

**Київський національний університет  
імені Тараса Шевченка**

**Н.П. ХАРЧЕНКО, О.В. ПРОКОПЕНКО, Г.Ю. КАРЛАШ**

# **АТОМНА ФІЗИКА В ЗАДАЧАХ**

**Навчальний посібник**

**Київ – 2007**

УДК 539.18 (075.8)  
ББК 22.383я73  
Хар20

Рецензент

д-р фіз.-мат. наук, проф. В. С. Овечко

*Затверджено Вченою радою радіофізичного факультету  
Київського національного університету  
імені Тараса Шевченка  
(протокол № 6 від 12 листопада 2007 року)*

**Харченко Н. П., Прокопенко О. В., Карлаш Г. Ю.** Атомна фізика в задачах: Навчальний посібник. — К.: Академдрук, 2007. — 336 с. — ISBN 978-966-96952-0-8.

Навчальний посібник відповідає університетській програмі нормативного курсу "Атомна фізика". Він складається з чотирнадцяти розділів та шести додатків. У кожному розділі наводяться короткі теоретичні відомості, методичні вказівки та поради, приклади розв'язування задач та набір задач для самостійної роботи. У посібнику розглянуто більше 100 прикладів розв'язання задач та запропоновано близько 260 задач для самостійного опрацювання.

Для студентів, що вивчають курс "Атомна фізика" в рамках університетської програми, та викладачів вищої школи.

ISBN 978-966-96952-0-8

© Харченко Н. П.,  
Прокопенко О. В.,  
Карлаш Г.Ю., 2007

## ЗМІСТ

Передмова .....	4
<b>Розділ 1.</b> Корпускулярні властивості випромінювання .....	6
<b>Розділ 2.</b> Хвильові властивості частинок .....	23
<b>Розділ 3.</b> Співвідношення невизначеностей .....	37
<b>Розділ 4.</b> Рівняння Шредінґера. Хвильова функція .....	58
<b>Розділ 5.</b> Рівняння Шредінґера. Потенціальні ями, потенціальні бар'єри .....	80
<b>Розділ 6.</b> Формула Резерфорда. Теорія воднеподібних атомів Бора-Зоммерфельда .....	116
<b>Розділ 7.</b> Квантові числа одноелектронних атомів. Тонка та надтонка структура спектральних ліній. Лембівський зсув .....	148
<b>Розділ 8.</b> Спектри атомів лужних металів .....	181
<b>Розділ 9.</b> Векторна модель атома .....	196
<b>Розділ 10.</b> Атом гелію .....	216
<b>Розділ 11.</b> Атом у магнітному полі .....	228
<b>Розділ 12.</b> Рентгенівські спектри .....	248
<b>Розділ 13.</b> Ширина та інтенсивність спектральних ліній ....	272
<b>Розділ 14.</b> Спектри двохатомних молекул .....	296
Додаток 1. Значення фундаментальних фізичних сталих ..	321
Додаток 2. Правила переходу з гаусової системи одиниць до системи одиниць СІ .....	325
Додаток 3. Зв'язок між різними одиницями атомної фізики	327
Додаток 4. Основні формули атомної фізики в системі СІ..	328
Додаток 5. Границі К- та L-смуг поглинання рентгенівського випромінювання .....	329
Додаток 6. Константи двохатомних молекул .....	330
Список рекомендованої літератури .....	331

*При вивченні наук приклади  
є кориснішими за правила.*

*Ісаак Ньютон*

## **ПЕРЕДМОВА**

Вивчаючи теоретичний матеріал, важливо не тільки добре його зрозуміти, але й вміти застосувати на практиці, тобто опанувати методи розв'язання конкретних фізичних задач. Це є особливо важливим для такого складного курсу, як "Атомна фізика", в якому багато теоретичних моделей фізичних явищ та відповідних експериментальних фактів стають зрозумілими лише після детального розгляду на семінарських заняттях спеціально підібраних задач. Тому основною метою навчального посібника "Атомна фізика в задачах" є спроба допомогти студентам навчитись розв'язувати задачі з атомної фізики.

На сьогоднішній день у вітчизняній літературі обмаль навчально-методичних посібників з розв'язування задач з курсу "Атомна фізика". Відомий посібник "Розв'язування задач з курсу загальної фізики" А.А. Острохова, В.Л. Стрижевського, М.Г. Цвелиха та Ю.П. Цященко [20], де є розділ "Атомна фізика", вже давно став бібліографічним раритетом. Найчастіше для розв'язування задач використовуються російськомовні збірники задач з атомної фізики та квантової механіки професора Іродова І.Є. [14–16], але в цих збірниках не приділяється достатньої уваги методиці розв'язування задач.

Посібник складено на основі матеріалів, що розглядались на семінарських заняттях з курсу "Атомна фізика", які проводились авторами на радіофізичному факультеті Київського національного університету імені Тараса Шевченка впродовж багатьох років. Крім того, в посібник були включені деякі задачі з тих, що пропонувалися студентам під час контрольних робіт, а також типові задачі з найбільш відомих збірників задач. До загального списку типових задач було додано невелику кількість задач підвищеної складності, які, на думку авторів, дозволяють або пояснити цікаві фізичні ефекти, або проілюструвати застосування оригінального методу розв'язку.

Навчально-методичний посібник складається з чотирнадцяти

цяти розділів та шести додатків. На початку кожного розділу після коротких теоретичних відомостей наводяться методичні вказівки та поради до розв'язування задач. Вони містять опис "алгоритму" розв'язання типових задач, що, на думку авторів, дозволить студенту самостійно розібратись і опанувати відповідні методи розв'язку, особливо для таких складних тем як "Квантові числа", "Тонка та надтонка структура спектральних ліній", "Векторна модель атома" та ін. Після методичних вказівок і порад наводяться розібрані в деталях приклади задач, характерні для даної теми. В кінці кожного розділу пропонуються задачі для самостійної роботи. Загалом, у посібнику розглянуто більше 100 прикладів розв'язання задач та запропоновано близько 260 задач для самостійного опрацювання.

Всі формули в основній частині посібника наведені в системі одиниць Гауса, яка традиційно використовується в атомній фізиці. В додатках наводяться формули та коефіцієнти, що дозволяють легко перейти від гаусівської системи одиниць до системи одиниць СІ, та довідкові таблиці. Список літератури включає в себе підручники, збірники задач та навчальні посібники, а також літературу, що може бути рекомендована для поглибленого вивчення матеріалу з курсу "Атомна фізика".

Посібник розрахований на студентів, що вивчають курс "Атомна фізика" в рамках університетської програми, та викладачів вищої школи.

Видання навчального посібника здійснено за сприяння проекту Програми Розвитку ООН в Україні "Підвищення освітнього потенціалу Київського національного університету імені Тараса Шевченка".

## Розділ 1. КОРПУСКУЛЯРНІ ВЛАСТИВОСТІ ВИПРОМІНЮВАННЯ

### Основні теоретичні відомості

Відомо, що квант світла, або фотон, має енергію та імпульс, які записуються у вигляді

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad |\vec{k}| = \frac{\omega}{c}, \quad (1)$$

де  $\omega$  – частота,  $\vec{k}$  – хвильовий вектор, напрямком якого збігається з напрямком руху фотона. У більшості задач даного розділу взаємодія квантів світла з різними мікрочастинками розглядається як процес зіткнення. При цьому виконуються закони збереження енергії та імпульсу:

$$E_1 + \hbar\omega_1 = E_2 + \hbar\omega_2, \quad (2)$$

$$\vec{p}_1 + \hbar\vec{k}_1 = \vec{p}_2 + \hbar\vec{k}_2, \quad (3)$$

де  $E_1, \vec{p}_1, E_2, \vec{p}_2$  – енергія та імпульс мікрочастинки до зіткнення та після нього,  $\hbar\omega_1, \hbar\vec{k}_1, \hbar\omega_2, \hbar\vec{k}_2$  – відповідні енергії та імпульси фотона. Для мікрочастинок, які рухаються з великою енергією, потрібно використовувати релятивістські формули для енергії та імпульсу.

При зіткненні  $\gamma$ -кванту з вільним електроном (ефект Комптона) розв'язок рівнянь (2) та (3) дозволяє обчислити зміну довжини хвилі розсіяного фотона:

$$\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 = 2\Lambda_c \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (4)$$

де  $\lambda_1$  – довжина хвилі фотона до зіткнення,  $\lambda_2$  – після зіткнення,  $\Lambda_c = \frac{h}{mc} = 0,0243 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0,0243 \text{ \AA}$  – комптонівська

довжина хвилі електрона,  $\theta$  – кут розсіювання фотона.

У тому випадку, коли вільний електрон до взаємодії був нерухомим, його кінетична енергія віддачі дорівнює

$$E_k = \frac{hc}{\lambda_1} - \frac{hc}{\lambda_2} = hc \frac{\Delta\lambda}{\lambda_1 \lambda_2} = \frac{hc}{\lambda_1} \left( 2\Lambda_c \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) / \left( \lambda_1 + 2\Lambda_c \sin^2 \frac{\theta}{2} \right). \quad (5)$$

У випадку, коли джерело фотонів рухається відносно спостерігача, користуються формулою для ефекту Доплера:

$$\omega = \omega_0 \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{1+\beta \cos \vartheta}, \quad \beta = \frac{v}{c} \quad (6)$$

тут  $\omega_0$  – частота світла в системі координат, де джерело є нерухомим,  $\omega$  – частота світла в системі координат, що рухається відносно джерела зі швидкістю  $v$ ,  $\vartheta$  – кут між швидкістю  $\vec{v}$  та напрямком спостереження в рухомій системі координат.

Коли швидкість джерела перевищує фазову швидкість світла в середовищі  $v_\phi = \frac{c}{n}$ , спостерігається випромінювання Вавилова-Черенкова. Воно відбувається без зміни атомом квантового стану в напрямку черенківського конуса, що описується рівнянням

$$\vartheta = \arccos \left( \frac{1}{\beta n} \right). \quad (7)$$

### **Методичні вказівки та поради**

1. До цього розділу відносяться задачі на такі теми:
  - а) фотоефект;
  - б) тиск світла з фотонної точки зору;
  - в) ефект Доплера з фотонної точки зору;
  - г) визначення кількості фотонів при заданій потужності монохроматичного випромінювання;
  - д) гравітаційне зміщення частоти фотона в силовому полі;
  - е) ефект Комптона;
  - ж) ефект Мессбауера.
 Розв'язки деяких типових задач наведено в прикладах.
2. При розв'язуванні рівнянь (2) та (3) доцільно використовувати інваріант вектора енергії-імпульсу:

$$E^2 - p^2 c^2 = m_0^2 c^4, \quad (8)$$

де  $m_0$  - маса спокою частинки. Для фотона цей інваріант має вигляд

$$E = pc = \text{const} . \quad (9)$$

3. Якщо при розрахунку ефекту Комптона потрібно записати кінетичну енергію електрона через його імпульс, то користуються формулою:

$$E_k = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2 . \quad (10)$$

4. Зміна довжини хвилі фотона пов'язана зі зміною його частоти наступним співвідношенням:

$$|\Delta\omega| = \frac{2\pi c}{\lambda^2} \Delta\lambda . \quad (11)$$

5. При розв'язуванні задач на тему "*Ефект Мессбауера*", необхідно враховувати, що при випромінюванні фотона ядром, яке знаходилось у спокої, з'являється ефект віддачі, при цьому закони збереження (2), (3) записуються у вигляді:

$$\hbar\omega_0 = \hbar\omega + \frac{Mv^2}{2} , \quad (12)$$

$$0 = \hbar\vec{k} + M\vec{v} , \quad (13)$$

де  $\hbar\omega_0 = E_{n2} - E_{n1}$  – енергія, яка відповідає переходу з вищого енергетичного рівня ядра  $E_{n2}$  на нижчий  $E_{n1}$ ,  $\frac{Mv^2}{2}$  –

кінетична енергія віддачі ядра,  $\hbar\vec{k}$ ,  $M\vec{v}$  – імпульс фотона та імпульс віддачі ядра відповідно. Власне, сам ефект Мессбауера полягає у випромінюванні фотонів без віддачі. Це можливо лише за умови, коли імпульс віддачі перерозподіляється між усіма атомами, що входять до складу речовини.

6. У тому випадку, коли треба розрахувати зміну частоти фотона в *гравітаційному полі*, фотон розглядають як частинку з масою  $m = \frac{\hbar\omega_0}{c^2}$ , на яку діє гравітаційна сила

$$F = G \frac{Mm}{r^2} = \frac{GM\hbar\omega_0}{c^2 r^2} , \quad (14)$$

де  $M$  – маса тіла, що створює гравітаційне поле,  $G$  – гравітаційна стала.



## Приклади розв'язування задач

**Задача №1.** Фотон розсіюється на вільному електроні (ефект Комптона). Визначити зміну довжини хвилі фотона, величину та напрямок імпульсу віддачі електрона в залежності від кута розсіювання фотона, якщо початковий імпульс електрона має такий самий напрямок, що й вихідний пучок фотонів. Якою в цьому випадку може бути максимальна величина імпульсу, що передається електрону?

**Розв'язок:** Закони збереження енергії та імпульсу для цього випадку мають наступний вигляд:

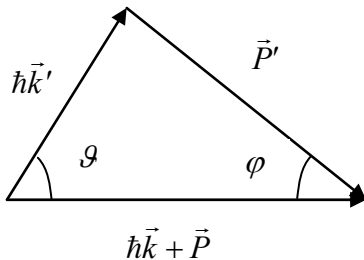


Рис. 1. Векторна діаграма імпульсів (до задачі №1)

$$\begin{cases} \hbar\omega + E = \hbar\omega' + E' \\ \hbar\vec{k} + \vec{P} = \hbar\vec{k}' + \vec{P}' \end{cases}, \quad (1.1)$$

де  $\vec{k}$  та  $\vec{k}'$  – хвильові вектори падаючого та розсіяного фотонів,  $\vec{P}, E$  та  $\vec{P}', E'$  – імпульс та повна енергія електрона до та після взаємодії. Позначимо модуль імпульсу фотона до та

після взаємодії як  $p$  та  $p'$  відповідно. Використовуючи векторну діаграму (Рис.1), друге рівняння в (1.1) розпишемо в скалярному вигляді, використавши теорему косинусів:

$$P'^2 = p'^2 + (p + P)^2 - 2p'(p + P)\cos\vartheta, \quad (1.2)$$

де  $\vartheta$  – кут розсіювання фотона. З першого рівняння (1.1) виразимо  $E'$ , підносячи обидві його частини до квадрату:

$$E'^2 = \hbar^2(\omega - \omega')^2 + E^2 + 2E\hbar(\omega - \omega'). \quad (1.3)$$

Помноживши рівняння (1.2) на  $c^2$ , віднімемо його від (1.3), використовуючи інваріантність величини (8)

$$E^2 - p^2c^2 = E'^2 - p'^2c^2 = m_0^2c^4, \quad (1.4)$$

де  $m_0$  – маса спокою електрона:

$$m_0^2c^4 = \hbar^2(\omega - \omega')^2 + E^2 + 2E\hbar(\omega - \omega') - p'^2c^2 - p^2c^2 -$$

$$-P^2c^2 - 2pPc^2 + 2p'c^2(p+P)\cos\vartheta. \quad (1.5)$$

Розв'яжемо рівняння (1.5), врахувавши, що  $pc = \hbar\omega$ ,  $p'c = \hbar\omega'$ :

$$\begin{aligned} 0 &= -2\hbar^2\omega\omega' + 2E\hbar(\omega - \omega') - 2pPc^2 + 2p'c^2(p+P)\cos\vartheta \Rightarrow \\ 0 &= 2\hbar^2\omega\omega' - 2\hbar\omega(E - Pc) + 2\hbar\omega'(E - c(p+P)\cos\vartheta) \Rightarrow \\ 0 &= 2\hbar^2 - 2\hbar\frac{E - Pc}{\omega'} + 2\hbar\frac{E - c(p+P)\cos\vartheta}{\omega}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Беручи до уваги, що  $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ ,  $\omega' = \frac{2\pi c}{\lambda'}$ , отримуємо

$$\lambda' = \frac{2\pi\hbar c}{E - Pc} + \lambda \frac{E - c(p+P)\cos\vartheta}{E - Pc}. \quad (1.7)$$

Спростимо формулу (1.7). Для цього помножимо та розділимо перший доданок на  $\lambda$  і врахуємо, що  $\frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = pc$ . Отримаємо

$$\begin{aligned} \lambda' &= \frac{\lambda(pc + E - c(p+P)\cos\vartheta)}{E - Pc} = \\ &= \frac{\lambda\left(2pc\sin^2\frac{\vartheta}{2} + E - cP\cos\vartheta\right)}{E - Pc}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Тепер додамо та віднімемо в дужках в (1.8)  $Pc$  і отримаємо наступну формулу:

$$\begin{aligned} \lambda' &= \lambda + \frac{\lambda\left(2pc\sin^2\frac{\vartheta}{2} + 2Pc\sin^2\frac{\vartheta}{2}\right)}{E - Pc} = \\ &= \lambda + \frac{2\lambda(p+P)c\sin^2\frac{\vartheta}{2}}{E - Pc}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Відносна зміна довжини хвилі розсіяного фотона:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{2c(p+P)\sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right)}{E - Pc}. \quad (1.10)$$

Імпульс віддачі електрона знаходимо з (1.2), врахувавши, що

$$p' = \frac{2\pi\hbar}{\lambda'} = \frac{E - Pc}{c \left( 1 - \frac{p+P}{p} \cos \vartheta \right) + \frac{E}{p}} = \frac{p(E - Pc)}{pc - c(p+P) \cos \vartheta + E}. \quad (1.11)$$

Тут використане рівняння для довжини хвилі розсіяного фотона (1.7). Остаточного:

$$P'^2 = \frac{p^2(E - Pc)^2}{(pc - c(p+P) \cos \vartheta + E)^2} + (p+P)^2 - 2 \frac{p(E - Pc)(p+P)}{pc - c(p+P) \cos \vartheta + E} \cos \vartheta. \quad (1.12)$$

З векторної діаграми імпульсів (див. Рис. 1) стає очевидним, що максимальним імпульс електрона віддачі буде тоді, коли кут розсіювання фотона складає  $180^\circ$ . З рівняння (1.2) отримуємо для цього випадку:

$$P'_{\max} = p' + p + P. \quad (1.13)$$

З рівняння (1.11) при  $\vartheta = 180^\circ$

$$p' = \frac{p(E - Pc)}{2pc + E + Pc}, \quad (1.14)$$

максимальне значення імпульсу електрона віддачі

$$P'_{\max} = \frac{p(E - Pc)}{2pc + E + Pc} + p + P. \quad (1.15)$$

Напрямок електрона віддачі визначається кутом  $\varphi$ . Цей кут знаходимо наступним чином:

$$\sin \varphi = \frac{p' \sin \vartheta}{P'}, \quad \varphi = \arcsin \left( \frac{p' \sin \vartheta}{P'} \right), \quad (1.16)$$

де значення  $p'$  та  $P'$  беруться з (1.11) та (1.12).

**Задача №2.** Фотон з довжиною хвилі  $\lambda$  розсіявся на релятивістському вільному електроні. В результаті електрон спинився, а фотон відхилився від початкового на-

прямку на кут  $\theta$ . Знайти зміну довжини хвилі фотона в такому процесі.

**Розв'язок:** Запишемо закони збереження енергії та імпульсу:

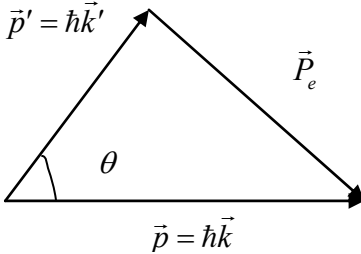


Рис. 2. Векторна діаграма імпульсів (до задачі №2)

$$\vec{p} + \vec{P}_e = \vec{p}', \quad (2.1)$$

$$\hbar\omega + E = \hbar\omega' + m_e c^2, \quad (2.2)$$

де  $\vec{p}$  та  $\vec{p}'$  - імпульси падаючого та розсіяного фотонів,  $\vec{P}_e$  - імпульс електрона,  $E$  - повна енергія електрона, а  $m_e$  - його маса спокою. Використовуючи векторну діаграму імпульсів (Рис. 2), роз-

пишемо рівняння (2.1) за допомогою теореми косинусів:

$$P_e^2 = \left(\frac{\hbar\omega'}{c}\right)^2 + \left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 - 2\frac{\hbar^2\omega\omega'}{c^2}\cos\theta \Rightarrow$$

$$P_e^2 c^2 = (\hbar\omega')^2 + (\hbar\omega)^2 - 2\hbar^2\omega\omega'\cos\theta, \quad (2.3)$$

де враховано, що  $p = \frac{\hbar\omega}{c}$ ,  $p' = \frac{\hbar\omega'}{c}$ . Із закону збереження

енергії, підносячи рівняння (2.2) до квадрата, знайдемо  $E^2$ :

$$E^2 = \hbar^2(\omega - \omega')^2 - 2\hbar(\omega - \omega')m_e c^2 + m_e^2 c^4. \quad (2.4)$$

Як і в попередній задачі, скористаємось інваріантністю величини  $E^2 - P_e^2 c^2 = m_e^2 c^4$  і віднімемо від (2.4) рівняння (2.3):

$$\hbar^2(\omega - \omega')^2 - 2\hbar(\omega - \omega')m_e c^2 + m_e^2 c^4 - (\hbar\omega')^2 -$$

$$-(\hbar\omega)^2 + 2\hbar^2\omega\omega'\cos\theta = m_e^2 c^4 \Rightarrow$$

$$2\hbar^2\omega\omega'(1 - \cos\theta) + 2\hbar(\omega - \omega')m_e c^2 = 0. \quad (2.5)$$

Останню рівність можемо переписати наступним чином:

$$\frac{\hbar}{m_e c^2}(1 - \cos\theta) = \frac{\omega' - \omega}{\omega\omega'} = \frac{1}{\omega} - \frac{1}{\omega'}, \quad (2.6)$$

і врахувавши, що  $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ ,  $\omega' = \frac{2\pi c}{\lambda'}$ , отримуємо остаточно:

$$\frac{2\pi\hbar}{m_e c}(1 - \cos \theta) = \lambda - \lambda',$$

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = -\frac{h}{m_e c}(1 - \cos \theta) = -2\lambda_c \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (2.7)$$

тобто в результаті такого розсіювання енергія фотона збільшується, оскільки зменшується довжина хвилі.

**Задача №3.** Гамма-квант з енергією  $\hbar\omega$  розсіюється на нерухомому електроні. Знайти напрямки розсіювання кванта, для яких він може породити електрон-позитронну пару.

**Розв'язок:** Для того, щоб породити електрон-позитронну пару, квант повинен мати енергію, яка дорівнює щонайменше подвійному значенню енергії спокою електрона. Тобто, ми повинні знайти, при яких кутах розсіювання цю умову можна задовольнити.

Використаємо формулу Комптона:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta). \quad (3.1)$$

На енергію розсіяного кванта накладаємо умову:

$$h\nu' > 2mc^2. \quad (3.2)$$

Врахувавши співвідношення між довжиною хвилі та частотою, умову (3.2) запишемо так:

$$\lambda' < \frac{h}{2mc}. \quad (3.3)$$

Виразимо  $\lambda'$  з (3.1) та використаємо умову (3.3):

$$\lambda + \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta) < \frac{h}{2mc} \Rightarrow$$

$$1 - \cos \theta < \frac{\frac{h}{2mc} - \lambda}{\frac{h}{mc}} = \frac{1}{2} - \frac{mc\lambda}{h} \Rightarrow \cos \theta > \frac{mc\lambda}{h} + \frac{1}{2}. \quad (3.4)$$

Таким чином, розсіяний квант може породити електрон-позитронну пару, якщо розсіювання відбувається всередину

конуса, що задовольняє умові (3.4). Для квантів дуже високих енергій ( $h\nu \rightarrow \infty$ ) умова (3.4) спрощується:

$$\cos \theta > \frac{1}{2}, \quad (3.5)$$

і пари можуть утворюватись, якщо кут розсіювання не перевищує  $60^\circ$ .

**Задача №4.** Як дослідив Мессбауер, у спектрі  $\gamma$ -квантів, що випромінюються збудженими ядрами, які входять до складу твердого тіла, кожна  $\gamma$ -лінія при кімнатній температурі містить дві компоненти: дуже вузьку з енергією, що дорівнює енергії переходу в ядрах, і більш широку, зміщену відносно першої. Для  $\gamma$ -лінії  $^{57}\text{Fe}$ , що має енергію  $14,4 \text{ keV}$ , відносний зсув зміщеної компоненти  $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = 1,35 \cdot 10^{-7}$ . Переконайтесь, що ця компонента обумовлена ефектом віддачі ядер при випромінюванні  $\gamma$ -квантів.

**Розв'язок:** Нехай  $M_1$  – початкова маса ядра, а  $M_2$  – його маса після випромінювання  $\gamma$ -кванта. Тоді енергію переходу можемо записати як  $(M_1 - M_2)c^2$ . Позначимо:

$$\omega_0 = \frac{(M_1 - M_2)c^2}{\hbar}, \quad (4.1)$$

– це є частота резонансної лінії Мессбауера, що відповідає випромінюванню  $\gamma$ -квантів без ефекту віддачі ядер. Оцінімо, як змінюється частота  $\gamma$ -кванта при врахуванні віддачі ядра.

Випромінений фотон будемо спостерігати в системі координат, де ядро до взаємодії знаходилось у спокої. Частота цього кванта  $\omega$ . Запишемо закони збереження енергії та імпульсу:

$$\hbar\omega_0 = \hbar\omega + \frac{p^2}{2M_2}, \quad (4.2)$$

$$p = \frac{\hbar\omega}{c}, \quad (4.3)$$

де  $p$  – імпульс віддачі ядра. Підставивши в (4.2) вираз для імпульсу (4.3), отримаємо:

$$\hbar\omega_0 = \hbar\omega + \frac{(\hbar\omega)^2}{2M_2c^2}. \quad (4.4)$$

Це рівняння легко розв'язати відносно  $\omega$ :

$$\omega = -\frac{M_2c^2}{\hbar} + \frac{M_2c^2}{\hbar} \sqrt{1 + \frac{2\hbar\omega_0}{M_2c^2}} = \frac{M_2c^2}{\hbar} \left( \sqrt{1 + \frac{2\hbar\omega_0}{M_2c^2}} - 1 \right). \quad (4.5)$$

Очевидно, якщо  $\hbar\omega_0 \ll M_2c^2$ , підкореневий вираз (4.5) можна представити у вигляді ряду Тейлора і отримати, що  $\omega \approx \omega_0$ ,  $p \approx \frac{\hbar\omega_0}{c}$ . Тоді рівняння (4.4) запишеться так, якщо  $M_2 \approx M_1 = M$ :

$$\hbar\omega_0 = \hbar\omega + \frac{(\hbar\omega_0)^2}{2Mc^2} \quad \text{або} \quad \omega_0 - \omega = \frac{\hbar(\omega_0)^2}{2Mc^2}. \quad (4.6)$$

Останній вираз перепишемо наступним чином:

$$\omega = \omega_0 \left( 1 - \frac{\hbar\omega_0}{2Mc^2} \right). \quad (4.7)$$

Це і є формула для частоти випроміненого кванта з урахуванням ефекту віддачі. Відносне зміщення частоти випроміненого фотона

$$\frac{\omega_0 - \omega}{\omega_0} \approx \frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{\hbar\omega_0}{2Mc^2}. \quad (4.8)$$

Приймаючи до уваги (11), отримаємо відносний зсув довжини хвилі:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{\hbar\omega_0}{2Mc^2}. \quad (4.9)$$

Врахувавши, що для даного ізотопу заліза  $Mc^2 = 57 \cdot 931,5 \text{ MeV}$ , з (4.9) отримаємо:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{14,4 \cdot 10^3}{2 \cdot 57 \cdot 931,5 \cdot 10^6} = 1,35 \cdot 10^{-7}. \quad (4.10)$$

Наприкінці зауважимо, що зміщена компонента лінії  $\gamma$ -випромінювання, яка виникає внаслідок ефекту віддачі ядра, уширюється за рахунок ефекту Доплера.

**Задача №5. Джерело  $\gamma$ -квантів розташоване над поглиначем на висоті 20 м. З якою швидкістю треба рухати вгору джерело, щоб у місці розташування поглинача повністю компенсувати гравітаційну зміну енергії  $\gamma$ -кванта, обумовлену гравітаційним полем Землі?**

**Розв'язок:** Гравітаційна маса фотона  $m = \frac{h\nu_0}{c^2}$ , тому під час

руху в гравітаційному полі Землі на нього діє сила  $\vec{F} = m\vec{g}$ . У випадку, коли фотон рухається донизу, його кінетична енергія збільшується на величину

$$\Delta E_g = \frac{h\nu_0}{c^2} gl, \quad (5.1)$$

де  $l$  – відстань, яку пройшов фотон. Такий ефект називається фіолетовим зміщенням частоти фотона. Під час руху вгору кінетична енергія фотона зменшується на таку саму величину (червоне зміщення).

Основним методом вимірювання гравітаційного зміщення частоти є резонансне мессбауерівське поглинання. Для компенсації гравітаційного зміщення необхідно забезпечити доплерівське зміщення частоти за рахунок руху джерела  $\gamma$ -квантів або поглинача. Нерелятивістська формула для доплерівської зміни частоти

$$\nu = \nu_0 \left( 1 + \frac{v}{c} \cos \vartheta \right), \quad (5.2)$$

де  $\vartheta$  – кут між напрямком руху джерела та напрямком спостереження; при повздовжньому ефекті  $\cos \vartheta = -1$ , тоді

$$\nu = \nu_0 \left( 1 - \frac{v}{c} \right), \quad \Delta \nu = \nu_0 - \nu = \nu_0 \frac{v}{c} \Rightarrow \Delta E_d = h\nu_0 \frac{v}{c}. \quad (5.3)$$

У даному випадку джерело необхідно рухати вгору для компенсації гравітаційного збільшення частоти фотона.

Прирівнюючи (5.1) та (5.3), одержуємо



$$\frac{h\nu_0}{c^2} gl = h\nu_0 \frac{v}{c} \Rightarrow v = \frac{gl}{c}. \quad (5.4)$$

Підставивши числові значення в (5.4), для швидкості руху джерела отримаємо

$$v = \frac{9,8 \cdot 20}{3 \cdot 10^8} = 6,5 \cdot 10^{-7} \text{ м/с} = 0,65 \text{ мкм/с}. \quad (5.5)$$

**Задача №6.** Відомо, що вплив середовища на поширення світла можна врахувати шляхом уведення показника заломлення  $n = n(v)$ . Використовуючи співвідношення

$$E_{\text{випр}} = h\nu, p_{\text{випр}} = \frac{h\nu n}{c} \text{ для енергії та імпульсу фотона в се-}$$

редовищі, знайти формулу Доплера, якщо джерело рухається з релятивістською швидкістю. Дослідити випадок, коли швидкість джерела перевищує фазову швидкість поширення світла в середовищі.

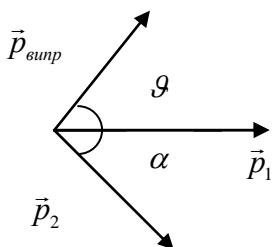


Рис. 3. Векторна діаграма імпульсів (до задачі №6)

**Розв'язок:** Позначимо через  $E_1, p_1$  та  $E_2, p_2$  повну енергію та імпульс випромінювача до та після випускання кванта світла, відповідно. Запишемо закони збереження імпульсу та енергії при випромінюванні світла:

$$\begin{aligned} E_2 &= E_1 - E_{\text{випр}}, \\ \vec{p}_2 &= \vec{p}_1 - \vec{p}_{\text{випр}}. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Друге рівняння в (6.1) розпишемо з урахуванням векторної діаграми (Рис.3), помноживши обидві частини (6.1) на  $c^2$ :

$$p_2^2 c^2 = p_1^2 c^2 + p_{\text{випр}}^2 c^2 - 2p_1 p_{\text{випр}} c^2 \cos \vartheta. \quad (6.2)$$

За умови, що атом може переходити з одного квантового стану до іншого, випромінювання фотона може відбуватись як за рахунок кінетичної, так і за рахунок внутрішньої енергії атома. Відповідні енергії спокою джерела до та після випромінювання позначимо як  $E_{01}, E_{02}$ .

Піднесемо перше рівняння в (6.1) до квадрата та віднімемо від нього (6.2). З урахуванням співвідношень

$$E_1^2 - (p_1 c)^2 = E_{01}^2, \quad E_2^2 - (p_2 c)^2 = E_{02}^2, \quad E_{\text{випр}} = \frac{p_{\text{випр}} c}{n}, \quad (6.3)$$

отримаємо:

$$E_{01}^2 - E_{02}^2 = 2E_1 h\nu + (h\nu)^2 (n^2 - 1) - 2p_1 \frac{nh\nu}{c} c^2 \cos \vartheta. \quad (6.4)$$

Беручи до уваги релятивістські вирази для імпульсу та енергії випромінювача

$$p_1 = \frac{m_1 v}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad E_1 = \frac{m_1 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}, \quad (6.5)$$

де  $m_1$  – маса атома до випромінювання фотона,  $v$  – початкова швидкість атома, рівняння (6.4) перепишемо так:

$$E_{01}^2 - E_{02}^2 = 2 \frac{m_1 c^2 h\nu}{\sqrt{1 - \beta^2}} (1 - \beta n \cos \vartheta) + (h\nu)^2 (n^2 - 1), \quad (6.6)$$

або

$$\begin{aligned} & (m_1 - m_2) c^2 (m_1 + m_2) c^2 = \\ & = 2 \frac{m_1 c^2 h\nu}{\sqrt{1 - \beta^2}} (1 - \beta n \cos \vartheta) + (h\nu)^2 (n^2 - 1). \end{aligned} \quad (6.7)$$

Якщо маса атома велика, можемо записати:  $m_1 + m_2 \approx 2m_1$ . Приймаючи до уваги, що частота фотона, випроміненого нерухомим джерелом

$$h\nu_0 = (m_1 - m_2) c^2, \quad (6.8)$$

з (6.7) отримаємо:

$$h\nu_0 = \frac{h\nu}{\sqrt{1 - \beta^2}} (1 - \beta n \cos \vartheta) + \frac{(h\nu)^2}{2m_1 c^2} (n^2 - 1). \quad (6.9)$$

Другим доданком в (6.9) можемо знехтувати, оскільки енергія випроміненого фотона  $h\nu \ll 2m_1 c^2$ . Таким чином, знаходимо релятивістську формулу для ефекту Доплера:

$$v = \frac{(m_1 - m_2)c^2 \sqrt{1 - \beta^2}}{h(1 - \beta n \cos \vartheta)} = \frac{v_0 \sqrt{1 - \beta^2}}{(1 - \beta n \cos \vartheta)}. \quad (6.10)$$

Розглянемо атом, який під час руху не змінює квантового стану. Тоді з рівняння (6.6) отримаємо:

$$\cos \vartheta = \frac{1}{\beta n} + \frac{h\nu}{2m_1 c^2} \frac{(n^2 - 1)}{\beta n} \sqrt{1 - \beta^2}. \quad (6.11)$$

Другий доданок у (6.11) враховує віддачу атома при випромінюванні фотона. Якщо знехтувати цим доданком (за умови, що він є значно меншим за  $\frac{1}{\beta n}$ ), отримаємо формулу

$$\cos \vartheta = \frac{1}{\beta n}. \quad (6.12)$$

З (6.12) випливає, що  $\cos \vartheta > 0$ , тобто випромінювання відбувається вперед, причому для випромінювання світла з частотою  $\nu$  необхідно, щоб швидкість атома перевищувала фазову

швидкість світла в середовищі  $v > v_{\text{фаз}} = \frac{c}{n}$ . Очевидно, що випромінювання неможливе під час руху атома у вакуумі, оскільки при цьому  $v_{\text{фаз}} = c$ .

Проаналізуємо формулу (6.10). Можливі три випадки:

- 1) швидкість джерела менша за фазову швидкість світла в середовищі  $v_{\text{фаз}} = \frac{c}{n}$ , при цьому знаменник у (6.10) додатний:  $1 - \beta n \cos \vartheta > 0$ . Оскільки при випромінюванні енергія фотона завжди додатна, випромінювання можливе лише за умови, що  $(m_1 - m_2)c^2 > 0$ , тобто атом в результаті випромінювання переходить з більш високого на більш низький енергетичний рівень, зокрема, незбуджений атом в цьому випадку випромінювати не може. Формула (6.10) набуває вигляду:

$$v = v_0 \sqrt{1 - \beta^2} \left/ \left( 1 - \frac{v}{v_{\text{фаз}}} \cos \vartheta \right) \right. \quad (6.13)$$

При  $\vartheta = \frac{\pi}{2}$  спостерігається поперечний ефект Доплера, для якого формула (6.13) запишеться так:

$$v = v_0 \sqrt{1 - \beta^2}; \quad (6.14)$$

- 2) швидкість джерела більша за фазову швидкість світла в середовищі, тобто  $1 - n\beta < 0$ . Це є випадок аномального, або надсвітлового ефекту Доплера. Тут, в свою чергу, є два випадки.

Якщо випромінювання світла відбувається поза межами черенківського конусу, який визначається рівнянням (7),

тобто  $\cos \vartheta < \frac{1}{\beta n}$ , випромінювання можливе тільки тоді,

коли  $(m_1 - m_2)c^2 > 0$ . Частота випроміненого світла визначається формулою (6.11).

Якщо ж випромінювання відбувається в межах конусу  $\cos \vartheta > \frac{1}{\beta n}$ , тобто знаменник у (6.10) від'ємний, для існу-

вання випромінювання необхідне виконання умови  $(m_1 - m_2)c^2 < 0$ . При цьому атом переходить з більш низького до збудженого енергетичного стану. Випромінювання кванта світла та збудження атома відбуваються за рахунок кінетичної енергії атома, а формула (6.10) набуде вигляду:

$$v = \frac{v_0 \sqrt{1 - \beta^2}}{\frac{v}{v_{\text{фаз}}} \cos \vartheta - 1}; \quad (6.15)$$

- 3)  $1 - n\beta = 0$ , тобто швидкість джерела дорівнює фазовій швидкості світла. При цьому спостерігається випромінювання Вавилова-Черенкова без зміни атомом квантового стану.

### **Задачі для самостійної роботи**

1. Часто в якості світлочутливого матеріалу використовується-

ся бромисте срібло  $AgBr$ . Чому ці фотоматеріали є нечутливими до червоної частини спектра?

2. Чи можливо використати комптонівське розсіювання для вивчення розподілу швидкостей електронів в атомі?
3. Дати відповідь на наступні запитання:
  - а) чому зміна довжини хвилі фотона при комптонівському розсіюванні не залежить від виду речовини?
  - б) яке походження незміщеної компоненти в розсіяному випромінюванні?
  - в) чим пояснюється уширення обох компонент в розсіяному випромінюванні?
  - г) чому збільшується інтенсивність зміщеної компоненти в розсіяному випромінюванні зі збільшенням кута розсіювання та зі зменшенням атомного номера елемента?
4. У скільки разів зміна довжини хвилі фотона при комптонівському розсіюванні на вільному електроні перевищує аналогічну зміну при розсіюванні на вільному протоні при однакових кутах розсіювання?
5. Фотон з довжиною хвилі  $0,7 \text{ \AA}$  здійснює комптонівське розсіювання на атомі вуглецю. Чому дорівнює довжина хвилі фотона, розсіяного на кут  $\pi/2$ , якщо частинкою, що розсіює, є: а) електрон атома; б) атом вуглецю?
6. Як змінюється довжина хвилі фотона, випроміненого воднем, з  $\lambda = 122 \text{ нм}$  після розсіювання його назад вільним електроном?
7. Визначити напрямок руху електрона віддачі при комптонівському розсіюванні фотона з довжиною хвилі  $\lambda = 0,01 \text{ нм}$  та кутом розсіювання  $\alpha = 30^\circ$ .
8. При проходженні рентгенівського випромінювання через деяку речовину було знайдено, що максимальна кінетична енергія комптонівських електронів віддачі становить  $E_K = 0,44 \text{ MeV}$ . Визначити довжину хвилі рентгенівського випромінювання.
9. Визначити довжину хвилі розсіяного назад фотона ( $\lambda_0 = 10,6 \text{ мкм}$ ) на релятивістському електроні з енергією  $E_e = 20 \text{ GeV}$ , який рухається назустріч фотону.
10. Фотон розсіюється на електроні, що рухається йому назу-

- стріч. З якою швидкістю повинен рухатись електрон, щоб частота фотона при розсіюванні не змінилась?
11. Атом водню випромінює резонансну лінію ( $\lambda = 122 \text{ нм}$ ). Визначити частотний зсув між лінією випромінювання та лінією поглинання.
  12. Визначити спектр  $\gamma$ -квантів  $^{60}\text{Co}$  з енергією  $E = 1,25 \text{ MeV}$ , розсіяних атомом водню на кут  $\pi/2$ .
  13. Виходячи з уявлення про світлові кванти, вивести формулу для ефекту Доплера, припускаючи, що джерело світла рухається з нерелятивістською швидкістю.
  14. Обрахувати червоне зміщення  $D$ -ліній натрію ( $\lambda_1 = 589 \text{ нм}$ ,  $\lambda_2 = 589,6 \text{ нм}$ ), які випромінюються Сонцем. Маса Сонця  $M = 1,99 \cdot 10^{33} \text{ г}$ , радіус його фотосфери  $R = 6,96 \cdot 10^8 \text{ м}$
  15. Вільне ядро  $^{119}\text{Sn}$  з енергією збудження  $E^* = 23,8 \text{ кеВ}$  переходить до основного стану, випромінюючи  $\gamma$ -квант. Ширина даного рівня  $\Gamma = 2,4 \cdot 10^{-8} \text{ еВ}$ . Чи можливе резонансне поглинання такого  $\gamma$ -кванту іншим вільним ядром  $^{119}\text{Sn}$ , яке знаходиться в основному стані, якщо спочатку обидва ядра знаходились у спокої?
  16. Збуджений атом, який рухається з нерелятивістською швидкістю  $v$ , випромінює фотон під кутом  $\theta$  до початкового напрямку руху. Знайти за допомогою законів збереження відносну зміну частоти фотона, обумовлену віддачею атома.

## Розділ 2. ХВИЛЬОВІ ВЛАСТИВОСТІ ЧАСТИНОК

### *Основні теоретичні відомості*

Співвідношення де Бройля пов'язує між собою корпускулярні (імпульс  $\vec{p}$ ) та хвильові характеристики мікрочастинок (хвильовий вектор  $\vec{k}$  та частота  $\omega$ ):

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad (1)$$

де

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}, \quad |\vec{k}| = \frac{\omega}{c}, \quad (2)$$

$E$  – повна енергія мікрочастинки. Формулу (1) записують також у вигляді

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (3)$$

де  $\lambda$  – довжина хвилі де Бройля мікрочастинки. Для нерелятивістських частинок імпульс  $p = \sqrt{2mE_k}$ ,  $E_k$  – кінетична енергія частинки.

Групова швидкість хвиль де Бройля співпадає зі швидкістю частинки і визначається рівністю

$$u = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\partial E}{\partial p}, \quad (4)$$

а фазова швидкість, що визначає швидкість поширення хвильового фронту, має вигляд:

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}. \quad (5)$$

Для нерелятивістських електронів, що прискорюються різницею потенціалів  $V$ , кінетична енергія :

$$E_k = eV. \quad (6)$$

Тоді довжина хвилі де Бройля таких електронів

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 eV}} = \sqrt{\frac{150,42}{V}} \cdot 10^{-8} \text{ см} = \frac{1,225}{\sqrt{V}} \text{ нм}, \quad (7)$$

де  $V$  вимірюється у вольтах.

Коли електрон проникає до кристалу, його фазова швидкість змінюється, що спричиняє заломлення хвиль де Бройля. Коефіцієнт заломлення визначається як відношення фазових швидкостей хвиль де Бройля у вакуумі та в кристалі:

$$n = \frac{v_{\phi 0}}{v_{\phi i}} = \frac{\sin \varphi_0}{\sin \varphi} = \sqrt{1 + \frac{V_i}{V}}, \quad (8)$$

тут  $V_i$  – внутрішній потенціал кристала,  $\varphi_0$  – кут падіння електронів на кристал,  $\varphi$  – кут заломлення. Формула Вульфа-Брегга, яка описує дифракцію мікрочастинок на кристалічній ґратці з урахуванням ефектів заломлення хвиль, має вигляд:

$$2d\sqrt{n^2 - \sin^2 \varphi_0} = m\lambda_0, \quad (9)$$

де  $d$  – відстань між кристалічними площинами,  $m$  – порядок інтерференційного максимуму,  $\lambda_0$  – довжина хвилі де Бройля у вакуумі. Якщо замість кута падіння  $\varphi_0$  ввести ковзний кут  $\vartheta$  (дивись рисунок до задачі №4), формула (9) перепишеться так:

$$2d\sqrt{n^2 - \cos^2 \vartheta} = m\lambda_0. \quad (10)$$

### **Методичні вказівки та поради**

1. Типовими задачами, які відносяться до цієї теми, є знаходження групової та фазової швидкостей електронів, розрахунок дифракції електронів та нейтронів, заломлення електронного пучка в кристалах тощо.
2. При розв'язуванні задач цього розділу необхідно звертати увагу на те, чи є кінетична енергія частинки релятивістською, оскільки це визначає вигляд імпульсу в формулі (3). Найкраще порівняти кінетичну енергію з енергією спокою частинки, врахувавши, що  $m_e c^2 = 0,511 \text{ MeV}$ , де  $m_e$  – маса електрона,  $m_n c^2 = 940,9 \text{ MeV}$ ,  $m_n$  – маса спокою нейтрона. Зага-



лом, якщо кінетична енергія в умові задачі не задана, для важких частинок (протон, нейтрон,  $\alpha$ -частинка) можна користуватись нерелятивістським наближенням  $p = \sqrt{2m_0 E_k}$ , а для легких частинок (електрони, позитрони тощо) краще розрахунок проводити з урахуванням релятивістських поправок.

3. Якщо треба визначити довжину хвилі релятивістської частинки (з енергією порядку або більшою за енергію спокою  $m_0 c^2$ ), то у співвідношенні (3) потрібно використовувати релятивістський вираз для імпульсу:

$$p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}, \quad (11)$$

де  $v$  – швидкість частинки,  $m_0$  – її маса спокою. Коли у задачі задано кінетичну енергію релятивістської частинки, зв'язок між  $E_k$  та  $p$  можна знайти наступним чином. Кінетична енергія виражається через повну енергію

$$E_k = E - m_0 c^2, \quad (12)$$

причому

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4. \quad (13)$$

Підносячи до квадрата рівняння (12) і використовуючи (13), отримаємо для імпульсу мікрочастинки

$$p = \sqrt{2m_0 E_k} \sqrt{1 + \frac{E_k}{2m_0 c^2}}. \quad (14)$$

4. При розв'язуванні задач на дифракцію частинок користуються формулою Вульфа-Брегга (9, 10). Якщо показник заломлення  $n = 1$  (наприклад, для рентгенівських фотонів), то формула Вульфа-Брегга спрощується:

$$2d \sin \vartheta = m \lambda_0. \quad (15)$$

Довжину хвилі де Бройля у вакуумі можна визначити з величини заданої кінетичної енергії частинки.

## Приклади розв'язування задач

**Задача №1.** Знайти релятивістський вираз для довжини хвилі де Бройля  $\lambda$  електрона та протона, якщо прискорююча напруга дорівнює  $V$ . При яких значеннях напруги можна користуватись нерелятивістським виразом, щоб помилка не перевищувала 5%? Знайти  $\lambda$  для цих частинок при  $V = 10^2, 10^3, 10^5, 10^{10}, 10^{15}$  В.

**Розв'язок:** Кінетична енергія, що її отримує частинка при проходженні різниці потенціалів  $V$ :

$$E_k = eV. \quad (1.1)$$

Зв'язок між кінетичною енергією та імпульсом релятивістської частинки визначається формулою:

$$E_k = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2, \quad (1.2)$$

де під  $m_0$  слід розуміти масу спокою частинки. З (1.2) знаходимо вираз для імпульсу, приймаючи до уваги (1.1):

$$\begin{aligned} p^2 c^2 &= e^2 V^2 + 2m_0 c^2 eV \Rightarrow \\ p &= \frac{\sqrt{e^2 V^2 + 2m_0 c^2 eV}}{c} = \sqrt{2m_0 eV} \sqrt{1 + \frac{eV}{2m_0 c^2}}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Тепер можемо записати формулу для довжини хвилі де Бройля:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 eV} \sqrt{1 + \frac{eV}{2m_0 c^2}}} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 eV}} \left( 1 + \frac{eV}{2m_0 c^2} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.4)$$

Другий множник у формулі (1.4) є релятивістською поправкою до довжини хвилі де Бройля. Якщо виконується умова  $eV \ll m_0 c^2$ , формула (1.4) може бути спрощена:

$$\lambda \approx \frac{h}{\sqrt{2m_0 eV}} \left( 1 - \frac{eV}{4m_0 c^2} \right).$$

Знайдемо, при яких значеннях  $eV$  можна користуватись нерелятивістським виразом, щоб похибка не перевищува-

ла 5%. При цьому повинна виконуватись умова:

$$\frac{eV}{4m_0c^2} \leq 0,05 \Rightarrow eV \leq \frac{1}{5} m_0c^2. \quad (1.5)$$

Для електронів ця умова виконується при  $eV \leq 100 \text{ кеВ}$ , а для протонів – при  $eV \leq 200 \text{ МеВ}$ .

Виразивши енергію в  $eB$ , отримаємо наступне значення для  $\lambda$  в  $нм$ :

$$\lambda = \sqrt{\frac{1,5}{eV}} (1 + 0.978 \cdot 10^{-6} \cdot eV)^{-\frac{1}{2}} \quad \text{– для електронів,}$$

$$\lambda = 10^{-2} \sqrt{\frac{8,2}{eV}} (1 + 0.533 \cdot 10^{-9} \cdot eV)^{-\frac{1}{2}} \quad \text{– для протонів.}$$

Підставляючи значення напруги з умови задачі, маємо довжини хвиль  $\lambda$ , відповідно, для електронів:

$$0,122; 0,0387; 4,06 \cdot 10^{-3}; 1,24 \cdot 10^{-8}; 1,24 \cdot 10^{-13} \text{ нм};$$

для протонів:

$$2,85 \cdot 10^{-3}; 9,04 \cdot 10^{-4}; 2,85 \cdot 10^{-4}; 1,17 \cdot 10^{-7}; 1,24 \cdot 10^{-12} \text{ нм}.$$

**Задача №2.** Протон з дебройлівською довжиною хвилі  $\lambda = 0,001 \text{ нм}$  розсіявся під кутом  $\pi/2$  на  $\alpha$ -частинці, що знаходилась у стані спокою. Визначити дебройлівську довжину хвилі  $\lambda'$  розсіяного протону.

**Розв'язок:** Нехай  $\vec{p}, \vec{p}'$  – імпульси протона до та після взаємодії,  $\vec{p}_\alpha$  – імпульс віддачі  $\alpha$ -частинки. З векторної діаграми імпульсів (рис.1) отримаємо

$$p_\alpha^2 = p^2 + p'^2. \quad (2.1)$$

В свою чергу, закон збереження енергії має вигляд:

$$E_K = E_K' + E_{K\alpha} \Rightarrow \frac{p^2}{m_p} = \frac{p'^2}{m_p} + \frac{p_\alpha^2}{m_\alpha}. \quad (2.2)$$

З цих рівнянь виключаємо  $p_\alpha$  і одержимо рівняння для  $p'$ :

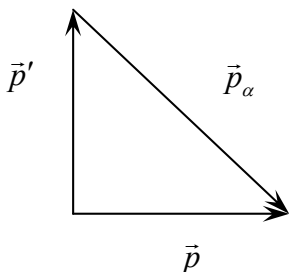


Рис. 1. Векторна діаграма імпульсів (до задачі №2)

$$p^2 = p'^2 + \frac{m_p}{m_\alpha} (p^2 + p'^2) \Rightarrow$$

$$p'^2 \left( 1 + \frac{m_p}{m_\alpha} \right) = p^2 \left( 1 - \frac{m_p}{m_\alpha} \right) \Rightarrow$$

$$p' = p \sqrt{\frac{m_\alpha - m_p}{m_\alpha + m_p}}. \quad (2.3)$$

Відповідно, дебройлівська довжина хвилі розсіяного протона запишеться так

$$\lambda' = \lambda \sqrt{\frac{m_\alpha + m_p}{m_\alpha - m_p}}. \quad (2.4)$$

Числове значення для  $\lambda'$  знайдемо, врахувавши, що  $m_\alpha \approx 4m_p$ :

$$\lambda' = \lambda \sqrt{\frac{5}{3}} = 0,0013 \text{ нм}.$$

**Задача №3.** Знайти кінетичну енергію електронів, що падають нормально на діафрагму з двома вузькими щілинами, якщо на екрані, який знаходиться на відстані  $l = 75 \text{ см}$  від діафрагми, період інтерференційної картини  $\Delta x = 7,5 \text{ мкм}$ . Відстань між щілинами  $d = 25 \text{ мкм}$ .

**Розв'язок:** Як відомо з курсу оптики, відстань між сусідніми інтерференційними максимумами на екрані

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\varphi}, \quad (3.1)$$

де  $\lambda$  – довжина хвилі двох інтерферуючих променів,  $\varphi$  – кут, під яким видно вторинні джерела з точки на екрані, в нашому випадку:

$$\varphi = \frac{d}{l}. \quad (3.2)$$

З (3.1) та (3.2) отримаємо довжину хвилі для електронів, що інтерферують:

$$\lambda = \frac{d\Delta x}{l}. \quad (3.3)$$

Щоб знайти кінетичну енергію електронів, скористаємось релятивістською формулою:

$$E_K = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2, \quad (3.4)$$

де  $m_0$  – маса електрона. Імпульс частинки пов'язаний з довжиною хвилі співвідношенням де Бройля:

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad (3.5)$$

Піднесемо вираз для кінетичної енергії (3.4) до квадрата:

$$E_K^2 + 2m_0 c^2 E_K + m_0^2 c^4 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \Rightarrow \\ E_K^2 + 2m_0 c^2 E_K = p^2 c^2. \quad (3.6)$$

Замість імпульсу в (3.6) підставляємо його вираз з (3.5):

$$E_K^2 + 2m_0 c^2 E_K - \frac{h^2}{\lambda^2} c^2 = 0$$

і розв'язуємо квадратне рівняння відносно  $E_K$

$$E_K = -m_0 c^2 + \sqrt{m_0^2 c^4 + \frac{h^2 c^2}{\lambda^2}} = m_0 c^2 \left( \sqrt{1 + \frac{h^2}{m_0^2 \lambda^2 c^2}} - 1 \right).$$

Підставивши в цю формулу  $\lambda$  з (3.3), отримаємо:

$$E_K = m_0 c^2 \left( \sqrt{1 + \left( \frac{hl}{m_0 cd\Delta x} \right)^2} - 1 \right). \quad (3.7)$$

Оцінімо другий доданок у підкореневому виразі (3.7):

$$\left( \frac{hl}{m_0 cd\Delta x} \right)^2 = \left( \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 0,75}{0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 25 \cdot 7,5 \cdot 10^{-12}} \right)^2 \approx 10^{-4}.$$

Оскільки ця величина набагато менша за одиницю, розкладемо квадратний корінь у (3.7) і знайдемо:

$$E_K = \frac{m_0 c^2}{2} \left( \frac{hl}{m_0 cd\Delta x} \right)^2 = \frac{1}{2m_0} \left( \frac{hl}{d\Delta x} \right)^2. \quad (3.8)$$

Такий самий вираз для енергії можна отримати, якщо кінетичну енергію записати у вигляді

$$E_K = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{h^2}{2m_0\lambda^2} = \frac{h^2 l^2}{2m_0 d^2 \Delta x^2},$$

проте формула (3.7) є більш загальною.

Підставляючи дані задачі, знаходимо значення кінетичної енергії інтерферуючих електронів:

$$E_K = \frac{1}{2 \cdot 0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \left( \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 0,75}{25 \cdot 7,5 \cdot 10^{-12}} \right)^2 = 24,4 \text{ eB}.$$

**Задача №4.** Вивести формулу Вульфа-Брегга з урахуванням заломлення електронних хвиль у кристалі та знайти з її допомогою внутрішній потенціал  $V_i$  монокристала срібла, якщо пучок електронів, прискорених різницею потенціалів  $V = 85 \text{ B}$ , утворює максимум другого порядку при дзеркальному відбиванні від кристалічних площин з  $d = 204 \text{ нм}$  під ковзимим кутом  $\vartheta = 30^\circ$ .

**Розв'язок:** Формула Вульфа-Брегга без урахування заломлення електронного пучка в кристалі має вигляд:

$$2d \sin \vartheta = m\lambda, \quad (4.1)$$

де  $m = 1, 2, \dots$

Подивимось, як зміниться ця формула, якщо врахувати показник заломлення кристала. Нагадаємо, що показник заломлення для пучка електронів у кристалі  $n$  визначається як:

$$n = \sqrt{1 + \frac{V_i}{V}}, \quad (4.2)$$

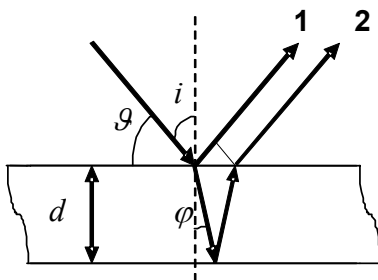


Рис. 2. Заломлення електронного пучка в кристалі

де  $V_i$  – внутрішній потенціал кристала. Для того, щоб виконувалась умова максимуму при інтерференції променів **1** та **2** (рис.2), необхідно, щоб різниця ходу між ними складала ціле число довжин хвиль де Бройля:

$$2dn \cos \varphi = m\lambda. \quad (4.3)$$

Враховуючи закон заломлення, запишемо:

$$\cos \varphi = \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} = \frac{1}{n} \sqrt{n^2 - \sin^2 i},$$

(4.3) тепер перепишемо у вигляді:

$$2d\sqrt{n^2 - \sin^2 i} = m\lambda.$$

Якщо замість кута падіння  $i$  ввести ковзний кут  $\vartheta$ , одержимо формулу:

$$2d\sqrt{n^2 - \cos^2 \vartheta} = m\lambda. \quad (4.4)$$

При  $n=1$  вона перетворюється в умову (4.1). Запишемо вираз для довжини хвилі де Бройля в нерелятивістському варіанті:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 eV}},$$

і підставимо його та вираз для показника заломлення (4.2) у формулу (4.4):

$$2d\sqrt{1 + \frac{V_i}{V} - \cos^2 \vartheta} = m \frac{h}{\sqrt{2m_0 eV}}. \quad (4.5)$$

Знайдемо звідси внутрішній потенціал кристала:

$$V_i = V \left( \frac{k^2 \hbar^2}{4d^2 2m_0 eV} - \sin^2 \vartheta \right) = \frac{\pi^2 m^2 \hbar^2}{2d^2 m_0 e} - V \sin^2 \vartheta. \quad (4.6)$$

Підставивши значення з умови задачі, отримаємо для внутрішнього потенціалу монокристала срібла:

$$V_i = \frac{2\pi^2 (1,0546)^2 \cdot 10^{-68}}{204^2 \cdot 10^{-24} \cdot 0,911 \cdot 10^{-30} \cdot 1,602 \cdot 10^{-19}} - 85 \cdot \frac{1}{4} = 14,75 \text{ В}.$$

**Задача №5.** В одному з методів монохроматизації повільних нейтронів використовують два диски, виготовлені з кадмію, насаджені на спільну вісь (рис. 3). На

периферії дисків на однаковій відстані  $R$  від осі зроблено два малих круглих отвори діаметр яких  $a$ . Диски, повернуті один відносно іншого на кут  $\varphi$  навколо осі приладу і закріплені в такому положенні, обертаються навколо осі з кутовою швидкістю  $\Omega$ . Визначити довжину хвилі де Бройля  $\lambda$  та ступінь монохроматичності нейтронів, на виході такого монохроматора, якщо відстань між дисками  $l$ . Зробити розрахунок для  $l = 1 \text{ м}$ ,  $R = 10 \text{ см}$ ,  $\Omega = 300 \text{ рад/с}$ ,  $\varphi = 4^\circ$ ,  $a = 5 \text{ мм}$ .

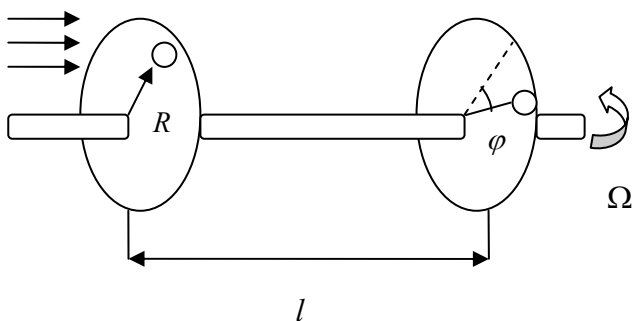


Рис. 3. Принцип роботи монохроматора нейтронів

**Розв'язок:** Необхідною умовою роботи монохроматора є вимога, щоб за той час, який нейтрони витрачають на проходження відстані  $l$ , отвір у другому диску змістився на кут  $\varphi$ . Диск повертається на кут  $\varphi$  за час  $t$

$$t = \frac{\varphi}{\Omega}. \quad (5.1)$$

Швидкість нейтронів визначається їх енергією  $E_n = \frac{m_n v_n^2}{2}$ , крізь отвір монохроматора проходитимуть лише ті нейтрони, для яких виконується умова



$$v_n = \frac{l}{t} = \frac{l\Omega}{\varphi}. \quad (5.2)$$

При цьому довжина хвилі де Бройля таких нейтронів

$$\lambda = \frac{h}{m_n v_n} = \frac{h\varphi}{m_n l\Omega}. \quad (5.3)$$

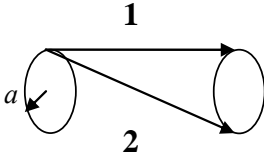


Рис. 4. Траєкторія руху нейтронів між отворами монохроматора: **1** — швидкі нейтрони, **2** — повільні

Для визначення ступеня монохроматичності пучка нейтронів, потрібно врахувати, що отвір має діаметр  $a$ . З рис. 4 видно, що більш швидкі нейтрони, рухаються по шляху 1, більш повільні — по шляху 2, витрачаючи на проходження відстані  $l$  час

$$t_1 = \frac{\varphi}{\Omega}, \quad t_2 = \frac{\varphi R + a}{\Omega R}. \quad (5.4)$$

Таким чином, крізь монохроматор проходять нейтрони, що мають швидкості в діапазоні від  $v_{n1} = \frac{l\Omega}{\varphi}$  до

$$v_{n2} = \frac{l\Omega R}{\varphi R + a} \text{ та, відповідно, довжини хвиль від } \lambda_1 = \frac{h\varphi}{m_n l\Omega}$$

$$\text{до } \lambda_2 = \frac{h(\varphi R + a)}{m_n l\Omega R} = \frac{h\varphi}{m_n l\Omega} + \frac{ha}{m_n l\Omega R}. \text{ Ступінь монохрома-}$$

тичності визначається як  $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$  і, з урахуванням формул для довжин хвиль, отримаємо:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_1} = \frac{ha}{m_n l\Omega R} \frac{m_n l\Omega}{h\varphi} = \frac{a}{\varphi R}. \quad (5.5)$$

Підставляючи параметри з умови задачі, отримаємо довжину хвилі де Бройля нейтронів на виході монохроматора

$$\lambda = \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 4 \cdot 3,14}{180 \cdot 300 \cdot 1,7 \cdot 10^{-27}} = 0,9 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0,09 \text{ нм},$$

та ступінь монохроматичності таких нейтронів

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{5 \cdot 10^{-3} \cdot 180}{4 \cdot 3,14 \cdot 0,1} = 0,716.$$

**Задача №6.** Для монохроматизації пучка нейтронів використовується бреггівське відбивання першого порядку від кристала  $LiF$  (001), для якого міжплощинна відстань  $d = 2,32 \text{ \AA}$ . На кристал падає пучок нейтронів з різними енергіями. Оцінити невизначеність енергії нейтронів  $\Delta E$  у відбитому пучку, якщо кутове розходження дифрагованого пучка  $\Delta\varphi \approx 0,1^\circ$ . Якою повинна бути товщина кристала в цьому експерименті, щоб отримати нейтрони з енергією  $1 \text{ eB}$ ?

**Розв'язок:** Запишемо умову Вульфа–Брегга для дифракційного максимуму першого порядку:

$$2d\sin\varphi = \lambda \Rightarrow \sin\varphi = \frac{\lambda}{2d}. \quad (6.1)$$

Оцінимо довжину хвилі де Бройля для нейтронів з енергією  $1 \text{ eB}$ :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_n E}} = \frac{6.62 \cdot 10^{-27}}{\sqrt{2 \cdot 1,67 \cdot 10^{-24} \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}}} = 0,287 \text{ \AA}.$$

Напрямок на перший максимум:

$$\sin\varphi = \frac{0,287}{2 \cdot 2,32} = 0,06,$$

$$\sin\varphi \approx \varphi = 0,06 \text{ рад} = 3,44^\circ.$$

З (6.1) при малих кутах можемо оцінити діапазон довжин хвиль:

$$\varphi = \frac{\lambda}{2d}, \Delta\varphi = \frac{\Delta\lambda}{2d} \Rightarrow \frac{\Delta\varphi}{\varphi} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \quad (6.2)$$

Невизначеність енергії для нейтронів пов'язана з невизначеністю довжини хвилі наступним співвідношенням:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_n}} E^{-\frac{1}{2}} \Rightarrow |\Delta\lambda| = \frac{h}{\sqrt{2m_n}} \frac{\Delta E}{2E^{\frac{3}{2}}} \Rightarrow \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\Delta E}{2E}.$$

Остаточно знаходимо:

$$\Delta E = 2E \frac{\Delta \lambda}{\lambda} = 2E \frac{\Delta \varphi}{\varphi} = 2 \cdot \frac{0,1}{3,44} = 0,058 \text{ eB}.$$

Роздільна здатність системи:

$$\mathfrak{R} = \frac{\lambda}{\Delta \lambda} = mN, \quad (6.3)$$

де  $m = 1$  – порядок максимуму,  $N = \frac{D}{d}$  – кількість інтерфруючих пучків,  $D$  – товщина кристала. З (6.3) робимо оцінку для  $D$ :

$$\frac{\lambda}{\Delta \lambda} = \frac{\varphi}{\Delta \varphi} = \frac{D}{d} \Rightarrow D = d \frac{\varphi}{\Delta \varphi} = 2,32 \cdot \frac{3,44}{0,1} \approx 80 \text{ \AA}.$$

### ***Задачі для самостійної роботи***

1. Визначити, в чому полягає різниця між хвилями де Бройля для фотонів, електронів та нейтронів? Які особливості спостереження явища дифракції для електронів, нейтронів та рентгенівського випромінювання?
2. На яку кінетичну енергію повинен бути розрахований прискорювач протонів для дослідження структури з просторовими розмірами  $l = 1 \text{ фм} = 10^{-13} \text{ см}$ ?
3. Знайти середню довжину хвилі де Бройля теплового нейтрона (такого, що знаходиться в тепловій рівновазі з зовнішнім середовищем) при кімнатній температурі  $T = 300 \text{ K}$ .
4. Визначити теоретичну мінімальну роздільну здатність  $d$  електронного мікроскопа, якщо прискорююча напруга  $V = 100 \text{ кВ}$ , а числова апертура мікроскопа  $A = 0,1$ .
5. При пропусканні пучка нейтронів від ядерного реактора через блок пресованого графіту всі нейтрони з довжинами хвиль де Бройля, коротшими за  $0,67 \text{ нм}$ , зазнають інтерференційного відбивання Вульфа – Брега. Проходять через блок лише повільні, так звані холодні нейтрони. Визначити максимальну температуру, яка відповідає найкоротшим довжинам хвиль нейтронів, що

пропускаються графітом та обрахувати постійну ґратки  $d$  графіту.

6. Виміряна довжина хвилі де Бройля виявилась вдвічі меншою, ніж обчислена за формулою  $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}}$ .

З'ясуйте причину розбіжності та розрахуйте, при якому прискорюючому потенціалі проводився експеримент.

7. Довжина хвилі рентгенівських променів, що визначалась за допомогою каліброваної ґратки, становить  $0,709 \text{ \AA}$ . Ці промені падають на кристал  $\text{NaCl}$  з густиною  $2165 \text{ кг/м}^3$ . При куті  $\varphi = 7,27^\circ$  спостерігається максимум інтерференції першого порядку. Оцінити з цих даних число Авогадро.
8. Пучок електронів з кінетичною енергією  $E_k = 80 \text{ eV}$  падає на поверхню платини, внутрішній потенціал якої  $U_i = 12 \text{ В}$ . Кут падіння  $\vartheta = 60^\circ$ . Знайти кут заломлення.
9. Визначити внутрішній потенціал монокристала срібла, якщо для електронних хвиль з енергією  $100 \text{ eV}$  при відбиванні від грані (001) під кутом  $\alpha = 30^\circ$  спостерігається дифракційний максимум четвертого порядку. Стала ґратки для срібла  $a = 0,4 \text{ нм}$ .
10. Знайти залежність фазової швидкості дебройлівських хвиль від їх довжини у релятивістському випадку.
11. На шляху паралельного пучка атомів водню з енергією  $E_k = 0,06 \text{ eV}$  розміщено щілину і на відстані  $l = 1 \text{ м}$  від неї – екран. Оцінити ширину щілини  $d$ , при якій ширина зображення пучка атомів буде мінімальною. Яким буде значення  $d$  для електронів при тій самій енергії?

### Розділ 3. СПІВВІДНОШЕННЯ НЕВИЗНАЧЕНОСТЕЙ

#### Основні теоретичні відомості

В атомній фізиці та квантовій механіці використовуються два типи співвідношення невизначеностей. Перший тип – це співвідношення між невизначеністю проекції імпульсу і невизначеністю відповідної координати:

$$\overline{\Delta p_x^2} \cdot \overline{\Delta x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad \overline{\Delta p_y^2} \cdot \overline{\Delta y^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad \overline{\Delta p_z^2} \cdot \overline{\Delta z^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad (1)$$

де  $\Delta p_x = \sqrt{\overline{\Delta p_x^2}} = \sqrt{\overline{(p_x - \bar{p}_x)^2}}$  і  $\Delta x = \sqrt{\overline{\Delta x^2}} = \sqrt{\overline{(x - \bar{x})^2}}$  – квантово-механічні невизначеності проекції імпульсу і координати вздовж осі  $x$ ; аналогічно  $\Delta p_y = \sqrt{\overline{\Delta p_y^2}}$  і  $\Delta y = \sqrt{\overline{\Delta y^2}}$ ;  $\Delta p_z = \sqrt{\overline{\Delta p_z^2}}$  і  $\Delta z = \sqrt{\overline{\Delta z^2}}$ ; риска над величинами означає квантово-механічне усереднення. Як видно з (1), мірою відхилення імпульсів та координат від середніх значень є середньоквадратичні величини  $\overline{\Delta p_x^2}$ ,  $\overline{\Delta x^2}$ ,  $\overline{\Delta p_y^2}$ ,  $\overline{\Delta y^2}$ ,  $\overline{\Delta p_z^2}$ ,  $\overline{\Delta z^2}$ .

Оскільки співвідношення (1) визначають лише нижню межу відхилення імпульсів та координат, а також з огляду на те, що іноді незручно працювати з квадратичними величинами, співвідношення (1) часто записують у більш простій формі:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar, \quad \Delta p_y \cdot \Delta y \geq \hbar, \quad \Delta p_z \cdot \Delta z \geq \hbar. \quad (2)$$

Відмітимо також ту обставину, що в (1), (2) входить приведена стала Планка  $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,055 \cdot 10^{-27} \text{ ерг} \cdot \text{с}$ , а не стала

Планка  $h = 6,626 \cdot 10^{-27} \text{ ерг} \cdot \text{с}$ . Якщо для (1) це є математично обґрунтованим [33], то в співвідношеннях (2) це зроблено лише для зручності. Без жодних обмежень в *наближених* співвідношеннях (2) можна замінити  $\hbar$  на  $h$ , оскільки ці співвідношення, як правило, використовуються лише для розв'язання задач на якісному рівні, коли коефіцієнт  $2\pi$  несуттєво впливає на кінцевий результат.

Співвідношення невизначеностей другого типу пов'язує між собою можливе відхилення енергії  $\Delta E$  з проміжком часу  $\Delta t$ , за який спостерігається це відхилення:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (3)$$

Співвідношення (3) має наступний зміст. Нехай частинка перебуває в певному нестационарному стані, ймовірність перебування в якому змінюється з часом  $t$ . Тоді інтервал часу  $\Delta t$ , протягом якого ця ймовірність є суттєвою, буде “ефективним” часом життя частинки в даному нестационарному стані. Для моментів часу  $t > \Delta t$  ймовірність перебування в нестационарному стані дуже мала. Крім того, оскільки стан не є стаціонарним, енергія в цьому стані не зберігається, тобто може бути визначена лише з точністю до певної величини  $\Delta E$ . Співвідношення (3) пов'язує між собою обидві ці величини – похибку  $\Delta E$  в законі збереження енергії для частинки з проміжком часу  $\Delta t$ , протягом якого може не виконуватись цей закон.

Як приклад, можна навести збуджені стани атомів, яким відповідають енергетичні рівні з шириною  $\Delta E$ , що призводить до того, що спектральні лінії, які випромінює збуджений атом, не є строго монохроматичними, а характеризуються певним інтервалом частот. Таке уширення спектральної лінії за рахунок розмиття енергетичних рівнів отримало назву радіаційного або природного уширення (див. розділ 13).

### **Методичні вказівки та поради**

1. Співвідношення невизначеностей часто застосовують для наближених обчислень, в яких робиться оцінка певних величин чи ефектів. Наприклад, оцінюються розміри області, в якій рухається частинка, найменше значення її повної енергії, з'ясовується, коли рух частинки переходить у класичний тощо. При таких обчисленнях звичайно вважають, що величина невизначеності має той самий порядок, що й сама величина, тобто вважають, що

$$\Delta x = \sqrt{(x - \bar{x})^2} = \sqrt{x^2 - \bar{x}^2} = \sqrt{x^2} \sim x, \quad \Delta p_x = \sqrt{(p_x - \bar{p}_x)^2} = \sqrt{p_x^2 - \bar{p}_x^2} = \sqrt{p_x^2} \sim p_x \text{ тощо.}$$

Таке наближення є природ-

ним для систем, що знаходяться в стані, близькому до стаціонарного, що підтверджується багатьма конкретними прикладами [2]. Коли частинку можна розглядати як нерелятивістську, то, якщо це потрібно для розв'язування задачі, можна вважати, що  $\Delta p_x \sim p_x \sim mv_x$ ,

$$\Delta E \sim E \sim E_K \sim \frac{p_x^2}{2m}, \text{ де } E_K - \text{кінетична енергія частинки,}$$

що рухається лише вздовж осі  $x$  тощо.

2. Наближений характер обчислень із застосуванням співвідношення невизначеностей є підставою до того, що іноді під час розрахунків користуються не точними нерівностями (1), а наближеними (2). При цьому можна також змінювати числовий коефіцієнт, що входить до правих частин (2) (а також (3)), наприклад, замість приведеної сталої Планка  $\hbar$  використовувати величину  $h = 2\pi\hbar$ .

3. При наближених обчисленнях мінімально можливої енергії частинки і відповідних розмірів області простору, в якій вона рухається, звичайно виходять з класичного виразу

$$\text{для повної енергії } E = \frac{p_x^2}{2m} + U(x). \text{ Далі зі співвідношення}$$

невизначеностей знаходять, наприклад, імпульс  $p_x \sim \frac{\hbar}{x}$  і

підставляють його до виразу для повної енергії; тоді  $E$  стає функцією лише  $x$ , і вдається дослідити поведінку функції  $E(x)$  звичайними методами. Ці обчислення не є строгими з точки зору точної теорії, але їх можна вважати такими, що дають правильний порядок величини мінімальної енергії частинки.

4. В окремих задачах необхідно визначити, коли рух частинки можна вважати класичним, тобто таким, що відбувається за законами класичної механіки. Щоб відповісти на це питання, треба знайти квантово-механічні невизначеності  $\Delta x$ ,  $\Delta p_x$ ,  $\Delta v_x$  тощо, і порівняти їх з самими величинами  $x$ ,  $p_x$ ,  $v_x$ . Якщо виконуються нерівності  $|\Delta x| \ll |x|$ ,  $|\Delta p_x| \ll p_x$ ,  $|\Delta v_x| \ll v_x$ , то рух частинки можна вважати

класичним.

### Приклади розв'язування задач

**Задача №1.** Довести, що вимірювання координати мікрочастинки за допомогою оптичного мікроскопа з роздільною здатністю  $1/\delta l$  призводить до невизначеності її імпульсу  $\Delta p_x \sim \hbar/\delta l$  (рис. 1).

**Розв'язок:** Нехай мікрочастинка, що знаходиться в фокусі  $F$  об'єктива мікроскопа, опромінюється потоком фотонів  $a$ . Висновок про наявність у точці  $F$  мікрочастинки можна зробити, лише фіксуючи фотони, що розсіялися на частинці і потрапили до об'єктива мікроскопа. При цьому імпульс фотона  $\vec{p}$  може змінювати свій напрямок у межах кута  $2\varphi$ . Відповідно  $x$ -проекція імпульсу буде змінюватись у межах від  $p \sin \varphi$  до  $-p \sin \varphi$ . Отже, величина  $p \sin \varphi$  є невизначеністю імпульсу  $\Delta p_x$ .

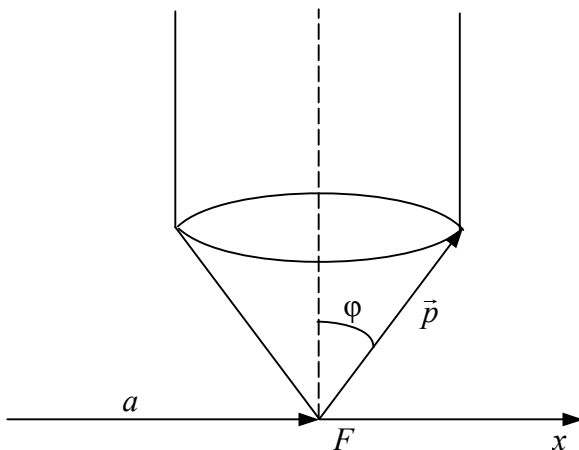


Рис. 1. Схематичне зображення об'єктива оптичного мікроскопа, в фокусі  $F$  якого знаходиться мікрочастинка

При розсіюванні фотонів на мікрочастинці виконується закон збереження імпульсу, тому невизначеність імпульсу фотона дорівнює невизначеності імпульсу частинки:



$$\Delta p_x = p \sin \varphi . \quad (1.1)$$

Для оптичного мікроскопа величина  $\delta l$  визначається за формулою [1\*]<sup>1</sup>

$$\delta l \cong \frac{\lambda}{n \sin \varphi} , \quad (1.2)$$

де  $\lambda$  – довжина хвилі світла;  $n$  – показник заломлення середовища, де знаходиться об'єкт;  $n \sin \varphi$  – числова апертура. Вважаючи, що мікрочастинка знаходиться в повітрі ( $n = 1$ ), невизначеність координати  $\Delta x$  мікрочастинки можна записати як  $\Delta x = \delta l$ , тобто

$$\Delta x \cong \frac{\lambda}{\sin \varphi} . \quad (1.3)$$

Тепер з умови

$$p = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} , \quad (1.4)$$

знаходимо, що

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\lambda}{\sin \varphi} p \sin \varphi = p\lambda = 2\pi\hbar , \quad (1.5)$$

тобто

$$\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{\delta l} , \quad (1.6)$$

що й треба було довести.

**Задача №2.** Оцінити радіуси атома  $r_a$  та ядра атома  $r_{\text{я}}$ , вважаючи, що швидкості електронів і нуклонів, що знаходяться в найнижчому енергетичному стані, визначаються енергією зв'язку  $\Delta E$ . При розрахунках вважати, що енергія зв'язку електрона в атомі  $\Delta E_e = 10 \text{ eV}$ , енергія зв'язку нуклона в ядрі  $\Delta E_n = 8 \text{ MeV}$ .

**Розв'язок:** По-перше визначимо, яким законам підкорюється рух електрона в атомі та нуклона в ядрі – законам нереляти-

---

<sup>1</sup> Тут і далі зірочкою вказані номери посилань на додаткову літературу, що наведена в кінці розділу.

вістської чи релятивістської механіки. Для цього обчислимо енергії спокою електрона  $E_{0e}$  та нуклона  $E_{0n}$ :

$$\begin{aligned} E_{0e} &= m_e c^2 = 9,11 \cdot 10^{-28} (3 \cdot 10^{10})^2 = 81,99 \cdot 10^{-8} \text{ ерг} = \\ &= 512,4 \text{ кеВ} , \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} E_{0n} &= m_n c^2 = 1,67 \cdot 10^{-24} (3 \cdot 10^{10})^2 = 15,03 \cdot 10^{-4} \text{ ерг} = \\ &= 938,4 \text{ МеВ} , \end{aligned} \quad (2.2)$$

де  $m_e$  та  $m_n$  – маси спокою електрона та нуклона,  $c$  – швидкість світла. Електрон в атомі та нейтрон в ядрі знаходяться в зв'язаному стані, отже їх кінетичні енергії  $E_{Ke}$  та  $E_{Kn}$  повинні бути меншими за енергії зв'язку  $\Delta E_e$  та  $\Delta E_n$ . А тому будуть виконуватись нерівності

$$E_{Ke} \sim \Delta E_e \ll E_{0e}, \quad E_{Kn} \sim \Delta E_n \ll E_{0n}, \quad (2.3)$$

де  $E_{Ke}$  та  $E_{Kn}$  – кінетичні енергії електрона та нуклона, відповідно. Отже, можна вважати, що рух електрона в атомі та нуклона в ядрі описується законам нерелятивістської механіки (з (2.3) впливає аналогічна умова для імпульсів та швидкостей електрона та нейтрона). З урахуванням цього покладемо, що

$$E_{Ke} = \frac{m_e v_e^2}{2} \sim \Delta E_e, \quad E_{Kn} = \frac{m_n v_n^2}{2} \sim \Delta E_n, \quad (2.4)$$

де  $v_e$  та  $v_n$  – відповідно, швидкості електрона та нуклона, що визначаються як

$$v_e \sim \sqrt{\frac{2\Delta E_e}{m_e}}, \quad v_n \sim \sqrt{\frac{2\Delta E_n}{m_n}}. \quad (2.5)$$

Застосуємо тепер співвідношення невизначеностей (2), вважаючи, що невизначеність координати для електрона дорівнює  $r_a$ , а для нуклона –  $r_{я}$ :

$$\Delta p_e r_a \sim \hbar, \quad \Delta p_n r_{я} \sim \hbar. \quad (2.6)$$

Оскільки за умовою задачі електрон та нуклон знаходяться в найнижчому енергетичному стані, зручно скористатись наближенням

$$\Delta p_e \sim p_e = m_e v_e, \quad \Delta p_n \sim p_n = m_n v_n. \quad (2.7)$$

З урахуванням (2.7) зробимо оцінки для радіусів атома  $r_a$  та ядра атома  $r_{\text{я}}$ :

$$r_a \sim \frac{\hbar}{\Delta p_e} \sim \frac{\hbar}{m_e v_e} \sim \frac{\hbar}{m_e} \sqrt{\frac{m_e}{2\Delta E_e}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_e \Delta E_e}}, \quad (2.8)$$

$$r_{\text{я}} \sim \frac{\hbar}{\Delta p_n} \sim \frac{\hbar}{m_n v_n} \sim \frac{\hbar}{m_n} \sqrt{\frac{m_n}{2\Delta E_n}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_n \Delta E_n}}. \quad (2.9)$$

Підставляючи в них умови задачі, одержимо:

$$\begin{aligned} r_a &\sim \frac{\hbar}{\sqrt{2m_e \Delta E_e}} = \frac{1,05 \cdot 10^{-27}}{\sqrt{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-28} \cdot 10 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}}} = \\ &= 0,61 \cdot 10^{-8} \text{ см} \sim 0,5 \text{ \AA}, \\ r_{\text{я}} &\sim \frac{\hbar}{\sqrt{2m_n \Delta E_n}} = \frac{1,05 \cdot 10^{-27}}{\sqrt{2 \cdot 1,67 \cdot 10^{-24} \cdot 8 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}}} = \\ &= 1,6 \cdot 10^{-13} \text{ см} \sim 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

**Задача №3. Застосовуючи співвідношення невизначеностей, довести, що електрони не можуть бути складовими атомних ядер.**

**Розв'язок:** Оцінимо за допомогою співвідношення невизначеностей повну енергію електрона  $E$ , що знаходиться в атомному ядрі:

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}, \quad (3.1)$$

де  $p$  та  $m_0$  – імпульс та маса спокою електрона,  $c$  – швидкість світла.

За невизначеність координати  $\Delta x$  електрона приймемо діаметр ядра  $D$ . Будемо також вважати, що електрон знаходиться в найнижчому енергетичному стані, для якого, як відомо, зручно скористатись наближенням  $\Delta p \cong p$ . З цього випливає, що

$$p \cong \Delta p \cong \hbar / \Delta x \cong \hbar / D. \quad (3.2)$$

Тоді, виходячи з (3.1)–(3.2), повна енергія запишеться як

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + \frac{\hbar^2 c^2}{D^2}} = c \sqrt{m_0^2 c^2 + \frac{\hbar^2}{D^2}}. \quad (3.3)$$

Для  $D = 2 \cdot 10^{-13}$  см отримаємо наступний результат:

$$\begin{aligned} E &= c \sqrt{m_0^2 c^2 + \frac{\hbar^2}{D^2}} = 3 \cdot 10^{10} \sqrt{9,1 \cdot 10^{-28} \cdot 81,99 \cdot 10^{-11} + \frac{(1,05 \cdot 10^{-27})^2}{(2 \cdot 10^{-13})^2}} = \\ &= 1,575 \cdot 10^{-4} \text{ ерг} = 98,4 \text{ MeB}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

де  $m_0 c^2 = 0,512 \text{ MeB}$  – енергія спокою електрона.

Повній енергії  $E$  електрона відповідає кінетична енергія

$$E_K = E - m_0 c^2 = 98,4 - 0,512 = 97,88 \text{ MeB}. \quad (3.5)$$

Електрон з такою кінетичною енергією не зможе перебувати в атомному ядрі, оскільки енергія зв'язку нуклона в ядрі становить всього  $\Delta E_n = 8 \text{ MeB}$ . Отже, електрон, якщо навіть він потрапить до ядра, повинен відразу ж з нього вилетіти.

**Задача №4. Вивести співвідношення невизначеностей  $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$ , використовуючи поняття хвильового пакета.**

**Розв'язок:** Представимо довільну хвильову функцію частинки  $\psi(x, t)$  у вигляді хвильового пакета, тобто неперервної суми плоских монохроматичних хвиль де Бройля в інтервалі хвильових чисел від  $k_0 - \Delta k$  до  $k_0 + \Delta k$ :

$$\psi(x, t) = A \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{ikx - i\omega t} dk, \quad (4.1)$$

де  $A$  – амплітуда, однакова для всіх хвиль де Бройля,  $\omega$ ,  $k$  – колова частота та хвильове число плоскої хвилі де Бройля,  $k_0$  – хвильове число, що відповідає власній хвильовій функції частинки  $\psi_{k_0}(x, t)$ .

Оскільки навіть у вакуумі хвилі де Бройля є хвилями, що мають дисперсію, то  $\omega = \omega(k)$ . Розкладемо цю функцію в ряд Тейлора навколо значення  $k = k_0$ , вважаючи, що  $\Delta k$  є малою

величиною:

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + \left( \frac{\partial \omega}{\partial k} \right)_{k=k_0} (k - k_0) = \omega(k_0) + u(k - k_0), \quad (4.2)$$

де  $u \equiv v_{ep}$  – групова швидкість.

Підставляючи розклад  $\omega(k)$  у вираз (4.1) для  $\psi(x, t)$ , одержимо:

$$\psi(x, t) = A \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{ikx - i\omega(k_0)t - iu(k - k_0)t} dk = A e^{-i\omega(k_0)t + iuk_0t} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{ik(x - ut)} dk. \quad (4.3)$$

Для спрощення подальших обчислень введемо нову змінну

$$\varphi = ik(x - ut). \quad (4.4)$$

Тоді

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= A \frac{e^{-i\omega(k_0)t + iuk_0t}}{i(x - ut)} \int_{i(k_0 - \Delta k)(x - ut)}^{i(k_0 + \Delta k)(x - ut)} e^{\varphi} d\varphi = \\ &= A \frac{e^{-i\omega(k_0)t + iuk_0t}}{i(x - ut)} \left( e^{i(k_0 + \Delta k)(x - ut)} - e^{i(k_0 - \Delta k)(x - ut)} \right) = \\ &= A e^{-i\omega(k_0)t + ik_0x} \left( \frac{e^{i\Delta k(x - ut)} - e^{-i\Delta k(x - ut)}}{i(x - ut)} \right) = \\ &= 2A\Delta k \frac{\sin(\Delta k(x - ut))}{\Delta k(x - ut)} e^{i[k_0x - \omega(k_0)t]}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Таким чином, виконується співвідношення

$$\psi(x, t) \sim \frac{\sin \eta}{\eta},$$

де  $\eta = \Delta k(x - ut)$ . За рахунок цього функцію  $\psi(x, t)$  з достатньою точністю можна вважати відмінною від нуля лише в околі першого максимуму при  $\eta = \pi x = 0$  (рис. 2). Дійсно (див. рис. 2), амплітуда  $\psi(x, t)$  в околі другого та наступних макси-

мумів значно менша за амплітуду  $\psi(x, t)$  при  $\eta = 0$ , що дає підстави для такого припущення.

Ширину першого максимуму можна оцінити як відстань між координатами нулів функції, які визначаються з умови

$$x = x_0 \pm \frac{\pi n}{\Delta k}, n \in \mathbb{Z}. \quad (4.6)$$

Відповідно, ширина першого максимуму дорівнює

$$\Delta x = \frac{2\pi}{\Delta k}. \quad (4.7)$$

Цю величину можна вважати за невизначеність координати частинки. Враховуючи, що

$$\Delta p_x = \hbar \Delta k, \quad (4.8)$$

одержимо

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar. \quad (4.9)$$

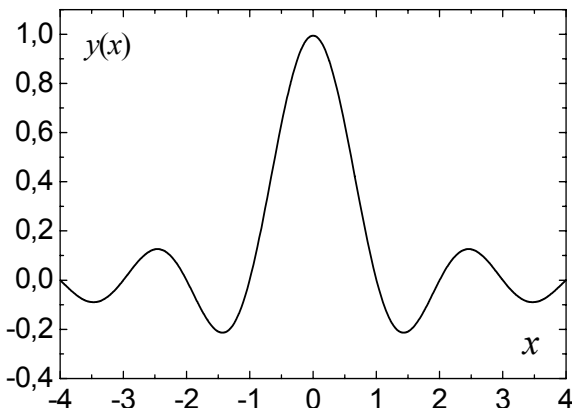


Рис. 2. Графік функції  $y(x) = \frac{\sin(\pi x)}{\pi x}$

**Задача №5. У 1935 році Х. Юкава запропонував мезонну теорію ядерних сил. Відповідно до цієї теорії,  $p \rightarrow n + \pi^+$ , а  $n + \pi^+ \rightarrow p$ , тобто протони і нейтрони обмінюються двома квантами ядерного поля –  $\pi^+$ -мезонами. Але якщо нуклони постійно випромінюють і поглинають  $\pi^+$ -мезони, то чому в дослідах не спостерігаються протони і нейтрони з масами, які б відрізнялись від мас спокою цих частинок? Виходячи з моделі Х. Юкави, оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей масу  $\pi^+$ -мезона.**

**Розв'язок:** На перше питання задачі можна відповісти наступним чином. Нуклони обмінюються  $\pi^+$ -мезонами за такий малий проміжок часу  $\Delta t$ , за який неможливо оцінити зміну маси всієї системи. Цей проміжок часу  $\Delta t$  оцінимо як

$$\Delta t = \frac{R}{c} \sim 10^{-23} \text{ с}, \quad (5.1)$$

де  $R \approx 1,7 \cdot 10^{-13} \text{ см} = 1,7 \text{ фм}$  – радіус дії ядерних сил, що близький до радіуса ядра атома,  $c$  – швидкість світла. Згідно співвідношення невизначеностей (3)

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar, \quad (5.2)$$

де може бути враховано зв'язок маси  $\pi^+$ -мезона  $m_\pi$  та відповідної енергії

$$\Delta E = m_\pi c^2. \quad (5.3)$$

Отже, комбінуючи формули (5.1)–(5.3), одержимо

$$m_\pi c^2 \cdot \frac{R}{c} \geq \hbar \quad (5.4)$$

або

$$m_\pi \geq \frac{\hbar}{Rc}. \quad (5.5)$$

Підставляючи числові значення, знаходимо, що

$$m_\pi \geq \frac{\hbar}{Rc} = \frac{1,05 \cdot 10^{-27}}{1,7 \cdot 10^{-13} \cdot 3 \cdot 10^{10}} \approx 2 \cdot 10^{-25} \text{ з},$$

тобто маса  $\pi^+$ -мезона приблизно в 200 разів більша за масу спокою електрона ( $m_\pi \approx 200 m_e$ ), що добре узгоджується з відомими експериментальними даними.

**Задача №6.** Оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей мінімальну енергію лінійного гармонічного осцилятора.

**Розв'язок:** За аналогією з класичною механікою, повну енергію  $E$  лінійного гармонічного осцилятора представимо у вигляді суми кінетичної та потенціальної енергій:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (6.1)$$

де  $p$  – імпульс, що визначає кінетичну енергію осцилятора – частинки з масою  $m$ , яка коливається з коловою частотою  $\omega$ , відхиляючись від положення рівноваги на відстань  $x$ .

Але якщо осцилятором є мікрочастинка, що виконує гармонічні коливання, то необхідно врахувати, що невизначеності координати  $\Delta x$  та імпульсу  $\Delta p_x$  цієї частинки пов'язані співвідношенням (2).

З урахуванням цього повна енергія осцилятора запишеться у вигляді

$$E = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + \frac{m\omega^2 (\Delta x)^2}{2} = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2 (\Delta x)^2}{2}. \quad (6.2)$$

Мінімум енергії осцилятора буде досягатися при такому значенні невизначеності координати  $\Delta x_{\min}$ , яке задовольняє умові

$$\frac{dE}{d(\Delta x)} = -\frac{\hbar^2}{m(\Delta x_{\min})^3} + m\omega^2 \Delta x_{\min} = 0, \quad (6.3)$$

звідки одержимо, що

$$\Delta x_{\min} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (6.4)$$

При цьому значенні невизначеності координати  $\Delta x = \Delta x_{\min}$  мінімальна енергія осцилятора буде дорівнювати

$$E_{\min} = E(\Delta x_{\min}) = \hbar\omega. \quad (6.5)$$

Зауважимо, що це значення енергії вдвічі перевищує точне значення мінімальної енергії квантового гармонічного осцилятора, що дорівнює  $\frac{\hbar\omega}{2}$ . Щоб отримати точний вираз для мінімальної енергії осцилятора, необхідно використати точні співвідношення невизначеностей (1):

$$\overline{(\Delta p_x)^2} \cdot \overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Дійсно, в цьому випадку, за аналогією з тим, що було ви-



кладено раніше,

$$E = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + \frac{m\omega^2 (\Delta x)^2}{2} = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2 (\Delta x)^2}{2}. \quad (6.6)$$

З умови мінімуму енергії

$$\frac{dE}{d(\Delta x)} = -\frac{\hbar^2}{4m(\Delta x_{\min})^3} + m\omega^2 \Delta x_{\min} = 0 \quad (6.7)$$

знаходимо невизначеність координати

$$\Delta x_{\min} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad (6.8)$$

звідки відразу ж одержуємо вираз для мінімальної енергії квантового гармонічного осцилятора:

$$E_{\min} = E(\Delta x_{\min}) = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (6.9)$$

**Задача №7.** Паралельний потік моноенергетичних електронів поширюється по нормалі до діафрагми з вузькою прямокутною щілиною завширшки  $b = 1,0 \text{ мкм}$  (рис. 3).

**Виведіть співвідношення невизначеностей  $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$ , після чого визначте за його допомогою швидкість цих електронів, якщо на екрані, що знаходиться на відстані  $l = 50 \text{ см}$  від щілини, ширина центрального дифракційного максимуму дорівнює  $\Delta x = 0,36 \text{ мм}$ .**

**Розв'язок:** До проходження електроном щілини, проекція його імпульсу на ось  $x$  має точне значення:  $p_x = 0$ . Це призводить до того, що  $\Delta p_x = 0$ , але координата частинки  $x$  відповідно до (2) взагалі не є визначеною.

Якщо електрон пройде крізь щілину, то в області щілини він може бути зафіксованим з невизначеністю по координаті  $x$  не більшою, ніж

$$\Delta x \approx b. \quad (7.1)$$

При цьому, за рахунок дифракції, кожен з електронів, що пройшов крізь щілину, відхиляється від свого початкового напрямку руху і будуть рухатись під деяким кутом  $\varphi$ , утворюю-

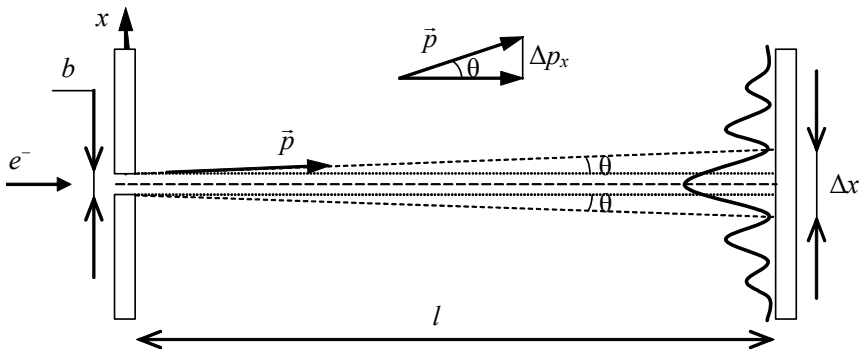


Рис. 3. Дифракція моноенергетичних електронів на вузькій щілині завширшки  $b$

чи на екрані картинку з дифракційних максимумів та мінімумів. Оскільки інтенсивність нульового дифракційного максимуму значно більша за інтенсивність інших максимумів, будемо вважати, що майже всі електрони після дифракції на щілині поширюються в межах кута  $2\theta$ , де  $\theta$  – кут що відповідає першому дифракційному мінімуму (рис. 3). В оптиці доводиться, що цей кут можна визначити як кут, якому відповідає різниця ходу від обох меж щілини, що дорівнює довжині хвилі випромінювання  $\lambda$  [1\*]. Отже,

$$b \sin \theta = \lambda_B, \quad (7.2)$$

де  $\lambda_B$  – довжина хвилі де Бройля, однакова для всіх моноенергетичних електронів.

Внаслідок дифракції у електронів виникає невизначеність  $x$ -компоненти імпульсу з характерною величиною розкиду:

$$\Delta p_x \approx p \sin \theta. \quad (7.3)$$

Модуль вектора імпульсу  $p$  виразимо за допомогою співвідношення де Бройля

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_B}, \quad (7.4)$$

тоді комбінуючи вищенаведені формули, одержимо шукане співвідношення невизначеностей:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq p b \sin \theta \approx \frac{2\pi\hbar}{\lambda_B} b \frac{\lambda_B}{b} \geq h. \quad (7.5)$$

Знайдемо тепер швидкість електронів  $v$ , для чого спочатку оцінимо  $\sin \theta$  наступним чином:

$$\sin \theta \approx \operatorname{tg} \theta = \frac{\frac{\Delta x}{2} - \frac{b}{2}}{l} \approx \frac{\Delta x}{2l}, \quad (7.6)$$

де враховано, що кут  $\theta$  – малий, оскільки  $b \ll \Delta x \ll l$ .

З співвідношення (7.5) випливає, що

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \approx p b \sin \theta \sim \hbar, \quad (7.7)$$

звідки, враховуючи, що  $p = m_e v$ , де  $m_e$  – маса електрона, одержимо:

$$v \sim \frac{\hbar}{m_e b \sin \theta} = \frac{2\hbar l}{m_e b \Delta x} = \frac{2 \cdot 1,05 \cdot 10^{-27} \cdot 50}{9,11 \cdot 10^{-28} \cdot 10^{-4} \cdot 0,036} \approx 3,2 \cdot 10^7 \text{ см/с}. \quad (7.8)$$

**Задача №8.** Доведіть за допомогою співвідношення невизначеностей, що навіть при температурі абсолютного нуля  $T = 0 \text{ K}$  гелій буде знаходитись в рідкій фазі. Врахувати, що енергія зв'язку атомів гелію при цій температурі  $U \approx -12,5 \cdot 10^{-16} \text{ ерг}$  [31].

**Розв'язок:** Будемо вважати, що при температурі абсолютного нуля атоми гелію здійснюють лише “нульові коливання”. Кінетична енергія  $E_K$  таких коливань запишеться у вигляді (див. задачу №6 цього розділу):

$$E_K = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}, \quad (8.1)$$

де  $\Delta x$  – невизначеність координати атома гелію, а  $m$  – його маса.

Середню відстань між атомами гелію оцінимо виразом

$$d \sim \sqrt[3]{\frac{M}{\rho N_A}} = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 10^{-3}}{0,145 \cdot 6 \cdot 10^{23}}} \approx 3,6 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 3,6 \text{ Å}, \quad (8.2)$$

де  $M$  – молярна маса гелію,  $\rho \approx 0,145 \text{ г/см}^3$  – густина рідкого гелію [31],  $N_A$  – стала Авогадро. За розмір атома гелію  $a$  візьмемо величину, що за порядком дорівнює подвійному розміру атома водню:

$$a \sim 4a_0 \approx 2,2 \text{ \AA}, \quad (8.3)$$

де  $a_0$  – радіус першої борівської орбіти. Тоді для невизначеності координати атома  $\Delta x$  одержимо

$$\Delta x \sim \frac{d-a}{2} = \frac{3,6-2,2}{2} = 0,7 \text{ \AA}, \quad (8.4)$$

а відповідне значення кінетичної енергії буде

$$E_K = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-27})^2}{2 \cdot 4 \cdot 1,67 \cdot 10^{-24} \cdot (0,7 \cdot 10^{-8})^2} = 16,8 \cdot 10^{-16} \text{ ерг}. \quad (8.5)$$

Оскільки  $E_K + U > 0$ , то атоми гелію навіть при температурі абсолютного нуля будуть мати надлишок енергії і, відповідно, знаходитись у вільному стані. Тому гелій не буде кристалізуватись, а залишиться в рідинному стані, до якого він перейшов при температурі  $T_{He} = 4,2 \text{ K}$ .

**Задача №9.** В надпровідниках носіями заряду, що можуть утворювати бездисипативний постійний струм, є так звані куперівські пари – об'єднання двох електронів з протилежно направленими імпульсами та спінами. Вважаючи, що енергія зв'язку куперівської пари  $\Delta E$  при температурі абсолютного нуля дорівнює  $\Delta E \sim 2kT_C$ , де  $T_C$  – температура, що відповідає переходу до надпровідного стану, оцінити розмір куперівської пари для ніобію ( $T_C \approx 9 \text{ K}$ ) при температурі  $T = 0$ .

**Розв'язок:** Куперівська пара (детальну інформацію див. в [2\*, 3\*]) – це система двох зв'язаних електронів з протилежно направленими імпульсами та спінами. Вона утворюється за рахунок того, що один з електронів, взаємодіючи з кристалічною

ґраткою, в якій він рухається, породжує коливальне збудження цієї ґратки – фонон. Цей фонон поглинається іншим електроном, який, в свою чергу, також випромінює фонон, що поглинається першим електроном. Обмінюючись фононами, електрони взаємодіють один з одним (і утворюють зв'язаний стан – куперівську пару), подібно до того, як електрон та протон взаємодіють один з одним за рахунок обміну квантами електромагнітного поля – фотонами і можуть утворити зв'язану систему – атом водню.

Енергія зв'язку  $\Delta E$  куперівської пари – це мінімальна енергія, яку необхідно надати парі для того, щоб її зруйнувати. Припустимо, що енергія нерухомої куперівської пари збільшилася на  $\Delta E$ . Тоді куперівська пара повинна зруйнуватися, породжуючи при цьому два незв'язаних електрони. Час  $\Delta t$ , за який відбувається цей процес, можна знайти з співвідношення невизначеностей (3):

$$\Delta t \sim \frac{\hbar}{\Delta E}. \quad (9.1)$$

Електрони, що утворюють куперівську пару, знаходяться поблизу поверхні Фермі, а тому їх імпульси  $p$  задовольняють умові [2\*, 3\*]

$$p \approx p_F = m_e v_F, \quad (9.2)$$

де  $p_F$ ,  $v_F$  – імпульс та швидкість електрона з масою  $m_e$  на поверхні Фермі.

Інформація про зміну стану куперівської пари передається від одного електрона до іншого шляхом обміну фононами, швидкості яких можна вважати за порядком однаковими з  $v_F$ .

І, отже, для розміру куперівської пари  $\xi_0$  при температурі абсолютного нуля одержимо наступну оцінку:

$$\xi_0 \sim v_F \Delta t = \frac{\hbar v_F}{\Delta E}. \quad (9.3)$$

Оскільки  $v_F \approx 10^8$  см/с для розміру куперівських пар в ніобію маємо оцінку:

$$\xi_0 \sim \frac{\hbar v_F}{2kT_C} = \frac{1,05 \cdot 10^{-27} \cdot 10^8}{4 \cdot 1,38 \cdot 10^{-16} \cdot 9} = 2,1 \cdot 10^{-5} \text{ см} = 2100 \text{ \AA}, \quad (9.4)$$

тобто відстань між електронами, що утворюють куперівську

пару, в сотні й тисячі разів перевищує міжатомну відстань.

**Задача №10.** Взаємодія магнітних моментів нейтрона і електрона може формально призвести до зв'язаного стабільного стану цих частинок. Який характерний розмір такої системи?

**Розв'язок:** Оскільки електрон та нейтрон мають бути в зв'язаному стані, то повна енергія  $E$  такої системи буде від'ємною:

$$E = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{\mu_e \mu_n}{r^3} < 0, \quad (10.1)$$

де  $p$ ,  $m_e$  – імпульс та маса електрона,  $\mu_e$  та  $\mu_n$  – магнітні моменти електрона та нейтрона,  $r$  – відстань між частинками. В (10.1) ми взяли до уваги те, що маса нейтрона  $m_n$  значно більша за масу електрона  $m_e$ , а тому можна вважати, що електрон обертається навколо нерухомого нейтрона.

Скористаємось співвідношенням невизначеностей (2), вважаючи, що невизначеність імпульсу  $\Delta p$  порядку самого імпульсу  $p$ :

$$pr \sim \hbar. \quad (10.2)$$

З (10.1), (10.2) одержуємо вираз для повної енергії як функцію відстані  $r$  між частинками:

$$E \simeq \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{\mu_e \mu_n}{r^3}. \quad (10.3)$$

Радіус стаціонарної орбіти електрона  $r_0$ , що рухається навколо нейтрона, знайдемо з умови

$$\left. \frac{dE}{dr} \right|_{r=r_0} = -\frac{\hbar^2}{m_e r^3} + 3 \frac{\mu_e \mu_n}{r^4} \Big|_{r=r_0} = 0, \quad (10.4)$$

звідки

$$r_0 = \frac{3m_e \mu_e \mu_n}{\hbar^2}. \quad (10.5)$$

Враховуючи, що  $\mu_n = |\vec{\mu}_n| = 0,96 \cdot 10^{-23} \text{ ерг} / \text{Гс},$

$\mu_e = |\vec{\mu}_e| = 0,93 \cdot 10^{-20} \text{ ерг} / \text{Гс}$  , одержимо

$$r_0 = \frac{3 \cdot 9,1 \cdot 10^{-28} \cdot 0,86 \cdot 10^{-20} \cdot 0,93 \cdot 10^{-23}}{(1,05 \cdot 10^{-27})^2} = 1,98 \cdot 10^{-16} \text{ см} . \quad (10.6)$$

Величина  $r_0$  виявляється суттєво меншою за комптонівську довжину хвилі електрона  $\lambda_e = 2,4 \cdot 10^{-10} \text{ см}$  , а це означає, що такий стан електрона спостерігатись не буде.

### **Задачі для самостійної роботи**

1. Світло дифрагує на щілині завширшки  $\Delta x$  . Довести, що невизначеність координати  $\Delta x$  та імпульсу  $\Delta p_x$  фотона дифрагованого світла задовольняють співвідношенню  $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$  .
2. Потік електронів з довжиною хвилі де Бройля  $\lambda = 11 \text{ нм}$  падає нормально на прямокутну щілину завширшки  $b = 0,1 \text{ нм}$  . Оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей кутову ширину пучка за щілиною (в кутових градусах).
3. Плоский потік частинок падає нормально на діафрагму з двома вузькими щілинами, утворюючи на екрані дифракційну картинку. Показати, що спроба визначити, через яку щілину пройшла та чи інша частинка (наприклад, за допомогою введення в щілину детектора), призводить до руйнації дифракційної картинки. Для спрощення вважати кути дифракції малими.
4. Оцінити швидкість електрона в атомі водню, враховуючи, що радіус першої борівської орбіти  $a_0 = 0,53 \text{ Å}$  . Порівняти її невизначеність з самою швидкістю електрона.
5. Оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей енергію зв'язку електрона в основному стані атома водню та відповідну відстань від електрона до ядра.
6. Оцінити мінімально можливу енергію електронів в атомі гелію та відповідну відстань від електронів до ядра.
7. Використовуючи співвідношення невизначеностей, оцінити мінімальне значення повної енергії та розмір області, в

якій рухається частинка, якщо її потенціальна енергія  $U(x) = Ax^4$ , де  $A = \text{const}$ .

8. Оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей мінімальну енергію ангармонічного осцилятора, потенціальна енергія якого  $U(x) = Ax^6$ , де  $A = \text{const}$ .
9. Електрон з кінетичною енергією  $E_K = 10 \text{ eB}$  локалізований в області з розміром  $l = 1 \text{ мкм}$ . Оцінити відносну невизначеність швидкості електрона. Оцінити розміри області локалізації електрона через час  $\Delta t = 1 \text{ с}$ . Як зміняться отримані результати, якщо замість електрона взяти протон?
10. Оцінити мінімальну кінетичну енергію електрона, що локалізований в області розміром  $l \times l$ , де  $l = 1 \text{ нм}$ .
11. Частинка з масою  $m$  локалізована в області з розміром  $l$ . Оцінити кінетичну енергію  $E_K$  частинки, при якій її відносна невизначеність буде приблизно 1%.
12. Нерелятивістська частинка, що вільно рухається, має відносну невизначеність кінетичної енергії  $1,6 \cdot 10^{-4}$ . Оцінити, у скільки разів невизначеність координати такої частинки більша за її дебройлівську довжину хвилі.
13. Оцінити невизначеність координати частинки з масою  $m = 1 \text{ г}$ , швидкість якої відома з точністю  $\Delta v = 10^{-4} \text{ см/с}$ . Рух частинки описується класичними чи квантовими законами?
14. Прискорююча напруга на електронно-променевій трубці дорівнює  $U = 10 \text{ кВ}$ . Відстань від електронної гармати до екрану  $l = 20 \text{ см}$ . Оцінити невизначеність координати електрона на екрані, якщо слід електронного пучка на екрані має діаметр  $d = 0,5 \text{ мм}$ .
15. Атом випустив фотон з довжиною хвилі  $\lambda = 0,58 \text{ мкм}$  за час  $\Delta t = 10^{-8} \text{ с}$ . Оцінити невизначеність  $\Delta x$ , з якою можна зафіксувати координату фотона в напрямку його руху, а також оцінити відносну невизначеність його довжини хвилі  $\Delta \lambda$ .
16. Час життя збудженого стану  $2p$  атома водню дорівнює



$\Delta t = 1,6 \cdot 10^{-9} \text{ с}$ . Обчислити величину невизначеності довжини хвилі світла, яке випромінюється під час переходу  $2p \rightarrow 1s$  електрона в атомі.

17. Частинка знаходиться в одновимірній потенціальній ямі завширшки  $l$  з нескінченно високими стінками. Оцінити силу тиску частинки на стінки ями при мінімально можливому значенні її енергії, яка дорівнює  $E_{\min}$ .
18. Вважаючи, що енергія зв'язку куперівської пари  $\Delta E$  в високотемпературному надпровіднику при температурі абсолютного нуля дорівнює  $\Delta E \sim 2kT_C$ , де  $T_C$  – температура, що відповідає переходу до надпровідного стану, оцінити розмір куперівської пари для кераміки  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  ( $T_C \approx 90 \text{ K}$ ) при температурі  $T = 0$ . Порівняти отримані результати з розміром куперівської пари для низькотемпературного надпровідника, наприкладі ніобію (див. задачу №9 в цьому розділі).

### **Література**

1. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1973. – 720 с.
2. Шмидт В.В. Введение в физику сверхпроводников. – М.: МЦНМО, 2000. – 402 с.
3. Пашицкий Э.А. Основы теории сверхпроводимости. – К.: Вища школа, 1985. – 103 с.

## Розділ 4. РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА. ХВИЛЬОВА ФУНКЦІЯ

### *Основні теоретичні відомості*

Стационарне рівняння Шредінгера для хвильової функції частинки  $\psi(\vec{r})$  має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(\vec{r})\psi = E\psi, \quad (1)$$

де  $m$  – маса частинки,  $U(\vec{r})$  – її потенціальна енергія,  $E$  – повна енергія,  $\vec{r}$  – радіус-вектор.

Згідно з основними положеннями квантової механіки, хвильова функція дає нам всю інформацію про стан частинки. За її допомогою визначають, якими величинами можна охарактеризувати стан частинки, обчислюють середні значення фізичних величин у цьому стані тощо.

Хвильова функція має бути неперервною, однозначною і скінченною. Розв'язок рівняння (1), що задовольняє цим умовам, існує, загалом кажучи, лише при певних значеннях енергії системи  $E$ . Ці значення називають квантованими значеннями енергії або квантованими рівнями енергії системи  $E_n$ , де  $n$  – номер рівня.

Як відомо,  $|\psi(\vec{r})|^2 dV$  є ймовірність того, що частинка перебуває в об'ємі  $dV$  біля точки з радіус-вектором  $\vec{r}$  і має стан, що описується хвильовою функцією  $\psi(\vec{r})$ .

На хвильову функцію, що відповідає дискретному спектру значень енергії  $E$ , накладається умова нормування<sup>1</sup>:

$$\int |\psi(\vec{r})|^2 dV = 1. \quad (2)$$

Більш загальним рівнянням є часове рівняння Шредінгера, яке враховує залежність хвильової функції частинки  $\psi(\vec{r}, t)$  від часу  $t$ :

---

<sup>1</sup> У випадку неперервного спектру значень енергії умова (2) загалом не виконується (див. §10 в [33]).

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t), \quad (3)$$

де  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t)$  – оператор Гамільтона (гамільтоніан).

На розв'язки цього рівняння також накладаються умови неперервності, однозначності і скінченності. Методи розв'язування рівняння (3) значно складніші, ніж рівняння (1). Якщо в рівнянні (3) можна відокремити часові та координатні змінні (методом, відомим з курсу математичної фізики), то отримаємо рівняння (1) для координатної частини хвильової функції  $\psi(\vec{r})$ . Таке відокремлення змінних, як правило, мож-

ливе, якщо гамільтоніан системи  $\hat{H}$  не залежить від часу. Тоді можна вважати, що частинка перебуває в стаціонарному стані з хвильовою функцією

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right), \quad (4)$$

де координатна частина хвильової функції  $\psi(\vec{r})$  є розв'язком рівняння (1).

Під час руху частинки в змінних у просторі потенціальних полях  $U(\vec{r}) \neq \text{const}$ , мають бути визначені величини, що зберігаються. Це можна зробити за допомогою перевірки комутаційних співвідношень. Якщо виконується співвідношення

$$\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H} = 0, \quad (5)$$

де  $\hat{L}$  – оператор деякої фізичної величини  $L$ , то ця фізична величина  $L$  зберігається в часі. Якщо ж співвідношення (5) не виконується – вона не зберігається.

Оператор фізичної величини  $\hat{L}$  визначає власні функції  $\psi(\vec{r}, t)$  і власні значення  $L$  із співвідношення

$$\hat{L}\psi(\vec{r}, t) = L\psi(\vec{r}, t), \quad (6)$$

так, наприклад, оператори імпульсу  $\hat{p}_x$  та кінетичної енергії  $\hat{E}_K$  під час руху частинки вздовж осі  $x$  записуються як

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{E}_K = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (7)$$

Середнє значення  $\bar{L}$  фізичної величини  $L$ , що характеризує частинку, яка знаходиться в стані з хвильовою функцією  $\psi(\vec{r}, t)$ , може бути знайдене за правилом

$$\bar{L} = \int \psi^*(\vec{r}, t) L \psi(\vec{r}, t) d\vec{r} = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{L} \psi(\vec{r}, t) d\vec{r}, \quad (8)$$

де зірочка означає комплексно-спряжену величину.

Вирази (1) – (6), (8) записані як функції радіус-вектора  $\vec{r}$ , в той же час, не є проблемою перехід до конкретної системи координат. Наприклад, для переходу до декартової системи координат

$$\vec{r} \rightarrow x, y, z, \quad d\vec{r} \rightarrow dx dy dz.$$

Так само можна перейти до інших систем ортогональних координат (сферичних, циліндричних тощо).

### **Методичні вказівки та поради**

Можна вказати на певну послідовність дій в розв'язуванні задач, пов'язаних з використанням рівняння Шредінґера, додержання якої дозволяє швидко і точно досягти результату. Цей порядок такий:

1. Проблема запису рівняння Шредінґера полягає у визначенні потенціального поля  $U(\vec{r})$ , в якому рухається частинка. Треба встановити конкретний вид функції  $U(\vec{r})$ .
2. Залежно від вигляду функції  $U(\vec{r})$ , вибираємо зручну систему координат і записуємо рівняння Шредінґера в цій системі координат. Наприклад, якщо  $U(\vec{r}) \equiv U(r)$ , то рівняння Шредінґера зручно розв'язувати в сферичній системі координат; якщо  $U$  залежить від координат  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $z$  рівняння зручно розв'язувати в циліндричній системі координат, тощо. Перехід у рівнянні Шредінґера від узагальнених криволінійних ортогональних координат до інших координат зводиться до представлення оператора Лапласа  $\Delta$  в цих нових координатах.

3. На розв'язок рівняння Шредінґера накладаємо умову скінченності, однозначності і неперервності. Якщо потенціальна енергія задана у вигляді частково-неперервної функції, то ці умови повинні виконуватись у кожній з областей неперервності потенціальної енергії та в точках її розриву.
4. Залежно від виду функції  $U(\vec{r})$  і значення повної енергії  $E$ , умови скінченності, однозначності і неперервності хвильової функції можуть виконуватись або при довільних значеннях енергії  $E$ , або лише при певних її значеннях, які можна представити у вигляді натурального ряду чисел:  $E_1, E_2, E_3, \dots$ . В останньому випадку ми дістаємо квантовані значення енергії або квантові рівні енергії частинки.
5. Найбільш поширеним методом розв'язування багатовимірного рівняння Шредінґера є відомий з математичної фізики метод відокремлення змінних. Його можна застосовувати, коли потенціальна енергія  $U(\vec{r})$  має специфічний вигляд: 1)  $U(\vec{r}) = \text{const}$ ; 2)  $U(\vec{r}) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$ ; 3)  $U(\vec{r}) = U(r)$ .
6. При знаходженні середніх значень фізичних величин, що характеризують частинку, яка знаходиться в стані з хвильовою функцією  $\psi(\vec{r}, t)$  складного виду, досить важко знайти явні математичні вирази для цих величин. У цьому випадку виявляється дуже зручним використати операторну форму співвідношення (8), оскільки оператор фізичної величини в (8) не залежить від стану, в якому знаходиться частинка.

### **Приклади розв'язування задач**

**Задача №1.** а) Одержати нестационарне рівняння Шредінґера  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$  на основі уявлень про квантові та хвильові властивості частинок. Порівняти одержане рівняння з класичним хвильовим рівнянням та вказати особливості цих рівнянь. б) Одержати нестационарне рівняння Шредінґера на основі уявлень про квантовомеханічні

**оператори.**

**Розв'язок: а)** Для вільної частинки з масою  $m$  повна енергія  $E$  дорівнює кінетичній енергії  $E_K$ :

$$E = E_K = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2), \quad (1.1)$$

де  $p$  – імпульс частинки; оскільки потенціальна енергія частинки  $U = 0$ .

Тепер використаємо квантові співвідношення

$$E = \hbar\omega, \quad p_x = \hbar k_x, \quad p_y = \hbar k_y, \quad p_z = \hbar k_z, \quad (1.2)$$

підставляючи їх у вираз (1.1) для  $E$ , одержимо:

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (1.3)$$

звідки відразу ж можна записати закон дисперсії

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (1.4)$$

Для того, щоб знайти величини  $\omega, k_x, k_y, k_z$ , візьмемо похідну від хвильової функції плоскої хвилі, яка характеризує вільну частинку

$$\psi(\vec{r}, t) = A \exp \left[ i (xk_x + yk_y + zk_z - \omega t) \right] \quad (1.5)$$

один раз по часу і двічі по координаті:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -i\omega \psi, \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= -k_x^2 \psi, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -k_y^2 \psi, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -k_z^2 \psi. \end{aligned} \quad (1.6)$$

З цих співвідношень визначимо  $\omega, k_x^2, k_y^2, k_z^2$  і підставимо їх у закон дисперсії (1.4):

$$-\frac{1}{i\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m\psi} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right), \quad (1.7)$$

звідки

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi. \quad (1.8)$$

Одержане рівняння – це загальне (часове) рівняння Шредінґера для вільної частинки.

Запишемо вираз для  $\psi(\vec{r}, t)$  у вигляді

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right), \quad (1.9)$$

де  $\psi_0(\vec{r}) = A \exp\left[i(xk_x + yk_y + zk_z)\right]$  і візьмемо похідну по часу  $t$  від цього виразу:

$$\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \psi(\vec{r}, t)$$

або

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E \psi(\vec{r}, t). \quad (1.10)$$

Підставимо останній вираз в часове рівняння Шредінґера (1.8) для вільної частинки ( $U = 0$ ). В результаті одержимо:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_0(\vec{r}) = -E \psi_0(\vec{r}), \quad (1.11)$$

де під  $E$  треба розуміти повну енергію (в нашому випадку  $E = E_K$ , оскільки  $U = 0$ ).

Узагальнимо (1.11) на випадок, коли частинка рухається в силовому полі з потенціальною енергією  $U$ . Тоді  $E_K = E$  в (1.11) (при  $U = 0$ ) треба замінити на  $E_K = E - U$ . Отже, одержимо стаціонарне рівняння Шредінґера

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0, \quad (1.12)$$

що описує рух частинки в потенціальному полі з енергією  $U$ .

Розглянемо тепер, як із стаціонарного рівняння Шредінґера одержати нестаціонарне. Підставимо (1.10) в стаціонарне рівняння Шредінґера (1.12). Одержимо рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (1.13)$$

яке є загальним часовим рівнянням Шредінґера. В цьому рівнянні відсутня в явному вигляді повна енергія  $E$ , і це означає, що воно є справедливим лише для нерелятивістських

частинок з малою кінетичною енергією  $E_K \ll m_0 c^2$ , де  $m_0$  – маса спокою частинки.

Порівняємо тепер класичне хвильове рівняння

$$\Delta\varphi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \quad (1.14)$$

і нестационарне рівняння Шредінґера (1.13). Відомо, що класичне хвильове рівняння має дійсний розв'язок  $\varphi(\vec{r}, t) = A \cos(\omega t - \vec{k}\vec{r})$ , який в той же час не є розв'язком нестационарного рівняння Шредінґера (1.13). Це обумовлено різними законами дисперсії для хвилі де Бройля (1.4) і для класичного випадку

$$\omega = ck \text{ або } \omega^2 = c^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (1.15)$$

Рівняння Шредінґера не є хвильовим рівнянням, оскільки не містить другу похідну по часу, а містить першу похідну по часу; воно більш схоже на рівняння дифузії. Але саме така форма рівняння Шредінґера вказує на те, що хвильову функцію можна отримати як функцію, квадрат модуля якої характеризує ймовірність знайти частинку в певній області простору. Це, мабуть, було причиною виникнення термінів “хвильове рівняння”, “хвильова механіка”.

**б)** При розв'язуванні цієї задачі природно вважати, що хвильова функція  $\psi$  і її похідна  $\frac{\partial \psi}{\partial t}$  є розв'язком деякого рівняння

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{F} \psi, \quad (1.16)$$

де  $\hat{F}$  – поки що невідомий лінійний самоспряжений (ермітовий) оператор<sup>2</sup> (ці властивості оператора  $\hat{F}$  безпосередньо витікають з умов, що накладаються на хвильову функцію  $\psi$  [33]).

Оскільки будь-яка хвильова функція може бути представ-

---

<sup>2</sup> Тобто для оператора  $\hat{F}$  виконується співвідношення  $\int_{\Omega} u^* \hat{F} v d\Omega = \int_{\Omega} v^* \hat{F} u d\Omega$ , де  $u, v$  – розв'язки (1.16) в області  $\Omega$ .



лена у вигляді суми плоских монохроматичних хвиль де Бройля (або інтегралу по цим хвилям), то така плоска монохроматична хвиля де Бройля

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = A \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (\vec{p}\vec{r} - Et) \right] \quad (1.17)$$

повинна задовольняти вищенаведеному рівнянню (1.16). Підставляючи вираз для  $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$  в рівняння (1.16), одержимо

$$\frac{\partial \psi_{\vec{p}}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi_{\vec{p}}, \quad (1.18)$$

де повна енергія  $E$  складається з кінетичної енергії  $E_K$  та потенціальної енергії  $U$ . Крім того, вираз для  $\frac{\partial \psi_{\vec{p}}}{\partial t}$  повинен бути еквівалентним виразу  $\hat{F} \psi_{\vec{p}}$ . Ця умова буде виконуватись, якщо величина  $E$  є еквівалентом оператора Гамільтона, тобто  $\hat{F} \equiv \hat{H}$  (це є узагальненням випадку вільного руху частинки)

$$\hat{H} = \hat{E}_K + U, \quad (1.19)$$

де  $\hat{E}_K = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$  – оператор кінетичної енергії. Враховуючи

вираз (1.18) та те, що  $E \equiv \hat{H}$ , остаточно одержуємо нестационарне рівняння Шредінґера для плоскої монохроматичної хвилі де Бройля з хвильовою функцією  $\psi_{\vec{p}}$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{\vec{p}}}{\partial t} = \hat{H} \psi_{\vec{p}}, \quad (1.20)$$

або, розписуючи вираз для  $\hat{H}$ ,

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{\vec{p}}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_{\vec{p}} + U \psi_{\vec{p}}. \quad (1.21)$$

Оскільки  $\psi_{\vec{p}}$  є розв'язком цього рівняння, то його розв'язком також буде й довільна лінійна комбінація хвильових функції  $\psi_{\vec{p}}$  плоских монохроматичних хвиль де Бройля. А це й означає, що розв'язком одержаного рівняння (1.21) буде

будь-яка хвильова функція  $\psi$  (яку можна представити за допомогою суми або інтегралу по  $\psi_{\vec{p}}$ ), що й треба було показати.

**Задача №2. Знайти хвильову функцію атома водню, що знаходиться в основному стані.**

**Розв'язок:** Основний стан атома водню є стаціонарним станом, який характеризується хвильовою функцією

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right), \quad (2.1)$$

координатна частина якої  $\psi(\vec{r})$  є розв'язком стаціонарного рівняння Шредінґера (1). Знайдемо явний вигляд  $\psi(\vec{r})$ . Для цього запишемо стаціонарне рівняння Шредінґера (1) в сферичній системі координат  $(r, \theta, \varphi)$ , враховуючи, що оператор Лапласа в цій системі координат

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \quad (2.2)$$

Будемо мати з (1) та (2.2):

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi(r, \theta, \varphi) + \\ + U(r) \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi), \end{aligned} \quad (2.3)$$

де  $E$  – повна енергія електрона в атомі водню,  $U$  – потенціальна енергія його взаємодії з кулонівським полем ядра атома водню, що залежить лише від відстані  $r$ .

Скористаємося методом розділення змінних, для чого представимо  $\psi(r, \theta, \varphi)$  у вигляді:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = AR(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi), \quad (2.4)$$

де  $A$  – поки що невідомий коефіцієнт нормування.

Підставимо (2.4) в рівняння Шредінґера і поділимо отримане рівняння на добуток  $AR\Theta\Phi$ , вважаючи, що він не дорівнює нулю. Отримаємо:

$$\frac{1}{R} \left( \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \Phi \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + K^2 = 0, \quad (2.5)$$

де  $K^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)$ . Методами математичної фізики можна показати, що це рівняння еквівалентне системі з трьох рівнянь

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi &= 0, \\ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta + l(l+1) \Theta &= 0, \quad (2.6) \\ \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left( K^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R &= 0, \end{aligned}$$

де  $m$  та  $l$  – константи розділення змінних. З точки зору фізики,  $l$  – це орбітальне квантове число, а  $m$  – магнітне квантове число, що залежить від  $l$ .

Розв'язками цих рівнянь є

$$\begin{aligned} \Phi(\varphi) &= \exp(\pm im\varphi), \\ \Theta(\theta) &= P_l^m(\cos \theta), Q_l^m(\cos \theta), \\ R(r) &= \frac{J_{l+1/2}(Kr)}{\sqrt{r}}, \frac{Y_{l+1/2}(Kr)}{\sqrt{r}}, \quad (2.7) \end{aligned}$$

де  $P_l^m(\cos \theta), Q_l^m(\cos \theta)$  – приєднані функції Лежандра 1-го та 2-го роду,  $J_{l+1/2}(Kr), Y_{l+1/2}(Kr)$  – функції Бесселя 1-го та 2-го роду.

Для основного стану атома водню  $l = m = 0$ , а повна енергія  $E < 0$ , оскільки електрон знаходиться в зв'язаному стані. В цьому випадку рівняння для  $R(r)$  значно спрощується і, шляхом підстановки  $\chi(r) = rR(r)$ , зводиться до рівняння

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\chi}{dr} + K^2\chi = 0, \quad (2.8)$$

з розв'язку якого, при врахуванні фізичних умов, що накладаються на  $R(r)$  і які є наслідком умов, що накладаються на хвильову функцію  $\psi(r)$ , випливає, що

$$R(r) = \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \text{ при } r \geq r_1, \quad (2.9)$$

де  $r_1 = \sqrt{-\frac{\hbar^2}{2mE}}$  при  $E < 0$  [3].

Отже, хвильова функція атома водню, що знаходиться в основному стані, має вигляд

$$\psi(r) = A \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right). \quad (2.10)$$

З умови нормування хвильової функції (2) знайдемо, що

$$\int_V |\psi|^2 dV = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^\infty |\psi|^2 r^2 dr = 1, \quad (2.11)$$

звідки, врахувавши вигляд хвильової функції при  $r < r_1$  (див. [3], [35]),

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}, \quad (2.12)$$

де  $a_0$  – радіус першої борівської орбіти. Отже, остаточно отримаємо:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right). \quad (2.13)$$

**Задача №3. Знайти густину та радіальний розподіл заряду електрона в атомі водню, що перебуває в основному**

**стані з хвильовою функцією  $\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$ , де  $a_0$**

**– радіус першої борівської орбіти. Показати, що класич-**

ний підхід до визначення густини заряду електрона в атомі водню призводить до суттєвої похибки результату. Довести, що максимум радіальної функції розподілу відповідає значенню  $r = a_0$ .

**Розв'язок:** З класичної електродинаміки відомо, що густина електричного заряду  $\rho$  – це кількість заряду в одиниці об'єму, тобто

$$\rho = \frac{q}{V}, \quad (3.1)$$

де  $q$  – заряд, що знаходить в області простору з об'ємом  $V$ . Ця проста формула, однак, зовсім не підходить для визначення густини заряду електрона в атомі водню, оскільки електрон в атомі не підкоряється законам класичної електродинаміки. Так, в класичній формулі (3.1) для густини заряду  $\rho$  вважається, що заряд цілком зосереджений в об'ємі  $V$ , в той час, як з квантової механіки відомо, що електрон з певною ймовірністю (хоча б і дуже малою) може знаходитись в будь-якій точці простору. Як впливає зі співвідношення невизначеностей Гейзенберга, імпульс та координати електрона визначені з певною обмеженою точністю, а значить принаймні з такою ж точністю визначені межі ефективного об'єму  $V_{eff}$ , де ймовірність знаходження електрона достатньо висока. Саме ці дві обставини, які пов'язані з квантовими властивостями електрона, не дають можливості розрахувати густину електричного заряду в атомі водню класичними методами.

Знайдемо густину заряду за класичною формулою, щоб в подальшому показати, що такий підхід до розв'язування задачі призводить до суттєвої похибки. Будемо вважати, що електрон в атомі водню, що знаходиться в основному стані, рухається всередині сфери радіуса  $r = a_0$ , де  $a_0$  – радіус першої борівської орбіти. Тоді з (3.1) густина заряду електрона в класичному наближенні

$$\rho_{кл} = -\frac{e}{\frac{4}{3}\pi a_0^3}. \quad (3.2)$$

Щоб знайти густину заряду електрона в атомі водню за до-

помогою квантової механіки, розглянемо умову нормування хвильової функції (2). З (2) випливає, що ймовірність знаходження частинки в нескінченно малому об'ємі  $dV$  навколо точки з радіус-вектором  $\vec{r} \in |\psi(\vec{r})|^2 dV$  (ми розглядаємо стаціонарний стан, коли  $\psi \neq \psi(t)$ ), тобто  $|\psi(\vec{r})|^2$  має розмірність  $\text{см}^{-3}$  і еквівалентна деякому оберненому ефективному об'єму  $V_{\text{eff}}^{-1}$ , всередині якого знаходиться точка з радіус-вектором  $\vec{r}$ . Якщо об'єм  $dV$  дуже малий, настільки, що можна вважати, що заряд в цьому об'ємі розподілений рівномірно, то можна скористатись класичною формулою (вище згадані обмеження, що накладаються на цю формулу, при цьому несуттєві):

$$\rho(\vec{r}) = -\frac{e}{V_{\text{eff}}} = -e|\psi(\vec{r})|^2. \quad (3.3)$$

Підставимо у цю формулу хвильову функцію  $\psi(r)$ , що характеризує атом водню, що знаходиться в основному стані

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \quad (3.4)$$

і отримаємо, що

$$\rho(r) = -\frac{e}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right). \quad (3.5)$$

Електричний заряд  $dq$ , що існує в об'ємі  $dV = 4\pi r^2 dr$  становить

$$dq = \rho dV = 4\pi r^2 \rho dr = -\frac{4e}{a_0^3} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) dr, \quad (3.6)$$

звідки радіальний розподіл заряду

$$f(r) = \frac{dq}{dr} = -\frac{4e}{a_0^3} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right). \quad (3.7)$$

Щоб знайти значення  $r$ , якому відповідає максимум функції  $f(r)$ , дослідимо її на екстремум:

$$\frac{df}{dr} = -\frac{8e}{a_0^3} r \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) = 0. \quad (3.8)$$

Єдиним фізичним розв'язком цього рівняння є  $r = a_0$ , отже при  $r = a_0$  спостерігається максимум радіальної функції розподілу.

Підставимо  $r = a_0$  в (3.5):

$$\rho(a_0) = -\frac{e}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2a_0}{a_0}\right) = -\frac{e}{\pi a_0^3} \exp(-2). \quad (3.9)$$

Похибку  $\eta$  класичної формули для густини заряду оцінимо співвідношенням

$$\eta \sim \frac{\rho_{KL}}{\rho(a_0)} = \frac{-\frac{e}{4\pi a_0^3}}{-\frac{e}{\pi a_0^3} \exp(-2)} = \frac{3}{4} \exp(2) \approx 5,5. \quad (3.10)$$

**Задача №4. Хвильова функція частинки, що знаходиться в області  $0 \leq x \leq l$ , має вигляд  $\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)$ , де  $l = \text{const}$ ,  $n \in \mathbb{Z}$ . Визначити коефіцієнт нормування  $A_n$  та знайти ймовірність знаходження частинки в області  $\frac{l}{3} \leq x \leq \frac{2l}{3}$ , якщо вона перебуває на другому збудженому рівні.**

**Розв'язок:** Знайдемо спочатку коефіцієнт нормування  $A_n$  з умови нормування (2):

$$\int_0^l |\psi_n(x)|^2 dx = A_n^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{n\pi}{l}x\right) dx = 1, \quad (4.1)$$

звідки випливає, що

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{l}}. \quad (4.2)$$

За умовою задачі, частинка перебуває в другому збудженому стані. Оскільки  $n=1$  відповідає основному стану частинки, то другому збудженому стану буде відповідати  $n=3$  і, отже, хвильова функція частинки в цьому стані буде

$$\psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{3\pi}{l}x\right). \quad (4.3)$$

Ймовірність  $P$  знаходження частинки в області  $\frac{l}{3} \leq x \leq \frac{2l}{3}$

запишемо за аналогією з (4.1) як

$$P = \int_{l/3}^{2l/3} |\psi_3(x)|^2 dx. \quad (4.4)$$

Підставляючи явний вираз для  $\psi_3(x)$ , одержимо, що

$$\begin{aligned} P &= \frac{2}{l} \int_{l/3}^{2l/3} \sin^2\left(\frac{3\pi}{l}x\right) dx = \frac{1}{l} \int_{l/3}^{2l/3} dx - \frac{1}{l} \int_{l/3}^{2l/3} \cos\left(\frac{6\pi}{l}x\right) dx = \\ &= \frac{1}{3} - \frac{1}{6\pi} (\sin 4\pi - \sin 2\pi) = \frac{1}{3}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

**Задача №5.** Довести, що з часового рівняння Шредінґера випливає рівняння неперервності  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{J} = 0$ , де

$\rho = |\psi|^2$  – густина ймовірності,  $\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$  – густина потоку ймовірності.

**Розв'язок:** Запишемо нестационарне рівняння Шредінґера для хвильової функції  $\psi$  та комплексно-спряжене до нього рівняння:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U\psi, \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + U\psi^*. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Помножимо перше рівняння (5.1) на функцію  $\psi^*$ , а друге рівняння (5.1) – на функцію  $\psi$ . Одержимо:



$$\begin{aligned}
i\hbar\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^* \Delta\psi + U\psi^*\psi, \\
-i\hbar\psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\psi \Delta\psi^* + U\psi\psi^*.
\end{aligned}
\tag{5.2}$$

Відніmemo тепер друге рівняння (5.2) від першого:

$$i\hbar\left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^* \Delta\psi + \psi \Delta\psi^*). \tag{5.3}$$

Ліва частина цього рівняння являє собою вираз  $\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 \equiv \frac{\partial\rho}{\partial t}$ .

Праву частину представимо у вигляді  $\operatorname{div}(a\vec{b})$ , де  $a = \psi$ ,  $\vec{b} = \nabla\psi^*$ . Тоді, враховуючи відому формулу

$$\operatorname{div}(a\vec{b}) = a \operatorname{div} \vec{b} + \vec{b} \nabla a, \tag{5.4}$$

одержимо

$$\psi^* \Delta\psi + \psi \Delta\psi^* = \operatorname{div}(\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*). \tag{5.5}$$

Якщо тепер увести позначення

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi \nabla\psi^* - \psi^* \nabla\psi), \tag{5.6}$$

то одержимо рівняння неперервності

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{J} = 0. \tag{5.7}$$

**Задача №6. Довести, що хвильова функція**

$\psi(x) = A x \exp\left(-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar} x^2\right)$  **є розв'язком рівняння Шредінґера**

**ра для гармонічного осцилятора з масою  $m$  та коефіцієнтом пружної сили  $k$ . Визначити власну енергію такого осцилятора.**

**Розв'язок:** Стаціонарне рівняння Шредінґера для гармонічного осцилятора з масою  $m$  та коефіцієнтом пружної сили  $k$  має вигляд

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \psi = 0, \quad (6.1)$$

де  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$  – кругова частота власних коливань осцилятора.

Знайдемо другу похідну від  $\psi(x)$ :

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= A \exp\left(-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar} x^2\right) - A \frac{\sqrt{km}}{\hbar} x^2 \exp\left(-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar} x^2\right), \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= -3A \frac{\sqrt{km}}{\hbar} x \exp\left(-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar} x^2\right) + \\ &+ A \frac{km}{\hbar^2} x^3 \exp\left(-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar} x^2\right). \end{aligned} \quad (6.2)$$

Підставимо тепер у рівняння Шредінґера вирази для  $\psi$  та  $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ . Одержимо:

$$\begin{aligned} A \frac{km}{\hbar^2} x^3 \exp\left(-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar} x^2\right) - 3A \frac{\sqrt{km}}{\hbar} x \exp\left(-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar} x^2\right) + \\ + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) A x \exp\left(-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar} x^2\right) = 0. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Оскільки  $\psi(x) \neq 0$ , останнє рівняння можна привести до вигляду

$$\frac{km}{\hbar^2} x^2 - 3 \frac{\sqrt{km}}{\hbar} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) = 0. \quad (6.4)$$

Рівняння (6.4) повинно мати фізичний розв'язок при будь-якому значенні  $x$ , у тому числі й при  $x = 0$ . Для цього випадку ( $x = 0$ ) одержимо, що

$$3 \frac{\sqrt{km}}{\hbar} = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad (6.5)$$

звідки, враховуючи вираз для  $\omega_0$ , випливає, що

$$E = \frac{3}{2} \hbar \omega_0 = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0, \quad (6.6)$$

тобто хвильова функція  $\psi(x) = A x \exp\left(-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar} x^2\right)$  описує гармонічний осцилятор у першому збудженому стані з  $n = 1$ .

**Задача №7. Які з механічних величин зберігаються під час руху частинки в полі  $U(x, t) = xu(t)$  ?**

**Розв'язок:** Гамільтоніан частинки

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + u(t)x \quad (7.1)$$

залежить від часу, в зв'язку з чим повна енергія частинки  $E$  не зберігається.

Оператори проекцій імпульсу  $\hat{p}_{x,y,z}$  та моменту імпульсу  $\hat{L}_{x,y,z}$  мають вигляд [33]

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, \quad (7.2)$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{L}_y = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (7.3)$$

Зберігатися будуть ті механічні величини  $L$ , оператори яких  $\hat{L}$  комутують з  $\hat{H}$ , тобто

$$\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H} = 0. \quad (7.4)$$

Перевіримо за допомогою цього співвідношення чи будуть зберігатися імпульси  $p_{x,y,z}$  під час руху частинки в полі  $U(x, t)$ :

$$\hat{H}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{H} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + u(t)x \right) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) -$$

$$\begin{aligned}
& -\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+u(t)x\right)= \\
& =i\frac{\hbar^3}{2m}\Delta\frac{\partial}{\partial x}-i\hbar u(t)x\frac{\partial}{\partial x}-i\frac{\hbar^3}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\Delta+i\hbar u(t)\neq 0. \quad (7.5)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}\hat{p}_y-\hat{p}_y\hat{H} & =\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+u(t)x\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)- \\
& \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+u(t)x\right)= \\
& =i\frac{\hbar^3}{2m}\Delta\frac{\partial}{\partial y}-i\hbar u(t)x\frac{\partial}{\partial y}-i\frac{\hbar^3}{2m}\frac{\partial}{\partial y}\Delta+i\hbar u(t)x\frac{\partial}{\partial y}=0. \quad (7.6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}\hat{p}_z-\hat{p}_z\hat{H} & =\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+u(t)x\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)- \\
& \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+u(t)x\right)= \\
& =i\frac{\hbar^3}{2m}\Delta\frac{\partial}{\partial z}-i\hbar u(t)x\frac{\partial}{\partial z}-i\frac{\hbar^3}{2m}\frac{\partial}{\partial z}\Delta+i\hbar u(t)x\frac{\partial}{\partial z}=0. \quad (7.7)
\end{aligned}$$

Таким чином, зберігаються величини  $p_y$  та  $p_z$ , а компонента імпульсу  $p_x$  не зберігається.

Перевіримо тепер, чи комутують з  $\hat{H}$  оператори моменту імпульсу  $\hat{L}_{x,y,z}$ :

$$\begin{aligned}
\hat{H}\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{H} & =\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+u(t)x\right)\left[-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right]- \\
& -\left[-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right]\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+u(t)x\right)=0. \quad (7.8)
\end{aligned}$$

Оскільки оператор  $\hat{L}_x$  не містить похідної  $\frac{\partial}{\partial x}$ , то для нього

$\hat{L}_x U-U\hat{L}_x=0$ . Оператори  $\hat{L}_y$ ,  $\hat{L}_z$ , відповідно до цього прави-

ла не будуть комутувати з  $\hat{H}$ , а тому відповідні проекції моменту імпульсу  $L_y$ ,  $L_z$  зберігатися не будуть.

Оскільки під час руху частинки компоненти моменту імпульсу  $L_y$ ,  $L_z$  не зберігаються, то не буде також зберігатися величина  $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ .

Отже, під час руху частинки в полі  $U(x, t) = xu(t)$  зберігаються величини  $p_y$ ,  $p_z$ ,  $L_x$ . Решта механічних величин ( $p_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$ ,  $L^2$ ,  $E$ ) не зберігаються.

**Задача №8. Знайти середню відстань від електрона до ядра атома водню, що знаходиться в стаціонарному стані з хвильовою функцією  $\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$ , де  $a_0$  – радіус першої борівської орбіти.**

**Розв'язок:** Відповідно до (8), середня відстань від електрона до ядра атома водню  $\bar{r}$  визначається виразом

$$\begin{aligned} \bar{r} &= \int_V \psi^*(r) r \psi(r) dV = \int_0^{4\pi} d\Omega \int_0^\infty r^2 \psi^*(r) r \psi(r) dr = \\ &= 4\pi \int_0^\infty \psi^*(r) r^3 \psi(r) dr. \end{aligned} \quad (8.1)$$

Після підстановки в цей вираз  $\psi(r)$ , одержимо:

$$\begin{aligned} \bar{r} &= \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \int_0^\infty r^3 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) dr = 4 \int_0^\infty \left(\frac{r}{a_0}\right)^3 \exp\left(-2\frac{r}{a_0}\right) dr = \\ &= 4a_0 \int_0^\infty x^3 \exp(-2x) dx = 4a_0 \frac{3!}{2^4} = \frac{3}{2} a_0. \end{aligned} \quad (8.2)$$

### **Задачі для самостійної роботи**

1. Які розв'язки часового рівняння Шредингера є стаціонар-

ними? Показати, що такі розв'язки можна отримати лише в тому випадку, коли потенціальна енергія  $U$  явно не залежить від часу  $t$ .

2. Як зміниться повна хвильова функція  $\psi(x, t)$ , що описує стаціонарні стани, якщо змінити початок відліку потенціальної енергії на деяку величину  $\Delta U$ ?
3. У момент часу  $t = 0$  хвильова функція вільної частинки має вигляд  $\psi(x, t = 0) = A \cos \frac{p}{\hbar} x$ , де  $p$  – імпульс частинки. Знайти хвильову функцію в момент часу  $t = \tau$ .
4. Знайти розв'язок часового рівняння Шредінґера для вільної частинки, що рухається в позитивному напрямку осі  $x$  з імпульсом  $p_x$ .
5. Показати, що енергетичний спектр вільної частинки, що рухається – неперервний.
6. Хвильова функція частинки має вигляд  $\psi(r) = \frac{A}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right)$ , де  $r$  – відстань цієї частинки до силового центра,  $r_0 = \text{const}$ . Визначити коефіцієнт нормування  $A$ .
7. За допомогою рівняння Шредінґера вивести умову збереження в часі нормування хвильової функції  $\frac{d}{dt} \int \psi^* \psi dV = 0$ .
8. Визначити коефіцієнт нормування  $A$  для хвильової функції частинки  $\psi(r) = A \exp\left(-\frac{r^2}{2a^2}\right)$ , де  $a = \text{const}$ , та найбільш імовірне значення координати  $r$  частинки.
9. Довести, що в основному стані атома водню з хвильовою функцією  $\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$  ( $a_0$  – радіус першої борівської орбіти) електричні струми відсутні.
10. Довести, що в стаціонарних станах густина електричного заряду та струму від часу не залежать.

11. Потенціальна енергія частинки, що рухається, має вигляд  $U(x) = ax$ , де  $a$  – деяка стала. Які з механічних величин, що характеризують рух частинки, зберігаються?
12. Які з механічних величин зберігаються, якщо частинка перебуває у центральносиметричному полі  $U = U(r)$ ?
13. Визначити середнє значення квадрата відстані  $\overline{r^2}$  електрона до ядра атома водню, що знаходиться в основному стані з хвильовою функцією  $\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$ , де  $a_0$  – радіус першої борівської орбіти.
14. Визначити середнє значення кінетичної енергії  $\overline{E_K}$  та компоненти імпульсу  $\overline{p_x}$  електрона в атомі водню, що знаходиться в основному стані з хвильовою функцією  $\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$ , де  $a_0$  – радіус першої борівської орбіти.
15. Визначити середнє значення кінетичної енергії  $\overline{E_K}$  частинки, що знаходиться в області  $0 \leq x \leq l$  і має хвильову функцію  $\psi_n(x) = A_n \exp\left(-\alpha_n \left|x - \frac{l}{2}\right|\right) \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)$ , де  $\alpha_n, l = \text{const}$ ,  $n \in \mathbb{Z}$ .

## Розділ 5. РІВНЯННЯ ШРЕДІНґЕРА. ПОТЕНЦІАЛЬНІ ЯМИ, ПОТЕНЦІАЛЬНІ БАР'ЄРИ

### *Основні теоретичні відомості*

Під час розгляду одновимірного руху частинки в потенціальному полі  $U(x)$ , вважається, що цей рух описується стаціонарним рівнянням Шредінґера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(x) \psi = E \psi, \quad (1)$$

де  $\psi \equiv \psi(x)$  – хвильова функція,  $m$  – маса частинки, що рухається,  $E$  – повна енергія частинки, а координата  $x$  має зміст координати в ортогональній системі координат  $(x, y, z)$ .

Згідно з основними положеннями квантової механіки, хвильова функція містить у собі всю інформацію про квантовий стан частинки. За її допомогою визначають, якими величинами можна характеризувати стан частинки, обчислюють середні значення фізичних величин у цьому стані тощо.

Хвильова функція має бути неперервною, однозначною і скінченною. Розв'язок рівняння (1), що задовольняє цим умовам, існує, загалом кажучи, лише при певних значеннях повної енергії зв'язаної системи  $E$ . Ці дискретні значення називають квантованими значеннями енергії або квантованими рівнями енергії системи  $E_n$ , де  $n$  – номер рівня.

$|\psi(x, y, z)|^2 dV$  є ймовірність того, що частинка перебуває в об'ємі  $dV = h_x h_y h_z dx dy dz$  ( $h_{x,y,z}$  – коефіцієнти Ламе обраної системи координат<sup>1</sup>) біля точки з координатами  $x, y, z$  і має

---

<sup>1</sup> Коефіцієнтами Ламе (метричними коефіцієнтами) називаються величини  $h_\xi = \frac{ds_\xi}{d\xi}$ ,  $h_\eta = \frac{ds_\eta}{d\eta}$ ,  $h_\zeta = \frac{ds_\zeta}{d\zeta}$  в криволінійних ортогональних координатах  $(\xi, \eta, \zeta)$ , де  $ds_{\xi, \eta, \zeta}$  – елементи довжини вздовж координат  $\xi, \eta, \zeta$ . Для прямокутної системи ко-



стан, що описується хвильовою функцією  $\psi(x, y, z)$ . При одновимірному русі частинки ці вирази значно спрощуються. Так, імовірність  $dP$  того, що частинка буде перебувати в малому інтервалі  $dx$  поблизу точки  $x = x_0$ , а її стан буде описуватись хвильовою функцією  $\psi(x)$ , може бути записана у вигляді:

$$dP(x_0) = |\psi(x_0)|^2 h_x dx. \quad (2)$$

На хвильову функцію, що відповідає дискретному спектру значень повної енергії  $E_n$ , накладається умова нормування:

$$\int |\psi(x, y, z)|^2 h_x h_y h_z dx dy dz = 1, \quad (3)$$

яка в одновимірному випадку набуває вигляду

$$\int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 h_x dx = 1, \quad (4)$$

де  $x_1$  та  $x_2$  – координати, що відповідають границям області, де рухається частинка.

До найважливіших задач, що пов'язані з одновимірним рухом, належать задачі про рух частинки в потенціальній ямі та задачі про проходження частинки крізь потенціальний бар'єр (задачі на тунельний ефект). При розв'язуванні таких задач необхідно врахувати наступні особливості розв'язків рівняння (1):

1. Рівні енергії частинки можуть бути виродженими, якщо різним хвильовим функціям, що описують стан частинки, відповідає одне значення енергії;
2. Якщо потенціальна енергія частинки стрибкоподібно змінюється при  $x = x_0$ , то на цій границі хвильова функція та її похідна повинні задовольняти умовам (доведення цього див. у [33, 35]):

$$\psi(x_0 - 0) = \psi(x_0 + 0),$$

---

ординат (СК)  $h_x = h_y = h_z = 1$ . Для циліндричної СК  $h_r = h_z = 1$ ,  $h_\varphi = r$ . Для сферичної СК  $h_r = 1$ ,  $h_\theta = r$ ,  $h_\varphi = r \sin \theta$  [1\*].

$$\frac{d\psi(x_0 - 0)}{dx} = \frac{d\psi(x_0 + 0)}{dx}; \quad (5)$$

3. Якщо в точці  $x = x_0$  потенціальна енергія має дельтоподібний вигляд  $U(x) = a\delta(x - x_0)$ , де  $a = \text{const}$ , то умови “зшивання” хвильової функції записуються як

$$\psi(x_0 - 0) = \psi(x_0 + 0),$$

$$\frac{d\psi(x_0 + 0)}{dx} - \frac{d\psi(x_0 - 0)}{dx} = \frac{2ma}{\hbar^2} \psi(x_0). \quad (6)$$

При розгляді задач на потенціальні бар'єри широко користуються поняттям густини струму (або потоку) імовірності в стані з хвильовою функцією  $\psi$  (виведення цієї формули див. в задачі №5 четвертого розділу):

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (7)$$

За допомогою (7) коефіцієнти прозорості бар'єра  $D$  та коефіцієнта відбиття  $R$  записуються як

$$D = \frac{|J_d|}{|J_0|}, \quad R = 1 - D = \frac{|J_r|}{|J_0|}, \quad (8)$$

де  $J_0$  – початковий потік частинок,  $J_r$  – потік відбитих частинок,  $J_d$  – потік частинок, що пройшли крізь бар'єр.

Під час руху частинки крізь потенціальний бар'єр складної форми  $U(x)$  іноді виявляється незручним знаходження точного розв'язку задачі (визначення хвильової функції  $\psi$ ) з рівняння (1) та використання формули (8). В цьому випадку зручно скористатись наближеним виразом для коефіцієнту прозорості  $D$  потенціального бар'єра:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\}, \quad (9)$$

де  $D_0$  – амплітудне значення прозорості бар'єра,  $m$  – маса частинки, що тунелює крізь бар'єр,  $x_1$  – координати точки входження частинки в бар'єр,  $x_2$  – координата точки виходу

частинки з бар'єру. Координати  $x_1, x_2$  (координати точок повороту) знаходяться з умови  $E = U(x_{1,2})$ , де  $E$  – енергія частинки.

Для прямокутних бар'єрів висотою  $U_0$  та шириною  $l$  коефіцієнт прозорості

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right\}. \quad (10)$$

Глибину проникнення частинки в бар'єр  $\xi$  для цього випадку знаходимо з умови  $\frac{2\xi}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} = 1$ , звідки

$$\xi = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}. \quad (11)$$

### **Методичні вказівки та поради**

При розв'язуванні задач на тему “Рівняння Шредінґера. Потенціальні ями, потенціальні бар'єри” доцільно притримуватись певної послідовності дій, що дозволяє легко отримати вірний розв'язок задачі з мінімальними затратами часу. Ця послідовність складається з наступних кроків:

1. У першу чергу необхідно визначити, якої розмірності є задача: одновимірною, двовимірною чи трьохвимірною. Залежно від цього оператор Лапласа в рівнянні Шредінґера (1) буде містити один, два або три доданки, кожен з яких містить похідну другого порядку по відповідній змінній.
2. Далі необхідно записати стаціонарне рівняння Шредінґера (1) відповідно до умов задачі, що зводиться, по суті, до визначення, в якому потенціальному полі  $U(\vec{r})$  рухається частинка ( $\vec{r}$  – радіус-вектор). Треба визначити конкретний вигляд функції  $U(\vec{r})$ .
3. Залежно від вигляду функції  $U(\vec{r})$ , вибираємо зручну систему координат і записуємо рівняння Шредінґера в цій системі координат. Наприклад, якщо  $U(\vec{r}) \equiv U(r)$ , то рів-

няння Шредінґера зручно розв'язувати в сферичній системі координат; якщо  $U$  залежить від координат  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $z$  рівняння зручно записувати в циліндричній системі координат тощо. Перехід у рівнянні Шредінґера від узагальнених криволінійних ортогональних координат до інших координат зводиться до представлення оператора Лапласа  $\Delta$  в цих нових координатах.

4. Якщо частинка рухається на площині або вздовж усіх трьох координат  $x, y, z$ , необхідно спробувати розділити змінні в стаціонарному рівнянні Шредінґера. Це можна зробити, якщо потенціальна енергія  $U(\vec{r})$  має вигляд: 1)  $U(\vec{r}) = \text{const}$ ; 2)  $U(\vec{r}) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$ ; 3)  $U(\vec{r}) = U(r)$ . Для цього застосовують наступний математичний прийом. Хвильову функцію  $\psi(x, y, z)$  представляють у вигляді добутку трьох функцій, кожна з яких залежить лише від своєї координати  $x, y, z$ :  $\psi(x, y, z) = A\psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$ . Цей добуток підставляють у рівняння (1) і, вважаючи, що  $\psi(x, y, z) \neq 0$ , отримують три більш простих одновимірних рівняння. Таким чином, задача про складний рух частинки зводиться до розгляду її одновимірних рухів вздовж кожної з осей обраної системи координат.
5. Розв'язуємо отримані рівняння (одне для одновимірного руху, два для двовимірного руху, тощо). На знайдений розв'язок рівняння Шредінґера накладаємо умову скінченності, однозначності і неперервності. Залежно від вигляду функції  $U(\vec{r})$ , користуємося граничними умовами (5) або (6). Щоб знайти довільний множник  $A$  у виразі для  $\psi(x, y, z)$ , використовуємо умову нормування (3).

### ***Приклади розв'язування задач***

**Задача №1.** На основі уявлень про хвильові властивості частинок, оцінити енергію частинки з масою  $m$  в одно-

вимірній нескінченній потенціальній ямі з абсолютно непрозорими стінками завширшки  $l$  (рис. 1). Порівняти отриманий результат з точним виразом, що впливає з розв'язку стаціонарного рівняння Шредінґера.

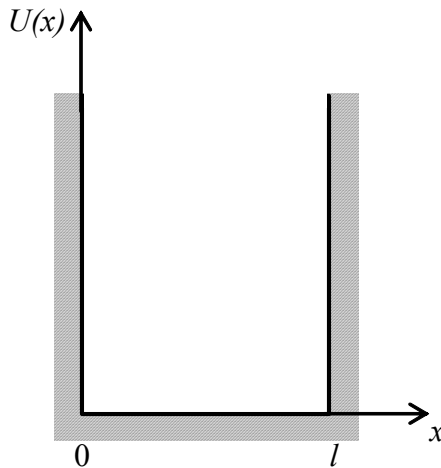


Рис 1. Одновимірна нескінченна потенціальна яма з абсолютно непрозорими стінками

**Розв'язок:** Потенціальна енергія частинки в такій ямі має вигляд

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq l \\ \infty, & x < 0, x > l \end{cases}. \quad (1.1)$$

Частинка рухається вздовж осі  $x$ . Дійсно, якщо б вона рухалась вздовж осі, що перпендикулярна осі  $x$ , то її потенціальна енергія  $U$  була б незмінною, і можна було б вважати, що  $U = 0$ , тобто вважати, що частинка є вільною, що протирічить умові задачі.

Оскільки частинка знаходиться в потенціальній ямі, її повна енергія  $E < 0$ . Вона не може покинути потенціальну яму за скінченний час  $t$ , оскільки яма нескінченно глибока, а це означає, що стан частинки є стаціонарним. Таким чином, необхідно розглядати лише рух частинки вздовж осі  $x$  (під час руху частинки під довільним напрямком до осі  $x$ , за до-

помогою аналогічних міркувань, приходимо до цього ж висновку).

Спочатку оцінимо енергію частинки, виходячи з уявлень про її хвильові властивості. Будемо розглядати частинку в потенціальній ямі як деякий об'єкт, що характеризується хвильовою функцією  $\psi(x)$  з довжиною хвилі  $\lambda$ , яка дорівнює довжині хвилі де Бройля

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad (1.2)$$

де  $p$  – імпульс частинки.

Під час свого руху частинка може наближатися до абсолютно непрозорих стінок потенціальної ями, за межі яких вона вийти не може. Тому, коли вона потрапляє на стінку потенціальної ями, то відразу ж відбивається від неї за законом абсолютно пружного удару.

Якщо тепер розглянути хвилю де Бройля, що ототожнюється з частинкою, то при падінні її на стінку потенціальної ями, вона також буде відбиватися, утворюючи відбиту хвилю. Оскільки умови відбиття для хвиль де Бройля на обох стінках ями однакові, то відбита та падаюча хвилі де Бройля будуть мати однакову амплітуду (немає загасання) і буде утворюватися стояча хвиля де Бройля.

Припустимо, що хвиля де Бройля (і відповідно, частинка) відбиваються від лівої стінки потенціальної ями. Тоді для того, щоб система повернулася до початкового стану, хвиля де Бройля (і відповідно частинка) повинна пройти відстань  $2l$ . Під час такого руху фаза хвильової функції  $\varphi$  змінюється на  $\Delta\varphi = 2\pi n$ , де  $n$  – ціле число. Відповідно, довжина хвилі де Бройля при такому русі буде записуватись як

$$\lambda = \frac{2l}{n}. \quad (1.3)$$

Враховуючи вираз (1.2) для довжини хвилі де Бройля, маємо:

$$\lambda = \frac{2l}{n} = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad (1.4)$$

звідки легко знайти вираз для імпульсу частинки:

$$p = \frac{n\pi\hbar}{l}. \quad (1.5)$$

Оскільки за умовою задачі потенціальна енергія всередині ями  $U = 0$ , то повна енергія  $E$  системи дорівнює кінетичній

енергії частинки  $E_K = \frac{p^2}{2m}$  і отже:

$$E \equiv E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2}. \quad (1.6)$$

Визначимо тепер енергію системи за допомогою рівняння Шредінґера (1). Для області всередині ями ( $0 \leq x \leq l$ ) воно має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x). \quad (1.7)$$

Його розв'язок відомий:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (1.8)$$

де введено позначення  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ .

Оскільки частинка не може вийти за межі ями, то хвильова функція частинки в областях  $x < 0$  та  $x > l$  повинна дорівнювати нулю:

$$\psi(x < 0) = \psi(x > l) = 0. \quad (1.9)$$

Отже, граничні умови для хвильової функції запишуться у вигляді:

$$\psi(x = 0) = A \sin(k \cdot 0) + B \cos(k \cdot 0) = 0,$$

$$\psi(x = l) = A \sin(kl) + B \cos(kl) = 0, \quad (1.10)$$

звідки випливає, що

$$B = 0, \quad kl = \pi n. \quad (1.11)$$

Тоді, враховуючи попередній вираз для коефіцієнта  $k$ , маємо

$$E \equiv E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2}, \quad (1.12)$$

тобто той же самий вираз (1.6), що випливає з хвильових властивостей частинки. Це свідчить про те, що при розв'язанні задач про рух частинок в прямокутних ямах, може вияви-

тись зручним розгляд не самої частинки, а пов'язаної з нею хвилі де Бройля.

**Задача №2.** Частинка масою  $m$  знаходиться в одновимірній потенціальній ямі шириною  $l$  і глибиною  $U_0$  (рис. 2),

так що  $U(x) = \begin{cases} U_0, & x < 0, x > l \\ 0, & 0 < x < l \end{cases}$ . Знайти рівні енергії частинки при  $E < U_0$  та їх кількість в ямі в залежності від  $l$  та  $U_0$ .

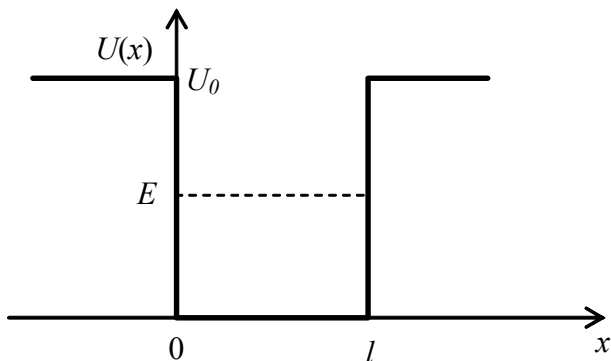


Рис. 2. Одновимірна потенціальна яма шириною  $l$  і глибиною  $U_0$

**Розв'язок:** Розіб'ємо систему на три області: 1)  $x < 0$ ; 2)  $0 \leq x \leq l$ ; 3)  $x > l$ . В кожній з областей розв'яжемо рівняння Шредінґера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_j(x)}{dx^2} + U_j(x) \psi_j(x) = E \psi_j(x), \quad (2.1)$$

вважаючи, що  $U_1(x) = U_3(x) = U_0$ ,  $U_2(x) = 0$ ; індексом  $j$  позначаються величини, що відносяться до  $j$ -ї області.

Загальний розв'язок рівняння Шредінґера (2.1) в усіх областях має вигляд

$$\psi_j(x) = A_j \exp(ik_j x) + B_j \exp(-ik_j x), \quad (2.2)$$



де  $k_j^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_j)$ ;  $U_1 = U_3 = U_0$ ,  $U_2 = 0$ ,  $A_j, B_j$  – деякі константи.

В областях 1 та 3 знаходження частинки мало імовірно, оскільки  $E < U_0$ . Тому, виходячи з (2.2),  $k_1^2 = k_3^2 < 0$ , тобто розв'язок рівняння Шредінґера в цих областях має вигляд згасаючої функції. Його зручно представити у вигляді

$$\psi_1(x) = A \exp\{\alpha x\}, \quad \psi_3(x) = D \exp\{-\alpha(x-l)\}, \quad (2.3)$$

де  $\alpha^2 = -k_1^2 = -k_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$ ,  $A, D$  – поки що невідомі сталі. Фізичний зміст (2.3) полягає в тому, що при  $E < U_0$  частинка може вийти за межі ями, тобто проникнути до “забороненої” області лише на деяку глибину  $\xi \sim \frac{1}{\alpha}$ . Загалом, такий вигляд  $\psi_1(x)$  та  $\psi_3(x)$  впливає одразу ж з рівняння Шредінґера (2.1) при  $E < U_0$ , оскільки кінетична енергія частинки  $E - U_0$  виявляється від'ємною.

В області 2 розв'язком рівняння Шредінґера є

$$\psi_2(x) = B \sin(kx) + C \cos(kx), \quad (2.4)$$

де  $k^2 \equiv k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E > 0$ ,  $B, C$  – поки що невідомі сталі. При записі (2.4) ми скористались альтернативною формою запису розв'язку, порівняно з (2.2), оскільки в другій області розв'язок має осцилюючий характер.

На границях областей повинні виконуватись умови неперервності хвильових функцій  $\psi_j(x)$  та їх похідних  $\frac{d\psi_j(x)}{dx}$

(5),  $j = 1, 2, 3$ , тобто

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A = C,$$

$$\frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0) \Rightarrow \alpha A = kB,$$

$$\psi_2(l) = \psi_3(l) \Rightarrow B \sin(kl) + C \cos(kl) = D,$$

$$\frac{d\psi_2}{dx}(l) = \frac{d\psi_3}{dx}(l) \Rightarrow kB \cos(kl) - kC \sin(kl) = -\alpha D. \quad (2.5)$$

Поділимо четверте рівняння в (2.5) на третє. Одержимо рівняння

$$\frac{kB \cos(kl) - kC \sin(kl)}{B \sin(kl) + C \cos(kl)} = -\alpha, \quad (2.6)$$

яке з урахуванням перших двох рівнянь (2.5) набуде вигляду

$$\frac{\alpha A \cos(kl) - kA \sin(kl)}{\frac{\alpha}{k} A \sin(kl) + A \cos(kl)} = -\alpha \Rightarrow \operatorname{tg}(kl) = \frac{2\alpha k}{k^2 - \alpha^2}. \quad (2.7)$$

З цього рівняння випливає, що

$$k_n l = n\pi + \operatorname{arctg}\left(\frac{2\alpha_n k_n}{k_n^2 - \alpha_n^2}\right), \quad (2.8)$$

де  $n = 1, 2, 3 \dots$ . Корені  $k_n$  цього трансцендентного рівняння визначають енергію частинки в потенціальній ямі:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}. \quad (2.9)$$

Вираз (2.8) можна значно спростити, якщо врахувати відомі співвідношення

$$\begin{aligned} \operatorname{arctg}(-y) &= -\arcsin\left(\frac{y}{\sqrt{1+y^2}}\right), \\ \arcsin\left(2y\sqrt{1-y^2}\right) &= 2\arcsin(y). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Дійсно, покладаючи  $y = \frac{2\alpha_n k_n}{\alpha_n^2 - k_n^2}$ , одержимо, враховуючи явний вигляд  $\alpha_n$ :

$$\begin{aligned} k_n l &= n\pi - \arcsin\left(\frac{2\hbar k_n}{\sqrt{2mU_0}} \sqrt{1 - \frac{\hbar^2 k_n^2}{2mU_0}}\right) = \\ &= n\pi - 2\arcsin\left(\frac{\hbar k_n}{\sqrt{2mU_0}}\right). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Зрозуміло, що максимальне значення  $k_{n\max}$  буде досягатися, коли аргумент функції арксинус буде прямувати до одиниці. Отже,

$$\frac{\hbar k_{n\max}}{\sqrt{2mU_0}} = 1 \Rightarrow k_{n\max} = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}. \quad (2.12)$$

Підставляючи значення  $k_{n\max}$  в (2.11), отримаємо максимальну кількість можливих рівнів в ямі:

$$n < 1 + \frac{l}{\pi\hbar} \sqrt{2mU_0}. \quad (2.13)$$

З (2.13) випливає цікавий результат, що в будь-якій одновимірній потенціальній ямі кінцевої ширини та глибини присутній хоча б один стан, енергія якого менша за глибину ями. В той же час, наявність вищих енергетичних рівнів зовсім не гарантовано.

**Задача №3.** Скільки квантових станів може бути у частинки масою  $m_0$ , що знаходиться всередині тривимірної прямокутної потенціальної ями з абсолютно непрозорими стінками. Розміри ями дорівнюють  $a, b, c$ . Яка імовірність знаходження частинки в області  $\Omega \equiv \left\{ \frac{a}{4} \leq x \leq \frac{3a}{4}; \frac{b}{4} \leq y \leq \frac{3b}{4}; \frac{c}{4} \leq z \leq \frac{3c}{4} \right\}$  в найнижчому енергетичному стані?

**Розв'язок:** Тривимірну прямокутну потенціальну яму можна розглядати як взаємний перетин трьох одновимірних потенціальних ям з абсолютно непрозорими стінками. Хвильова функція частинки  $\psi(x, y, z)$  в такій ямі задовольняє тривимірному рівнянню Шредінґера

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial z^2} \right] = E\psi(x, y, z), \quad (3.1)$$

де враховано, що всередині ями потенціальна енергія частинки дорівнює нулю.

Скористаємось відомим методом розділення змінних, для чого представимо хвильову функцію частинки  $\psi(x, y, z)$  у вигляді

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z). \quad (3.2)$$

Підставимо (3.2) в (3.1) і поділимо отримане рівняння на  $\psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z)$ . В результаті одержимо:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{\psi_x''}{\psi_x} + \frac{\psi_y''}{\psi_y} + \frac{\psi_z''}{\psi_z} \right] = E, \quad (3.3)$$

де штрихом позначено диференціювання по відповідній змінній. Рівняння (3.3) еквівалентне трьом однотипним одновимірним рівнянням

$$\psi_x'' + k_x^2 \psi_x = 0, \quad \psi_y'' + k_y^2 \psi_y = 0, \quad \psi_z'' + k_z^2 \psi_z = 0, \quad (3.4)$$

які зв'язані додатковою умовою

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = 2m_0 E / \hbar^2. \quad (3.5)$$

Розв'яжемо, наприклад, рівняння для функції  $\psi_x(x)$ . Загальний розв'язок рівняння має вигляд

$$\psi_x(x) = A_x \sin(k_x x) + B_x \cos(k_x x). \quad (3.6)$$

На границях ями при  $x = 0$ ,  $a$  хвильова функція  $\psi(x, y, z)$  повинна дорівнювати нулю (див. задачу №1 цього розділу), тому маємо граничні умови:

$$\begin{cases} \psi_x(0) = 0 \\ \psi_x(a) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B_x = 0 \\ \sin(k_x a) = 0 \end{cases}. \quad (3.7)$$

З (3.7) випливає, що хвильове число

$$k_x = \frac{m\pi}{a}, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad (3.8)$$

а функція  $\psi_x(x)$  має вигляд

$$\psi_x(x) = A_{xm} \sin\left(\frac{m\pi}{a} x\right). \quad (3.9)$$

За аналогією, з (3.8)–(3.9) отримуємо вирази для коефіцієнтів  $k_y, k_z$ :

$$k_y = \frac{n\pi}{b}, \quad k_z = \frac{p\pi}{c}, \quad n, p \in \mathbb{Z} \quad (3.10)$$

та функцій  $\psi_y(y)$ ,  $\psi_z(z)$

$$\psi_y(y) = A_{yn} \sin\left(\frac{n\pi}{b}y\right), \quad \psi_z(z) = A_{zp} \sin\left(\frac{p\pi}{c}z\right). \quad (3.11)$$

Отже, повний розв'язок задачі має вигляд:

$$\begin{aligned} \Psi(x, y, z) &= A_{xm} A_{yn} A_{zp} \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{b}y\right) \sin\left(\frac{p\pi}{c}z\right), \\ \frac{m^2\pi^2}{a^2} + \frac{n^2\pi^2}{b^2} + \frac{p^2\pi^2}{c^2} &= \frac{2m_0E}{\hbar^2}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Відповідно до (3.12), мінімальна енергія частинки в тривимірній потенціальній ямі може дорівнювати мінімальній енергії частинки в нескінченній одновимірній потенціальній ямі з абсолютно непрозорими стінками

$$E_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 l^2}, \quad (3.13)$$

де  $l = \max(a, b, c)$ , що відповідає стану з квантовим числом 1 під час руху вздовж однієї з координат. Всі інші квантові числа дорівнюють нулю (при цьому зникає залежність хвильової функції від відповідної координати – відбувається перехід до потенціальної ями з більш низькою розмірністю).

Нехай, наприклад,  $b = a/2$ ,  $c = a/3$ , тоді користуючись другою формулою (3.12) легко розрахувати енергію частинки в різних квантових станах (див. табл. 1). В цьому випадку енергія частинки може послідовно набувати наступні значення:  $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}$ ,  $\frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_0 a^2}$ ,  $\frac{5\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}$ ,  $\frac{4\pi^2 \hbar^2}{m_0 a^2}$ ,  $\frac{9\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}$ ,  $\frac{5\pi^2 \hbar^2}{m_0 a^2}$  і т.д., що

відповідає станам з квантовими числами  $(mnp)$ , що дорівнюють (100), (010), (110), (210), (001), (101) і т.д.

Подібним чином можна розрахувати енергію будь-якого квантового стану, якщо відомі розміри  $a, b, c$  тривимірної потенціальної ями.

Таблиця 1

Енергія в одини- цях $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}$	Квантові числа		
	$m$	$n$	$p$
1	1	0	0
4	0	1	0
9	0	0	1
5	1	1	0
13	0	1	1
10	1	0	1
14	1	1	1
4	2	0	0
8	2	1	0
13	2	0	1
17	2	1	1
9	3	0	0
13	3	1	0
...	...	...	...

Кількість можли-  
вих станів частинки  
в тривимірній поте-  
нціалній ямі можна  
визначити як кіль-  
кість станів, енергії  
яких менші за певне  
критичне значення  
енергії  $E_c$ . Нехай,  
наприклад,

$$E_c = \frac{6\pi^2 \hbar^2}{m_0 a^2}, \quad \text{тоді}$$

частинка може  
перебувати лише в  
8 станах. Їм  
відповідають  
квантові числа  
( $mnp$ ), що дорівню-

ють (100), (010), (200), (110), (210), (001), (300), (101). Відмі-  
тимо також те, що деякі стани є виродженими. Наприклад,  
станам з квантовими числами (001) та (300) відповідає одне і

те ж значення енергії  $E_{001} = E_{300} = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}$  (звичайно, це вико-

нується за рахунок відповідного підбору розмірів ями  $a, b, c$ ).  
Такий стан називається двічі виродженим.

Знайдемо тепер імовірність знаходження частинки в обла-  
сті  $\Omega$ . Імовірність  $P$  визначається інтегралом по об'єму  $V_\Omega$   
області  $\Omega$  від квадрата модуля хвильової функції  $\psi(x, y, z)$ :

$$P = \int_{V_\Omega} |\psi(x, y, z)|^2 dV = A_{mnp}^2 \int_{a/4}^{3a/4} \sin^2\left(\frac{m\pi}{a}x\right) dx \int_{b/4}^{3b/4} \sin^2\left(\frac{n\pi}{b}y\right) dy \times \\ \times \int_{c/4}^{3c/4} \sin^2\left(\frac{p\pi}{c}z\right) dz, \quad (3.14)$$

де величина  $A_{mnp} = A_{xm} A_{yn} A_{zp}$  може бути визначена з умови

нормування хвильової функції:

$$\int_V |\Psi(x, y, z)|^2 dV = A_{mnp}^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{m\pi}{a}x\right) dx \int_0^b \sin^2\left(\frac{n\pi}{b}y\right) dy \times \\ \times \int_0^c \sin^2\left(\frac{p\pi}{c}z\right) dz = 1. \quad (3.15)$$

Оскільки

$$\int_0^l \sin^2\left(\frac{k\pi}{l}t\right) dt = \begin{cases} 0, & k = 0 \\ a/2, & k \neq 0 \end{cases}, \quad (3.16)$$

то з (3.15) випливає, що для станів з  $m \cdot n \cdot p \neq 0$

$$A_{mnp}^2 \frac{abc}{8} = 1 \Rightarrow A_{mnp} = \sqrt{\frac{8}{abc}}. \quad (3.17)$$

Уведемо допоміжний інтеграл

$$I(k, l, u_1, u_2) = \int_{u_1 l}^{u_2 l} \sin^2\left(\frac{k\pi}{l}t\right) dt = \\ = \frac{l}{2} \left\{ (u_2 - u_1) - \frac{[\sin(2k\pi u_2) - \sin(2k\pi u_1)]}{2k\pi} \right\}. \quad (3.18)$$

Тоді імовірність  $P$  може бути записана у вигляді

$$P = \frac{8}{abc} I\left(m, a, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) I\left(n, b, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) I\left(p, c, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right). \quad (3.19)$$

Область  $\Omega$  є тривимірною, тому найнижчий енергетичний стан частинки в цій області – це такий, якому відповідає мінімальна енергія руху вздовж осей координат  $x, y, z$ . Це буде стан з квантовими числами  $m = n = p = 1$ . Тоді вважаючи, як і раніше  $b = a/2, c = a/3$ , одержимо:

$$I\left(1, a, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) \approx 0,409a, \quad I\left(1, \frac{a}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) \approx 0,205a, \\ I\left(1, \frac{a}{3}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) \approx 0,136a. \quad (3.20)$$

І, відповідно, з (3.14), (3.17), (3.20) шукана імовірність

$$P = \frac{48}{a^3} \cdot 0,409a \cdot 0,205a \cdot 0,136a \approx 0,547, \quad (3.21)$$

це означає, що в середньому приблизно 55% свого часу частинка, яка знаходиться в стані (111), перебуває в центральній області  $\Omega$  тривимірної потенціальної ями.

**Задача №4.** Знайти вираз для коефіцієнта відбивання та коефіцієнта прозорості прямокутного потенціального бар'єра з висотою  $U_0$  та шириною  $l$  (рис. 3). Розглянути випадки, коли  $E > U_0$ ,  $E < U_0$ .

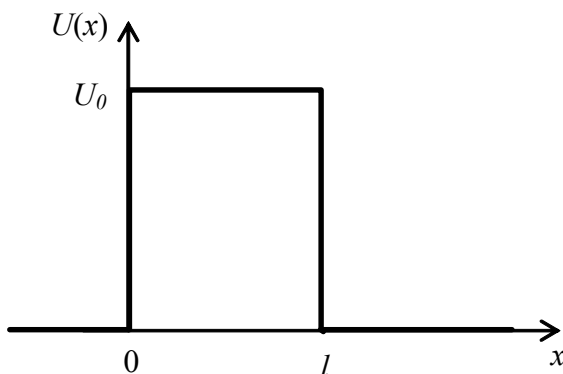


Рис. 3. Прямокутний потенціальний бар'єр з висотою  $U_0$  та шириною  $l$

**Розв'язок:** Розглянемо три області: 1)  $x < 0$ ; 2)  $0 \leq x \leq l$ ; 3)  $x > l$ . В кожній з областей розв'яжемо рівняння Шредінґера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_j(x)}{dx^2} + U_j(x) \psi_j(x) = E \psi_j(x), \quad (4.1)$$

вважаючи, що  $U_1(x) = U_3(x) = 0$ ,  $U_2(x) = U_0$ ; індексом  $j$  позначаються величини, що відносяться до  $j$ -ї області. Рівняння (4.1) еквівалентно трьом рівнянням для кожної з областей:



$$\begin{aligned}
\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) &= 0, \\
\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + k_2^2\psi_2(x) &= 0, \\
\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_3(x) &= 0,
\end{aligned} \tag{4.2}$$

де  $k_1^2 = k_3^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ,  $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0) = k_1^2\eta^2$ ; параметр

$\eta = \sqrt{\frac{E - U_0}{E}}$  можна по аналогії з оптикою назвати "показником заломлення" потенціального бар'єра.

Розв'язки рівнянь (4.2) представимо у вигляді

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \\
\psi_2(x) &= A_2 e^{ik\eta x} + B_2 e^{-ik\eta x}, \\
\psi_3(x) &= A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx},
\end{aligned} \tag{4.3}$$

де  $A_1, B_1, A_2, B_2, A_3, B_3$  – довільні сталі. Щоб хвильові функції (4.3) вірно описували рух частинки, вони повинні задовольняти граничним умовам

$$\begin{aligned}
\psi_1(0) &= \psi_2(0) \Rightarrow A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\
\frac{d\psi_1}{dx}(0) &= \frac{d\psi_2}{dx}(0) \Rightarrow A_1 - B_1 = \eta(A_2 - B_2), \\
\psi_2(l) &= \psi_3(l) \Rightarrow A_2 e^{ik\eta l} + B_2 e^{-ik\eta l} = A_3 e^{ikl} + B_3 e^{-ikl}, \\
\frac{d\psi_2}{dx}(l) &= \frac{d\psi_3}{dx}(l) \Rightarrow \eta(A_2 e^{ik\eta l} - B_2 e^{-ik\eta l}) = A_3 e^{ikl} - B_3 e^{-ikl}.
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Ми одержали чотири рівняння, до яких входять шість сталих  $A_1, B_1, A_2, B_2, A_3, B_3$ . Якщо частинка рухається в напрямку  $+x$ , то в третій області вона буде рухатись в тому ж напрямку (буде існувати тільки хвиля де Бройля частинки, що пройшла через бар'єр), і відповідно  $B_3 = 0$ . Розв'язки рівнянь (4.2) визначені з точністю до постійного множника, тому без жодних обмежень можна покласти  $A_1 = 1$ , тим самим нормуючи всі

сталі, що входять до рівняння. Остаточоно одержимо:

$$\begin{aligned} 1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ 1 - B_1 &= \eta(A_2 - B_2) \\ A_2 e^{ik\eta l} + B_2 e^{-ik\eta l} &= A_3 e^{ikl} \\ \eta(A_2 e^{ik\eta l} - B_2 e^{-ik\eta l}) &= A_3 e^{ikl} \end{aligned} \quad (4.5)$$

З цієї системи лінійних алгебраїчних рівнянь знаходимо вирази для  $B_1, A_2, B_2, A_3$ :

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{(1 - \eta^2)(e^{-ik\eta l} - e^{ik\eta l})}{(1 + \eta)^2 e^{-ik\eta l} - (1 - \eta)^2 e^{ik\eta l}}, \\ A_2 &= \frac{2(1 + \eta)e^{-ik\eta l}}{(1 + \eta)^2 e^{-ik\eta l} - (1 - \eta)^2 e^{ik\eta l}}, \\ B_2 &= \frac{2(\eta - 1)e^{ik\eta l}}{(1 + \eta)^2 e^{-ik\eta l} - (1 - \eta)^2 e^{ik\eta l}}, \\ A_3 &= \frac{4\eta e^{-ikl}}{(1 + \eta)^2 e^{-ik\eta l} - (1 - \eta)^2 e^{ik\eta l}}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Розглянемо спочатку випадок, коли  $E > U_0$ . В цьому випадку "показник заломлення"  $\eta$  є дійсним числом ( $0 < \eta < 1$ ). З урахуванням цього інтенсивність відбитої хвилі

$$|B_1|^2 = \frac{4(1 - \eta^2)^2 \sin^2(k\eta l)}{(1 + \eta)^4 + (1 - \eta)^4 - 2(1 - \eta^2)^2 \cos(2k\eta l)}, \quad (4.7)$$

а інтенсивність хвилі, що пройшла

$$|A_3|^2 = \frac{16\eta^2}{(1 + \eta)^4 + (1 - \eta)^4 - 2(1 - \eta^2)^2 \cos(2k\eta l)}. \quad (4.8)$$

Густину потоку частинок в падаючій хвилі  $J_0$ , у відбитій хвилі  $J_r$  та у хвилі, що пройшла,  $J_d$  знайдемо з (7):

$$J_0 = \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2 = \frac{\hbar k}{m}, \quad J_r = -\frac{\hbar k}{m} |B_1|^2, \quad J_d = \frac{\hbar k}{m} |A_3|^2. \quad (4.9)$$

Коефіцієнти відбивання  $R$  та прозорості  $D$  потенціально-

го бар'єра розрахуємо як

$$R = \frac{|J_r|}{J_0} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = |B_1|^2 = \frac{4(1-\eta^2)^2 \sin^2(k\eta l)}{(1+\eta)^4 + (1-\eta)^4 - 2(1-\eta^2)^2 \cos(2k\eta l)},$$

$$D = \frac{J_d}{J_0} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = |A_3|^2 = \frac{16\eta^2}{(1+\eta)^4 + (1-\eta)^4 - 2(1-\eta^2)^2 \cos(2k\eta l)}.$$
(4.10)

З (4.10) впливає співвідношення між  $R$  та  $D$

$$R + D = 1, \quad (4.11)$$

що є наслідком закону збереження кількості частинок.

Якщо  $E > U_0$ , то відповідно з класичною механікою частинка не повинна "відчувати" наявності потенціального бар'єра, тобто повинно бути  $R = 0, D = 1$ . Але з виразів (4.7), (4.8) впливає, що навіть при  $E > U_0$   $|B_1|^2 \neq 0$ ,  $|A_3|^2 \neq 0$ , і, отже, в квантовій механіці  $R > 0, D < 1$ . Це може бути пояснено лише на основі співвідношень невизначеностей Гейзенберга [33]. З точки зору квантової механіки частинка з енергією  $E$ , перебуваючи над бар'єром з висотою  $U_0 < E$ , з певною скінченною

імовірністю може опинитися на час  $\Delta t \sim \frac{\hbar}{E - E'}$  у стані з енергією  $E' < U_0$  і "відчути" потенціальний бар'єр.

Розглянемо тепер випадок  $E < U_0$ , коли "показник заломлення" потенціального бар'єра є уявною величиною:

$$\eta = i\chi, \quad \chi = \sqrt{\frac{U_0 - E}{E}}. \quad (4.12)$$

Покладемо для спрощення подальших виразів, що  $e^{k\chi l} \gg 1$ , тобто будемо вважати, що потенціальний бар'єр є достатньо широким. Тоді з (4.6), (4.9) впливає, що

$$D = |A_3|^2 \approx \frac{16\chi^2}{(1+\chi^2)^2} e^{-2k\chi l}. \quad (4.13)$$

Якщо ввести позначення  $D_0 = \frac{16\chi^2}{(1+\chi^2)^2}$  та підставити у вираз

(4.13) безпосередні значення для  $k$  та  $\chi$ , то одержимо відому формулу для коефіцієнта прозорості прямокутного потенціального бар'єра:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right\}. \quad (4.14)$$

Проаналізуємо вираз (4.13) з урахуванням співвідношення (4.11). Якщо  $E < U_0$ , то за законами класичної фізики має бути  $R = 1, D = 0$ , тобто повинно мати місце явище повного відбивання частинок від бар'єра. В той же час, відповідно до (4.13)  $D > 0$ , а отже,  $R < 1$ . Тобто в такому випадку відбувається явище тунелювання частинок крізь потенціальний бар'єр, що може бути пояснено лише в припущенні, що частинкам притаманні хвильові властивості.

**Задача №5. Знайти коефіцієнт прозорості параболічного потенціального бар'єра висотою  $U_0$  (рис. 4).**

**Розв'язок:** З рис. 4 можна визначити явний вигляд функції  $U(x)$ :

$$U(x) = \begin{cases} U_0 \left( 1 - \frac{x^2}{\ell^2} \right), & -\ell \leq x \leq \ell \\ 0, & x < -\ell, x > \ell \end{cases}. \quad (5.1)$$

Знайдемо координату точки входу  $x_1$  частинки в бар'єр та координату точки виходу  $x_2$  частинки з бар'єру з умови

$$E = U_0 \left( 1 - \frac{x_{1,2}^2}{\ell^2} \right) \Rightarrow x_{1,2} = \pm \ell \sqrt{1 - \frac{E}{U_0}}. \quad (5.2)$$

Коефіцієнт прозорості бар'єру  $D$  будемо шукати у вигляді

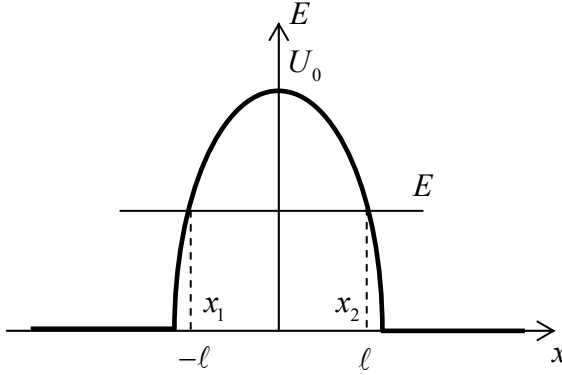


Рис. 4. Параболічний потенціальний бар'єр висоти  $U_0$

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2I}{\hbar} \sqrt{2m} \right\}, \quad (5.3)$$

де  $I = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U - E} dx = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{(U_0 - E) - \frac{U_0}{\ell^2} x^2} dx$ . Введемо нові змінні  $A = U_0 - E$ ,  $B = \frac{U_0}{\ell^2}$ , тоді  $x_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{A}{B}}$ . Отже

$$I = \sqrt{B} \int_{-\sqrt{\frac{A}{B}}}^{\sqrt{\frac{A}{B}}} \sqrt{\frac{A}{B} - x^2} dx. \quad (5.4)$$

Скориставшись співвідношенням

$$\int \sqrt{a^2 - x^2} dx = \frac{x}{2} \sqrt{a^2 - x^2} - \frac{a^2}{2} \arcsin \frac{x}{a} + \text{const},$$

одержимо

$$\begin{aligned} I &= \sqrt{B} \left[ \frac{\sqrt{A}}{2\sqrt{B}} \sqrt{\frac{A}{B} - \frac{A}{B}} + \frac{\sqrt{A}}{2\sqrt{B}} \sqrt{\frac{A}{B} - \frac{A}{B}} + 2 \frac{A}{2B} \arcsin 1 \right] = \\ &= \frac{\pi(U_0 - E)\ell}{2\sqrt{U_0}}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Таким чином коефіцієнт прозорості параболічного бар'єра

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{\pi \ell \sqrt{2m}}{\hbar \sqrt{U_0}} (U_0 - E) \right\}. \quad (5.6)$$

**Задача №6.** Знайти коефіцієнт прозорості потенціального бар'єра при холодній емісії електронів з металу під дією електричного поля напруженістю  $E$ . Вважати, що вектор напруженості електричного поля  $\vec{E}$  перпендикулярний до поверхні металу. Яка залежність густини струму холодної емісії від напруженості поля  $E$ ?

**Розв'язок:** Якщо до металу прикласти сильне електричне поле, то таке поле може виривати електрони з металу – з'являється струм. Це явище отримало назву “холодної емісії електронів”.

Для того, щоб вивільнити електрон з металу, необхідно затратити певну роботу  $A$ , яка називається роботою виходу і є характерним параметром речовини. Отже, потенціальна енергія електрона всередині металу нижча, ніж назовні.

Введемо прямокутну систему координат таким чином, щоб вісь  $x$  цієї системи координат співпадала з напрямком зовнішньої нормалі до поверхні металу, а площина  $x = 0$  співпадала б з границею розділу метал–вакуум (рис. 5). Нехай всередині металу (при  $x < 0$ ) потенціальна енергія електрона дорівнює нулеві, тоді потенціальна енергія електрона  $U(x)$  ззовні від металу ( $x > 0$ ) буде мати вигляд:

$$U(x) = A - eEx. \quad (6.1)$$

Якщо кінетична енергія електрона дорівнює  $E_K$ , тоді розрахунок коефіцієнта прозорості бар'єра  $D$  зводиться до обчислення інтеграла

$$I = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_e [U(x) - E_K]} dx, \quad (6.2)$$

де  $x_1$  та  $x_2$  – координати точок, в яких горизонтальна пряма  $E_K$  перетинає криву  $U(x)$ . Зрозуміло, що  $x_1 = 0$ . Координата

другої точки  $x_2$  знаходиться з (6.1) за умови  $E_K = U(x_2)$ :

$$x_2 = \frac{A - E_K}{eE}. \quad (6.3)$$

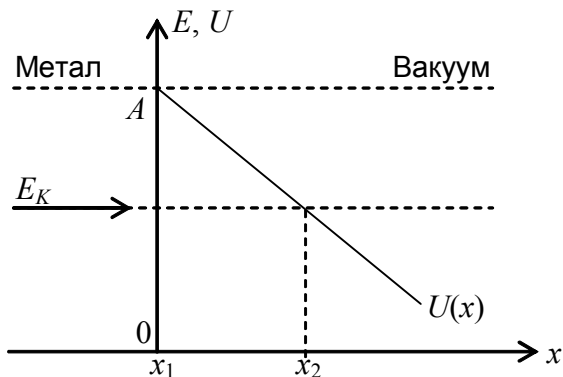


Рис. 5. Розподіл потенціальної енергії на границі метал-вакуум при прикладанні до металу електричного поля, нормального до його поверхні

Для обчислення інтеграла  $I$  введемо нову змінну інтегрування

$y = \frac{eEx}{A - E_K}$ , тоді

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{\frac{A-E_K}{eE}} \sqrt{2m_e [A - eEx - E_K]} dx = \frac{(A - E_K)^{3/2}}{eE} \sqrt{2m} \int_0^1 \sqrt{1 - y} dy = \\ &= \frac{2}{3} \frac{(A - E_K)^{3/2}}{eE} \sqrt{2m}. \end{aligned} \quad (6.4)$$

І, відповідно, коефіцієнт прозорості бар'єра

$$D(E_K) = D_0 \exp \left\{ -\frac{4}{3\hbar} \frac{(A - E_K)^{3/2}}{eE} \sqrt{2m} \right\}, \quad (6.5)$$

де  $D_0$  – амплітудне значення прозорості бар'єра, яке залежить від форми бар'єра, енергії частинки і т.д.

Густина струму холодної емісії  $J$  пропорційна до коефіціє-

нта прозорості бар'єра  $D$ , отже

$$J = J_0 \exp\left(-\frac{B}{E}\right), \quad (6.6)$$

де  $B = \frac{4}{3\hbar} \frac{(A - E_K)^{3/2}}{e} \sqrt{2m}$ . Тобто зі збільшенням напруженості поля  $E$  густина струму холодної емісії суттєво зростає.

**Задача №7. Проаналізуйте, чи може процес  $\alpha$ -розпаду важких ядер бути пояснений на основі явища тунельного ефекту.**

**Розв'язок:** В ядрах атомів зі збільшенням заряду ядра збільшується кулонівська сила відштовхування між протонами, що входять до складу ядра. Відповідно, такі важкі ядра виявляються нестабільними щодо  $\alpha$ -розпаду. З дослідів відомо, що енергії  $\alpha$ -частинок  $E$ , які вилітають з  $\alpha$ -радіоактивних ядер, досягають  $2-9 \text{ MeV}$ , в той час як висота кулонівських бар'єрів цих ядер значно перевищує енергію  $\alpha$ -частинки. Другою особливістю  $\alpha$ -розпаду є те, що період напіврозпаду ядер  $T_{1/2}$  сильно залежить від енергії  $\alpha$ -частинки  $E$ :

$$\ln T_{1/2} = \frac{C_1}{\sqrt{E}} + C_2, \quad (7.1)$$

де  $C_1$  і  $C_2$  – сталі величини.

Вперше теоретично пояснив фізику цього явища Г. Гамов (1928 р.), тому відповідна теорія отримала назву “теорія Гамова  $\alpha$ -розпаду важких ядер”.

В основі цієї теорії лежить припущення, що на малих відстанях  $r \leq r_0$  ( $r_0$  – радіус ядра) діє потенціал Юкави, зумовлений обміном  $\pi$ -мезонами з масою  $m_\pi$ . І відповідна потенціальна енергія

$$U_\pi(r) = -\frac{1,45 \cdot \hbar c}{r} \exp\left\{-\frac{m_\pi c r}{\hbar}\right\}, \quad (7.2)$$

а на великих відстанях ( $r > r_0$ ) є лише кулонівська енергія



взаємодії  $\alpha$ -частинки з атомним залишком  $U_e(r) = \frac{2Z^*e^2}{r}$ , за-

ряд якого  $Z^* = Z - 2$  ( $Z$  – заряд ядра, що розпадається). Потенціал Юкави сильно залежить від відстані  $r$  і суттєво зменшується при зміні відстані  $r$  від 0 до  $r_0$ . Вигляд потенціальної енергії  $U_\pi(r)$  при  $r \leq r_0$  нагадує потенціальну яму з майже вертикальними стінками (рис. 6), тому в цьому випадку зручно використати просту модель прямокутної потенціальної ями. Будемо вважати, що потенціальна енергія  $\alpha$ -частинки поблизу ядра має вигляд:

$$U(r) = \begin{cases} U_0, & r \leq r_0 \\ \frac{2Z^*e^2}{r}, & r > r_0 \end{cases}. \quad (7.3)$$

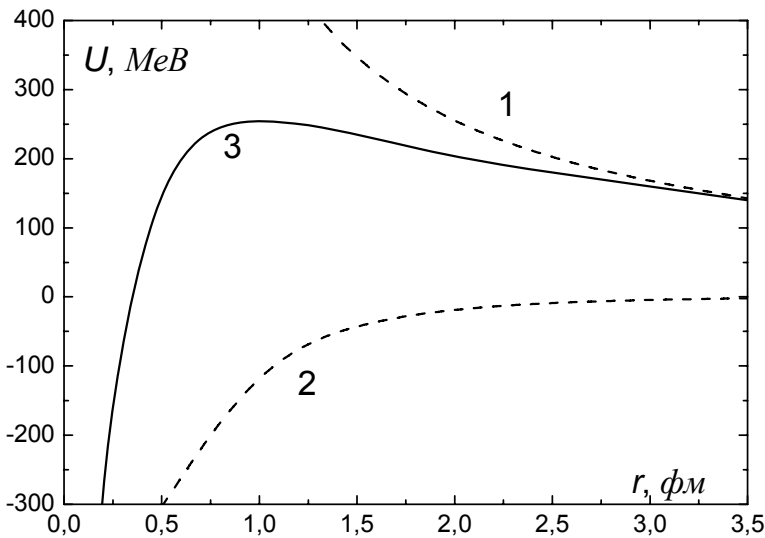


Рис. 6. Потенціальний бар'єр для  $\alpha$ -розпаду важкого ядра

урану  $U_{92}$ . 1 –  $U_e(r) = \frac{2Z^*e^2}{r}$ ; 2 –  $U_\pi(r) = -\frac{1,45 \cdot \hbar c}{r} \exp\left\{-\frac{m_\pi cr}{\hbar}\right\}$ ; 3 – дійсна залежність для ядра  $_{92}\text{U}$

Тоді імовірність  $\alpha$ -розпаду ядра, при якому з нього вилітає  $\alpha$ -частинка з енергією  $E$ , визначається прозорістю відповідного потенціального бар'єра:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m \left( \frac{2Z^* e^2}{r} - E \right)} dr \right\}. \quad (7.4)$$

Координату  $r_1$  легко визначити з рівняння  $E = U(r_1)$ . Звідки

$$r_1 = \frac{2Z^* e^2}{E}.$$

Візьмемо натуральний логарифм від (7.4) і введемо нову змінну інтегрування  $\xi$  за правилом  $r = r_1 \xi^2$ . Відповідно, одержимо:

$$\begin{aligned} \ln \left( \frac{D}{D_0} \right) &= -\frac{Z^* e^2 \sqrt{128m}}{\hbar \sqrt{E}} \int_{\sqrt{r_0/r_1}}^1 \sqrt{1-\xi^2} d\xi = \\ &= -\frac{Z^* e^2 \sqrt{32m}}{\hbar \sqrt{E}} \left[ \xi \sqrt{1-\xi^2} + \arcsin \xi \right] \Big|_{\sqrt{r_0/r_1}}^1 = \\ &= -\frac{Z^* e^2 \sqrt{32m}}{\hbar \sqrt{E}} \left[ \frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{r_0}{r_1} \left( 1 - \frac{r_0}{r_1} \right)} - \arcsin \sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \right]. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Для важких ядер завжди виконується співвідношення  $r_1 \gg r_0$ , тому в виразі (7.5) можна залишити тільки перші члени розкладу за малою величиною  $\sqrt{\frac{r_0}{r_1}}$ .

При цьому одержуємо вираз

$$\ln \left( \frac{D}{D_0} \right) \cong -\frac{Z^* e^2 \sqrt{32m}}{\hbar \sqrt{E}} \left[ \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \right]. \quad (7.6)$$

Залежність (7.6) відповідає відомому закону  $\alpha$ -розпаду ядер

$$N(t) = N_0 \exp \{ -\lambda t \}, \quad (7.7)$$

де  $N(t)$  – кількість атомів, які не розпалися за час  $t$ ,  $\lambda$  – стала розпаду, що характеризує ймовірність розпаду за одну секунду. Дійсно, величина  $\lambda$  повинна бути пропорційна кое-

фіцієнту прозорості бар'єра  $D$ :

$$\lambda = nD, \quad (7.8)$$

де  $n = \frac{v_0}{r_0}$  – кількість "ударів"  $\alpha$ -частинок о стінки бар'єра за

одну секунду,  $v_0 = \frac{\hbar}{2mr_0}$  – швидкість  $\alpha$ -частинки в ядрі (фор-

мула отримана за допомогою співвідношення невизначеностей – див. розділ 3). Таким чином, з (7.6), (7.8) випливає співвідношення

$$\ln \lambda = \ln n + \ln D = \ln \frac{\hbar}{2m_0 r_0^2} + \ln D_0 - \frac{Z^* e^2 \sqrt{32m}}{\hbar \sqrt{E}} \left[ \frac{\pi}{2} - 2 \sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \right]. \quad (7.9)$$

З (7.7) легко отримати співвідношення між  $\lambda$  та  $T_{1/2}$ :

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}. \quad (7.10)$$

З урахуванням (7.9), формула (7.10) відповідає відомій експериментальній залежності (7.1). Дійсно порівнюючи (7.9), (7.10) з (7.1) знаходимо, що

$$\ln T_{1/2} = \ln \ln 2 - \ln \lambda = \frac{C_1}{\sqrt{E}} + C_2, \quad (7.11)$$

$$\text{де } C_1 = \frac{Z^* e^2 \sqrt{32m}}{\hbar} \left[ \frac{\pi}{2} - 2 \sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \right], \quad C_2 = \ln \ln 2 - \ln \frac{\hbar}{2m_0 r_0^2} - \ln D_0.$$

Отже, наведена модель вірно пояснює процес  $\alpha$ -розпаду важких ядер.

**Задача №8.** Знайти величину струму, що протікає крізь тунельний контакт двох надпровідників, різниця фаз хвильових функцій між якими  $\theta$ , а ширина тунельного проміжку дорівнює  $d$ .

**Розв'язок:** Вперше цю задачу розв'язав у 1962 році Б. Джоозефсон. На його честь система, що складається з двох надпровідників, розділених діелектричним прошарком була названа "джозефсонівським контактом" (рис. 7).

Б. Джоозефсон розглядав тунелювання куперівських пар

(зв'язаного стану двох електронів з протилежними імпульсами та спінами) і передбачив існування двох ефектів, які отримали назву стаціонарного та нестаціонарного ефектів Джозефсона. Ці ефекти виникають за умов слабого електричного (тунельного) контакту між двома надпровідними елементами, відстань між якими  $d \leq 20 \text{ \AA}$ .

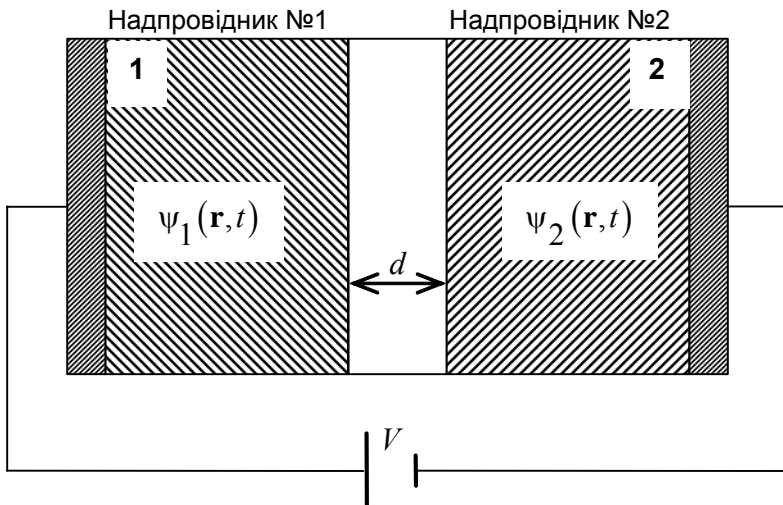


Рис. 7. Тунельний контакт двох надпровідників

Розглянемо тунельний контакт двох надпровідників, усі електрони в першому з яких описуються хвильовою функцією  $\psi_1(\vec{r}, t)$ , а у другому – відповідно,  $\psi_2(\vec{r}, t)$ . Якщо відстань між надпровідниками  $d$  велика ( $d \gg 20 \text{ \AA}$ ), то тунельний струм буде дуже малий, або взагалі відсутній. В цьому випадку  $\psi_1(\vec{r}, t)$  та  $\psi_2(\vec{r}, t)$  повинні задовольняти незалежним рівнянням Шредінгера. Зі зменшенням  $d$  наявність помітного тунельного струму призведе до появи зв'язку між  $\psi_1(\vec{r}, t)$  та  $\psi_2(\vec{r}, t)$ . Щоб описати обидва ці процеси, запишемо два зв'язаних рівняння Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = E_1 \psi_1 + k \psi_2,$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = E_2 \psi_2 + k \psi_1, \quad (8.1)$$

де  $k$  – коефіцієнт зв'язку, який залежить від характеристик джозефсонівського контакту (матеріалу надпровідників, відстані  $d$ , форми контакту і т.д.)

Якщо ми прикладемо до такої системи напругу  $V \neq 0$  (див. рис. 7), то енергія куперівських пар в одному з надпровідників буде відрізнятись від енергії пар в іншому надпровіднику на  $2eV$ , тобто

$$E_1 - E_2 = 2eV. \quad (8.2)$$

Перепишемо рівняння (8.1) відносно середнього рівня енергії  $(E_1 + E_2)/2$ . Одержимо:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} &= eV \psi_1 + k \psi_2, \\ i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} &= -eV \psi_2 + k \psi_1. \end{aligned} \quad (8.3)$$

Ці рівняння добре відомі з теорії коливань, вони описують зв'язані коливання двох осциляторів у комплексних нормальних координатах  $\psi_1$  та  $\psi_2$ . Для переходу до дійсних величин зробимо заміну змінних:

$$\psi_1 = \sqrt{\rho_1} e^{i\varphi_1}, \quad \psi_2 = \sqrt{\rho_2} e^{i\varphi_2}, \quad (8.4)$$

де  $\rho_1, \varphi_1, \rho_2, \varphi_2$  – відповідно густина електронів та фаза хвильової функції в першому та другому надпровіднику.

З урахуванням (8.4), рівняння (8.3) можна представити у вигляді чотирьох диференціальних рівнянь першого порядку:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} &= \frac{2}{\hbar} k \sqrt{\rho_1 \rho_2} \sin(\varphi_1 - \varphi_2), \\ \frac{\partial \rho_2}{\partial t} &= \frac{2}{\hbar} k \sqrt{\rho_1 \rho_2} \sin(\varphi_2 - \varphi_1), \\ \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} &= \frac{k}{\hbar} \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}} \cos(\varphi_2 - \varphi_1) - \frac{eV}{\hbar}, \\ \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} &= \frac{k}{\hbar} \sqrt{\frac{\rho_1}{\rho_2}} \cos(\varphi_2 - \varphi_1) + \frac{eV}{\hbar}. \end{aligned} \quad (8.5)$$

Припустимо, що густина зарядів в обох надпровідниках не суттєво відрізняється від рівноважного значення  $\rho_1 = \rho_2 \approx \rho_0$ , та позначимо різницю фаз хвильових функцій  $\varphi_2 - \varphi_1 = \theta$  (за умовою задачі). З перших двох рівнянь (8.5) випливає, що навіть за відсутності напруги ( $V = 0$ ) крізь такий контакт буде текти струм, який залежить лише від різниці фаз хвильових функцій:

$$I = \frac{\partial \rho_1}{\partial t} = \frac{2k}{\hbar} \sqrt{\rho_1 \rho_2} \sin \theta = I_0 \sin \theta. \quad (8.6)$$

Це явище отримало назву “стаціонарного ефекту Джозефсона”.

Відповідно, з двох останніх рівнянь (8.5) отримуємо вираз, який описує так званий нестаціонарний ефект Джозефсона:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{2e}{\hbar} V. \quad (8.7)$$

З (8.6), (8.7) слідує, що при  $V \neq 0$  крізь джозефсонівський контакт тече змінний струм

$$I(t) = I_0 \sin \left[ \theta_0 + \frac{2eV}{\hbar} t \right] + \frac{V}{R} + C \frac{dV}{dt}, \quad (8.8)$$

де  $\theta_0$  – початкова різниця фаз хвильових функцій  $\psi_1(\vec{r}, t)$  та  $\psi_2(\vec{r}, t)$ ,  $R$  – “нормальний” опір контакту (опір при температурі, що близька до кімнатної),  $C$  – ємність контакту. Останні два доданки в (8.8) описують струм “нормальних” електронів (електронів, що не утворили куперівські пари) та струм зміщення. Вони були додані у (8.8), щоб врахувати те, що при  $V \neq 0$  і температурі  $T > 0$  повний струм  $I$  не може переноситись тільки куперівськими парами, струм яких описується (8.6). Ми також не виписали в (8.8) доданка, що враховує індуктивність джозефсонівського контакту  $L$ , оскільки для більшості реальних контактів вона дуже мала, а тому вплив її незначний.

За аналогією із задачами №2 та №4 цього розділу, зрозуміло, що в області тунельного проміжку хвильові функції  $\psi_1(\vec{r}, t)$  та  $\psi_2(\vec{r}, t)$  будуть затухати за експоненціальним законом при віддалені від границь відповідних надпровідників.

Отже, константа  $I_0$  буде залежати від ширини тунельного проміжку за законом

$$I_0 \sim \exp\{-\alpha d\}, \quad (8.9)$$

де  $\alpha$  – константа, що залежить від матеріалу надпровідників, що утворюють контакт, від типу зарядів, що тунелюють, від геометрії контакту та ін. Для куперівських пар  $\alpha \approx 0,05 \text{ \AA}$ , що й обумовлює необхідність використання джозефсонівських контактів з товщиною тунельного прошарку  $d \leq 20 \text{ \AA}$ . В той же час електрони, які мають набагато меншу ефективну масу, можуть тунелювати при товщині тунельного прошарку  $d \sim 100 \text{ \AA}$ .

### **Задачі для самостійної роботи**

1. Визначити хвильові функції та енергетичний спектр частинки з масою  $m$  в одновимірній потенціальній ямі з абсолютно непрозорими стінками шириною  $l$  (рис. 1).
2. Знайти розподіл густини ймовірності координати частинки в одновимірній потенціальній ямі шириною  $l$  з нескінченно високими непрозорими стінками (рис. 1). Проаналізувати результат при малих значеннях квантового числа  $n$ .
3. Для частинки в одновимірній потенціальній ямі завширшки  $l$  з абсолютно непрозорими стінками знайти ймовірність її знаходження в області  $\frac{1}{4}l \leq x \leq \frac{1}{2}l$ , якщо вона перебуває в основному стані (рис. 1).
4. Використовуючи результати розв'язку задачі №2, знайти значення  $l^2 U_0$ , при якому енергія основного стану частинки дорівнює  $\frac{1}{4}U_0$ . Яка при цьому кількість рівнів енергії в ямі?
5. Частинка масою  $m$  знаходиться в одновимірній потенціальній ямі шириною  $l$  та глибиною  $U_0$  (рис. 2). Знайти кількість рівнів енергії в ямі, якщо: а)  $l^2 U_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{m}$ ; б)

$$l^2 U_0 < \frac{10\pi^2 \hbar^2}{m}. \text{ Яке мінімальне число рівнів енергії в ямі?}$$

6. Частинка знаходиться в одновимірній потенціальній ямі з абсолютно непрозорими стінками шириною  $l$  у квантовому стані  $\psi(x) = \sqrt{\frac{8}{3l}} \cos^2 \frac{\pi x}{l}$ . Знайти середнє значення кінетичної енергії частинки та ймовірність її перебування в основному стані.

7. Частинка з масою  $m$ , що знаходиться в одновимірній потенціальній ямі шириною  $l$  з абсолютно непрозорими стінками, перебуває в квантовому стані, який описується хвильовою функцією  $\psi(x) = A(x^2 - lx)$ . Знайти: а) середнє значення її координати  $\bar{x}$ ; б) середнє значення енергії  $\bar{E}$ ; в) ймовірність її перебування в стані з енергією  $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$ .

8. Частинка масою  $m$  знаходиться в потенціальному полі 
$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ 0, & 0 < x < a; \\ U_0, & x > a. \end{cases} \text{ (рис. 8). Знайти спосіб визначення}$$

дискретних рівнів енергії частинки при  $E < U_0$ . З'ясувати умову їх наявності.

9. Знайти хвильову функцію частинки в потенціальній ямі, зображеній на рис. 9. Визначити середні значення координати  $\bar{x}$  та енергії частинки  $\bar{E}$  в основному та перших двох збуджених станах.
10. Визначити коефіцієнт прозорості потенціального бар'єра, зображеного на рис. 10, для частинки з масою  $m$  та енергією  $E < U_0$ .
11. Знайти рівні енергії та нормовані хвильові функції станів дискретного спектра частинки у полі  $U(x) = -a\delta(x)$ ,  $a > 0$  (рис. 11).



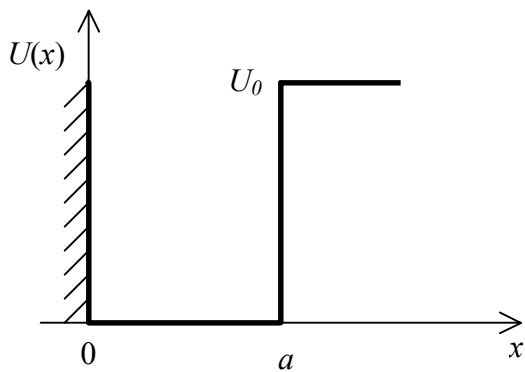


Рис. 8

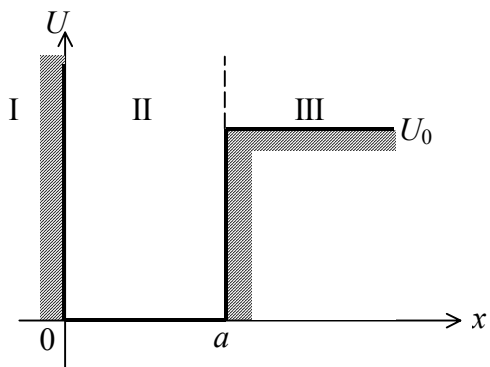


Рис. 9

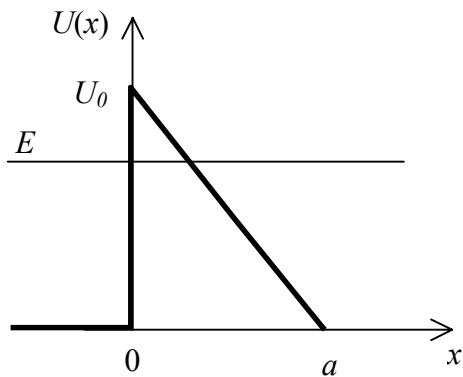


Рис. 10

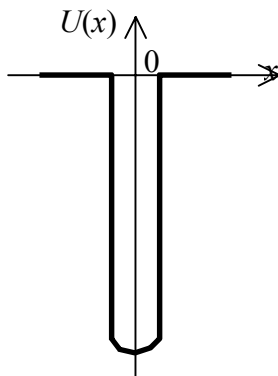


Рис. 11

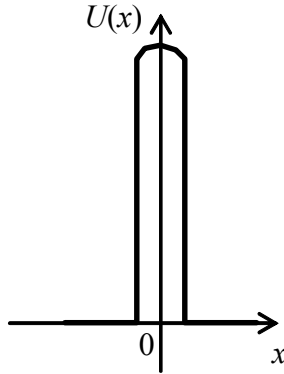


Рис. 12

12. Визначити коефіцієнти прозорості та відбиття для  $\delta$ -подібного потенціального бар'єра  $U(x) = a\delta(x)$ , якщо частинка масою  $m$  рухається вздовж осі  $x$  (рис. 12).
13. Визначити коефіцієнт прозорості потенціального бар'єра прямокутної форми висотою  $10 \text{ eV}$  та шириною  $l = 100 \text{ нм}$  для електрона та протона з кінетичною енергією  $5 \text{ eV}$ . На скільки треба змінити енергію протона, щоб ймовірність його тунелювання крізь бар'єр була такою ж, як для електрона?
14. Коефіцієнт прозорості потенціального бар'єра, зображеного на рис. 3, для електрона при  $E < U_0$  дорівнює  $0,1$ . Як він зміниться, якщо замість електрона буде відбуватися тунелювання  $\pi$ -мезона, а ширина бар'єра зменшиться в 10 разів?
15. Визначити коефіцієнт прозорості бар'єра
 
$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > a \\ U_0 \frac{x}{a}, & 0 < x < a \end{cases}$$
 для частинки масою  $m$  та енергією  $E < U_0$ .
16. Визначити хвильові функції та енергетичний спектр частинки з масою  $m$  у двовимірній ( $0 \leq x \leq l_1, 0 \leq y \leq l_2$ ) потенціальній ямі з абсолютно непрозорими стінками. Як

зміниться спектр, якщо  $\beta = l_2 / l_1$ : а) ціле число; б) раціональне число; в) ірраціональне число.

17. Визначити хвильові функції та енергетичний спектр частинки масою  $m$  у двовимірній потенціальній ямі глибиною  $U_0$  із поперечними розмірами  $l \times 3l$ , вважаючи, що частинка рухається незалежно в обох взаємно перпендикулярних напрямках всередині ями.
18. Використовуючи результати розв'язку задачі №4, доведіть формулу для коефіцієнта прозорості потенціального бар'єра довільної форми

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\}. \text{ Чому в багатьох ви-}$$

падках множник  $D_0$  у виразі для  $D$  не виписується?

19. Визначте якою повинна бути ширина  $l$  прямокутного потенціального бар'єра з висотою  $U_0/2$ , щоб його коефіцієнт прозорості дорівнював коефіцієнту прозорості трикутного бар'єра з висотою  $U_0$  та шириною  $a$ , зображеного на рис. 10.
20. Визначити хвильові функції та енергетичний спектр частинки масою  $m$  в тривимірній сферичній потенціальній ямі радіуса  $R$ , якщо стінки ями є абсолютно непрозорими.
21. Частинка масою  $m$  та енергією  $E < U_0$  починає рухатись з точки  $A(0,0)$  в точку  $B(l,l)$  крізь двовимірний потенціальний бар'єр прямокутної форми висотою  $U_0$  та шириною  $l$ . Знайти коефіцієнт прозорості бар'єра при переміщенні частинки з точки  $A$  в точку  $B$ .

### **Література**

1. Анго А. Математика для электро- и радиоинженеров. – М.: Наука, 1967. – 780 с.

## Розділ 6. ФОРМУЛА РЕЗЕРФОРДА. ТЕОРІЯ ВОДНЕПОДІБНИХ АТОМІВ БОРА-ЗОММЕРФЕЛЬДА

### Основні теоретичні відомості

При розв'язуванні задач на тему "Розсіяння частинок на центрах розсіяння" (атоми, ядра, електрони і т.д.) використовуються закони збереження енергії, імпульсу та моменту імпульсу:

$$E = \frac{m_1 v_1^2}{2} + \frac{m_2 v_2^2}{2} + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{m_1 (v'_1)^2}{2} + \frac{m_2 (v'_2)^2}{2} + U(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2), \quad (1)$$

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2, \quad (2)$$

$$[\vec{r}_1, \vec{p}_1] + [\vec{r}_2, \vec{p}_2] = [\vec{r}'_1, \vec{p}'_1] + [\vec{r}'_2, \vec{p}'_2], \quad (3)$$

де  $m_1, m_2$  – маси частинок,  $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  – їх потенціальна енергія взаємодії,  $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2$  – імпульси та радіус-вектори частинок до зіткнення,  $\vec{p}'_1, \vec{p}'_2, \vec{r}'_1, \vec{r}'_2$  – після зіткнення,  $p_1 = m_1 v_1$ ,  $p_2 = m_2 v_2$ ,  $p'_1 = m_1 v'_1$ ,  $p'_2 = m_2 v'_2$ .

Коли маси розсіяних частинок та мішені близькі, задачу розсіяння корисно розглядати в системі центра мас (центра інерції). Від лабораторної системи координат до системи центра мас переходять за допомогою формул:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad (4)$$

де  $\vec{r}$  – радіус-вектор однієї частинки відносно іншої,  $\vec{R}$  – радіус-вектор центру інерції системи.

За допомогою цих формул можна виключити з рівнянь (1)

$$- \quad (3) \quad \vec{r}_i \quad \text{та} \quad \vec{v}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt} \quad (i = 1, 2), \quad \text{вважаючи, що}$$

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|), \quad \text{і вивести закони збереження енергії } E_s$$

та моменту імпульсу  $\vec{M}_s$  в системі центра мас:

$$E_s = \frac{1}{2} \mu v^2 + U(\vec{r}) = \text{const}, \quad (5)$$

$$\vec{M}_S = [\vec{r}, \mu \vec{v}] = \text{const}, \quad (6)$$

де  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  – зведена маса обох частинок,  $\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$  – їх відносна швидкість. При записі формул (5), (6) було використано той факт, що вектор швидкості центра інерції  $\vec{v}_C = \frac{d\vec{R}}{dt}$  є сталим вектором (за величиною і за напрямком).

Формула для розсіювання двох частинок, що мають заряди  $q_1$  та  $q_2$  і взаємодіють за законом Кулона, виражає зв'язок між кутом розсіювання в системі центра мас  $\theta_S$  і "прицільною відстанню"  $b$ :

$$\text{ctg} \frac{\theta}{2} = \frac{2b}{d_m} \quad \text{або} \quad \text{tg} \frac{\theta}{2} = \frac{d_m}{2b}, \quad (7)$$

$b$  – "прицільна відстань" – відстань до мішені, на якій би пролетіла частинка, якби не було взаємодії (див. рис. 1),  $d_m$  – мінімальна відстань, на яку може підійти частинка до мішені при лобовому зіткненні.

У випадку розсіювання  $\alpha$ -частинок на важких ядрах,  $d_{\min}$  можна знайти з умови:

$$E_{k\alpha} = E_p = \frac{2Ze^2}{d_{\min}}, \quad (8)$$

звідки

$$d_{\min} = \frac{2Ze^2}{E_{k\alpha}}, \quad (9)$$

де  $E_{k\alpha}$  – кінетична енергія  $\alpha$ -частинки, заряд  $\alpha$ -частинки  $2e$ ,  $Ze$  – заряд ядра.

Кут розсіювання частинок на ядрах визначається за формулою

$$\text{tg} \frac{\theta_S}{2} = \frac{q_1 q_2}{2b E_S}, \quad (10)$$

де  $E_S$  – кінетична енергія частинки, що розсіюється, в системі центра мас. Цю формулу неможливо підтвердити експериме-

нтально, оскільки параметр  $b$  недоступний для вимірювання.

Для чисельних оцінок ефективності розсіяння частинок використовують формулу Резерфорда, що дає вираз для диференціального перерізу розсіяння:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN}{N \cdot n} = \left( \frac{q_1 q_2}{4E_s} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (11)$$

Ймовірність розсіяння частинок на одному центрі розсіяння розраховується в межах тілесного кута  $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ , що визначається відносним отвором (апертурою) детектора, що застосовується в досліді. У (11)  $N$  – кількість частинок в первинному потоці за час  $t$ ,  $dN$  – кількість розсіяних частинок, що збираються детектором в тілесному куті  $d\Omega$  за час  $t$ ,  $n$  – число розсіюючих ядер в  $1 \text{ см}^3$  ( $n = \frac{N_A}{A} \cdot \rho$ ,  $\rho$  – густина мішені,  $A$  – атомна маса,  $N_A$  – число Авогадро).

З (11) випливає, що

$$dN \cdot \sin^4 \frac{\theta}{2} = n \cdot N \left( \frac{q_1 q_2}{4E_s} \right)^2 d\Omega. \quad (12)$$

Якщо в умовах експерименту  $n, N, E_s, \Omega$  є сталими величинами, то при зміні кута  $\theta$ , повинна виконуватись умова

$$dN \cdot \sin^4 \frac{\theta}{2} = \text{const}. \quad (13)$$

Саме формула (13), у першу чергу, перевірялась у дослідях Резерфорда.

Формула Резерфорда дозволяє визначити заряд ядра за формулою (12).

Для порівняння теорії з експериментом часто застосовують макроскопічний переріз  $\Sigma$ , тобто суму перерізів всіх розсіюючих ядер в  $1 \text{ см}^3$ . Якщо вважати, що ядра-мішені розподілені рівномірно, то

$$\Sigma = n \cdot d\sigma = n \left( \frac{q_1 q_2}{4E_s} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (14)$$

Середнє число частинок, що розсіялися під кутом  $\theta$  в межах тілесного кута  $d\Omega$  за час  $t$  дорівнює

$$dN = N\Sigma = nN \left( \frac{q_1 q_2}{4E_s} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (15)$$

де  $N$  – кількість частинок, що потрапили на мішень за час  $t$ .

Якщо одна з частинок (наприклад, друга) до зіткнення була нерухомою, то енергія частинок у системі центра інерції

$$E_s = \frac{m_2}{m_1 + m_2} E = \frac{A_2}{A_1 + A_2} E, \quad (16)$$

де  $E$  – енергія частинки, що налітає,  $A_1$  та  $A_2$  – відповідно атомні маси частинки, що розсіюється, та атомів мішені.

Підкреслимо також, що чим менша маса частинки, що налітає, порівняно з масою атома мішені, тим з більшою точністю можна нехтувати різницею між величинами в системі центра інерції і в лабораторній системі: кути розсіяння і енергії в обох системах будуть приблизно однакові. В задачах можна переходити від енергії  $E_s$  до  $E$  за допомогою формули (16). Цього можна не робити, якщо  $m_1 < m_2$ .

Якщо на рух частинки накласти умову квантування Бора-Зоммерфельда

$$\oint p dq = nh, \quad (17)$$

то її енергія буде дискретною, і рух частинки стає квантованим. Інтеграл (17) береться за період руху,  $p, q$  – узагальнені імпульс та координата частинки

$$p = \sqrt{2m(E - U(q))}, \quad (18)$$

$E$  – її повна енергія,  $U(q)$  – потенціальне поле, в якому рухається частинка.

Під час переходу між енергетичними рівнями в атомі випромінюється або поглинається квант світла, частота якого визначається з умови частот Бора:

$$\omega = \frac{E_i - E_k}{\hbar}, \quad (19)$$

$E_i, E_k$  – енергії початкового та кінцевого станів атома, відпо-

відно.

Для атома водню та воднеподібних іонів із зарядом ядра  $Ze$  повна енергія електрона на  $n$ -й борівській орбіті дорівнює

$$E_n = -\frac{Z^2 m_0 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -hc \frac{Z^2 R_\infty}{n^2}, \quad (20)$$

де  $R_\infty$  – стала Рідберга в наближенні нескінченної маси ядра:

$$R_\infty = \frac{m_0 e^4}{4\pi\hbar^3 c}. \quad (21)$$

Радіус  $n$ -ї борівської орбіти дорівнює:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Z m_0 e^2}. \quad (22)$$

Швидкість руху електрона на борівській орбіті становить

$$v_n = \frac{Ze^2}{n\hbar}. \quad (23)$$

Для спектральних серій, що спостерігаються в атомі водню та воднеподібних іонах, використовують формулу Бальмера

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_\infty Z^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right), \quad (24)$$

де  $\tilde{\nu}$  – хвильове число ( $\text{см}^{-1}$ ),  $k = n+1, n+2, \dots, \infty$ .

Якщо враховувати скінченність маси ядра, стала Рідберга визначатиметься за формулою

$$R = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m_0}{M}}, \quad (25)$$

де  $M$  – маса ядра.

### **Методичні вказівки та поради**

1. При розв'язуванні задач на зіткнення та розсіяння частинок слід пам'ятати, що енергія та кут розсіяння у формулах (7), (10)–(11), (14)–(15) визначені в системі центра мас (центра інерції). Тому при розв'язуванні задачі насамперед треба з'ясувати, в якій системі координат (лабораторній чи центра інерції) задано енергію або швидкість частинок, що розсіюються, а також кути розсіяння.



2. Якщо ці величини задано в лабораторній системі координат, то, загалом кажучи, треба зробити перехід до відповідних величин у системі центра інерції, наприклад, за допомогою формули (16). Такий перехід можна не робити лише тоді, коли розглядається розсіювання легких частинок на важких ядрах. У цьому випадку можна користуватись лабораторною системою відліку (системою відліку, пов'язаною з вимірювальними приладами).
3. В задачах на формулу Резерфорда не враховуються релятивістські ефекти ( $v \ll c$ ) та хвильові властивості частинок, що розсіюються ( $\lambda_B \ll r_A$ ). Формулу Резерфорда не можна застосовувати при малих кутах відхилення  $\theta_{s0}$  ( $\sim 3^\circ$ ), оскільки при виводі формули не враховувалась взаємодія заряджених частинок з електронною оболонкою атомів. Також формулу Резерфорда не можна застосовувати при розсіянні частинок ядрами на відстанях менших за  $10^{-12}$  см, оскільки на цих відстанях є різні відхилення від закону Кулона (радіус дії ядерних сил  $1,7 \cdot 10^{-13}$  см).
4. Якщо треба знайти параметри розсіювання для кутів  $\theta_s \leq \theta_{s0}$ , використовують наступний штучний прийом. Вважають, що ймовірність розсіювання  $P(\theta_s \leq \theta_{s0})$  на кути  $\theta_s \leq \theta_{s0}$  разом з ймовірністю розсіювання  $P(\theta_s > \theta_{s0})$  на кути  $\theta_s > \theta_{s0}$  дають одиницю (тобто розсіювання на довільний кут є достовірною подією). Таким чином, маємо залежність:  $P(\theta_s \leq \theta_{s0}) = 1 - P(\theta_s > \theta_{s0})$ , де ймовірність  $P(\theta_s > \theta_{s0})$  можна знайти, використавши формулу Резерфорда.
5. Якщо мішень є сполукою, що складається з атомів різних сортів, то диференціальний ефективний переріз розсіювання атомів такої мішені дорівнюватиме  $d\sigma = c_1 d\sigma_1 + c_2 d\sigma_2 + c_3 d\sigma_3 + \dots$ , де  $c_i$  – відносна концентрація атомів  $i$ -сорту,  $d\sigma_i$  – їх переріз розсіювання для даного процесу. Завдяки (12) аналогічну формулу будемо мати й для інтегрального ефективного перерізу розсіювання  $\Sigma$ :  $\Sigma = c_1 \Sigma_1 + c_2 \Sigma_2 + c_3 \Sigma_3 + \dots$ , де  $\Sigma_i$  – інтегральний переріз роз-

сіяння для атомів  $i$ -сорту;

6. З умови квантування Бора-Зоммерфельда можна знаходити дозволені рівні енергії та інші характеристики руху мікрочастинок (див. задачі 4,5,6);
7. Формули теорії атома Бора містять багато фізичних констант, тому при обчисленні доцільно користуватись відомими комбінаціями цих величин та їх числовими значеннями. Наприклад, радіус  $n$ -ї борівської орбіти можна обчислювати за такими формулами:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Z m_0 e^2} = \frac{a_0 n^2}{Z} = \frac{\Lambda_c n^2}{2\pi Z \alpha}, \quad (26)$$

де  $a_0$  – борівський радіус,  $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2} = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$  в СГС;

$a_0 = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_0 e^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}$  в системі СІ,  $\alpha$  – стала тонкої

структури,  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,03}$  в системі СГС і

$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,03}$  в системі СІ, комптонівська довжина

хвилі електрона  $\Lambda_c = \frac{h}{m_0 c} = 2,426 \cdot 10^{-10} \text{ см}$ .

8. З формули Бальмера (24) можна визначити довжини хвиль спектральних ліній та границь спектральних серій, перевірити комбінаційний принцип Рідберга-Рітца [2, 7].
9. Якщо джерелом випромінювання є суміш ізотопів, то в спектрах спостерігається ізотопічна структура спектральних ліній, яка обумовлена різними масами атомних ядер. У цьому випадку при розрахунках довжин хвиль потрібно користуватись формулою (24), де стала Рідберга має вигляд (25).

### **Приклади розв'язування задач**

**Задача №1.** На яку мінімальну відстань наблизиться  $\alpha$ -

частинка з кінетичною енергією  $E_K$  (в системі центра інерції) до ядра атома елемента з порядковим номером  $Z$ , якщо вона розсіюється на кут  $\theta$ , а прицільний параметр дорівнює  $b$  (Рис. 1)? Чому буде дорівнювати модуль приросту вектора імпульсу  $\alpha$ -частинки при розсіюванні, якщо  $Z \gg 2$ ? При якому значенні  $E_K$  модуль приросту вектора імпульсу розсіяної  $\alpha$ -частинки буде максимальним для даного прицільного параметра? Який буде при цьому кут розсіювання?

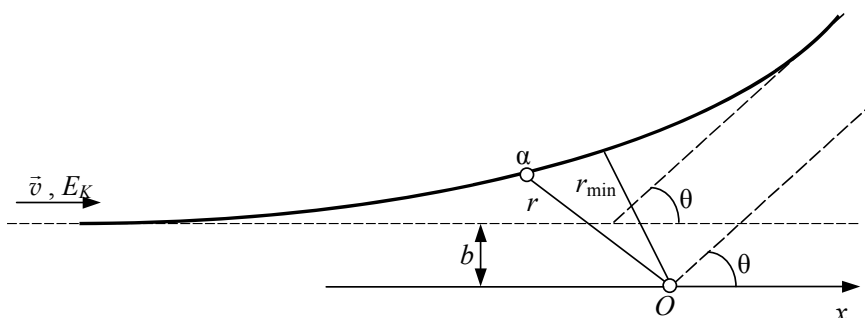


Рис. 1. Розсіювання  $\alpha$ -частинки на ядрі атома, що знаходиться в точці  $O$ .  $\vec{v}$ ,  $E_K$  – вектор швидкості та кінетична енергія  $\alpha$ -частинки,  $b$  – прицільний параметр,  $\theta$  – кут розсіювання

**Розв’язок:** Першу частину даної задачі можна розв’язати різними способами.

**Перший спосіб.** Скористаємось законом збереження енергії (1), вважаючи, що при максимальному наближенні  $\alpha$ -частинки до ядра атома на відстань  $r_{\min}$  її кінетична енергія  $E_K$  повністю переходить у потенціальну енергію взаємодії двох зарядів  $U \equiv E_p$ :

$$E_p = \frac{qQ}{r_{\min}}, \quad (1.1)$$

де  $q = 2e$  – заряд  $\alpha$ -частинки,  $Q = Ze$  – заряд ядра атома, на який налітає  $\alpha$ -частинка,  $e$  – модуль заряду електрона. Враховуючи, що в цьому випадку  $E_p = E_K$ , легко одержати вираз для мінімальної відстані між  $\alpha$ -частинкою та ядром атома при лобовому зіткненні:

$$r_{\min} = \frac{qQ}{E_K}. \quad (1.2)$$

Оцінімо цю відстань на прикладі  $\alpha$ -частинки з кінетичною енергією  $E_K = 40 \text{ кеВ}$ , що налітає на ядро атома золота ( $Z = 79$ ):

$$r_{\min} = \frac{2 \cdot 79 \cdot (4,8 \cdot 10^{-10})^2}{40 \cdot 10^3 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}} = 5,688 \cdot 10^{-10} \text{ см} \approx 5,7 \text{ нм}. \quad (1.3)$$

Недоліком цього способу визначення  $r_{\min}$  є те, що ми зовсім не враховуємо такі параметри розсіювання, як  $\theta$  та  $b$ .

**Другий спосіб.** Припустимо, що система  $\alpha$ -частинка – ядро є замкненою системою, в якій виконується закон збереження імпульсу (2). Таке наближення, як правило, виконується, якщо відбувається зіткнення  $\alpha$ -частинки з ядром атома легкого елемента.

Дійсно, в цьому випадку другий закон Ньютона може бути записаний у вигляді

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}, \quad (1.4)$$

де  $\vec{p}$  – вектор імпульсу однієї з взаємодіючих частинок,  $\vec{F}$  – сила Кулона ( $\sim 2Ze^2$ ), що діє на одну частинку з боку іншої. Якщо порядковий номер  $Z$  ядра атома настільки малий, що зміна потенціальної енергії взаємодії  $E_p$  двох зарядів, що пов'язана з силою  $\vec{F}$  відомим співвідношенням

$$\vec{F} = -\frac{\partial E_p}{\partial \vec{r}}, \quad (1.5)$$

де  $\vec{r}$  – радіус-вектор, буде малою, порівняно з кінетичною

енергією  $E_K$ , то в цьому випадку можна знехтувати порушенням закону збереження імпульсу (2). На практиці це наближення, як правило, використовують, якщо  $Z < 10$ .

В нашому випадку закони збереження енергії (1) та імпульсу (2) можуть бути записані таким чином

$$p_\alpha = p',$$

$$E_{K\alpha} = E'_K + \frac{qQ}{r_{\min}}, \quad (1.6)$$

де врахована та обставина, що в момент максимального наближення  $\alpha$ -частинки до ядра, система  $\alpha$ -частинка – ядро рухається як єдине ціле; індексом  $\alpha$  позначаються величини, що відносяться до  $\alpha$ -частинки, а штрихом – величини, що відносяться до системи  $\alpha$ -частинка – ядро;  $E_{K\alpha} \equiv E_K$ . Враховуючи, що

$$E_{K\alpha} = \frac{p_\alpha^2}{2m}, \quad E'_K = \frac{(p')^2}{2(m+M)}, \quad (1.7)$$

де  $m$  – маса  $\alpha$ -частинки,  $M$  – маса ядра, закон збереження імпульсу можна переписати у вигляді

$$mE_{K\alpha} = (m+M)E'_K. \quad (1.8)$$

Комбінуючи (1.8) з другим рівнянням (1.6), що описує закон збереження енергії, отримаємо систему з двох рівнянь з двома невідомими

$$\begin{cases} mE_{K\alpha} = (m+M)E'_K \\ E_{K\alpha} = E'_K + \frac{qQ}{r_{\min}} \end{cases}, \quad (1.9)$$

з якої легко отримати вираз для  $r_{\min}$ :

$$r_{\min} = \frac{qQ}{E_K} \left( 1 + \frac{m}{M} \right) = 2 \frac{Ze^2}{E_K} \left( 1 + \frac{m}{M} \right). \quad (1.10)$$

Оцінімо цю відстань на прикладі  $\alpha$ -частинки з кінетичною енергією  $E_K = 40 \text{ кеВ}$ , що розсіюється на ядрі атома  ${}^7\text{Li}$  ( $Z = 3$ ), яке спочатку знаходилось в стані спокою. В цьому випадку:

$$r_{\min} = \frac{2 \cdot 3 \cdot (4,8 \cdot 10^{-10})^2}{40 \cdot 10^3 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}} \left(1 + \frac{4}{7}\right) = 3,39 \cdot 10^{-11} \text{ см} \approx 0,34 \text{ нм}. \quad (1.11)$$

Недоліком такого способу визначення відстані  $r_{\min}$  є те, що ми не враховуємо параметр  $b$ , тобто фактично розглядаємо випадок центрального зіткнення  $\alpha$ -частинки з ядром.

Третій спосіб. Якщо  $\alpha$ -частинка розсіюється на ядрі важкого елемента, або відбувається нецентральне зіткнення, причому  $b \geq R_0$ , де  $R_0$  – радіус ядра, то два попередні способи визначення  $r_{\min}$  призводять до суттєвої похибки.

У цьому випадку не можна записати закон збереження імпульсу подібно до (16), оскільки умова  $E_K \gg \Delta E_p$  не виконується. Але можна скористатися законом збереження моменту імпульсу. Дійсно, будемо розглядати моменти імпульсу всіх тіл, що беруть участь у взаємодії, відносно центра ядра важкого елемента. В цьому випадку плече сили Кулона, що діє між зарядженими частинками буде нульовим і закон збереження моменту імпульсу (3) можна буде записати у вигляді:

$$bv = r_{\min} v', \quad (1.12)$$

де враховано, що при максимальному наближенні до ядра швидкість  $\vec{v}$   $\alpha$ -частинки буде перпендикулярна її радіус-вектору відносно центра ядра;  $v$  – початкова швидкість  $\alpha$ -частинки далеко від ядра,  $v'$  – її швидкість в момент максимального наближення до ядра.

Вважаючи ядро нерухомим, закон збереження енергії (1) запишемо таким чином:

$$E_K = E'_K + \frac{qQ}{r_{\min}}. \quad (1.13)$$

З обох рівнянь (1.12) та (1.13) поклавши

$$E_K = \frac{mv^2}{2}, \quad E'_K = \frac{m(v')^2}{2}, \quad (1.14)$$

легко отримати квадратне рівняння відносно  $r_{\min}$ :

$$E_K r_{\min}^2 - qQr_{\min} - b^2 E_K = 0. \quad (1.15)$$

Воно має єдиний фізичний розв'язок

$$r_{\min} = \frac{qQ + \sqrt{(qQ)^2 + 4b^2 E_K^2}}{2E_K} = \frac{qQ}{2E_K} \left( 1 + \sqrt{1 + \operatorname{ctg}^2 \frac{\theta}{2}} \right), \quad (1.16)$$

де враховано (9).

Отриманий розв'язок описує не тільки ефект розсіюння  $\alpha$ -частинки з великим прицільний параметром  $b$ , а й випадок центрального зіткнення. Дійсно, якщо  $b = 0$ , то із зв'язку  $b$  і  $\theta$  (9) випливає, що  $\theta = \pi$ . У цьому випадку, для  $\alpha$ -частинки з кінетичною енергією  $E_K = 40 \text{ кеВ}$ , що розсіюється на ядрі атома золота ( $Z = 79$ ), одержуємо:

$$\begin{aligned} r_{\min} &= \frac{2 \cdot 79 \cdot (4,8 \cdot 10^{-10})^2}{2 \cdot 40 \cdot 10^3 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}} \left( 1 + \sqrt{1 + \operatorname{ctg}^2 \frac{\pi}{2}} \right) = \\ &= 5,688 \cdot 10^{-10} \text{ см} \approx 5,7 \text{ нм}, \end{aligned} \quad (1.17)$$

тобто той же самий результат, що й в (1.3) при застосуванні першого методу розв'язку.

Розглянемо тепер питання про модуль приросту вектора імпульсу розсіяної  $\alpha$ -частинки  $\Delta p = |\Delta \vec{p}|$ . Оскільки, за умовою задачі  $Z \gg 2$ , це означає, що ми розглядаємо розсіюння  $\alpha$ -частинок на важкому ядрі. Отже, можемо вважати, що після розсіювання  $\alpha$ -частинки на ядрі воно залишається нерухомим. Побудуємо векторну діаграму імпульсів (рис. 2), де  $\vec{p}$  – імпульс  $\alpha$ -частинки до зіткнення,  $\vec{p}'$  – після зіткнення. Оскільки ядро нерухоме, то  $p = p'$  і з рівнобедреного трикутника імпульсів маємо вираз для  $\Delta p$ :

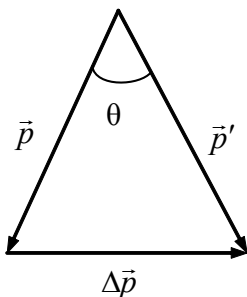


Рис. 2. Векторна діаграма імпульсів  $\alpha$ -частинки, розсіяної на кут  $\theta$

$$\Delta p = 2p \sin \frac{\theta}{2}. \quad (1.18)$$

Скориставшись співвідношеннями  $p = \sqrt{2mE_K}$ ,  $\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = \frac{qQ}{2bE_K}$ , перепишемо вираз для  $\Delta p$  у

вигляді

$$\Delta p = \frac{2p}{\sqrt{1 + \frac{1}{\operatorname{tg}^2 \frac{\theta}{2}}}} = \frac{2\sqrt{2mE_K}}{\sqrt{1 + \left(\frac{2bE_K}{qQ}\right)^2}} = \sqrt{\frac{8mE_K}{1 + \left(\frac{bE_K}{Ze^2}\right)^2}}. \quad (1.19)$$

Знайдемо тепер при якому значенні кінетичної енергії  $E_{K \max}$  модуль приросту вектора імпульсу розсіяної  $\alpha$ -частинки  $\Delta p$  буде максимальним. Дослідимо функцію (1.19) на екстремум:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta p}{\partial E_K} &= \frac{1}{2 \sqrt{\frac{8mE_K}{1 + \left(\frac{bE_K}{Ze^2}\right)^2}}} \times \\ &\times \frac{8m \left[ 1 + \left(\frac{bE_K}{Ze^2}\right)^2 \right] - 16mE_K^2 \left(\frac{b}{Ze^2}\right)^2}{\left[ 1 + \left(\frac{bE_K}{Ze^2}\right)^2 \right]^2} = 0, \end{aligned} \quad (1.20)$$

звідки випливає, що

$$E_{K \max}^2 \left(\frac{b}{Ze^2}\right)^2 = 1, \quad (1.21)$$

тобто

$$E_{K \max} = \frac{Ze^2}{b}. \quad (1.22)$$

При цьому кут розсіювання  $\theta_{\max}$  можна знайти як

$$\theta_{\max} = 2 \operatorname{arctg} \left( \frac{qQ}{2bE_{K \max}} \right) = 2 \operatorname{arctg} 1 = \frac{\pi}{2}. \quad (1.23)$$

**Задача №2.** Вузький пучок  $\alpha$ -частинок з кінетичною енергією  $E_K = 1,00 \text{ MeV}$  падає нормально на золоту фольгу товщиною  $l = 1 \text{ мкм}$ . Потік частинок  $I = 3,6 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$ . Знайти



кількість  $\alpha$ -частинок, розсіяних фольгою протягом часу  $\tau = 2,0$  хв. під кутами: а) в інтервалі  $59^\circ - 61^\circ$ ; б)  $\theta < 60^\circ$ .

**Розв'язок:** В умові задачі не сказано, що числові дані наведені в системі центра інерції, це означає, що дані відносяться до лабораторної системи координат. Цю обставину однак, можна проігнорувати, оскільки маса  $\alpha$ -частинки набагато менша за масу атома золота, а тому відповідними похибками можна знехтувати. Далі будемо розв'язувати задачу так, ніби то її умови записані в системі центра інерції.

а) За час  $\tau = 120$  с на фользі розсіється

$$N = I\tau \quad (2.1)$$

$\alpha$ -частинок. Відповідно до формули Резерфорда (13) їх кількість, що розсіюється під кутами від  $\theta$  до  $\theta + d\theta$ , буде

$$dN(\theta) = 2\pi nN \left( \frac{qQ}{4E_\kappa} \right)^2 \frac{\sin \theta d\theta}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (2.2)$$

де враховано, що  $d\Omega_s = \sin \theta d\theta d\varphi$ , а інтеграл від  $d\Omega_s$  по азимутальному куту  $\varphi$  дорівнює  $2\pi$ .

Оскільки нам невідомі всі розміри мішені (відома лише її товщина), то величину  $n$ , що входить до попередньої формули слід розуміти як концентрацію атомів на одиницю поверхні мішені. Цю величину за допомогою (15) оцінимо як

$$n = \frac{\rho l}{M}, \quad (2.3)$$

де  $\rho$  – густина золота,  $M$  – маса атома золота. Тоді кількість частинок, що розсіялися за час  $\tau$  в інтервалі кутів  $59^\circ - 61^\circ$ , буде

$$\Delta N = 2\pi \frac{\rho l}{M} N \left( \frac{qQ}{4E_\kappa} \right)^2 \int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{\sin \theta d\theta}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (2.4)$$

де  $\theta_1 = \frac{59\pi}{180}$ ,  $\theta_2 = \frac{61\pi}{180}$ . Інтеграл

$$I(\theta_1, \theta_2) = \int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{\sin \theta d\theta}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = 4 \int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{d\left(\sin \frac{\theta}{2}\right)}{\sin^3 \frac{\theta}{2}} \quad (2.5)$$

у виразі для  $\Delta N$  легко обчислити чисельно – його значення дорівнює 0,484 . І, отже, остаточно маємо

$$\begin{aligned} \Delta N = 6.28 \frac{19,3 \cdot 10^{-4}}{197 \cdot 1,66 \cdot 10^{-24}} 3,6 \cdot 10^4 \cdot 120 \times \\ \times \left( \frac{2 \cdot 79 \cdot (4,8 \cdot 10^{-10})^2}{4 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}} \right)^2 0,484 = 2507. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Хоча ми чисельно знайшли значення інтеграла  $I(\theta_1, \theta_2)$ , на практиці це не завжди є можливим, тому корисно проілюструвати інший, наближений спосіб розв'язання подібних задач. Для цього треба скористатись формулою прямокутників, а саме, замінити  $I(\theta_1, \theta_2)$  на вираз для площі прямокутника,

сторони якого дорівнюють  $\frac{\sin \theta_0}{\sin^4 \frac{\theta_0}{2}}$  та  $\Delta \theta = \theta_2 - \theta_1$  :

$$I(\theta_1, \theta_2) = \int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{\sin \theta d\theta}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \frac{\sin \theta_0}{\sin^4 \frac{\theta_0}{2}} \Delta \theta, \quad (2.6)$$

де  $\theta_0 = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} = \frac{\pi}{3}$  . Підставляючи числові значення, отрима-

ємо  $I(\theta_1, \theta_2) \approx 0,484$  , тобто цей метод, не зважаючи на зроблені наближення, є достатньо точним.

**б)** В цьому випадку не можна безпосередньо використати формулу Резерфорда так, як це було зроблено раніше, оскільки ця формула не виконується для кутів, менших за  $3^\circ$  . Тому шукану кількість частинок  $\Delta N$  представимо у вигляді

$$\Delta N = N - nN\sigma(\theta_0), \quad (2.7)$$

де  $\sigma(\theta_0)$  – ефективний переріз розсіяння, що відповідає розсіянню  $\alpha$ -частинок під кутами  $\theta \geq \theta_0$ . Величину  $\sigma(\theta_0)$  наближено можна представити у вигляді

$$\sigma(\theta_0) \approx \pi b_0^2, \quad (2.8)$$

де  $b_0$  – прицільний параметр, що відповідає куту розсіяння  $\theta_0$ . Дійсно, при зменшенні прицільного параметра  $b$  кут розсіяння  $\theta$ , відповідно до формули (9), збільшується, отже малим кутам розсіяння відповідають найбільші значення ефективного перерізу розсіяння.

Значенню кута розсіяння  $\theta = \theta_0$  відповідає прицільний параметр

$$b_0 = \frac{Ze^2}{E_K \operatorname{tg} \frac{\theta_0}{2}}. \quad (2.9)$$

Тоді шукана кількість розсіяних частинок

$$\begin{aligned} \Delta N &= I\tau \left[ 1 - \frac{\rho l}{M} \pi \frac{Z^2 e^4}{E_K^2 \operatorname{tg}^2 \frac{\theta_0}{2}} \right] = \\ &= 3,6 \cdot 10^4 \cdot 120 \left[ 1 - \frac{19,3 \cdot 10^{-4}}{197 \cdot 1,66 \cdot 10^{-24}} \cdot 3,14 \left( \frac{2 \cdot 79 \cdot (4,8 \cdot 10^{-10})^2}{3^{-1/2} \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}} \right)^2 \right] \approx \\ &\approx 4,2 \cdot 10^6. \end{aligned} \quad (2.10)$$

**Задача №3.** Плівка-мішень зі сплаву берилію й алюмінію (їх вагове співвідношення у сплаві  $Be:Al = 4:1$ ) масової товщини  $\rho l = 1 \text{ мг/см}^2$  бомбардується дейтронами (ядра ми дейтерію;  $Z_D = 1$ ,  $A_D = 2$ ) з енергією  $E_K = 2 \text{ MeB}$  (у лабораторній системі координат). Визначити відносну кількість частинок, що розсіялися на кути  $\theta_s$  більші за  $\theta_{s0} = 90^\circ$ .

**Розв'язок:** Маса атомів берилію ( $A_{Be} = 9$ ) лише в 4,5 рази більша за масу дейтрону, тому при розв'язку цієї задачі не можна вважати, що маса частинки, що налітає на атом нескінченно мала, порівняно з масою самого атома. І, отже, для розв'язання задачі необхідно перейти від лабораторної системи координат (в якій задано енергію іонів  $E_K$ ) до системи центра інерції. При цьому кінетична енергія дейтронів вже не буде дорівнювати  $E_K$ , а буде визначатись як

$$E_S = \frac{M}{m + M} E_K, \quad (3.1)$$

де  $m$  – маса дейтрону,  $M$  – маса атома, на якому відбувається процес розсіювання іонів дейтерію. Переходячи від абсолютних одиниць до відносних, будемо мати:

$$E_S = \frac{A}{A_D + A} E_K, \quad (3.2)$$

де  $A$  – атомна маса атома на якому відбувається процес розсіювання.

Природно припустити, що розсіювання на атомах берилію та алюмінію відбувається незалежно. Тоді враховуючи, що атомні маси берилію та алюмінію, відповідно, дорівнюють  $A_{Be} = 9$ ,  $A_{Al} = 27$ , для енергій дейтронів при розсіюванні на атомах берилію та алюмінію, одержимо:

$$E_{Be} = \frac{A_{Be}}{A_D + A_{Be}} E_K = \frac{9}{2 + 9} \cdot 2 \cdot 10^6 \approx 1,64 \text{ MeV}, \quad (3.3)$$

$$E_{Al} = \frac{A_{Al}}{A_D + A_{Al}} E_K = \frac{27}{2 + 27} \cdot 2 \cdot 10^6 \approx 1,86 \text{ MeV}. \quad (3.4)$$

Відносна кількість частинок, що розсіялись у тілесний кут  $d\Omega$  атомами мішені одного сорту, дорівнює ймовірності розсіювання на шляху  $l$  у напрямку  $d\Omega$ :

$$\frac{dN}{N} = dP = \frac{N_a \rho l}{A_a} \left( k \frac{Z_a Z_1 e^2}{4E_S} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta_S}{2}}, \quad (3.5)$$

де  $N$  – загальна кількість частинок,  $Z_a$ ,  $A_a$  – порядковий но-

мер атома та його атомна маса.

Оскільки за умовою задачі мішень являє собою сплав, то повне відносне число розсіяних частинок  $\eta$  можна записати як суму двох доданків, кожен з яких відповідає за незалежне розсіяння іонів дейтерію на атомах берилію та алюмінію:

$$\eta = \int (0,8dP_{Be} + 0,2dP_{Al}). \quad (3.6)$$

Таким чином,

$$\begin{aligned} \eta &= 0,8 \frac{N_{Al}\rho l}{A_{Be}} \left( \frac{Z_{Be}Z_De^2}{4E_{Be}} \right)^2 \int \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta_S}{2}} + \\ &+ 0,2 \frac{N_{Al}\rho l}{A_{Al}} \left( \frac{Z_{Al}Z_De^2}{4E_{Al}} \right)^2 \int \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta_S}{2}} = \\ &= N_{Al}\rho l \left( \frac{Z_De^2}{4} \right)^2 \left[ \frac{0,8}{A_{Be}} \left( \frac{Z_{Be}}{E_{Be}} \right)^2 + \frac{0,2}{A_{Al}} \left( \frac{Z_{Al}}{E_{Al}} \right)^2 \right] \int \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta_S}{2}}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Обчислимо інтеграл у наведеній формулі, враховуючи, що  $d\Omega = \sin \theta_S d\theta_S d\varphi$ :

$$\begin{aligned} I(\theta_{S0}) &= \int \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta_S}{2}} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\theta_{S0}}^{\pi} \frac{\sin \theta_S}{\sin^4 \frac{\theta_S}{2}} d\theta_S = 2\pi \int_{\theta_{S0}}^{\pi} \frac{4 \sin \theta_S}{(1 - \cos \theta_S)^2} d\theta_S = \\ &= 8\pi \int_{-1}^{\cos \theta_{S0}} \frac{dx}{(1-x)^2} = 4\pi \operatorname{ctg}^2 \frac{\theta_{S0}}{2}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Тоді для відносної кількості частинок  $\eta$  остаточно одержуємо вираз:

$$\eta = 4\pi N_{Al}\rho l \operatorname{ctg}^2 \frac{\theta_{S0}}{2} \left( \frac{Z_De^2}{4} \right)^2 \left[ \frac{0,8}{A_{Be}} \left( \frac{Z_{Be}}{E_{Be}} \right)^2 + \frac{0,2}{A_{Al}} \left( \frac{Z_{Al}}{E_{Al}} \right)^2 \right]. \quad (3.9)$$

Підставляючи сюди відповідні значення параметрів, знаходимо:

$$\eta = 4 \cdot 3,14 \cdot 6 \cdot 10^{23} \cdot 10^{-3} \cdot 1^2 \left( \frac{1 \cdot (4,8 \cdot 10^{-10})^2}{4} \right)^2 \times$$

$$\times \left[ \frac{0,8}{9} \left( \frac{4}{1,64 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}} \right)^2 + \frac{0,2}{27} \left( \frac{13}{1,86 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}} \right)^2 \right] \approx$$

$$\approx 8,68 \cdot 10^{-9} . \quad (3.10)$$

**Задача №4.** Частинка масою  $m$  вертикально падає на горизонтальну пластину і пружно від неї відбивається. Які можливі висоти  $H_n$  та рівні енергії такої частинки, якщо на її рух накладено умову Бора-Зоммерфельда?

**Розв'язок:** Введемо позначення:  $p$  – імпульс частинки,  $z$  – координата, яка відраховується від поверхні пластини. Повна енергія частинки:

$$E = \frac{p^2}{2m} + mgz = mgH , \quad (4.1)$$

де  $H$  – початкова висота, на якій знаходиться частинка. З рівняння (4.1) знаходимо імпульс:

$$p = \pm \sqrt{2m(E - mgz)} . \quad (4.2)$$

Запишемо умову квантування:

$$\oint pdz = 2 \int_0^H \sqrt{2m(E_n - mgz)} dz = nh , \quad (4.3)$$

де двійка перед інтегралом враховує умову пружного відбивання. Далі отримуємо

$$nh = 2\sqrt{2mE_n} \int_0^H \sqrt{1 - \frac{mgz}{E_n}} dz = \frac{4\sqrt{2}E_n^{3/2}}{3g\sqrt{m}} . \quad (4.4)$$

З (4.4) знаходимо вирази для енергії  $E_n$  та висоти  $H_n$ :

$$E_n = \left( \frac{3\sqrt{mghn}}{4\sqrt{2}} \right)^{\frac{2}{3}} , \quad H_n = \left( \frac{3nh}{4m\sqrt{2g}} \right)^{\frac{2}{3}} . \quad (4.5)$$

**Задача №5.** Знайти за допомогою борівської умови квантування дозволіні рівні енергії частинки маси  $m$ , що рухається: а) в одновірній прямокутній потенціальній ямі шириною  $l$  з нескінченно високими стінками; б) в одновірному потенціальному полі  $U = \kappa x^2 / 2$  (гармонічний осцилятор).

**Розв'язок:** а) В межах потенціальної ями  $U = 0$ , тому повна енергія частинки дорівнюватиме:

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (5.1)$$

Умова квантування Бора-Зоммерфельда в цьому випадку матиме вигляд:

$$2 \int_0^l p dx = nh. \quad (5.2)$$

Звідси знаходимо дозволіні рівні енергії:

$$2l\sqrt{2mE_n} = nh \Rightarrow E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8l^2 m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2}. \quad (5.3)$$

б) Повна енергія для одновірного гармонічного осцилятора записується у вигляді:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{\kappa x^2}{2}. \quad (5.4)$$

Позначимо:  $\omega_0 = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}$  – власна частота коливань осцилятора, тоді повна енергія матиме вигляд:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} = \frac{m\omega_0^2 A^2}{2}, \quad (5.5)$$

де  $A$  – амплітуда коливань (у крайніх точках, де кінетична енергія дорівнює нулю). З рівності (5.5) знайдемо імпульс  $p$ :

$$p = \sqrt{2mE \left( 1 - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2E} \right)}. \quad (5.6)$$

Умова Бора-Зоммерфельда запишеться наступним чином:

$$\oint p dx = 2\sqrt{2mE_n} \int_{-A}^A \sqrt{1 - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2E_n}} dx = \frac{4E_n}{\omega_0} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - z^2} dz = nh. \quad (5.7)$$

У (5.7) введено заміну  $\frac{m\omega_0^2}{E_n} x^2 = z^2$ , а також враховано, що

$$z = \sqrt{\frac{m\omega_0^2}{2E_n}} x, \quad dz = \sqrt{\frac{m\omega_0^2}{2E_n}} dx.$$

Шляхом введення наступної за-

міни  $z = \cos \alpha$ , вираз (5.7) перепишемо так:

$$\frac{4E_n}{\omega_0} \int_0^\pi \sin^2 \alpha d\alpha = \frac{4E_n}{\omega_0} \int_0^\pi \frac{1 - \cos 2\alpha}{2} d\alpha = \frac{2\pi E_n}{\omega_0} = nh \Rightarrow$$

$$E_n = n\hbar\omega_0. \quad (5.8)$$

Відповідно, дозволені значення амплітуди будуть дорівнювати:

$$A_n^2 = \frac{2n\hbar}{m\omega_0}. \quad (5.9)$$

**Задача №6.** Використовуючи правило квантування Бора-Зоммерфельда, для воднеподібних атомів знайти радіус кругових електронних орбіт, енергію та період обертання електрона на основній орбіті з урахуванням релятивістських поправок.

**Розв'язок:** За умови руху по коловій орбіті, введемо узагальнену координату  $\varphi$  та відповідний узагальнений імпульс  $p_\varphi$ , що являє собою момент імпульсу:

$$p_\varphi = L = mr^2\dot{\varphi}. \quad (6.1)$$

Умова Бора-Зоммерфельда (17) матиме вигляд:

$$\oint mr^2\dot{\varphi} d\varphi = \int_0^{2\pi} mr^2\dot{\varphi} d\varphi = 2\pi L = nh \Rightarrow$$

$$L = mr^2\dot{\varphi} = mvr = n\hbar \quad (6.2)$$

де  $m$  – релятивістська маса електрона:



$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (6.3)$$

Під час руху електрона навколо ядра доцентровою силою є сила Кулона:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2} . \quad (6.4)$$

Беручи до уваги (6.3), знайдемо з (6.4) радіус орбіти:

$$r = \frac{Ze^2}{m_0 v^2} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} . \quad (6.5)$$

Швидкість руху електрона на орбіті визначається формулою (23). Підставивши цю формулу у (6.5), отримаємо:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_0 Ze^2} \sqrt{1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2}} , \quad (6.6)$$

Енергія електрона на борівській орбіті:

$$E_n = -\frac{Ze^2}{2r_n} = -\frac{Z^2 m_0 e^4}{2n^2 \hbar^2 \sqrt{1 - \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2}} = -\frac{hcZ^2 R_\infty}{n^2 \sqrt{1 - \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2}} . \quad (6.7)$$

Період обертання

$$T_n = \frac{2\pi}{\omega_n} = \frac{2\pi \hbar^3 n^3}{Z^2 m_0 e^4} \sqrt{1 - \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2} = \frac{n^3}{2Z^2 c R_H} \sqrt{1 - \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2} . \quad (6.8)$$

З (6.6)–(6.8) знайдемо числові значення енергії, радіуса орбіти та періоду обертання для першої борівської орбіти воднеподібних атомів:

$$E_1 = -\frac{13,613Z^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{Z}{137}\right)^2}} [eB];$$

$$r_1 = \frac{1,055^2 \cdot 10^{-54}}{0,9 \cdot 10^{-27} \cdot 4,8^2 \cdot 10^{-20} \cdot Z} \sqrt{1 - \frac{Z^2}{137^2}} =$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{0,537 \cdot 10^{-8}}{Z} \sqrt{1 - \frac{Z^2}{137^2}} \text{ [см]}; \\
 T_1 &= \frac{1}{2Z^2 \cdot 3 \cdot 10^{10} \cdot 1,097 \cdot 10^5} \sqrt{1 - \left(\frac{Z}{137}\right)^2} = \\
 &= \frac{0,15 \cdot 10^{-15}}{Z^2} \sqrt{1 - \left(\frac{Z}{137}\right)^2} \text{ [с]}. \quad (6.9)
 \end{aligned}$$

**Задача №7.** У 1932 р. був проведений наступний експеримент: Юрі зі співробітниками повільно випаровували 30 л рідкого водню. Увівши залишок до розрядної трубки, вчені сфотографували спектр. Виявилось, що всі лінії спектральних серій стали подвійними. Юрі висловив гіпотезу, що причиною подвоєння ліній є наявність у розрядній трубці, крім водню, його важкої фракції – ізоотопу. Зі спектральних даних вдалося визначити атомну масу невідомого ізоотопу. Як це можна зробити, якщо, наприклад, друга лінія  $H_\beta$  серії Бальмера містить дві компоненти з довжинами хвиль  $\lambda_1 = 486,132 \text{ нм}$  та  $\lambda_2 = 485,9975 \text{ нм}$  ?

**Розв'язок:** Запишемо формулу Бальмера з урахуванням маси ядра:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{R}{1 + \frac{m_e}{m_H}} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right). \quad (7.1)$$

Знайдемо відносний ізотопічний зсув довжини хвилі лінії  $\lambda_1 = 486,132 \text{ нм}$ . Враховуючи (7.1), отримаємо:

$$\lambda_1 = \frac{1 + \frac{m_e}{m_H}}{R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right)} = \frac{16}{3R} \left( 1 + \frac{m_e}{m_H} \right);$$

$$\lambda_2 = \frac{1 + \frac{m_e}{m_x}}{R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right)} = \frac{16}{3R} \left( 1 + \frac{m_e}{m_x} \right) \Rightarrow$$

$$\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda_1} = \frac{\frac{m_e}{m_H} - \frac{m_e}{m_x}}{1 + \frac{m_e}{m_H}}. \quad (7.2)$$

Оскільки  $\frac{m_e}{m_H} = \frac{1}{1836}$ , в знаменнику (7.2) цим доданком знехтуємо і знайдемо відношення маси електрона до маси невідомого атома:

$$\frac{m_e}{m_x} = \frac{m_e}{m_H} - \frac{\Delta\lambda}{\lambda_1} = \frac{1}{1836} - \frac{0,1345}{486,132} = \frac{1}{3731}. \quad (7.3)$$

Звідси  $\frac{m_x}{m_H} = \frac{3731}{1836} = 2,03$ . Отже, лінія  $\lambda_2 = 485,9975 \text{ нм}$  ви-

никає внаслідок наявності в розрядній трубці атомів дейтерію.

**Задача №8.** При якій роздільній здатності дифракційного спектрографа можна дослідити ізотопічну структуру спектральних ліній серії Лаймана, якщо у водневій розрядній лампі є домішка тритію? Якою має бути роздільна здатність спектрального приладу, необхідного для спостереження ізотопічного зсуву спектральних ліній, що відносяться до інших серій (Бальмера, Пашена)?

**Розв'язок:** Запишемо формулу Бальмера для серії Лаймана:

$$\tilde{\nu}_H = \frac{1}{\lambda_H} = \frac{R}{1 + \frac{m_e}{m_H}} \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{k^2} \right) - \text{для водню},$$

$$\tilde{\nu}_T = \frac{1}{\lambda_T} = \frac{R}{1 + \frac{m_e}{3m_H}} \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{k^2} \right) - \text{для тритію}. \quad (8.1)$$

Знайдемо ізотопічний зсув для ліній цієї серії:

$$\frac{\lambda_H - \lambda_T}{\lambda_H} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda_H} = \frac{\frac{2m_e}{3m_H}}{1 + \frac{m_e}{m_H}} \approx \frac{2m_e}{3m_H}. \quad (8.2)$$

Для спостереження ізотопічної структури роздільна здатність дифракційного спектрографа повинна бути такою:

$$\mathfrak{R} = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} > \frac{3m_H}{2m_e} = 2754. \quad (8.3)$$

Звернемо увагу на те, що відносний ізотопічний зсув спектральних ліній є однаковим для всіх серій, які характерні для воднеподібних атомів.

**Задача №9.** Негативні мюони можуть бути захопленими атомом і замінити собою електрони електронної оболонки. На практиці може бути заміщений лише один електрон. Система, що при цьому утворюється, називається **мезоатомом**. Маса мюона  $m_\mu = 207m_e$ . Обрахувати за теорією Бора радіус першої кругової орбіти (К-орбіти) мюона в мезоатомі. Розрахувати енергетичні рівні мезоатома. Яке випромінювання буде спостерігатись під час переходу з більш високих орбіт на найнижчу К-орбіту ( $n = 1$ )? Чому дослідження такого випромінювання застосовується для аналізу структури важких атомних ядер?

**Розв'язок:** Згідно теорії Бора, радіус орбіти воднеподібного атома в наближенні ядра з нескінченною масою:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Zm_e e^2}. \quad (9.1)$$

В нашому випадку можемо скористатись цією ж формулою, замінивши масу в знаменнику (9.1) на зведену масу системи "мюон-ядро":

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Zm_\mu e^2} \left( 1 + \frac{m_\mu}{Am_p} \right), \quad (9.2)$$

де  $A$  – масове число, що показує сумарну кількість протонів

та нейтронів в ядрі.

Припустимо, що орбіта мюона є внутрішньою (К-орбітою). Отже, електронна оболонка практично не впливає на результат, оскільки внаслідок сферичної симетрії електронної хмари створюване нею поле в місці знаходження мюона може вважатись нульовим.

Знайдемо відношення радіусів орбіт для воднеподібного атома та мезоатома:

$$\frac{r}{r_\mu} = \frac{m_\mu}{m_e \left(1 + \frac{m_\mu}{Am_p}\right)} = \frac{207m_e}{m_e \left(1 + \frac{207m_e}{Am_p}\right)} = \frac{207}{\left(1 + \frac{0,1128}{A}\right)}. \quad (9.3)$$

Це відношення знаходиться в межах від 186 для протону до 207 для важких ядер.

Для рівнів енергії мезоатома маємо наступний вираз:

$$E_n = -\frac{207hcZ^2R}{1 + \frac{207m_e}{Am_p}} \frac{1}{n^2}. \quad (9.4)$$

Наприклад, енергія іонізації мезоатома  $Ca$  ( $A = 40$ ,  $Z = 20$ ) дорівнює

$$E_i = \frac{207 \cdot 1,24 \cdot 10^{-4} \cdot 1,097 \cdot 10^5 \cdot 20^2}{1 + \frac{207}{40 \cdot 1836}} \frac{1}{1^2} = 1,12 MeV. \quad (9.5)$$

Видно, що випромінювання, яке виникає під час переходу з вищих орбіт на К-орбіту в мезоатомі, буде розташоване в рентгенівській області, а для важких ядер – у  $\gamma$ -діапазоні.

Очевидно, що для важких ядер наше наближення не є придатним, оскільки орбіта мюона проходитиме на периферії ядра. Проте, саме внаслідок цього спектри випромінювання мезоатома є чутливими до розподілу електричного заряду в ядрі, тому їх і використовують для дослідження структури атомних ядер.

**Задача №10.** Якщо один з електронів атомної оболонки має велике значення головного квантового числа, то такий атом називається рідбергівським, а стан електрона, відповідно, рідбергівським станом. Показати, що рідбер-

гівським атомам притаманні такі властивості: а) частота переходу атома на сусідній рівень дорівнює класичній частоті обертання електрона по круговій орбіті; б) час життя збудженого атома може набувати великих значень.

**Розв'язок:** а) Розглянемо формулу Бальмера при великих значеннях головного квантового числа  $n$ :

$$\tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right) = \frac{me^4}{4\pi c \hbar^3} \left( \frac{2n-1}{n^2(n-1)^2} \right) \approx \frac{me^4}{2\pi c \hbar^3} \frac{1}{n^3}, \quad (10.1)$$

де використано умову  $n \gg 1$ .

З (10.1) можемо визначити частоту переходу між рівнями  $n$  та  $n-1$ :

$$\omega = 2\pi c \tilde{\nu} = \frac{me^4}{\hbar^3 n^3}. \quad (10.2)$$

Врахуємо, що згідно теорії Бора, радіус орбіти електрона

$$r = a_0 n^2 = \frac{\hbar^2}{me^2} n^2, \quad (10.3)$$

де  $a_0$  – радіус першої борівської орбіти, а лінійна швидкість

$$v = \frac{e^2}{n\hbar}. \quad (10.4)$$

Класична частота обертання електрона на круговій орбіті:

$$\omega = \frac{v}{r} = \frac{me^4}{\hbar^3 n^3}. \quad (10.5)$$

Порівнюючи (10.2) та (10.5), бачимо, що частота переходу між сусідніми рівнями рідбергівського атома співпадає з класичною частотою обертання електрона на круговій орбіті.

б) Будемо розглядати рідбергівський атом як диполь, що коливається з частотою  $\omega$ . Згідно класичної електродинаміки, швидкість зміни енергії електрона за рахунок дипольного випромінювання має вигляд:

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^2 a^2}{c^3}, \quad (10.6)$$

де  $a$  – прискорення електрона на круговій орбіті. Враховуючи, що доцентровою силою є сила Кулона, знайдемо  $a$ :

$$ma = \frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \Rightarrow a = \frac{e^2}{mr^2}.$$

Оскільки повна енергія електрона  $E = -\frac{e^2}{2r}$ , з (10.6) отримаємо:

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^6}{m^2 r^4 c^3}. \quad (10.7)$$

З іншого боку,

$$\frac{dE}{dt} = \frac{e^2}{2r^2} \frac{dr}{dt}. \quad (10.8)$$

Прирівнюючи (10.7) та (10.8), одержимо наступний вираз:

$$\frac{e^2}{2r^2} \frac{dr}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^6}{m^2 r^4 c^3} \Rightarrow dt = -\frac{3}{4} \frac{m^2 r^2 c^3}{e^4} dr. \quad (10.9)$$

Оцінімо час життя електрона на збудженому рівні, проінтегрувавши вираз (10.9):

$$\int_{t_1}^{t_2} dt = -\frac{3m^2 c^3}{4e^4} \int_{r_1}^{r_2} r^2 dr \Rightarrow \tau = t_2 - t_1 = \frac{m^2 c^3}{4e^4} (r_1^3 - r_2^3). \quad (10.10)$$

Радіус орбіти воднеподібного атома, згідно теорії Бора-Зоммерфельда,  $r = a_0 n^2$ , де  $a_0 \approx 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см}$  – радіус першої борівської орбіти. Тоді час життя атома в збудженому стані запишеться наступним чином:

$$\tau = \frac{m^2 c^3}{4e^4} a_0^3 (n^6 - (n-1)^6). \quad (10.11)$$

Зробимо оцінку часу життя, орієнтовно взявши значення головного квантового числа  $n = 500$ :

$$\tau = 3 \cdot 10^{-11} (1,5625 - 1,5438) \cdot 10^{16} = 5610 \text{ с} = 1,56 \text{ год}. \quad (10.12)$$

### **Задачі для самостійної роботи**

1.  $\alpha$ -частинка з енергією  $E_K = 6 \text{ MeV}$  (у лабораторній системі координат) рухається по прямій, що проходить крізь неї та ядро атома свинцю  $^{207}_{82}\text{Pb}$  (центральне зіткнення). Знайти найменшу відстань, до якої зблизяться  $\alpha$ -

частинка та ядро атома свинцю.

2. Знайти мінімальну відстань, на яку протон з кінетичною енергією  $E_K = 40 \text{ MeV}$  наблизиться до ядра атома ртуті, що знаходиться у спокої, при розсіянні на кут  $\theta = 90^\circ$ . Порівняти цю відстань з відповідним значенням прицільного параметру.
3. Знайти число  $\alpha$ -частинок з кінетичною енергією  $E_K = 2,0 \text{ MeV}$ , що розсіюються щосекунди срібною фольгою під кутами, меншими за  $\theta_0 = 10^\circ$ . Припускається, що формула Резерфорда поблизу цього значення кута  $\theta_0$  ще є справедливою.
4.  $\alpha$ -частинка проходить плівку з вуглецю  ${}^{12}_6\text{C}$  і відхиляється на кут  $30^\circ$  (в системі центра інерції). Енергія  $\alpha$ -частинки в лабораторній системі координат дорівнює  $E_K = 5 \text{ MeV}$ ; атом вуглецю вважати нерухомим до зіткнення (в лабораторній системі координат). Знайти прицільну відстань при цьому зіткненні і порівняти її з ефективним радіусом ядра вуглецю, що відповідає максимальному наближенню частинки для випадку центрального зіткнення.
5. На плівку-мішень товщиною  $l = 2 \text{ мкм}$  з алюмінію нормально до її площини падає пучок  $\alpha$ -частинок з енергією  $E_K = 4 \text{ MeV}$  (у лабораторній системі координат). Інтенсивність пучка  $I = 10^3 \text{ c}^{-1} \cdot \text{см}^{-2}$ . Визначити, скільки частинок розсіюється в інтервалі кутів  $\theta_s = 49 \div 51^\circ$  (у системі центра інерції) протягом часу  $\tau = 20 \text{ хв}$ . Скільки  $\alpha$ -частинок розсіється при тих самих умовах, якщо алюмінієву мішень замінити на мішень із золота тієї самої товщини?
6. Вивести за допомогою законів збереження формулу 
$$\text{tg} \frac{\theta_s}{2} = \frac{qQ}{2bE_s}.$$
7. Отримати з формули  $\text{tg} \frac{\theta_s}{2} = \frac{qQ}{2bE_s}$  вираз для відносної кількості  $\alpha$ -частинок, розсіяних в інтервалі кутів



- ( $\theta, \theta + d\theta$ ) та вираз для відповідного диференціального перерізу ядра (формулу Резерфорда).
8. Знайти ефективний переріз розсіяння атомом золота, протонів з кінетичною енергією  $E_K = 1,20 \text{ MeV}$  в інтервалі кутів від  $\theta = 60^\circ$  до  $\theta = 180^\circ$ .
  9. Альфа-частинки з кінетичною енергією  $E_K = 1,7 \text{ MeV}$  розсіюються кулонівським полем ядер атомів свинцю. Визначити диференціальні перерізи розсіяння цих ядер  $\frac{d\sigma}{d\theta}$  та  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ , що відповідають розсіянню на кут  $\theta = 90^\circ$ .
  10. Диференціальний переріз розсіяння  $\alpha$ -частинок кулонівським полем нерухомого ядра  $d\sigma/d\Omega = 7,0 \cdot 10^{-22} \text{ cm}^2/\text{sr}$  для кута  $\theta_0 = 30^\circ$ . Визначити переріз розсіяння  $\alpha$ -частинок в інтервалі кутів  $\theta > \theta_0$ .
  11. Вузкий пучок протонів з кінетичною енергією  $E_K = 1,0 \text{ MeV}$  падає нормально на латунну фольгу з масовою товщиною  $\rho d = 1,5 \text{ mg/cm}^2$ . Знайти відносне число протонів, розсіяних на кути, що перевищують  $\theta_0 = 30^\circ$ , якщо масове співвідношення міді та цинку у фользі дорівнює 7:3.
  12. Плівка-мішень зі сплаву міді й олова (їх вагове співвідношення у сплаві  $\text{Cu} : \text{Sn} = 4 : 1$ ) масової товщини  $\rho l = 1 \text{ mg/cm}^2$  бомбардується ядрами тритію ( $Z_T = 1$ ,  $A_T = 3$ ) з енергією  $E_K = 10 \text{ MeV}$  (у лабораторній системі координат). Визначити відносну кількість частинок, що розсіялися на кути  $\theta_s$ , більші за  $\theta_{s0} = 60^\circ$ .
  13. Що таке ізотопічна структура ліній у спектрі атомарного водню? Як визначити знак та величину ізотопічного зміщення спектральних ліній?
  14. Знайти вираз для частот лінійчатого спектру поглинання атомарного водню.
  15. Скориставшись квантовою умовою Бора-Зоммерфельда,

визначити радіуси орбіт та рівні енергії в центрально-симетричному силовому полі  $\vec{F} = -k\vec{r}$ . Орбіти вважати круговими.

16. Квантування в макроскопічній системі. Штучний супутник масою  $m = 100 \text{ кг}$  рухається по круговій орбіті на висоті  $H = 100 \text{ км}$  над поверхнею Землі. В рамках моделі Бора оцінити номер квантового числа, що відповідає руху по такій орбіті. Визначити зміну радіуса орбіти при зміні квантового числа на  $\Delta n \approx 1$ .
17. Які спектральні лінії з'являються при збудженні атомарного водню електронами з енергією  $12,5 \text{ eV}$ ?
18. Фотон головної лінії серії Лаймана іона  $\text{He}^+$  поглинається атомом водню, що знаходиться в основному стані, та іонізує його. Визначити кінетичну енергію, яку отримає електрон в результаті іонізації.
19. Оцінити час переходу електрона з орбіти атома водню з квантовим числом  $n_1 = 100$  на орбіту з квантовим числом  $n_2 = 101$ .
20. Двом лініям серії Бальмера атома водню відповідають довжини хвиль  $\lambda_1 = 6562 \text{ Å}$  та  $\lambda_2 = 4340 \text{ Å}$ . Спираючись на комбінаційний принцип Рітца, визначити, якій серії належить спектральна лінія, хвильове число якої дорівнює різниці хвильових чисел цих двох ліній.
21. Атом водню переходить зі збудженого стану з  $n = 2$  до основного стану  $n = 1$ . Випромінювання спостерігають під кутом  $\vartheta = 60^\circ$  до напрямку руху атома, швидкість якого  $v = 3 \cdot 10^5 \text{ см/с}$ . Обчислити відносну добавку до частоти, яка зумовлена ефектом Доплера, а також додаткову швидкість, яку отримує атом після випромінювання.
22. Намалювати систему термів та розрахувати довжини хвиль перших трьох ліній серії Бальмера для іона  $\text{He}^+$ .
23. Визначити різницю довжин хвиль світла, для переходів  $n_2 = 2 \rightarrow n_1 = 1$  та  $n_2 = 5 \rightarrow n_1 = 4$  в атомах водню та тритію.
24. Визначити роздільну здатність  $\mathfrak{R}$  спектрального приладу,

необхідну для спостереження ізотопічного зсуву спектральних ліній дейтерію відносно ліній водню. Якою має бути ширина  $b$  основи призми з важкого флінту з дисперсією

$$\frac{dn}{d\lambda} = 1000 \text{ см}^{-1} \text{ (в діапазоні червоного світла) в призмово-}$$

му спектрографі, який використовується для дослідження ізотопічного зсуву головної лінії серії Бальмера?

- 25.** Обрахувати відношення маси протона до маси електрона, якщо відомо, що відношення сталих Рідберга для важкого та легкого водню  $\eta = 1,000272$ , а відношення мас ядер  $n = 2,00$ .
- 26.** Позитроній являє собою зв'язану систему з електрона та позитрона, що обертаються навколо центра мас системи. Знайти рівні енергії, енергію іонізації та довжину хвилі резонансної лінії для позитронію.

**Розділ 7.**  
**КВАНТОВІ ЧИСЛА ОДНОЕЛЕКТРОННИХ АТОМІВ.**  
**ТОНКА ТА НАДТОНКА СТРУКТУРА СПЕКТРАЛЬНИХ ЛІНІЙ.**  
**ЛЕМБІВСЬКИЙ ЗСУВ**

***Основні теоретичні відомості***

Стан електрона в атомі водню та воднеподібних атомах визначається такими квантовими числами:

1.  $n$  – головне квантове число. Від цього квантового числа, головним чином, залежить енергія електрона в атомі. Може набувати значень  $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$ . Правила відбору відсутні.
2.  $l$  – орбітальне квантове число. Визначає орбітальний момент імпульсу електрона  $P_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ . Межі зміни:  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ . Правило відбору для електродипольних переходів:  $\Delta l = \pm 1$ . Вводяться наступні позначення станів і термів, відповідно до значення квантового числа  $l$ : якщо  $l = 0$ , то атом знаходиться в  $s$ -стані, якому відповідає  $S$ -терм, при  $l = 1$  маємо  $p$ -стан,  $P$ -терм, при  $l = 2$  –  $d$ -стан та  $D$ -терм і т.д.
3.  $m_l$  – магнітне орбітальне квантове число. Визначає проекцію орбітального моменту електрона на певний напрямок (наприклад, напрямок вектора напруженості магнітного поля)  $P_{lz} = m_l \hbar$ . Межі зміни  $m_l : +l, l-1, l-2, \dots, -l$ . Правила відбору:  $\Delta m_l = 0, \pm 1$ .
4.  $s$  – спінове квантове число. Визначає власний механічний (спіновий) момент електрона  $P_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}$ ,  $s = \frac{1}{2}$ . Правила відбору:  $\Delta s = 0$ .
5.  $m_s$  – магнітне спінове число. Визначає проекцію спінового моменту на виділений напрямок  $P_{sz} = m_s \hbar$ . Квантове число  $m_s$  набуває значень:  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ . Правила відбору:

$$\Delta m_s = 0.$$

6.  $j$  – внутрішнє квантове число. Визначає повний механічний момент електрона  $\vec{P}_j = \vec{P}_l + \vec{P}_s$ ,  $|\vec{P}_j| = \hbar\sqrt{j(j+1)}$ . Межі зміни:  $j = l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}$ ;  $j > 0$ . Правила відбору:  $\Delta j = 0, \pm 1$ . Квантове число  $j$  вводиться при врахуванні спіно-орбітальної взаємодії.
7.  $m_j$  – магнітне квантове число. Характеризує просторову орієнтацію повного механічного моменту електрона  $P_{jz} = m_j \hbar$ . Межі зміни:  $m_j = +j, j-1, \dots, -j$ . Правила відбору:  $\Delta m_j = 0, \pm 1$ .
8.  $I$  – спінове число ядра. Залежить від кількості протонів та нейтронів у ядрі. Інформацію про значення цього числа можна знайти в [14]. Для ядра атома водню (протона)  $I = \frac{1}{2}$ .
9.  $F$  – повне квантове число атома. Визначає повний механічний момент атома  $\vec{P}_F = \vec{P}_j + \vec{P}_I$ ,  $|\vec{P}_F| = \hbar\sqrt{F(F+1)}$ . Межі зміни:  $F = j + I, j + I - 1, \dots, |j - I|$ . Для атома водню  $F = j \pm \frac{1}{2}$ . Правила відбору  $\Delta F = 0, \pm 1$ ,  $F_1 = 0 \not\rightarrow F_2 = 0$ .
10.  $m_F$  – магнітне квантове число атома. Визначає просторову орієнтацію повного механічного моменту атома  $P_{Fz} = m_F \hbar$ . Межі зміни:  $m_F = +F, F-1, \dots, -F$ . Правила відбору:  $\Delta m_F = 0, \pm 1$ .

Квантові числа  $j, F$  вводяться при розгляді тонкої та надтонкої структури енергетичних рівнів, яка обумовлена спіно-орбітальною взаємодією та взаємодією електрона з магнітним полем ядра.

Квантові числа  $m_j, m_F$  відіграють важливу роль при наявності зовнішніх електричного або магнітного полів.

Для спектральних термів атомарного водню та воднеподі-

бних іонів уводиться наступне позначення:  $^{2s+1}L_j$ , де  $2s+1$  – плетність терму (в нашому випадку вона дорівнює 2, оскільки  $s = \frac{1}{2}$ ),  $j$  – внутрішнє квантове число; терм з орбітальним квантовим числом  $l$  позначають латинськими літерами  $S, P, D, F, \dots$  у відповідності до значень квантового числа  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

Причиною появи тонкої структури енергетичних рівнів, а отже, розщеплення спектральних ліній атомарного водню, є спін-орбітальна взаємодія. Енергія стаціонарних станів була розрахована при розв'язку релятивістського рівняння Дірака, в якому враховано залежність маси електрона від швидкості (релятивістська поправка) та спін-орбітальна взаємодія. Енергія залежить від двох квантових чисел:  $n$  та  $j$  [1\*, 44]:

$$E_{n,j} = -\frac{(Ze^2)^2 \mu}{2\hbar^2 n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (1)$$

Спектральний терм розраховується за такою формулою:

$$T_{n,j} = -\frac{E_{n,j}}{hc} = \frac{Z^2 R_H}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right], \quad (2)$$

де  $Z$  – заряд ядра,  $\mu$  – зведена маса системи «ядро–електрон»,  $R_H$  – стала Рідберга,  $R_H = \frac{\mu e^4}{4\pi\hbar^3 c}$ ,  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,03}$

– стала тонкої структури. Стала тонкої структури визначає зміщення бальмерівського енергетичного рівня за рахунок релятивістського ефекту та спін-орбітальної взаємодії.

Надтонка структура спектральних ліній обумовлена лембівським зсувом та врахуванням електромагнітної взаємодії електрона з ядром.

У 1947 році У.Е. Лембом та Р.К. Різерфордом був проведений блискучий експеримент, який виявив наявність відхи-

лення отриманих ними експериментальних результатів від відомого рівняння П. Дірака [1\*]

$$-i\hbar c \left( \alpha_1 \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \alpha_4 mc^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (3)$$

де  $\psi \equiv \psi(x, y, z, t)$  – хвильова функція електрона в атомі водню,  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$  – антикомутативні множники, що задовольняють умови [2\*]:

$$\alpha_i^2 = \alpha_j^2 = \alpha_k^2 = \alpha_l^2 = 1, \quad \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 0, \quad (4)$$

де  $i, j = \overline{1, 4}, i \neq j$ .

З рівняння (3) випливає, що енергія електрона в атомі водню  $E_{n,j}$ , що знаходиться в стані з головним квантовим числом  $n$  та внутрішнім квантовим числом  $j$ , визначається формулою

$$E_{n,j} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left( \frac{\alpha Z}{n - j - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2 Z^3}} \right)^2}}, \quad (5)$$

яка шляхом представлення у вигляді ряду за степенями  $\alpha \ll 1$  з наступним відкиданням малих доданків  $\sim \alpha^x$ , де  $x \geq 3$ , зводиться до [2\*, 3\*]

$$E_{n,j} \approx mc^2 - E_n Z^2 - E_n \frac{\alpha^2 Z^4}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right). \quad (6)$$

При  $Z = 1$  формула (6) визначає енергію рівнів атома водню.

З (6) випливає, що енергія електрона в атомі водню не залежить від орбітального квантового числа  $l$ , крім того, всі енергетичні рівні в атомі є двічі виродженими, оскільки кожному значенню  $l$  відповідають два значення енергії для станів з внутрішніми квантовими числами  $j_1 = \left| l - \frac{1}{2} \right|$  та  $j_2 = l + \frac{1}{2}$ . Це означає, що стани з однаковими квантовими

числами  $n$ ,  $j$  мають однакову енергію, що наочно демонструється енергетичною діаграмою для атома водню, що наведена на рис. 1а [2\*]. Видно, що за теорією П. Дірака, терми  $2^2S_{\frac{1}{2}}$  та  $2^2P_{\frac{1}{2}}$  знаходяться на одному рівні, тобто мають однакову енергію.

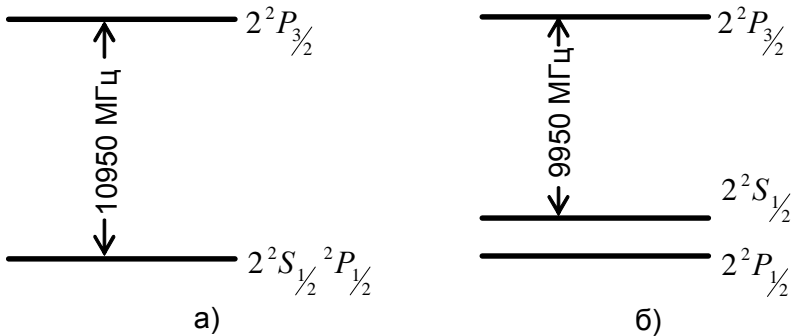


Рис. 1. Енергетична діаграма термів атома водню (при  $n = 2$ ) за теорією Дірака (а) та визначена на основі експерименту У. Лемба та Р. Різерфорда (б).

В той же час, в експерименті Лемба–Різерфорда була отримана інша енергетична діаграма для атома водню, схематично показана на рис. 1б [1\*, 2\*]. Експериментально було визначено, що терм  $2^2S_{\frac{1}{2}}$  знаходиться вище за терм  $2^2P_{\frac{1}{2}}$ , а відстань між двома цими термами приблизно дорівнює [1\*]

$$1062 \pm 5 \text{ МГц} = (350,46 \pm 1,65) \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1} = (4354,2 \pm 20,5) \cdot 10^{-9} \text{ eV}, \quad (7)$$

тобто величина цього зсуву приблизно в мільйон разів менша за енергію зв'язку електрона в атомі водню, що знаходиться в

стані  $2^2S_{\frac{1}{2}}$  ( $\frac{\Delta E}{E_2} \approx \frac{4360 \cdot 10^{-9}}{13,56/4} \approx 1,28 \cdot 10^{-6}$ ).

Аналогічні дослідження були також проведені для однократно іонізованого атома гелію. Було показано, що зсув S-термів відносно P-термів, що належать одній електронній



оболонці (головне квантове число  $n$  однакове для обох термів) якісно відбувається за тим самим законом, що й для атома водню. Було визначено зсув терма  $2^2S_{\frac{1}{2}}$  відносно терма

$$2^2P_{\frac{1}{2}} [2^*, 3^*]:$$

$$14100 \pm 300 \text{ МГц} = (4653 \pm 99) \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1} = \\ = (57810 \pm 1230) \cdot 10^{-9} \text{ eВ} \quad (8)$$

та зсув терма  $3^2S_{\frac{1}{2}}$  відносно терма  $3^2P_{\frac{1}{2}} [2^*, 3^*]:$

$$3390 \pm 420 \text{ МГц} = (1118,7 \pm 138,6) \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1} = \\ = (13899 \pm 1722) \cdot 10^{-9} \text{ eВ}. \quad (9)$$

Це явище зсуву спектральних S-термів відносно Р-термів, що відповідають станам електрона з однаковими квантовими числами  $n$  та  $j$ , отримало назву "*лембівський зсув*" (радіаційна поправка). Причиною цього зсуву є взаємодія електрона в атомі (чи воднеподібному іоні) з нульовими коливаннями електромагнітного поля. Наочно уявити собі це можна таким чином: електрон постійно випромінює віртуальні фотони, які потім сам і поглинає, взаємодіючи таким чином з електромагнітним вакуумом [ $1^*-4^*$ , 44].

### **Методичні вказівки та поради**

1. Перший тип задач пов'язаний із записом спектральних позначень термів при заданих квантових числах (задача №1).
2. Особливість водню та воднеподібних атомів полягає у виродженні енергетичних рівнів за орбітальним квантовим числом. Це означає, що рівні з однаковими значеннями квантових чисел  $n$  та  $j$ , але з різними  $l$  матимуть ту саму енергію (див. задачі №1,2), наприклад,

$$E\left(2P_{\frac{3}{2}}\right) = E\left(2D_{\frac{3}{2}}\right). \text{ Виключенням з цього правила є лем-}$$

бівський зсув рівнів  $2^2 S_{\frac{1}{2}}$  та  $2^2 P_{\frac{1}{2}}$  атомарного водню, який

розглядається в задачі №7.

3. При розрахунку окремо релятивістської поправки, що пов'язана із залежністю маси електрона від швидкості, та спин-орбітальної поправки, яка викликана спин-орбітальною взаємодією, користуються наступними формулами [44]:

$$\Delta E_r = -\frac{hcR\alpha^2 Z^4}{n^3} \left( \frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \quad (10)$$

– релятивістська поправка,

$$\Delta E_{ls} = \frac{hcR\alpha^2 Z^4}{n^3 l \left( l + \frac{1}{2} \right) (l + 1)} \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2} \quad (11)$$

– спин-орбітальна поправка (задача №2).

4. При розрахунку тонкої та надтонкої структури спектральних ліній необхідно зобразити діаграму енергетичних рівнів та вказати переходи з урахуванням правил відбору для квантових чисел  $l$ ,  $j$  та  $F$  (задачі №3, 4, 5).

5. Спінове число ядра атома водню дорівнює  $\frac{1}{2}$ , тому кван-

тове число  $F$  набуває двох значень:  $j \pm \frac{1}{2}$ . Це означає,

що всі енергетичні рівні при врахуванні надтонкої структури є дублетами (задача №5).

6. Лембівський зсув виникає тільки для  $S$ -рівнів. Найбільшим його значення буде для рівня  $2^2 S_{\frac{1}{2}}$ . Оскільки енергія

цього рівня зменшується за модулем, на енергетичній діаграмі він буде розташований вище, ніж рівень  $2^2 P_{\frac{1}{2}}$  (оскі-

льки загальна енергія атома водню є від'ємною).

7. Задачі, на розрахунок лембівського зсуву для атома водню чи воднеподібних іонів, достатньо складні як з точки

зору фізики, так і з точки зору математики. Під час їх розгляду неможливо вказати “одну чи дві формули”, за допомогою яких розв’язується задача. Розв’язання таких задач є в певному розумінні “мистецтво”, оскільки метод розв’язання та наближення, які при цьому застосовуються, не є однозначними. Сформулюємо декілька основних підходів до розв’язання таких задач:

- а. Достатньо точні значення лембівського зсуву дає розгляд цього явища в рамках нерелятивістської квантової теорії. Ідея цього методу, запропонованого Г. Бете, полягає в тому, що енергія взаємодії електрона  $E$  з нульовими коливаннями поля вакууму можна записати як  $\delta E = E_S - E_P$ , де  $E_S$  та  $E_P$  – енергії, що відповідають  $s$ - та  $p$ -станам атома. В квантовій теорії доводиться, що вирази для енергій  $E_S$  та  $E_P$  зводяться до розбіжних інтегралів в просторі хвильових чисел. Але різниця цих величин, тобто  $\delta E$ , є скінченою величиною, що може бути обрахована. Саме це лежить в основі розв’язання задач подібним методом. Більш простим методом визначення лембівського зсуву в нерелятивістській квантовій теорії є метод, заснований на врахуванні флуктуацій координати та імпульсу електрона за рахунок його взаємодії з нульовими коливаннями вакууму. По суті, цей метод зводиться до знаходження поправки до потенціалу взаємодії електрона з ядром атома.
- б. Найбільш громіздким, але разом з тим найбільш точним, є метод розрахунку величини лембівського зсуву за допомогою методів релятивістської квантової теорії. Опускаючи детальне обговорення цього методу (оскільки він є дуже складним), відмітимо той факт, що в його основі покладено оригінальну ідею про те, що маса електрона складається з двох компонент: звичайної “механічної” маси, яка, наприклад, входить у рівняння (1), та так званої “електромагнітної маси”, яка обумовлює появу лембівського зсуву.

### ***Приклади розв’язування задач***

**Задача №1. Виписати спектральні позначення термів в**

атомі водню для значень головного квантового числа  $n = 1, 2, 3, 4$  з урахування спін-орбітальної взаємодії. Скільки компонент тонкої структури має енергетичний рівень, що характеризується головним квантовим числом  $n$ ?

**Розв'язок:** Орбітальне квантове число  $l$  при заданому  $n$  набуває  $n$  значень:

$$l = 0, 1, \dots, n-1. \quad (1.1)$$

Оскільки водень є одноелектронною системою зі спіновим числом  $s = \frac{1}{2}$ , повне квантове число  $j$  може набувати значення:

$$j = \left| l \pm \frac{1}{2} \right|, \quad (1.2)$$

тобто два значення при заданому  $l$ , окрім випадку, коли  $l = 0$ , оскільки в цьому стані відсутня спін-орбітальна взаємодія. Кількість термів, що відповідає заданому числу  $n$ , при врахуванні тонкої структури термів буде дорівнювати:

$$N = 2n - 1. \quad (1.3)$$

Випишемо спектральні позначення термів для різних значень  $n$ .

При  $n = 1, l = 0; j = \frac{1}{2}$  маємо терм  $^2S_{\frac{1}{2}}$ . Повний момент кількості руху електрона для цього терму є чисто спіновим. Хоча плетність терму дорівнює 2, по суті цей рівень є синглетним. Зауваження це, зрозуміло, стосується всіх  $S$ -станів.

При  $n = 2, l = 0, 1$ , для  $l = 0$  отримаємо терм  $^2S_{\frac{1}{2}}$ , а для  $l = 1, j = \frac{1}{2}; \frac{3}{2}$  – два терми  $^2P_{\frac{1}{2}}, ^2P_{\frac{3}{2}}$ . Аналогічним чином записуються терми для  $n = 3, 4$ . Результати представимо у вигляді таблиці 1.

Згідно розв'язку рівняння Дірака, для воднеподібних атомів, енергія в стаціонарному стані знаходиться з формули:

$$E_{n,j} = -\frac{(Ze^2)^2 \mu}{2\hbar^2 n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (1.4)$$

Таблиця 1

$n$	Терм
1	$1^2 S_{\frac{1}{2}}$
2	$2^2 S_{\frac{1}{2}}; {}^2 P_{\frac{1}{2}}, {}^2 P_{\frac{3}{2}}$
3	$3^2 S_{\frac{1}{2}}; {}^2 P_{\frac{1}{2}}, {}^2 P_{\frac{3}{2}}, {}^2 D_{\frac{3}{2}}, {}^2 D_{\frac{5}{2}}$
4	$4^2 S_{\frac{1}{2}}; {}^2 P_{\frac{1}{2}}, {}^2 P_{\frac{3}{2}}, {}^2 D_{\frac{3}{2}}, {}^2 D_{\frac{5}{2}}, {}^2 F_{\frac{5}{2}}, {}^2 F_{\frac{7}{2}}$

З (1.4) випливає, що енергія рівня визначається лише двома квантовими числами:  $n$  та  $j$ , тобто має місце виродження по орбітальному квантовому числу  $l$ , що пояснюється симетричністю розподілу кулонівського потенціалу в таких системах.

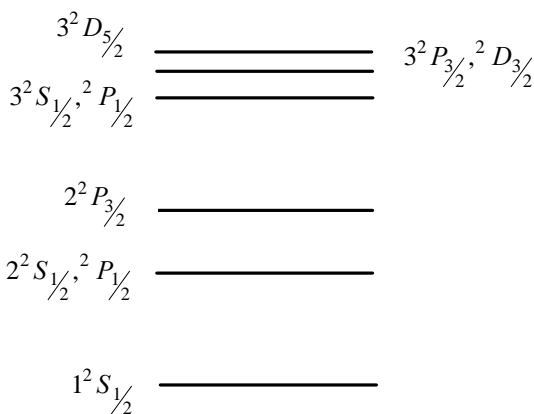


Рис. 2. Діаграма енергетичних рівнів атомарного водню

На практиці це виражається в тому, що терми з різними значеннями  $l$ , але однаковими значеннями  $n$  та  $j$  мають однакову енергію (рис. 2).

Це можна записати таким чином:

$$E\left({}^2S_{\frac{1}{2}}\right) = E\left({}^2P_{\frac{1}{2}}\right), \quad E\left({}^2P_{\frac{3}{2}}\right) = E\left({}^2D_{\frac{3}{2}}\right). \quad (1.5)$$

**Задача №2.** Знайти для атомарного водню, що знаходиться в станах з головним квантовим числом  $n = 1, 2, 3$ , додаткову енергію, що обумовлена залежністю маси електрона від швидкості (релятивістська поправка) та додаткову енергію, яка виникає за рахунок існування власного магнітного моменту електрона (спіну) та його взаємодії з орбітальним моментом кількості руху (спін-орбітальна поправка).

**Розв'язок:** Як відомо з теорії Бора, енергія електрона в атомі водню залежить лише від головного квантового числа  $n$  і має вигляд

$$E_n = -\frac{hcRZ^2}{n^2}. \quad (2.1)$$

Розрахуємо величину цієї енергії для атома водню ( $Z=1$ ) при  $n = 1, 2, 3$ , скориставшись значенням  $hc = 1,24 \cdot 10^{-4} \text{ eB} \cdot \text{см}$ :

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{1,24 \cdot 10^{-4} \cdot 1,097 \cdot 10^5}{1^2} = -13,61 \text{ eB}; \\ E_2 &= -\frac{E_1}{2^2} = -3,4 \text{ eB}; \\ E_3 &= -\frac{E_1}{3^2} = -1,51 \text{ eB}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Якщо врахувати релятивістський характер руху електрона в центральному полі, що призводить до прецесії орбіти електрона в площині його руху навколо ядра, то з'явиться додаткова енергія:

$$\Delta E_r = -\frac{hcR\alpha^2 Z^4}{n^3} \left( \frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right), \quad (2.3)$$

де  $l$  – орбітальне квантове число,  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$  – стала тонкої структури.

Додаткова енергія взаємодії власного магнітного моменту електрона з магнітним полем, обумовленим його орбітальним рухом:

$$\Delta E_{ls} = \frac{hcR\alpha^2 Z^4}{n^3 l \left( l + \frac{1}{2} \right) (l+1)} \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2}. \quad (2.4)$$

В цій формулі  $j, l, s$  – квантові числа, що характеризують стан атома. Для водню магнітне спінове квантове число може набувати лише 2 значення:  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ , тому повне механічне

квантове число  $j$  матиме 2 значення:  $j_1 = l + \frac{1}{2}, j_2 = l - \frac{1}{2}$ .

Відповідно, енергія (2.4) для двох випадків орієнтації спінового моменту запишеться наступним чином:

$$\Delta E_{ls} = \frac{hcR\alpha^2 Z^4}{n^3 l \left( l + \frac{1}{2} \right) (l+1)} \frac{\left( l + \frac{1}{2} \right) \left( l + \frac{3}{2} \right) - l^2 - l - \frac{3}{4}}{2} = \frac{hcR\alpha^2 Z^4}{2n^3 \left( l + \frac{1}{2} \right) (l+1)} \quad \text{для } j = l + \frac{1}{2}, \quad (2.5)$$

$$\Delta E_{ls} = \frac{hcR\alpha^2 Z^4}{n^3 l \left( l + \frac{1}{2} \right) (l+1)} \frac{\left( l - \frac{1}{2} \right) \left( l + \frac{1}{2} \right) - l^2 - l - \frac{3}{4}}{2} = - \frac{hcR\alpha^2 Z^4}{2n^3 l \left( l + \frac{1}{2} \right)} \quad \text{для } j = l - \frac{1}{2}. \quad (2.6)$$

У випадку термів з нульовим орбітальним моментом ( $S$ -термів) немає спін-орбітальної взаємодії, тому для розрахунку енергії  $S$ -термів необхідно користуватись загальною формулою Дірака (1).

Першим трьома рівнями атомарного водню з урахуванням

спін-орбітальної взаємодії відповідають такі терми (задача №1):  $1^2 S_{\frac{1}{2}}; 2^2 S_{\frac{1}{2}}; 2^2 P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}; 3^2 S_{\frac{1}{2}}; 3^2 P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}; 3^2 D_{\frac{3}{2}, \frac{5}{2}}.$

Додаткову енергію для термів  $1^2 S_{\frac{1}{2}}, 2^2 S_{\frac{1}{2}}, 3^2 S_{\frac{1}{2}}$  розрахуємо з використанням формули Дірака:

$$\Delta E_{n,j} = -\frac{hcR\alpha^2}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \quad (2.7)$$

врахувавши, що  $j = \frac{1}{2}$ . Оскільки маємо тільки одне значення числа  $j$ ,  $S$ -терми лише зміщуються, але не розщеплюються. Підставляючи значення до (2.7), отримаємо

$$\begin{aligned} \Delta E_{1, \frac{1}{2}}(1^2 S_{\frac{1}{2}}) &= -\frac{1,24 \cdot 10^{-4} \cdot 1,1 \cdot 5,33}{1^3} \left( 1 - \frac{3}{4} \right) \approx -1,82 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E_{2, \frac{1}{2}}(2^2 S_{\frac{1}{2}}) &= -\frac{1,24 \cdot 10^{-4} \cdot 1,1 \cdot 5,33}{2^3} \left( 1 - \frac{3}{8} \right) \approx -0,57 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E_{3, \frac{1}{2}}(3^2 S_{\frac{1}{2}}) &= -\frac{1,24 \cdot 10^{-4} \cdot 1,1 \cdot 5,33}{3^3} \left( 1 - \frac{3}{12} \right) \approx -0,2 \cdot 10^{-4} \text{ eB}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Знайдемо тепер поправки для інших термів, а саме: для термів  $2^2 P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}$  з (2.6) та (2.5). Спін-орбітальна поправка:

$$\begin{aligned} \Delta E_{ls}(2^2 P_{\frac{1}{2}}) &= \frac{E_2}{n} \frac{\alpha^2}{2l \left( l + \frac{1}{2} \right)} = -3,41 \frac{5,33 \cdot 10^{-5}}{4 \cdot \frac{3}{2}} = -0,3 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E_{ls}(2^2 P_{\frac{3}{2}}) &= -\frac{E_2}{n} \frac{\alpha^2}{2 \left( l + \frac{1}{2} \right) (l+1)} = 3,41 \frac{5,33 \cdot 10^{-5}}{4 \cdot \frac{3}{2} \cdot 2} = \\ &= 0,15 \cdot 10^{-4} \text{ eB}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Релятивістська поправка для цих термів з (2.3) дорівнює:



$$\Delta E_r(2P) = \frac{E_2}{n} \alpha^2 \left( \frac{2}{3} - \frac{3}{4 \cdot 2} \right) = -\frac{3,41}{2} \cdot 5,33 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{7}{24} =$$

$$= -0,27 \cdot 10^{-4} \text{ eB} . \quad (2.10)$$

Сумарне зміщення для терму  $2^2 P_{\frac{1}{2}}$  з урахуванням (2.9), (2.10)

складає

$$\Delta E = \Delta E_r + \Delta E_{ls} = (-0,27 - 0,3) \cdot 10^{-4} = -0,57 \cdot 10^{-4} \text{ eB} . \quad (2.11)$$

Бачимо, що це значення є таким самим, як і для терму  $2^2 S_{\frac{1}{2}}$ .

Це буде справедливим для будь-яких термів з однаковими значеннями головного  $n$  та повного  $j$  квантових чисел. Така ситуація виникає внаслідок симетричності кулонівського поля для воднеподібних атомів. Для інших атомів виродження по орбітальному квантовому числу знімається.

Для терму  $2^2 P_{\frac{3}{2}}$  сумарна додаткова енергія становитиме:

$$\Delta E = (-0,27 + 0,15) \cdot 10^{-4} = -0,12 \cdot 10^{-4} \text{ eB} . \quad (2.12)$$

Для термів  $3^2 P_{\frac{1}{2}}, 3^2 D_{\frac{3}{2}}$  маємо спін-орбітальні поправки:

$$\Delta E_{ls} \left( 3^2 P_{\frac{1}{2}} \right) = \frac{E_3}{2n} \frac{\alpha^2}{l \left( l + \frac{1}{2} \right)} = -\frac{1,51 \cdot 5,33 \cdot 10^{-5}}{6 \cdot \frac{3}{2}} = -0,089 \cdot 10^{-4} \text{ eB} ,$$

$$\Delta E_{ls} \left( 3^2 P_{\frac{3}{2}} \right) = -\frac{E_3}{2n} \frac{\alpha^2}{\left( l + \frac{1}{2} \right) (l + 1)} = \frac{1,51 \cdot 5,33 \cdot 10^{-5}}{6 \cdot \frac{3}{2} \cdot 2} =$$

$$= 0,045 \cdot 10^{-4} \text{ eB} ,$$

$$\Delta E_{ls} \left( 3^2 D_{\frac{3}{2}} \right) = \frac{E_3}{2n} \frac{\alpha^2}{l \left( l + \frac{1}{2} \right)} = -\frac{1,51 \cdot 5,33 \cdot 10^{-5}}{6 \cdot 2 \cdot \frac{5}{2}} = -0,027 \cdot 10^{-4} \text{ eB} ,$$

$$\Delta E_{ls} \left( 3^2 D_{\frac{5}{2}} \right) = -\frac{E_3}{2n} \frac{\alpha^2}{\left( l + \frac{1}{2} \right) (l + 1)} = \frac{1,51 \cdot 5,33 \cdot 10^{-5}}{6 \cdot \frac{5}{2} \cdot 3} =$$

$$= 0,018 \cdot 10^{-4} \text{ eB} \quad (2.13)$$

та релятивістські поправки:

$$\begin{aligned} \Delta E_r(3P) &= \frac{E_3}{n} \alpha^2 \left( \frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) = -\frac{1,51 \cdot 5,33 \cdot 10^{-5}}{3} \cdot \frac{5}{12} = \\ &= -0,11 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E_r(3D) &= \frac{E_3}{n} \alpha^2 \left( \frac{1}{\frac{5}{2}} - \frac{3}{12} \right) = -\frac{1,51 \cdot 5,33 \cdot 10^{-5}}{3} \cdot \frac{3}{20} \approx \\ &\approx -0,04 \cdot 10^{-4} \text{ eB}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Сумарна поправка для термів третього квантового рівня становитиме з урахуванням (2.8), (2.13), (2.14):

$$\begin{aligned} \Delta E(3^2 S_{\frac{1}{2}}) &\approx -0,2 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E(3^2 P_{\frac{1}{2}}) &= (-0,089 - 0,11) \cdot 10^{-4} \approx -0,2 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E(3^2 P_{\frac{3}{2}}) &= (0,045 - 0,11) \cdot 10^{-4} \approx -0,065 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E(3^2 D_{\frac{3}{2}}) &= (-0,027 - 0,04) \cdot 10^{-4} = -0,067 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E(3^2 D_{\frac{5}{2}}) &= (0,018 - 0,04) \cdot 10^{-4} \approx -0,02 \cdot 10^{-4} \text{ eB}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Видно, що на третьому збудженому рівні терми практично зливаються і для атомарного водню дослідити тонку структуру таких енергетичних рівнів важко, проте для більш важких воднеподібних атомів розщеплення термів стає набагато суттєвішим, оскільки додаткова енергія пропорційна  $Z^4$ .

Зазвичай формули (2.1), (2.3) та (2.4) для водню та воднеподібних атомів представлені в об'єднаному вигляді, ідентичному до розв'язку релятивістського рівняння Дірака:

$$E_{n,j} = - \left[ \frac{hcRZ^2}{n^2} + \frac{hcR\alpha^2 Z^4}{n^3} \left\{ \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right\} \right]. \quad (2.16)$$

Другий доданок представляє собою тонке розщеплення бальмерівського терму.

**Задача №3.** Обрахувати тонке розщеплення енергетичних рівнів атома водню та іона  $Li^{++}$  для  $n = 2, n = 3$ . Результати подати в  $см^{-1}$  та  $eB$ .

**Розв'язок:** Енергія рівня з урахуванням тонкої структури визначається формулою:

$$E_{n,j} = - \frac{hcZ^2 R_n}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (3.1)$$

Спектральний терм пов'язаний з енергією стаціонарного стану:

$$T_{n,j} = - \frac{E_{n,j}}{hc} = \frac{Z^2 R_n}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (3.2)$$

Різниця спектральних термів дає хвильове число:

$$\tilde{\nu} = T_{n,j_1} - T_{k,j_2} = \frac{1}{\lambda}, \quad (3.3)$$

яке характеризує довжину хвилі, що випромінюється або поглинається під час переходу між станами  $(n, j_1)$  та  $(k, j_2)$ .

Тонке розщеплення енергетичного рівня з  $n = 2$  визначаємо як різницю енергій термів  $2^2P_{\frac{3}{2}}$  та  $2^2P_{\frac{1}{2}}$ , а для рівня з  $n = 3$  – термів  $3^2P_{\frac{3}{2}} - 3^2P_{\frac{1}{2}}$  та  $3^2D_{\frac{5}{2}} - 3^2D_{\frac{3}{2}}$ .

У першому випадку в формулу (3.1) підставляємо

$$n = 2, j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}:$$

$$\begin{aligned} E_{2, \frac{1}{2}} &= -\frac{hcZ^2 R_H}{4} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2 5}{16} \right], \\ E_{2, \frac{3}{2}} &= -\frac{hcZ^2 R_H}{4} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{16} \right]. \\ \Delta E_1 &= \frac{hcZ^4 \alpha^2 R_H}{16} - \text{різниця енергій.} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Для рівня  $n = 3$  з (3.1) знаходимо:

$$\begin{aligned} E_{3, \frac{1}{2}} &= -\frac{hcZ^2 R_H}{9} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{4} \right], \\ E_{3, \frac{3}{2}} &= -\frac{hcZ^2 R_H}{9} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{12} \right], \\ E_{3, \frac{5}{2}} &= -\frac{hcZ^2 R_H}{9} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{36} \right]. \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} E_{3, \frac{3}{2}} - E_{3, \frac{1}{2}} &= \Delta E_2 = \frac{hcZ^4 \alpha^2 R_H}{54}, \\ E_{3, \frac{5}{2}} - E_{3, \frac{3}{2}} &= \Delta E_3 = \frac{hcZ^4 \alpha^2 R_H}{162}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Підставимо в (3.4), (3.5) та (3.6) числові значення та врахувавши, що

$$hcR_H = 13,61 \text{ eB}, \quad \alpha^2 = 5,33 \cdot 10^{-5},$$

отримаємо для водню:

$$\begin{aligned} \Delta E_1 &= \frac{13,61 \cdot 5,33 \cdot 10^{-5}}{16} = 0,45 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E_2 &= \frac{13,61 \cdot 5,33 \cdot 10^{-5}}{54} = 0,13 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E_3 &= 0,05 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

та для  $Li^{++} (Z = 3)$ :

$$\begin{aligned}\Delta E_1 &= 0,45 \cdot 10^{-4} \cdot 81 = 36,45 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E_2 &= 0,13 \cdot 10^{-4} \cdot 81 = 10,53 \cdot 10^{-4} \text{ eB}, \\ \Delta E_3 &= 0,05 \cdot 10^{-4} \cdot 81 = 3,65 \cdot 10^{-4} \text{ eB}.\end{aligned}\tag{3.8}$$

Як видно з результатів розрахунку, розщеплення термів внаслідок спин-орбітальної взаємодії (тонка структура) пропорційне  $Z^4$ , тому є значно більшим для воднеподібних атомів. Виразимо тепер розщеплення енергетичних рівнів в  $\text{см}^{-1}$ . Для цього використаємо наступну формулу:

$$\Delta T = -\frac{\Delta E}{hc},\tag{3.9}$$

де  $\Delta T$  – різниця спектральних термів. З урахуванням (3.4), (3.5) та (3.6), отримаємо:

$$\Delta T_1 = \frac{Z^4 \alpha^2 R_H}{16}, \quad \Delta T_2 = \frac{Z^4 \alpha^2 R_H}{54}, \quad \Delta T_3 = \frac{Z^4 \alpha^2 R_H}{162}.\tag{3.10}$$

З (3.10), підставивши числові значення, знаходимо для атома водню:

$$\begin{aligned}\Delta T_1 &= 0,36 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}, \\ \Delta T_2 &= 0,1 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}, \\ \Delta T_3 &= 0,04 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1},\end{aligned}\tag{3.11}$$

та для іону  $Li^{++}$ :

$$\begin{aligned}\Delta T_1 &= 29,35 \text{ см}^{-1}, \\ \Delta T_2 &= 8,49 \text{ см}^{-1}, \\ \Delta T_3 &= 2,94 \text{ см}^{-1}.\end{aligned}\tag{3.12}$$

**Задача № 4. Розрахувати тонку структуру перших трьох спектральних ліній  $L_\alpha$ ,  $L_\beta$  та  $L_\gamma$  серії Лаймана атомарного водню. Знайти роздільну здатність  $\mathfrak{R}$  спектрального приладу, яка є достатньою для дослідження тонкої структури ліній.**

**Розв'язок:** У задачі №1 ми розглянули можливі терми, що виникають внаслідок спин-орбітальної взаємодії для енергетичного рівня з  $n = \text{const}$  і на рис.2 зобразили діаграму рівнів.

Використаємо тепер ці дані для розв'язку нашої задачі. Відомо, що серія Лаймана спостерігається в спектрах поглинання атома водню під час переходу електрона з найнижчого енергетичного рівня з  $n=1$  до вищих рівнів. Аналогічно, в спектрах випромінювання ця сама серія відповідає переходам з вищих рівнів до основного  $n=1$ . З усіх можливих переходів будуть реалізовуватись лише ті, що дозволені правилами відбору:

$$\Delta l = \pm 1, \Delta j = 0, \pm 1. \quad (4.1)$$

Зваживши на (4.1), отримаємо для першої лінії  $L_\alpha$  серії Лаймана два можливі переходи (рис.3):

$$\begin{aligned} 1^2S_{\frac{1}{2}} &\rightarrow 2^2P_{\frac{1}{2}} \\ 1^2S_{\frac{1}{2}} &\rightarrow 2^2P_{\frac{3}{2}} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Ці дві близькі лінії і утворюють тонку структуру спектральної лінії  $L_\alpha$ . Аналогічні дублети отримаємо для лінії  $L_\beta$  (перехід  $n=3 \rightarrow n=1$ ):

$$\begin{aligned} 1^2S_{\frac{1}{2}} &\rightarrow 3^2P_{\frac{1}{2}} \\ 1^2S_{\frac{1}{2}} &\rightarrow 3^2P_{\frac{3}{2}} \end{aligned} \quad (4.3)$$

та для  $L_\gamma$  ( $n=4 \rightarrow n=1$ ):

$$\begin{aligned} 1^2S_{\frac{1}{2}} &\rightarrow 4^2P_{\frac{1}{2}} \\ 1^2S_{\frac{1}{2}} &\rightarrow 4^2P_{\frac{3}{2}} \end{aligned} \quad (4.4).$$

Як і в задачі №2, використаємо формулу для тонкої структури і визначимо терми, що відповідають переходам (4.2), (4.3) та (4.4):

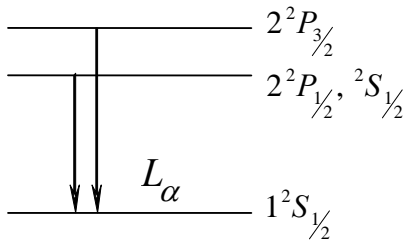


Рис. 3. Тонка структура головної лінії серії Лаймана атомарного водню

$$\begin{aligned}
T_{1,\frac{1}{2}} &= R_n \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{4} \right\}; & T_{3,\frac{3}{2}} &= \frac{R_n}{9} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{12} \right\}; \\
T_{2,\frac{1}{2}} &= \frac{R_n}{4} \left\{ 1 + \frac{5\alpha^2}{16} \right\}; & T_{4,\frac{1}{2}} &= \frac{R_n}{16} \left\{ 1 + \frac{13\alpha^2}{64} \right\}; \\
T_{2,\frac{3}{2}} &= \frac{R_n}{4} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{16} \right\}; & T_{4,\frac{3}{2}} &= \frac{R_n}{16} \left\{ 1 + \frac{5\alpha^2}{64} \right\}; \\
T_{3,\frac{1}{2}} &= \frac{R_n}{9} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{4} \right\}.
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Для  $L_\alpha$ ,  $L_\beta$  та  $L_\gamma$  маємо довжини хвиль компонент дублету:

$$\begin{aligned}
\tilde{\nu}_{L_{\alpha_1}} &= T_{1,\frac{1}{2}} - T_{2,\frac{1}{2}} = \frac{1}{\lambda_{L_{\alpha_1}}}; & \tilde{\nu}_{L_{\beta_2}} &= T_{1,\frac{1}{2}} - T_{3,\frac{3}{2}} = \frac{1}{\lambda_{L_{\beta_2}}}; \\
\tilde{\nu}_{L_{\alpha_2}} &= T_{1,\frac{1}{2}} - T_{2,\frac{3}{2}} = \frac{1}{\lambda_{L_{\alpha_2}}}; & \tilde{\nu}_{L_{\gamma_1}} &= T_{1,\frac{1}{2}} - T_{4,\frac{1}{2}} = \frac{1}{\lambda_{L_{\gamma_1}}}; \\
\tilde{\nu}_{L_{\beta_1}} &= T_{1,\frac{1}{2}} - T_{3,\frac{1}{2}} = \frac{1}{\lambda_{L_{\beta_1}}}; & \tilde{\nu}_{L_{\gamma_2}} &= T_{1,\frac{1}{2}} - T_{4,\frac{3}{2}} = \frac{1}{\lambda_{L_{\gamma_2}}}.
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Підставивши числові значення в (4.5) та використавши (4.6), знайдемо для  $L_\alpha$ :

$$\begin{aligned}
\lambda_{L_{\alpha_1}} &= \frac{1}{109677,576 \cdot 0,75000916} = 121,542119 \text{ нм}; \\
\lambda_{L_{\alpha_2}} &= \frac{1}{109677,576 \cdot 0,7500125} = 121,541579 \text{ нм} \Rightarrow \\
\Delta\lambda_{L_\alpha} &= 5,4 \cdot 10^{-4} \text{ нм}.
\end{aligned}$$

Для наступних ліній маємо:

$$\begin{aligned}
\lambda_{L_{\beta_1}} &= 102,551049 \text{ нм}; & \lambda_{L_{\gamma_1}} &= 97,233571 \text{ нм}; \\
\lambda_{L_{\beta_2}} &= 102,550935 \text{ нм} \Rightarrow & \lambda_{L_{\gamma_2}} &= 97,233528 \text{ нм} \Rightarrow \\
\Delta\lambda_{L_\beta} &= 1,14 \cdot 10^{-4} \text{ нм}. & \Delta\lambda_{L_\gamma} &= 0,43 \cdot 10^{-4} \text{ нм}.
\end{aligned}$$

Найменшою є відстань між компонентами дублета

$\Delta\lambda_{L_\gamma} = 0,43 \cdot 10^{-4} \text{ нм}$ . Тому роздільна здатність спектрального приладу повинна бути такою:

$$\mathfrak{R} = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} > \frac{97,234}{0,43 \cdot 10^{-4}} \cong 2,3 \cdot 10^6.$$

Таку роздільну здатність можна отримати, використовуючи інтерферометр Фабрі-Перо. Але внаслідок уширення спектральних ліній експериментально таку структуру в оптичному діапазоні дослідити практично неможливо. Розщеплення термів  $2^2P_{\frac{1}{2}}$  та  $2^2P_{\frac{3}{2}}$  добре досліджене методами радіоспектроскопії та лазерної спектроскопії.

**Задача №5.** Враховуючи, що протон має власний спін  $I = \frac{1}{2}$ , виписати всі можливі терми електрона в атомі водню для  $n=1, 2, 3$  та позначити переходи, що виникають між рівнями  $n=1$ ,  $n=2$  та  $n=3$  (надтонка структура спектральних ліній).

**Розв'язок:** Врахування взаємодії повного механічного моменту  $\vec{P}_j$  електрона в атомі водню та ядерного спінового моменту  $\vec{P}_I$  призводить до надтонкого розщеплення рівнів. Повний момент кількості руху атома з урахуванням ядерного спіну:

$$\begin{aligned} \vec{P}_F &= \vec{P}_j + \vec{P}_I, \\ |\vec{P}_F| &= \hbar\sqrt{F(F+1)}, \end{aligned} \quad (5.1)$$

де  $F$  – повне квантове число атома.

Ми вже розв'язували задачу, де знаходили тонку структуру термів атомарного водню (Задача 1). Використаємо отримані дані, враховуючи, що кожен терм додатково розщепиться за рахунок взаємодії векторів  $\vec{P}_j$  та  $\vec{P}_I$ .

Термам  $^2S_{\frac{1}{2}}, ^2P_{\frac{1}{2}}$  відповідає значення  $j = \frac{1}{2}$ . Знайдемо можливі значення квантового числа  $F$ , що характеризує мо-



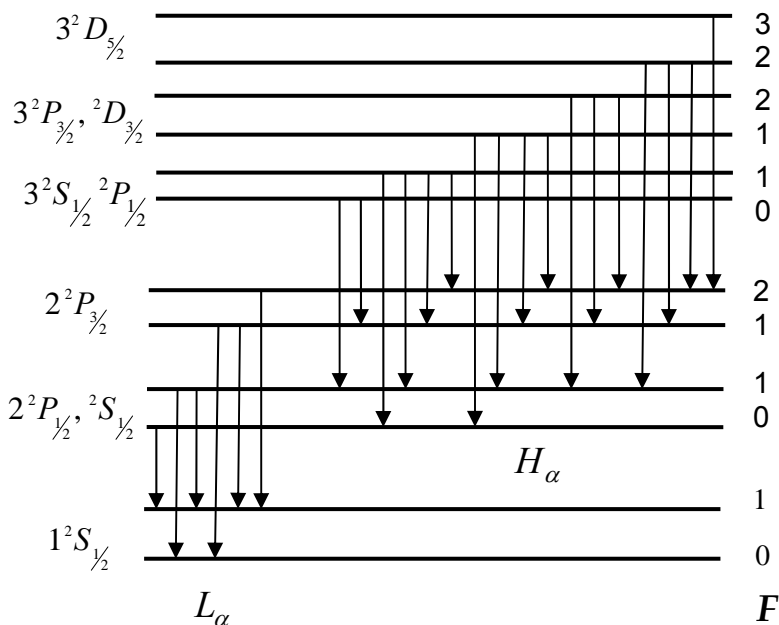


Рис. 4. Надтонка структура головних ліній серій Лаймана та Бальмера атомарного водню

мент  $\vec{P}_F$ :

$$F = j + I, j + I - 1, \dots, |j - I|. \quad (5.2)$$

Для  $j = I = \frac{1}{2}$   $F = 0, 1$ . Аналогічно, термам  $^2P_{3/2}, ^2D_{3/2}$  відповідає значення  $j = \frac{3}{2}$  і в цьому випадку  $F = 1, 2$ , для  $j = \frac{5}{2}$  -  $F = 2, 3$ , тобто кожен терм розщеплюється на дві компоненти. Побудуємо діаграму енергетичних рівнів з урахуванням надтонкого розщеплення (рис.4).

Щоб визначити дозволені спектральні переходи, ми повинні врахувати правила відбору для квантового числа  $F$ :

$$\Delta F = 0, \pm 1, F_1 = 0 \not\rightarrow F_2 = 0. \quad (5.3)$$

Використавши (5.3), на діаграмі отримуємо 6 ліній надтон-

кого розщеплення для переходу  $n = 2 \rightarrow n = 1$  (головна лінія серії Лаймана) та 17 ліній надтонкого розщеплення для переходу  $n = 3 \rightarrow n = 2$  (головна лінія серії Бальмера).

Зауважимо, що методами оптичної спектроскопії надтонку структуру спектральних ліній розділити практично неможливо.

**Задача №6.** Експериментально визначено, що надтонке розщеплення енергетичного рівня атомарного водню  $1^2S_{\frac{1}{2}}$  дорівнює  $6,06 \cdot 10^{-6} \text{ eB}$  ( $\nu = 1470 \text{ МГц}$ ). Якою є напруженість магнітного поля, створюваного електроном, що знаходиться в стані  $1s$ , в центрі ядра атома водню?

**Розв'язок:** Причиною надтонкого розщеплення рівня  $1^2S_{\frac{1}{2}}$  є взаємодія магнітного спінового моменту електрона (в стані  $s$  орбітальний момент електрона дорівнює нулю) з магнітним моментом протона. Відомо, що енергія взаємодії магнітного моменту з магнітним полем

$$\delta E = -(\vec{\mu}_I \vec{H}) = -\mu_I H \cos(\vec{\mu}_I \vec{H}) = \mu_I H \cos(\vec{I} \vec{J}), \quad (6.1)$$

де  $\vec{\mu}_I$  – магнітний момент ядра (в даному випадку це магнітний момент протона),  $H$  – напруженість магнітного поля, яке створює електронна оболонка в місці знаходження ядра,  $\vec{I}$  – механічний момент ядра. Формули (5.1) та (5.2) з попередньої задачі дають вираз для повного орбітального моменту атома. Косинус кута між векторами ядерного та механічного моментів атома знайдемо як

$$\cos(\vec{I} \vec{J}) = \frac{|\vec{F}|^2 - |\vec{I}|^2 - |\vec{J}|^2}{2|\vec{I}||\vec{J}|} = \frac{F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)}{2\sqrt{I(I+1)J(J+1)}}. \quad (6.2)$$

Підставляючи (6.2) в (6.1), одержимо для енергії взаємодії

$$\begin{aligned} \delta E &= \mu_I H \frac{F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)}{2\sqrt{I(I+1)J(J+1)}} = \\ &= \frac{1}{2} A [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)], \end{aligned}$$

де

$$A = \frac{\mu_I H}{\sqrt{I(I+1)J(J+1)}}. \quad (6.3)$$

Враховуючи, що спін протона  $I = \frac{1}{2}$ , для терму  $1^2 S_{\frac{1}{2}}$  отримаємо два значення повного механічного квантового числа  $F = 0, 1$ . Знайдемо величину надтонкого розщеплення:

$$\delta E_1(F=0) = \frac{1}{2} A \left[ 0(0+1) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \right] = -\frac{3}{4} A;$$

$$\delta E_2(F=1) = \frac{1}{2} A \left[ 1(1+1) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \right] = \frac{1}{4} A;$$

$$\Delta E = \delta E_2 - \delta E_1 = A;$$

Згідно умови,  $A = 6,06 \cdot 10^{-6} \text{ eB}$ . Відомо, що магнітний момент протона дорівнює  $2,79\mu_{\text{я}}$ , де  $\mu_{\text{я}}$  – ядерний магнетон  $\mu_{\text{я}} = 5 \cdot 10^{-24} \text{ ерг} / \Gamma_{\text{с}} = 3152 \cdot 10^{-12} \text{ eB} / \Gamma_{\text{с}}$ . З (6.3) отримаємо значення напруженості магнітного поля

$$H = \frac{A \sqrt{I(I+1)J(J+1)}}{\mu_I} = \frac{6,06 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{3}{4}}{3,152 \cdot 10^{-12}} = 1,44 \cdot 10^6 \text{ E}. \quad (6.4)$$

Зробимо таку саму оцінку, використовуючи класичний метод. З електродинаміки відомо, що напруженість магнітного поля диполя з магнітним моментом  $\vec{\mu}$  дорівнює

$$H = \frac{3(\vec{\mu}_e \vec{R}) \vec{R}}{R^5} - \frac{|\vec{\mu}_e|}{R^3}. \quad (6.5)$$

Максимальне значення напруженості магнітного поля

$$H \approx 2 \frac{\mu_e}{R^3}. \text{ Магнітний момент електрона}$$

$$\mu_e = \mu_B \frac{\sqrt{3}}{2} = 0,87\mu_B = 0,81 \cdot 10^{-20} \frac{\text{ерг}}{\Gamma_{\text{с}}}. \quad (6.6)$$

Відстань до центру ядра дорівнює радіусу першої борівської орбіти:  $R \approx 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ .

Оцінимо напруженість магнітного поля електрона в центрі ядра

$$H \simeq \frac{0,81 \cdot 10^{-20} \frac{epc}{Gc}}{0,148 \cdot 10^{-24} \frac{cm^3}{Gc}} = 1,094 \cdot 10^5 E. \quad (6.7)$$

Як бачимо, результат, розрахований з класичної точки зору, не співпадає з експериментально визначеним значенням  $H$ .

**Задача №7. Розрахувати величину лембівського зсуву між термами  $2^2S_{\frac{1}{2}}$  та  $2^2P_{\frac{1}{2}}$  для атома водню. Порівняти отриманий результат з даними експерименту.**

**Розв'язок:** Для розв'язання задачі скористаємось флуктуаційним методом. Для цього розглянемо стаціонарний стан електрона в атомі чи іоні, що характеризується головним квантовим числом  $n$  і хвильовою функцією  $\psi_n$ . Електрон знаходиться в кулонівському полі ядра і має потенціальну енергію в цьому полі

$$U(r) = \frac{Ze^2}{r}, \quad (7.1)$$

де  $Z$  – порядковий номер атома,  $r$  – відстань між електроном та ядром. Середнє значення потенціальної енергії  $\bar{U}$  в стані  $n$  електрона може бути подана у вигляді (див. (8) в розділі 4):

$$\bar{U} = \int_V U(r) |\psi_n(\vec{r})|^2 dV, \quad (7.2)$$

де  $|\psi_n(\vec{r})|^2$  – густина імовірності знаходження електрона в точці з радіус-вектором  $\vec{r}$ ; інтеграл розраховується за об'ємом  $V$ , де  $\psi_n(\vec{r}) \neq 0$ . Формули (7.1), (7.2) не враховують взаємодії електрона з нульовими коливаннями електромагнітного поля.

Взаємодія електрона з нульовими коливаннями поля призводить до того, що електрон флюктує навколо точки з радіус-вектором  $\vec{r}$ . Його потенціальна енергія  $U(r)$  також флук-

туює, що призводить до зміни середнього значення потенціальної енергії  $\bar{U}$ . Далі буде показано, що саме такою зміною середньої потенціальної енергії взаємодії можна описати зміщення терма  $2^2S_{\frac{1}{2}}$  електрона відносно терма  $2^2P_{\frac{1}{2}}$ .

Щоб знайти зміну середнього значення потенціальної енергії, спочатку розглянемо вираз  $U(\vec{r} + \delta\vec{r})$ , де  $\delta\vec{r}$  – мала зміна радіус-вектора електрона за рахунок нульових коливань. Розкладемо вираз  $U(\vec{r} + \delta\vec{r})$  в ряд Тейлора за степенями малого параметра  $\delta\vec{r}$ :

$$U(\vec{r} + \delta\vec{r}) = U(\vec{r}) + \delta\vec{r} \cdot \text{grad} U(\vec{r}) + \frac{1}{2}(\delta\vec{r} \cdot \text{grad} U(\vec{r}))^2 + \dots \quad (7.3)$$

Знехтуємо в розкладі (7.3) доданками, що пропорційні до  $\sim (\delta\vec{r})^\gamma$ , де  $\gamma \geq 3$ . Тоді після усереднення (7.3) перший член розкладу  $\overline{U(\vec{r})} = \bar{U}$ , другий –  $\overline{\delta\vec{r} \cdot \text{grad} U(\vec{r})} = 0$ , оскільки  $\delta\vec{r}$  – випадкова величина з нульовим середнім значенням ( $\overline{\delta\vec{r}} = 0$ ), третій – визначає поправку до енергії

$$\delta E_n = e\delta U = \frac{e}{6} \int_V \overline{(\delta\vec{r})^2} \cdot \Delta U(\vec{r}) |\psi_n(\vec{r})|^2 dV, \quad (7.4)$$

де враховано, що  $\overline{(\delta\vec{r} \cdot \text{grad} U(\vec{r}))^2} = \frac{1}{3} \overline{(\delta\vec{r})^2} \Delta U(\vec{r})$ ,  $\Delta$  – оператор Лапласа.

Будемо вважати, що величина  $\overline{(\delta\vec{r})^2}$  не залежить від стану електрона  $n$ , оскільки від стану електрона не залежать властивості нульових коливань, отже, величину  $\overline{(\delta\vec{r})^2}$  можна винести з-під знака інтеграла. Лапласіан кулонівського потенціалу в (7.4) пропорційний до густини заряду, який його створює:

$$\Delta U(\vec{r}) = 4\pi\rho(\vec{r}), \quad (7.5)$$

де  $\rho(\vec{r})$  – густина заряду ядра, яку можна приблизно описати  $\delta$ -функцією:  $\rho = Ze\delta(\vec{r})$ , де  $Ze$  – заряд ядра. Таким чином, з

(7.4), (7.5) отримуємо:

$$\delta E_n = \frac{2\pi}{3} Z e^2 \overline{(\delta \vec{r})^2} |\psi_n(0)|^2, \quad (7.6)$$

де  $|\psi_n(0)|^2$  – квадрат амплітуди хвильової функції в точці з радіус-вектором  $\vec{r}=0$  (в ядрі атома). Очевидно, що  $|\psi_n(0)|^2 \neq 0$  тільки якщо електрон під час свого руху перебуває в околі ядра, а це має місце, коли його орбітальний момент дорівнює нулю, тобто лише в s-станах при орбітальному квантовому числі  $l=0$ . Отже, s-стани мають додаткову енергію  $\delta E_n$ . Для інших станів  $\delta E_n = 0$ .

Для воднеподібних систем квантова теорія дає наступний вираз для хвильової функції  $\psi_n(r, \theta, \varphi)$  [44]:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (7.7)$$

де

$$R_{nl}(r) = \left( \frac{Z}{na_0} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-l-1)!(n+l)!}} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right)^l \exp\left( -\frac{Zr}{na_0} \right) \times \\ \times Q_{n-l-1}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right), \quad (7.8)$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \alpha_m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) \exp(im\varphi), \quad (7.9)$$

$Q_{n-l-1}^{2l+1}$  – узагальнений поліном Лаггера порядку  $n-l-1$ ,

$P_l^{|m|}(\cos \theta)$  – поліном Лежандра,  $\alpha_m = \begin{cases} +1, & m \geq 0 \\ -1, & m < 0 \end{cases}$ ,  $a_0$  – пер-

ший борівський радіус.

Для s-станів при  $l=m=0$  з (7.7) – (7.9) отримаємо:

$$R_{n0}(0) = 2 \left( \frac{Z}{na_0} \right)^{3/2}, \quad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \quad (7.10)$$

Отже,

$$|\Psi_n(0)|^2 = R_{n0}^2 |Y_0^0|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3}. \quad (7.11)$$

Середнє значення квадрата зміщення  $\overline{(\delta\vec{r})^2}$  електрона можна знайти методами класичної електродинаміки. Нехай на електрон діє поле вакууму  $\vec{E} = \int \vec{E}_\omega \cos(\omega t + \phi) d\omega$ , де  $\omega$  – колова частота,  $\phi$  – початкова фаза коливань. Тоді, відповідно до другого закону Ньютона,

$$m \frac{d^2 \delta\vec{r}}{dt^2} = -e\vec{E} = -e \int \vec{E}_\omega \cos(\omega t + \phi) d\omega, \quad (7.12)$$

де  $m$  – маса електрона. Враховуючи, що  $\frac{d^2 \delta\vec{r}}{dt^2} = -\omega^2 \delta\vec{r}$ , одержимо з (7.12):

$$(\delta\vec{r})^2 = \frac{e^2}{m^2} \int \frac{E_\omega^2}{\omega^4} \cos^2(\omega t + \phi) d\omega. \quad (7.13)$$

Після усереднення (7.13) по часу, враховуючи, що  $\overline{\cos^2(\omega t + \phi)} = \frac{1}{2}$ , одержуємо:

$$\overline{(\delta\vec{r})^2} = \frac{e^2}{2m^2} \int \frac{E_\omega^2}{\omega^4} d\omega. \quad (7.14)$$

Знайдемо  $E_\omega^2$ , виходячи з наступних міркувань. Нехай електрон знаходиться всередині області простору з об'ємом  $V$ , причому  $V \gg a_e^3$ , де  $a_e$  – радіус електрона, і тому можна вважати, що майже вся енергія нульових коливань поля  $\bar{W}$  зосереджена в цьому об'ємі. Тоді середнє значення цієї енергії легко знайти за класичною формулою

$$\bar{W} = \frac{1}{8\pi} \int_V (\overline{E^2} + \overline{H^2}) dV = \frac{\overline{E^2}}{4\pi} V = \frac{V}{8\pi} \int E_\omega^2 d\omega, \quad (7.15)$$

де  $H = \int H_\omega \cos(\omega t + \phi) d\omega$ . В (7.15) вважається, що  $\overline{E^2} = \overline{H^2}$ .

Скористаємось тепер відомою формулою [33, 44]

$$Z(\omega) d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega, \quad (7.16)$$

що дає кількість власних коливань в частотному інтервалі від  $\omega$  до  $\omega + d\omega$  в одиничному об'ємі. Тоді середня енергія  $\overline{W}$  поля вакууму в об'ємі  $V$  дорівнює сумі середніх енергій власних коливань (осциляторів) поля, енергія кожного з яких дорівнює  $\frac{\hbar\omega}{2}$ . Отже,

$$\overline{W} = V \int d\omega Z(\omega) \cdot \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{V}{8\pi} \int E_{\omega}^2 d\omega, \quad (7.17)$$

звідки

$$E_{\omega}^2 = \frac{4 \hbar \omega^3}{\pi c^3}. \quad (7.18)$$

Підставляючи (7.18) в (7.14), одержимо:

$$\overline{(\delta\vec{r})^2} = \frac{e^2}{2m^2} \int \frac{4 \hbar \omega^3}{\pi c^3} \frac{d\omega}{\omega^4} = \frac{2}{\pi} \frac{e^2 \hbar}{m^2 c^3} \int \frac{d\omega}{\omega}. \quad (7.19)$$

Основною проблемою при розрахунку величини  $\overline{(\delta\vec{r})^2}$  є вибір меж інтегрування в інтегралі (7.19). Якщо взяти в (7.19) нуль як нижню межу та нескінченність замість верхньої межі, то інтеграл (7.19) буде розбіжним. Насправді, електрон слабо реагує на частоти, менші за  $\frac{E_0}{\hbar}$ , де  $E_0$  – енергія зв'язку, а в області енергій  $\sim mc^2$  зростає релятивістська маса, отже, зменшуються флуктуації. При частотах більших за  $\frac{2mc^2}{\hbar}$  вже можливе утворення електронно-позитронних пар, що зовсім не враховується в (7.19). Тому вираз для  $\overline{(\delta\vec{r})^2}$  з достатньою точністю може бути поданим у вигляді

$$\overline{(\delta\vec{r})^2} = \frac{2}{\pi} \frac{e^2 \hbar}{m^2 c^3} \int_{E_0/\hbar}^{mc^2/\hbar} \frac{d\omega}{\omega} = \frac{2}{\pi} \frac{e^2 \hbar}{m^2 c^3} \ln \left( \frac{mc^2}{E_0} \right), \quad (7.20)$$

де враховано, що релятивістські явища стають суттєвими вже при частотах  $\omega \sim \frac{mc^2}{\hbar}$  [2\*, 44].

Підставляючи (7.11), (7.20) в (7.6), одержуємо



$$\begin{aligned}\delta E_n &= \frac{2\pi}{3} Ze^2 \cdot \frac{2}{\pi} \frac{e^2 \hbar}{m^2 c^3} \ln \left( \frac{mc^2}{E_0} \right) \cdot \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3} = \\ &= \frac{4}{3\pi} \frac{Z^4 e^4 \hbar}{m^2 c^3 a_0^3 n^3} \ln \left( \frac{mc^2}{E_0} \right).\end{aligned}\quad (7.21)$$

Якщо тепер врахувати, що, відповідно до узагальненої формули Бальмера,

$$E_0 = E_H Z^2, \quad (7.22)$$

де  $E_H = 13,56 \text{ eV}$  – енергія зв'язку електрона в атомі водню, з (7.21), (7.22) одержуємо кінцевий вираз для енергетичної величини лембівського зсуву:

$$\delta E_n = \frac{4}{3\pi} \frac{Z^4 e^4 \hbar}{m^2 c^3 a_0^3 n^3} \ln \left( \frac{mc^2}{E_H Z^2} \right). \quad (7.23)$$

З (7.23) випливає, що  $\delta E_n$  суттєво зростає із збільшенням  $Z$ . Отже, величина лембівського зсуву для атома гелію повинна бути значно більша ніж для атома водню, що й спостерігається на експерименті [2–4].

Для атома водню формула (7.23) дає таке значення поправки до енергії ( $n = 2$ )

$$\begin{aligned}\delta E_2 &= \frac{4}{3 \cdot 3,14} \frac{1^4 (4,8 \cdot 10^{-10})^4 \cdot 1,05 \cdot 10^{-27}}{(9,1 \cdot 10^{-28})^2 (3 \cdot 10^{10})^3 (0,53 \cdot 10^{-8})^3 2^3} \times \\ &\times \ln \left( \frac{9,1 \cdot 10^{-28} \cdot (3 \cdot 10^{10})^2}{13,56 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12} \cdot 1^2} \right) = 8,89 \cdot 10^{-19} \cdot \ln(3,77 \cdot 10^4) = \\ &= 8,89 \cdot 10^{-19} \cdot 10,5 = 93,35 \cdot 10^{-19} \text{ ерг} \approx 5,8 \cdot 10^{-6} \text{ eV},\end{aligned}\quad (7.24)$$

що по порядку величини співпадає з експериментальним значенням (7). Похибка отриманого результату

$$\frac{\delta E_2 - \delta E_{\text{exp}}}{\delta E_{\text{exp}}} = \frac{(5,8 - 4,4) \cdot 10^{-6}}{4,4 \cdot 10^{-6}} \cdot 100\% \approx 32\%, \quad (7.25)$$

що свідчить про наявність доволі грубих припущень в обраній моделі.

За допомогою теоретичних методів релятивістської кван-

тової теорії зараз спромоглись визначити величину лембівського зсуву для атома водню з похибкою  $10^{-4} \%$  [1\*–4\*, 44].

### **Задачі для самостійної роботи**

1. Як відрізнити лембівський зсув рівнів атомарного водню від зсуву за рахунок релятивістської поправки?
2. Показати на підставі формули тонкої структури (1), що серед рівнів атома водню, які належать одному й тому ж головному квантовому числу, є пари однакових. Розглянути терми  $4S, 4P, 4D, 4F$ .
3. Чому при лембівському зсуві рівень  $^2S_{\frac{1}{2}}$  знаходиться вище, ніж  $^2P_{\frac{1}{2}}$ ? Як це було доведено експериментально?
4. Атом водню збудили до стану  $4^2D_{\frac{5}{2}}$ . Які серії будуть спостерігатись у спектрі випромінювання? Вкажіть кількість компонент тонкої структури.
5. Намалюйте розщеплення рівня  $n=4$  атома водню з урахуванням тонкої та надтонкої структури енергетичних рівнів.
6. Зобразіть головну лінію серії Пашена в атомі водню з урахуванням тонкої та надтонкої структур.
7. Розрахувати тонку структуру спектральної лінії  $H_{\beta}$  серії Бальмера для атомарного водню та іону  $He^+$ .
8. Показати, враховуючи орбітальну взаємодію, що інтервали між компонентами одного мультиплету (за шкалою частот) відносяться, як цілі числа. *Вказівка:* Енергія спінової взаємодії пропорційна  $\cos(\vec{P}_l \vec{P}_s)$ .
9. Електронна оболонка атома створює в місці розташування ядра магнітне поле з індукцією  $\vec{B}_0$ , напрямком якого співпадає з напрямком механічного моменту електронної оболонки  $\vec{J}$ . Додаткова енергія взаємодії магнітного моменту ядра з цим полем залежить від орієнтації механічних моментів  $\vec{I}$  та  $\vec{J}$ , яка визначається правилами прос-

торового квантування. Виходячи з цих міркувань, показати, що спектральні інтервали між сусідніми підрівнями, що характеризуються квантовими числами  $F, F+1, F+2, \dots$ , відносяться як  $(F+1):(F+2): \dots$ .

10. Знайти кількість компонент надтонкого розщеплення спектральних ліній, що відповідають переходам  ${}^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow {}^2S_{\frac{1}{2}}$  та

${}^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow {}^2S_{\frac{1}{2}}$  для атомів водню та дейтерію, якщо спін дейтрону  $I_d = 1$ .

11. Довжина хвилі випромінювання, яке відповідає магнітодипольним переходам між компонентами надтонкої структури основного стану атома водню, дорівнює  $\lambda_H = 21 \text{ см}$ . Визначити довжину хвилі переходу між компонентами надтонкої структури атома дейтерію, якщо відомо, що спін протона  $I_p = \frac{1}{2}$ , спін дейтрона  $I_d = 1$ , а гіромагнітні відношення для протона та нейтрона дорівнюють  $g_p = 5,6$  та  $g_n = -3,8$ .

12. Оцінити величину лембівського зсуву між термами  $2^2S_{\frac{1}{2}}$  та  $2^2P_{\frac{1}{2}}$  термами для однократно іонізованого атома гелію. Проаналізувати отриманий результат.

13. Оцінити різницю в довжинах хвиль між термами  $2^2S_{\frac{1}{2}}$  та  $2^2P_{\frac{1}{2}}$  для двічі іонізованого атома літію.

14. Розрахувати величину зсуву терма  $3^2S_{\frac{1}{2}}$  відносно терма  $3^2P_{\frac{1}{2}}$  для атома водню.

15. Порівняти нормовану величину лембівського зсуву  $\frac{\Delta\nu}{\nu}$ , де  $\Delta\nu$  – зсув частоти,  $\nu$  – частота, що відповідає енергії

зв'язку електрона в s-стані, для атома водню та іону гелію ( $n = 2$ ). Оцінити можливості спостереження відповідних лембівських зсувів на експерименті.

16. Порівняти величину лембівського зсуву для атома водню та іону гелію ( $n = 2$ ) з величиною надтонкого розщеплення спектральних S- та P-термів цих систем. Вказати, який із зазначених ефектів (лембівський зсув чи надтонке розщеплення спектральних ліній) є домінуючим. Чому?
17. Побудувати схематичну енергетичну діаграму спектральних ліній для атома водню та однократно іонізованого атома гелію, де врахувати тонку і надтонку структури спектральних ліній, а також наявність лембівського зсуву для S-термів.

### ***Література***

1. Лэмб У.Э., Ризерфорд Р.К. Тонкая структура водородного атома // Успехи Физических Наук. – 1951. – Т. 45, № 4. – С. 553–615.
2. Смородинский Я.А. Смещение термов водородоподобных атомов и аномальный магнитный момент электрона // Успехи Физических Наук. – 1949. – Т. 39, № 3. – С.325–358.
3. Вайскопф В.Ф. Современные достижения в теории электрона // Успехи Физических Наук. – 1950. – Т. 41, № 2. – С.165–188.
4. Салпетер Е.Е. Лэмбовский сдвиг для водорода и дейтерия // Успехи Физических Наук. – 1953. – Т. 51, № 1. – С. 115–129.

## Розділ 8. СПЕКТРИ АТОМІВ ЛУЖНИХ МЕТАЛІВ

### Основні теоретичні відомості

Атоми лужних металів або лужноподібних іонів мають завершену електронну конфігурацію інертного газу і слабо зв'язаний валентний електрон. Оптичні властивості таких атомів обумовлені саме валентним електроном, який знаходиться в  $s$ -стані. Основним термом атомів лужних металів є  $n^2 S_{\frac{1}{2}}$ , де  $n$  — головне квантове число оболонки, на якій зна-

ходиться валентний електрон (наприклад, для  $Li$  —  $2^2 S_{\frac{1}{2}}(1s^2 2s^1)$ , для  $Na$  —  $3^2 S_{\frac{1}{2}}(1s^2 2s^2 2p^6 3s^1)$  і т.д.).

В атомі лужного металу, на відміну від атома водню, валентний електрон знаходиться не тільки в полі ядра, а й у полі електронного остову (електрони, що утворюють замкнену електронну конфігурацію). Отже, кулонівське поле вже не буде полем точкового заряду. Це призводить до того, що енергія рівнів атомів залежить не лише від головного квантового числа  $n$ , а й від орбітального  $l$ . У першому наближенні власну енергію електрона в атомі лужного металу можна записати аналогічно до енергії атомарного водню

$$E_{n,l} = -\frac{hcRZ_{ef}^2}{(n - \Delta_l)^2}, \quad (1)$$

де  $Z_{ef}$  — ефективний заряд (в одиницях  $e$ ) атомного остову,  $R = 1,097 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$  — стала Рідберга. Для атомів лужних металів  $Z_{ef} = 1$ , для однократно іонізованих двовалентних атомів (наприклад,  $Be^+$ )  $Z_{ef} = 2$ , для двократно іонізованих трьохвалентних атомів (наприклад,  $Al^{++}$ )  $Z_{ef} = 3$ .  $\Delta_l$  — поправка, яка вводиться до головного квантового числа  $n$ , називається поправкою Рідберга, або квантовим дефектом. Згідно теорії,  $\Delta_l$  залежить від квантового числа  $l$  ( $\sim \frac{1}{2l+1}$ ) та  $Z$  ( $\sim Z^2$ ). Для

значень  $l = 0, 1, 2, \dots$  вона позначається як  $\Delta_s, \Delta_p, \Delta_d, \dots$ , відповідно.

Іноді формулу (1) записують в іншому вигляді:

$$E_{n,l} = -\frac{hcR(Z - \sigma_l)^2}{n^2}, \quad (2)$$

де  $Z$  — заряд ядра атома,  $\sigma_l$  — поправка, яка називається поправкою екранування.

В спектрах атомів лужних металів спостерігають декілька серій:

- головна серія;
- дифузна (перша побічна) серія;
- різка (друга побічна) серія;
- фундаментальна серія.

У першому наближенні їх можна описати формулою, аналогічною до формули Бальмера. Лінії *головної серії* визначаються так:

$$\tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{(n - \Delta_s)^2} - \frac{1}{(m - \Delta_p)^2} \right), \quad (3)$$

де  $n$  відповідає основному терму атома,  $m = n, n + 1, n + 2, \dots$ . Переходи відбуваються зі збуджених термів  $mP$  до основного терму  $nS$ .

Перша побічна або *дифузна серія* описується формулою

$$\tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{(n - \Delta_p)^2} - \frac{1}{(m - \Delta_d)^2} \right), \quad (4)$$

переходи відбуваються з термів  $mD$  до нижнього терму  $nP$ .

Друга побічна або *різка серія* описується формулою

$$\tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{(n - \Delta_p)^2} - \frac{1}{(m - \Delta_s)^2} \right), \quad (5)$$

тобто переходи виникають між термами  $mS$  та  $nP$ .

*Фундаментальна серія* виникає під час переходів з термів  $mF$  на найнижчий терм  $nD$ . Формула цієї серії

$$\tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{(n - \Delta_d)^2} - \frac{1}{(m - \Delta_f)^2} \right). \quad (6)$$

Якщо врахувати спін – орбітальну взаємодію, то виникає дублетне розщеплення термів (окрім  $S$  терму), а отже, тонка структура спектральних ліній. У цьому випадку енергію рівня розраховують за формулою Дірака:

$$E_{n,l,j} = -\frac{hcR(Z - \sigma_l)^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 (Z - \sigma_l)^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right], \quad (7)$$

де  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$  - стала тонкої структури.

Спектральні лінії головної та різкої серії стають дублетними, фундаментальної та дифузної серій – триплетними. Так, всі лінії головної серії визначаються переходами:

$m^2 P_{\frac{1}{2}} \rightarrow n^2 S_{\frac{1}{2}}$  та  $m^2 P_{\frac{3}{2}} \rightarrow n^2 S_{\frac{1}{2}}$ , лініям різкої серії відповідають

переходи  $m^2 S_{\frac{1}{2}} \rightarrow n^2 P_{\frac{1}{2}}$  та  $m^2 S_{\frac{1}{2}} \rightarrow n^2 P_{\frac{3}{2}}$ ; лініям фундамен-

тальної серії – переходи  $m^2 F_{\frac{7}{2}} \rightarrow n^2 D_{\frac{5}{2}}$ ,  $m^2 F_{\frac{5}{2}} \rightarrow n^2 D_{\frac{5}{2}}$  та

$m^2 F_{\frac{5}{2}} \rightarrow n^2 D_{\frac{3}{2}}$ , а дифузної серії – переходи

$m^2 D_{\frac{5}{2}} \rightarrow n^2 P_{\frac{3}{2}}$ ,  $m^2 D_{\frac{3}{2}} \rightarrow n^2 P_{\frac{3}{2}}$  та  $m^2 D_{\frac{3}{2}} \rightarrow n^2 P_{\frac{1}{2}}$ , де  $n$  – квантове

число, яке визначає основний стан атома, (наприклад, для  $Cs$   $n = 6$ ),  $m = n + 1, n + 2, \dots$ , для головної серії  $m = n, n + 1, n + 2, \dots$ . Нижній рівень атома літію  $n = 2$  і фундаментальна серія виникає при переходах на  $3^2 D$  – терм (рис.1)

При врахуванні електромагнітної взаємодії повного моменту електрона зі спіновим моментом ядра в атомах лужних металів виникає надтонке розщеплення енергетичних рівнів та надтонка структура спектральних ліній (див. задачу №6).

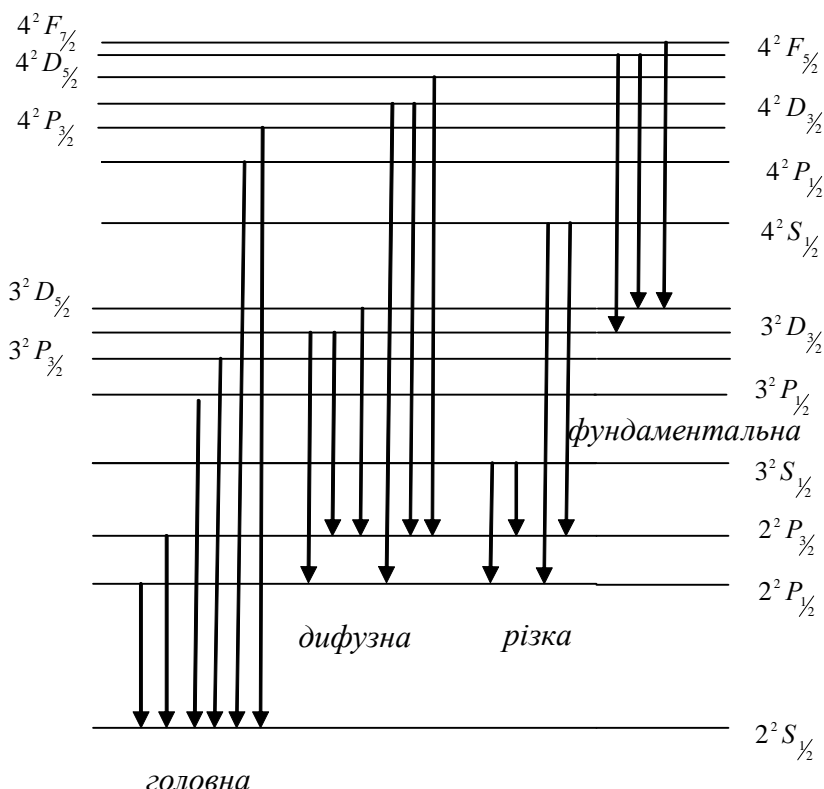


Рис. 1. Спектральні серії атома літію  
(чітко не витримується правило інтервалів)

### Методичні вказівки та поради

1. При розв'язуванні задач, насамперед, необхідно визначити квантові числа, що характеризують стани атома (початковий та кінцевий). При визначенні дозволених в електродипольному наближенні переходів між квантовими станами потрібно користуватись правилами відбору, у випадку лужних металів достатньо пам'ятати, що перехід можливий при зміні орбітального квантового числа  $\Delta l = \pm 1$ .
2. Багато задач пов'язано з обчисленням квантових дефектів або сталої екранування при заданих параметрах (енергії



переходу, довжини хвилі для певного переходу, позначення термів, енергії іонізації тощо). В цьому випадку спочатку необхідно визначити, між якими квантовими станами відбуваються переходи, далі скористатись формулами (1) – (3) та формулою Бальмера для лужних металів або іонів і визначити з системи рівнянь необхідні значення поправок. Слід зважати на те, що квантові дефекти практично не залежать від значення головного квантового числа  $n$  і є майже однаковими для всіх термів  $s$  – типу,  $p$  – типу і т.д.

3. Оскільки терми атомів лужних металів залежать від обох квантових чисел  $n$  та  $l$ , їх взаємне розташування значно відрізняється від розташування термів атомарного водню. Тому після обчислення термів краще побудувати схему енергетичних рівнів у відповідному масштабі і лише потім визначати можливі переходи між рівнями.
4. При врахуванні спіну – орбітальної взаємодії необхідно записати всі терми для атома згідно правил додавання моментів та квантових чисел у випадку одноелектронних атомів (дивись розділ 7). Після цього треба зобразити в масштабі діаграму енергетичних рівнів та вказати, у відповідності до правил відбору, можливі спектральні переходи.
5. При розрахунку надтонкого розщеплення енергетичних рівнів лужних металів користуються тим самим методом, що й для атомарного водню (дивись розділ 7, задача №5), значення спіну ядер відповідних атомів беруть з таблиці ізотопів.

### **Приклади розв'язування задач**

**Задача №1.** Атом літію збудили до терма  $4^2P_{\frac{1}{2}}$ . До яких серій належать лінії, що виникають в емісійному спектрі такого атома?

**Розв'язок:** Відомо, що терми атомів лужних металів записуються так само, як для атома водню, з тією різницею, що у лужних металів знімається виродження по орбітальному квантовому числу.

На рис.2 зображено енергетичну діаграму рівнів атома *Li*.

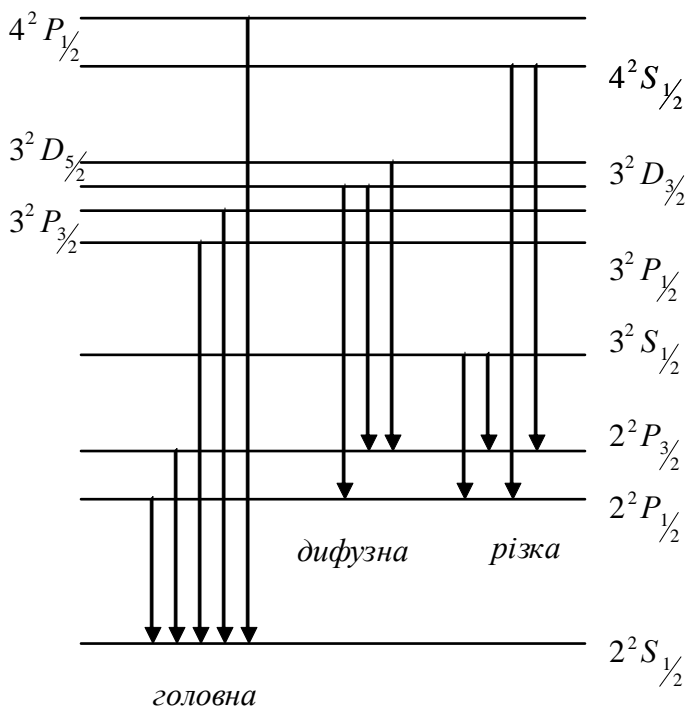


Рис. 2. Переходи, що виникають в атомі літію, збудженому до стану  $4^2 P_{\frac{1}{2}}$

Основним термом літію є  $2^2 S_{\frac{1}{2}}$ . Випишемо всі терми, які з'являються при збудженні атома літію до терма  $4^2 P_{\frac{1}{2}}$ . При  $n=2$  маємо три терми:  $2^2 S_{\frac{1}{2}}$ ;  $2^2 P_{\frac{1}{2}}$ ;  $2^2 P_{\frac{3}{2}}$ , при  $n=3$  — відповідно терми  $3^2 S_{\frac{1}{2}}$ ;  $3^2 P_{\frac{1}{2}}$ ;  $3^2 P_{\frac{3}{2}}$ ;  $3^2 D_{\frac{3}{2}}$ ;  $3^2 D_{\frac{5}{2}}$  і нарешті, при  $n=4$  — те-

рми  $4^2S_{\frac{1}{2}}; ^2P_{\frac{1}{2}}$ . Для визначення можливих переходів зі збудженого стану до основного, скористаємось правилами відбору. На рис.2 зображено перші три лінії головної серії, дифузійний триплет та перші дві лінії різкої серії. Всі інші лінії, які відповідають переходам на вищі збуджені рівні, не позначено.

**Задача №2.** Обрахувати квантові дефекти  $S$ -,  $P$ - та  $D$ -термів атома літію, якщо відомо, що енергія зв'язку валентного електрона в основному стані дорівнює  $5,39 \text{ eV}$ , перший потенціал збудження  $1,85 \text{ B}$  та довжина хвилі головної лінії дифузної серії  $\lambda = 610 \text{ нм}$ . Який з перерахованих термів є найбільш близьким до воднеподібного, чим це зумовлено?

**Розв'язок:** Як відомо, терми лужних металів записують у вигляді:

$$T_{n,l} = \frac{RZ_{ef}^2}{(n - \Delta_l)^2},$$

причому ефективний заряд атомного остову, в полі якого рухається валентний електрон,  $Z_{ef} = 1$ . Основним рівнем (термом) атома літію є  $2S$  (без урахування спин-орбітальної взаємодії). Отже, енергія зв'язку валентного електрона – це енергія, що відповідає переходу електрона з рівня  $2S$  до вільного стану. Таким чином, енергія зв'язку запишеться так:

$$|E_{36}| = \frac{hcR}{(2 - \Delta_s)^2}.$$

Звідси отримуємо вираз для квантового дефекту  $\Delta_s$ :

$$\Delta_s = 2 - \sqrt{\frac{hcR}{E_{36}}}. \quad (2.1)$$

Перший потенціал збудження відповідає переходу електрона  $2S \rightarrow 2P$ . Енергія такого переходу

$$\Delta E_{SP} = hcR \left( \frac{1}{(2 - \Delta_s)^2} - \frac{1}{(2 - \Delta_p)^2} \right).$$

Враховуючи вираз (2.1) для квантового дефекту  $\Delta_s$ , перетворимо останню рівність і виразимо  $\Delta_p$ :

$$\begin{aligned} \Delta E_{SP} &= hcR \left( \frac{E_{36}}{hcR} - \frac{1}{(2 - \Delta_p)^2} \right) = E_{36} - \frac{hcR}{(2 - \Delta_p)^2} \Rightarrow \\ (2 - \Delta_p)^2 &= \frac{hcR}{E_{36} - E_{SP}} \Rightarrow \Delta_p = 2 - \sqrt{\frac{hcR}{E_{36} - E_{SP}}}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Нарешті, головна лінія дифузної серії виникає під час переходу атома зі стану  $3D$  до стану  $2P$ . Довжина хвилі цієї лінії виражається наступним чином:

$$\frac{1}{\lambda} = \tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{(2 - \Delta_p)^2} - \frac{1}{(3 - \Delta_d)^2} \right).$$

Враховуючи (2.2), знаходимо квантовий дефект  $\Delta_d$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{(3 - \Delta_d)^2} &= \frac{E_{36} - E_{SP}}{hcR} - \frac{1}{\lambda R} = \frac{\lambda(E_{36} - E_{SP}) - hc}{\lambda hcR} \Rightarrow \\ \Delta_d &= 3 - \sqrt{\frac{\lambda hcR}{\lambda(E_{36} - E_{SP}) - hc}}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Підставивши у (2.1), (2.2) та (2.3) дані з умови задачі, можемо розрахувати всі квантові дефекти. В даному випадку обрахунки зручно проводити, підставивши дані в  $eV$  та врахувавши, що  $hcR = 13,6 \text{ eV}$  (енергія іонізації атома водню):

$$\begin{aligned} \Delta_s &= 2 - \sqrt{\frac{13,6}{5,39}} = 0,41, \\ \Delta_p &= 2 - \sqrt{\frac{13,6}{5,39 - 1,85}} = 0,037, \\ \Delta_d &= 3 - \sqrt{\frac{610 \cdot 10^{-7} \cdot 13,6}{610 \cdot 10^{-7} \cdot 3,54 - 1,24 \cdot 10^{-4}}} = -0,007. \end{aligned}$$

Як бачимо, для  $D$ -терму квантовий дефект практично дорівнює нулю, тому саме цей терм і буде найбільш близьким до воднеподібних атомів.

**Задача №3.** Обрахувати для іону  $Be^+$  квантові дефекти  $S$ - та  $P$ -термів, а також довжину хвилі головної лінії різкої серії, якщо відомо, що довжини хвиль головної лінії головної серії та її короткохвильової межі дорівнюють  $321 \text{ нм}$  та  $68,3 \text{ нм}$ .

**Розв'язок:** Для однократно іонізованих атомів спектральний терм записується наступним чином:

$$T_{n,l} = \frac{R(Z-2)^2}{(n-\Delta_l)^2}. \quad (3.1)$$

Головна лінія головної серії виникає при переході з терма  $2P$  до основного терма  $2S$ . Довжина хвилі такого переходу знаходиться з комбінації термів  $T_{2S}, T_{2P}$ :

$$\frac{1}{\lambda_0} = T_{2S} - T_{2P} = R(Z-2)^2 \left( \frac{1}{(2-\Delta_s)^2} - \frac{1}{(2-\Delta_p)^2} \right). \quad (3.2)$$

Границя головної серії — спектральна лінія, що виникає в спектрах поглинання при переході валентного електрона з основного стану  $2S$  до вільного стану ( $n \rightarrow \infty$ ). Довжина хвилі для такого переходу

$$\frac{1}{\lambda_{ep}} = T_{2S} = \frac{R(Z-2)^2}{(2-\Delta_s)^2}. \quad (3.3)$$

З рівняння (3.3) одразу можемо знайти квантовий дефект  $\Delta_s$ :

$$\Delta_s = n - (Z-2)\sqrt{R\lambda_{ep}} = 2 - 2\sqrt{1,1 \cdot 10^5 \cdot 0,683 \cdot 10^{-5}} \approx 0,27.$$

Тепер з рівняння (3.2) виразимо квантовий дефект  $\Delta_p$ :

$$\frac{R(Z-2)^2}{(2-\Delta_p)^2} = \frac{1}{\lambda_{ep}} - \frac{1}{\lambda_0} \Rightarrow \Delta_p = 2 - (Z-2) \sqrt{\frac{R}{\frac{1}{\lambda_{ep}} - \frac{1}{\lambda_0}}},$$

$$\Delta_p = 2 - 2 \sqrt{\frac{1,1 \cdot 10^5}{10^7 \cdot \left(\frac{1}{68,3} - \frac{1}{321}\right)}} = 0,047.$$

Головна лінія різкої серії відповідає переходу  $3S \rightarrow 2P$ . Довжина хвилі цієї лінії запишеться так:

$$\frac{1}{\lambda} = T_{2P} - T_{3S} = R(Z-2)^2 \left( \frac{1}{(2-\Delta_p)^2} - \frac{1}{(3-\Delta_s)^2} \right). \quad (3.4)$$

Підставляючи розраховані значення квантових дефектів, з (3.4) знаходимо

$$\frac{1}{\lambda} = 1,1 \cdot 10^5 \cdot 4 \cdot \left( \frac{1}{(2-0,047)^2} - \frac{1}{(3-0,27)^2} \right) = 0,568 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1},$$

$$\lambda = 176 \text{ нм}.$$

**Задача №4.** Знайти розщеплення в  $eV$  та  $\text{см}^{-1}$  рівня  $4P$  атома калію, якщо відомо, що довжини хвиль компонент дублета резонансної лінії дорівнюють  $769,898 \text{ нм}$  та  $766,491 \text{ нм}$ . Порівняти отримане значення з енергією резонансного переходу. Квантові дефекти для калію  $\Delta_s = 2,23$ ,  $\Delta_p = 1,776$ .

**Розв'язок:** При врахуванні спин-орбітальної взаємодії рівень  $4P$  розщеплюється на два:  $4^2P_{\frac{1}{2}}$ ;  $4^2P_{\frac{3}{2}}$ . Таким чином,

з'являється тонка структура резонансної лінії калію: переходу  $4^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4^2S_{\frac{1}{2}}$  відповідатиме довжина хвилі  $\lambda_1 = 769,898 \text{ нм}$ , а переходу  $4^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4^2S_{\frac{1}{2}}$  —  $\lambda_2 = 766,491 \text{ нм}$ . Енергія переходу

$4^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4^2S_{\frac{1}{2}}$   $E_1 = \frac{hc}{\lambda_1}$ , а для переходу  $4^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4^2S_{\frac{1}{2}}$  — енергія

$E_2 = \frac{hc}{\lambda_2}$ . Розщеплення терму  $4P$  запишемо як

$$\Delta E = E_2 - E_1 = hc \left( \frac{1}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1} \right). \text{Підставивши значення довжин}$$

хвиль та врахувавши, що  $hc = 12,4 \cdot 10^{-5} \text{ eB} \cdot \text{см}$ , отримаємо

$$\Delta E = 12,4 \cdot 10^{-5} \left( \frac{1}{7,66491 \cdot 10^{-5}} - \frac{1}{7,69898 \cdot 10^{-5}} \right) = 7,159 \cdot 10^{-3} \text{ eB}.$$

Розщеплення в обернених сантиметрах дорівнює

$$\Delta T = \frac{\Delta E}{hc} = \frac{7,159 \cdot 10^{-3}}{12,4 \cdot 10^{-5}} = 57,73 \text{ см}^{-1}.$$

Енергію резонансного переходу  $4P \rightarrow 4S$  без урахування тонкої структури можемо знайти, використавши формулу

$$E = hcR \left( \frac{1}{(4 - \Delta_s)^2} - \frac{1}{(4 - \Delta_p)^2} \right). \quad (4.1)$$

Квантові дефекти беремо з умови задачі, з (4.1) отримаємо

$$E = 13,6 \left( \frac{1}{(4 - 2,23)^2} - \frac{1}{(4 - 1,776)^2} \right) = 1,45 \text{ eB}.$$

Відносне розщеплення спектрального терму  $4P$  атома калію дорівнює

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{7}{1,45} \cdot 10^{-3} \approx 5 \cdot 10^{-3}.$$

**Задача №5.** Розрахувати розщеплення терму  $3P$  натрію та  $4P$  калію, яке виникає внаслідок спін-орбітальної взаємодії, якщо стала екранування для  $3P$ -стану натрію дорівнює  $\sigma_{Na} = 7,45$ , а для  $4P$  стану калію  $\sigma_K = 13,04$ . Обрахувати сталу екранування для  $3S$  стану натрію, якщо відома довжина хвилі переходу  $3^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 3^2S_{\frac{1}{2}} : \lambda_1 = 589 \text{ нм}$ .

**Розв'язок:** Тонка структура термів атомів лужних металів може бути розрахована за допомогою формули:

$$T = \frac{R(Z - \sigma_l)^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 (Z - \sigma_l)^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (5.1)$$

Внаслідок спин-орбітальної взаємодії  $P$ -терм розщеплюється на два:  ${}^2P_{\frac{1}{2}}$ ;  ${}^2P_{\frac{3}{2}}$ . Розщеплення терму  $3P$  для  $Na$  ви-

значаємо з (5.1) як різницю термів  ${}^2P_{\frac{1}{2}}$  та  ${}^2P_{\frac{3}{2}}$ . Квантові числа

для терму  $3^2P_{\frac{1}{2}}$  є такими:  $n = 3, l = 1, j_1 = \frac{1}{2}$ , а для терму  $3^2P_{\frac{3}{2}}$

—  $n = 3, l = 1, j_2 = \frac{3}{2}$ . Розщеплення терму  $3P$ :

$$\Delta T_{3P} = \frac{R\alpha^2 (Z - \sigma_p)^4}{n^3} \left[ \frac{j_2 - j_1}{\left(j_1 + \frac{1}{2}\right) \left(j_2 + \frac{1}{2}\right)} \right]. \quad (5.2)$$

Підставляючи дані з умови задачі та врахувавши, що  $\alpha^2 = 5,33 \cdot 10^{-5}$ , знаходимо

$$\Delta T_{3P} = \frac{1,097 \cdot 5,33(11 - 7,45)^4}{3^3} \cdot \frac{1}{2} = 17,2 \text{ см}^{-1}.$$

Аналогічним чином знаходимо розщеплення терму  $4P$  для калію:

$$\Delta T_{4P} = \frac{1,097 \cdot 5,33(19 - 13,04)^4}{4^3 \cdot 3} \cdot \frac{3}{2} = 57,64 \text{ см}^{-1}.$$

Резонансна лінія натрію виникає в спектрах випромінювання під час переходу  $3^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 3^2S_{\frac{1}{2}} (\lambda_1)$  та  $3^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 3^2S_{\frac{1}{2}} (\lambda_2)$ . За-

пишемо терми (5.1), між якими відбуваються переходи:

$$T_{3S} = \frac{R(Z - \sigma_s)^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 (Z - \sigma_s)^2}{n} \left( 1 - \frac{3}{4n} \right) \right], \quad (5.3)$$



$$T_{3^2 P_{\frac{1}{2}}} = \frac{R(Z - \sigma_p)^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 (Z - \sigma_p)^2}{n} \left( 1 - \frac{3}{4n} \right) \right], \quad (5.4)$$

$$T_{3^2 P_{\frac{3}{2}}} = \frac{R(Z - \sigma_p)^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 (Z - \sigma_p)^2}{n} \left( \frac{1}{2} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (5.5)$$

Лінія  $\lambda_1$  знаходиться як комбінація термів (5.5) та (5.3):

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda_1} &= T_{3^2 P_{\frac{3}{2}}} - T_{3s} = \frac{R}{n^2} \left( (Z - \sigma_p)^2 - (Z - \sigma_s)^2 \right) + \\ &+ \frac{R\alpha^2}{n^3} \left( (Z - \sigma_p)^4 \left( \frac{1}{2} - \frac{3}{4n} \right) - (Z - \sigma_s)^4 \left( 1 - \frac{3}{4n} \right) \right) = \\ &= \frac{R}{n^2} + \left( (Z - \sigma_p)^2 - (Z - \sigma_s)^2 \right) + \frac{R\alpha^2}{n^3} \left( \frac{1}{4} (Z - \sigma_p)^4 - \frac{3}{4} (Z - \sigma_s)^4 \right). \end{aligned}$$

Позначивши  $(Z - \sigma_s)^2 = x$ , отримаємо рівняння для  $x$ :

$$\begin{aligned} \frac{R\alpha^2}{n^3} \frac{3}{4} x^2 + \frac{R}{n^2} x - \frac{R}{n^2} (Z - \sigma_p)^2 - \frac{R\alpha^2}{n^3} \frac{1}{4} (Z - \sigma_p)^4 &= \frac{1}{\lambda_1} \Rightarrow \\ x &= \frac{-1 + \sqrt{1 + \frac{3\alpha^2}{n^2 R} \left( \frac{R}{n^2} (Z - \sigma_p)^2 + \frac{R\alpha^2}{n^3} \frac{1}{4} (Z - \sigma_p)^4 + \frac{1}{\lambda_1} \right)}}{\frac{3\alpha^2}{2n}}. \end{aligned}$$

Підставляючи параметри задачі, знаходимо:

$$x = (Z - \sigma_s)^2 = 0,514 \Rightarrow \sigma_s = 10,28.$$

**Задача №6. Знайти кількість компонент надтонкого розщеплення спектральних ліній  $4^2 P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4^2 S_{\frac{1}{2}}$  та  $4^2 P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4^2 S_{\frac{1}{2}}$**

**для атомів калію, якщо спин ядра  $^{39}K \quad I_K = \frac{3}{2}$ .**

**Розв'язок:** Задачу будемо розв'язувати за схемою, представлена в задачі №5 розділу 7. Зобразимо графічно надтонке

розщеплення термів. Для термів  $^2S_{\frac{1}{2}}; ^2P_{\frac{1}{2}}$  квантове число

$$j = \frac{1}{2}.$$

Значення повного квантового числа  $F$ , що характеризує сумарний механічний момент з урахуванням спіну ядра, знаходимо за правилом  $F = I + j, I + j - 1, \dots, |I - j|$ . При  $j = \frac{1}{2}$   $F$  набуває  $2j + 1$  значень:  $F = 1, 2$ , оскільки в цьому випадку

$j < I$ . Для терму  $^2P_{\frac{3}{2}}$   $j = \frac{3}{2}$ ,  $F = 0, 1, 2, 3$ , всього  $2I + 1$  значень.

На рис.3 зображено переходи, які утворюють надтонку структуру резонансного переходу. Тут використані правила

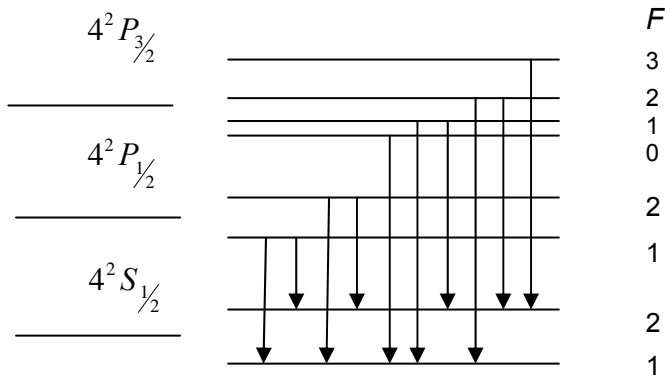


Рис. 3. Надтонка структура резонансного дублету атома калію

відбору для квантового числа  $F$ :

$$\Delta F = 0, \pm 1.$$

З рисунка видно, що переходу  $4^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow 4^2S_{\frac{1}{2}}$  відповідають чотири компоненти, а переходу  $4^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 4^2S_{\frac{1}{2}}$  — шість компонент надтонкого розщеплення.

### Задачі для самостійної роботи

1. Як можна експериментально визначити поправку  $\Delta_p$  (квантовий дефект) для літію?
2. Як відрізнити різку серію від головної для атома натрію?
3. Як розрахувати поправку екранування для натрію, якщо відомі лінії його резонансної серії?
4. Квантовий дефект для основного стану  $Na\ 3S$  дорівнює  $\Delta_s = 1,373$ . Атом перебуває в збудженому стані  $4P$ . Безпосередньому переходу  $4P \rightarrow 3S$  відповідає лінія з довжиною хвилі  $\lambda = 330,3\text{ нм}$ . Визначити, які лінії можуть виникати під час переходу атома зі збудженого стану  $4P$  до основного стану  $3S$ .
5. Відомі три лінії спектра натрію з довжинами хвиль  $\lambda_1 = 616,1\text{ нм}$ ,  $\lambda_2 = 589,6\text{ нм}$ ,  $\lambda_3 = 285,3\text{ нм}$ . Визначити, які з них належать до головної серії, якщо відомо, що переходові  $4P \rightarrow 3S$  відповідає лінія  $\lambda = 330,3\text{ нм}$ , а довжина хвилі границі головної серії дорівнює  $\lambda_0 = 241,3\text{ нм}$ .
6. Обчислити дублетне розщеплення терму  $4P$  в атомі натрію, якщо відомо, що поправка Рідберга (квантовий дефект) для цього терму дорівнює  $\Delta_p = 0,883$ . *Вказівка:* при обчисленні сталої екранування знехтувати поправкою тонкої структури.
7. На скільки компонент розщепиться перша лінія головної серії в спектрі натрію, якщо врахувати спин ядра ( $I_{Na} = \frac{3}{2}$ )?

## Розділ 9. ВЕКТОРНА МОДЕЛЬ АТОМА

### Основні теоретичні відомості

Векторна модель застосовується для систематики термів атомів, що мають декілька валентних електронів. Нехай  $\vec{P}_{li}$  та  $\vec{P}_{si}$  — орбітальний та спіновий моменти окремих електронів. Сумарний момент всіх електронів атома може бути отриманий за схемою  $L-S$  (Рассел-Саундерсівського) зв'язку або за схемою  $j-j$  зв'язку.

$L-S$  зв'язок застосовується для атомів з невеликим значенням зарядового числа  $Z$ , коли кулонівська взаємодія електронів більша за спін-орбітальну взаємодію.  $j-j$  зв'язок застосовується для атомів з великим значенням  $Z$ , коли має місце протилежний випадок, тобто кулонівська взаємодія менша за спін-орбітальну.

Для атомів з  $10 < Z < 87$  застосовують змішані типи зв'язку (наприклад,  $L-J$  зв'язок), які в загальному курсі фізики не вивчаються.

За схемою  $L-S$  зв'язку спочатку знаходять векторні суми орбітальних та спінових моментів окремих електронів, отримуючи сумарний орбітальний та спіновий моменти:

$$\vec{P}_L = \sum \vec{P}_{li}, |\vec{P}_L| = \hbar \sqrt{L(L+1)}, \quad (1)$$

$$\vec{P}_S = \sum \vec{P}_{si}, |\vec{P}_S| = \hbar \sqrt{S(S+1)}, \quad (2)$$

після чого знаходиться векторна сума моментів (1) та (2), яка дає вектор внутрішнього механічного моменту (повного механічного моменту електронної оболонки):

$$\vec{P}_J = \vec{P}_L + \vec{P}_S, |\vec{P}_J| = \hbar \sqrt{J(J+1)}. \quad (3)$$

В (1), (2) та (3)  $L, S, J$  — квантові числа, які характеризують електронну оболонку. Вони визначаються за такими правилами.

Сумарне орбітальне квантове число

$$L = \left( \sum l_i \right)_{\max}, \left( \sum l_i \right)_{\max} - 1, \left( \sum l_i \right)_{\max} - 2, \dots, \left( \sum l_i \right)_{\min},$$

тобто квантове число  $L$  набуває ряду значень, що відрізняються одне від одного на одиницю і знаходяться в межах між максимальним та мінімальним абсолютними значеннями алгебраїчної суми  $\sum l_i$ .

Сумарне спінове квантове число

$$S = (\sum s_i)_{\max}, (\sum s_i)_{\max} - 1, (\sum s_i)_{\max} - 2, \dots, (\sum s_i)_{\min}.$$

$J$  – внутрішнє квантове число, яке набуває таких значень:

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|.$$

Символічна форма запису терму у випадку  $L - S$  зв'язку:

$$^{2S+1}L_J, \quad (4)$$

де  $2S + 1$  – плетність терму, що вказує, на скільки компонентів розщеплюється енергетичний рівень за рахунок спіну – орбітальної взаємодії (тільки у випадку, коли  $S < L$ ). У (4)  $L$  позначається латинською літерою  $S, P, D, F, \dots$  відповідно до значень орбітального квантового числа  $L = 0, 1, 2, 3, \dots$ ,  $J$  – внутрішнє квантове число.

У випадку  $j - j$  зв'язку спочатку знаходять внутрішні моменти окремих електронів, а потім – внутрішній механічний момент усіх валентних електронів. Наприклад, для двох валентних електронів маємо:

$$\vec{P}_{j1} = \vec{P}_{s1} + \vec{P}_{l1}, \vec{P}_{j2} = \vec{P}_{s2} + \vec{P}_{l2}, \vec{P}_J = \vec{P}_{j1} + \vec{P}_{j2}.$$

Символьний запис терму для випадку  $j - j$  зв'язку

$$[j_1, j_2]_J,$$

$$\text{де } j_1 = l_1 \pm \frac{1}{2}, j_2 = l_2 \pm \frac{1}{2}, J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|.$$

Для визначення терму з найменшою енергією в наближенні  $L - S$  зв'язку застосовується емпірично встановлене правило Хунда. Згідно цього правила, найменшу енергію має рівень з максимально можливим для даної конфігурації значенням сумарного спінового квантового числа  $S$  та найбільшим при заданому  $S$  значенням орбітального квантового числа  $L$ . Внутрішнє квантове число  $J$  для такого терму знаходиться як  $J = |L_{\max} - S_{\max}|$ , якщо електронна оболонка запов-

нена менше, ніж наполовину, та  $J = L_{\max} + S_{\max}$ , якщо вона заповнена більше, ніж наполовину, якщо ж оболонка заповнена рівно наполовину,  $J = S_{\max}$ , оскільки в такому випадку  $L_{\max} = 0$ . Терм, визначений за правилом Хунда, називають *основним*.

Для кількісної характеристики здатності атомів об'єднуватись у молекули використовується поняття валентності. Валентність, з точки зору квантової механіки, тісно пов'язана зі спіновим моментом електрона. При об'єднанні атомів у молекули їх спінові моменти взаємно компенсуються. Те, що сумарний спіновий момент молекули дорівнює нулеві, є характерною особливістю всіх хімічно стійких молекул. Валентність атома дорівнює подвоєному значенню спіну електронної оболонки. Так, спінове число атома водню дорівнює  $\frac{1}{2}$ , тоді валентність є 1. Цікаво, що валентність атома дорівнює кількості неспарених по спіну електронів. Валентність атома може бути різною, залежно від стану, в якому він знаходиться (основний чи збуджений).

### **Методичні вказівки та поради**

1. Всі задачі даної теми пов'язані з операціями над квантовими числами  $l, s, j, L, S, J$ . Тому насамперед необхідно визначити ці числа. В задачах найчастіше використовується наближення  $L-S$  зв'язку, але у випадку багатоелектронних атомів необхідно застосовувати наближення  $j-j$  зв'язку.

2. З позначень термів легко можна знайти квантові числа. Наприклад, якщо атом знаходиться в стані  ${}^4D_{\frac{5}{2}}$ , це означає,

що  $2S+1=4$ , тобто  $S=\frac{3}{2}$ ,  $L=2$  (стан  $D$ ),  $J=\frac{5}{2}$ .

Якщо конфігурація електронної оболонки атома, наприклад,  $2s^2 2p^4$ , то ми маємо систему, в якій два електрони знаходяться в стані з  $n=2$ ,  $l=0$  та чотири електрони в

стані  $n = 2$ ,  $l = 1$ .

3. У деяких задачах необхідно знайти можливі терми (задачі №№ 1,2,5) або основний стан (задача №3) атома. В такому випадку потрібно записати електронну конфігурацію атома і застосувати правила відповідної векторної моделі до валентних електронів. При визначенні станів багатоелектронних атомів електрони заповнених оболонок можна не брати до уваги, оскільки, згідно принципу Паулі, сумарний спіновий та орбітальний моменти цих електронів дорівнюють нулю.
4. При знаходженні термів для еквівалентних електронів (таких, які мають однакові квантові числа  $n, l$ ) необхідно враховувати принцип Паулі (задачі №6, 7).
5. При визначенні загальної кількості термів для атомів з великим значенням  $Z$  можна використати модель  $L-S$ -зв'язку, оскільки загальна кількість термів не залежить від типу зв'язку.
6. Спін-орбітальна взаємодія призводить до *мультиплетного* розщеплення рівня. Кількість компонент мультиплетного розщеплення при  $L < S - 2L + 1$ , а при  $L > S - 2S + 1$ , тобто плетність терму визначає кількість компонент тонкого розщеплення тільки за умови, що  $L > S$ .
7. Для  $S$  термів вказується плетність, проте ці терми є синглетними, оскільки в  $S$  станах ( $L = 0$ ) відсутня спін-орбітальна взаємодія.

### **Приклади розв'язування задач**

**Задача №1.** Використовуючи векторну модель, визначити всі можливі терми для електронної конфігурації  $1s^2 2s^2 2p^1 3d^1$  в наближенні  $L-S$  та  $j-j$  зв'язку.

**Розв'язок:** Оскільки оболонки  $1s^2$  та  $2s^2$  є повністю заповненими, їх сумарні механічні моменти дорівнюють нулю, тому при подальшому розрахунку термів ми не будемо їх враховувати. Отже, для конфігурації  $2p^1 3d^1$  запишемо квантові числа:

$$2p^1: n_1 = 2, l_1 = 1, s_1 = \frac{1}{2};$$

$$3d^1: n_2 = 3, l_2 = 2, s_2 = \frac{1}{2}.$$

Спочатку розрахуємо терми в наближенні  $L-S$  зв'язку. Сумарне спінове число у випадку двох електронів набуватиме двох значень:  $S = 0, 1$ .

Таким чином, маємо систему синглетних ( $S = 0, \kappa = 1$ ) та триплетних ( $S = 1, \kappa = 3$ ) термів, де  $\kappa$  — плетність терму.

Згідно векторної моделі, значення сумарного орбітального квантового числа визначається так

$$L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|.$$

В нашому випадку  $L = 1, 2, 3$ . Квантове число, що відповідає внутрішньому механічному моменту атома визначимо за правилом:

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|.$$

Терми зведемо у таблицю 1:

Таблиця 1

$S = 0$ (синглети)			$S = 1$ (триплети)		
$L$	$J$	Терм	$L$	$J$	Терм
1	1	$^1P_1$	1	0, 1, 2	$^3P_{0,1,2}$
2	2	$^1D_2$	2	1, 2, 3	$^3D_{1,2,3}$
3	3	$^1F_3$	3	2, 3, 4	$^3F_{2,3,4}$

Отже, ми отримали 12 термів, з яких 3 є синглетними, 9 — триплетними.

Проведемо тепер розрахунок для моделі  $j-j$  зв'язку В таблицю 2 зведемо квантові числа для двох електронів.

Отримуємо 4 можливі комбінації квантових чисел  $[j_1, j_2]$ :

$$\left[\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right], \left[\frac{1}{2}, \frac{5}{2}\right], \left[\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right] \text{ та } \left[\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right]$$



Таблиця 2

$l_1$	$s_1$	$j_1$	$l_2$	$s_2$	$j_2$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	2	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}, \frac{5}{2}$

Для кожної пари значень, знаходимо квантове число  $J$  згідно правила:

$$J = j_1 + j_2; j_1 + j_2 - 1; \dots, |j_1 - j_2|.$$

Остаточню записуємо терми:

$$\left[ \frac{1}{2}; \frac{3}{2} \right]_{1,2}, \quad \left[ \frac{1}{2}; \frac{5}{2} \right]_{2,3}, \quad \left[ \frac{3}{2}; \frac{3}{2} \right]_{0,1,2,3}, \quad \left[ \frac{3}{2}; \frac{5}{2} \right]_{1,2,3,4}.$$

Зауважимо, що кількість термів однакова для обох типів зв'язку.

**Задача №2.** Використовуючи модель  $L-S$  зв'язку, виписати всі можливі терми для атома, що містить, крім заповненої оболонки,

а) два електрони ( $p$  та  $f$ );

б) три електрони ( $s$ ,  $p$  та  $d$ ).

**Розв'язок:** а) Для двох електронів можливі значення сумарного спінового числа  $S = 0, 1$ , для кожного з них терми запишуватимемо окремо, як і в попередній задачі.  $p$  та  $f$  станам електронів відповідають орбітальні квантові числа:  $l_1 = 1$ ,  $l_2 = 3$ . Сумарне орбітальне квантове число прийматиме значення  $L = 2, 3, 4$ . Терми випишемо у таблицю 3.

б)  $s$ ,  $p$  та  $d$  станам електронів відповідають орбітальні квантові числа:  $l_1 = 0$ ,  $l_2 = 1$ ,  $l_3 = 2$ .

Знайдемо спочатку проміжні значення сумарних квантових чисел  $S_1$  та  $L_1$  для двох електронів ( $s$  та  $p$ ):

$$S_1 = 0, 1; L_1 = 1.$$

Сумарне спінове число для трьох електронів знайдемо з умо-

ви:  $S = S_1 + s_3; S_1 + s_3 - 1; \dots, |S_1 - s_3|$ ;  $S = \frac{1}{2}$  для  $S_1 = 0$  та  $S = \frac{1}{2}; \frac{3}{2}$  для  $S_1 = 1$ , тобто отримуємо два можливих значення сумарного спінового числа  $S = \frac{1}{2}; \frac{3}{2}$ . Цим значенням відповідатимуть дублетні та квартетні терми.

Таблиця 3

$S = 0$ (синглети)			$S = 1$ (триплети)		
$L$	$J$	Терм	$L$	$J$	Терм
2	2	$^1D_2$	2	1,2,3	$^3D_{1,2,3}$
3	3	$^1F_3$	3	2,3,4	$^3F_{2,3,4}$
4	4	$^1G_4$	4	3,4,5	$^3G_{3,4,5}$

Сумарне орбітальне квантове число набуватиме значень:

$$L = L_1 + l_3; L_1 + l_3 - 1; \dots, |L_1 - l_3|, \Rightarrow L = 1, 2, 3.$$

Отримані дані зведемо в таблицю 4:

Таблиця 4

$s = \frac{1}{2}$ (дублети)			$S = \frac{3}{2}$ (квартети)		
$L$	$J$	Терм	$L$	$J$	Терм
1	$\frac{1}{2}; \frac{3}{2}$	$^2P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}$	1	$\frac{1}{2}; \frac{3}{2}; \frac{5}{2}$	$^4P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}}$
2	$\frac{3}{2}; \frac{5}{2}$	$^2D_{\frac{3}{2}, \frac{5}{2}}$	2	$\frac{1}{2}; \frac{3}{2}; \frac{5}{2}; \frac{7}{2}$	$^4D_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}}$
3	$\frac{5}{2}; \frac{7}{2}$	$^2F_{\frac{5}{2}, \frac{7}{2}}$	3	$\frac{3}{2}; \frac{5}{2}; \frac{7}{2}; \frac{9}{2}$	$^4F_{\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}}$

При заданих значеннях  $S$  та  $L$  кількість термів дорівнює  $2S+1$ , якщо  $S < L$  та  $2L+1$ , якщо  $S > L$ . Саме тому маємо

тільки три терми  ${}^4P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}} (L=1, S=\frac{3}{2})$ .

**Задача №3. Виписати електронні конфігурації та за допомогою правила Хунда знайти основні терми атомів:**

а) азоту та кисню;

б) вуглецю та хлору.

**Розв'язок:** а) Зарядові числа азоту та кисню  $Z=7$  та  $Z=8$  відповідно. Електронна конфігурація цих елементів:

$$N: 1s^2 2s^2 2p^3$$

$$O: 1s^2 2s^2 2p^4$$

Розглядатимемо лише валентні електрони, оскільки заповнені оболонки мають нульові механічні моменти. В атомі азоту є три еквівалентні  $p$ -електрони ( $l_i = 1$ ). Щоб задовольнити принципу Паулі, ці електрони мають відрізнятись значеннями магнітних орбітальних або спінових квантових чисел.

У нашому випадку  $m_l = -1; 0; 1$ .

Наочним буде, якщо ми схематично розташуємо електрони наступним чином:

$$\begin{array}{cccc} m_l & 1 & 0 & -1 \\ m_s & \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{array}$$

Стрілки, направлені вгору, відповідатимуть значенню магнітного спінового числа  $m_s = +\frac{1}{2}$ , а направлені донизу — значенню магнітного спінового числа  $m_s = -\frac{1}{2}$ .

Згідно правила Хунда, основним буде терм з максимальним можливим значенням спінового моменту та максимальним при цьому значенням орбітального моменту. В нашому випадку

$$S_{\max} = \frac{3}{2}, L_{\max} = 0, \quad \text{оскільки} \quad M_{S_{\max}} = S_{\max} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{3}{2},$$

$M_{L_{\max}} = L_{\max} = -1 + 0 + 1 = 0$ ,  $p$  — оболонка заповнена рівно наполовину, тому значення повного квантового числа

$J = S_{\max}$ , тобто для атома азоту основним буде терм  $2^4 S_{\frac{3}{2}}$ .

Для атома кисню використаємо аналогічну схему:

$$\begin{array}{cccc} m_l & 1 & 0 & -1 & M_{L\max} = 1 \\ m_s & \uparrow\downarrow & \uparrow & \uparrow & M_{S\max} = 1 \end{array}$$

У цьому випадку  $M_{S\max} = 1$  відповідає спіновому числу  $S_{\max} = 1$ , а  $M_{L\max} = 1$  – орбітальному числу  $L = 1$ , оскільки електронна оболонка заповнена більше, ніж наполовину,  $J = L + S$ . Основний терм для атома кисню –  ${}^3P_2$ ,

б) Для вуглецю та хлору  $Z = 6$  та  $Z = 17$ , відповідно. Електронна конфігурація цих елементів записується так:

$$C: 1s^2 2s^2 2p^2$$

$$Cl: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$$

Згідно моделі, представлений в п. а), для атома вуглецю маємо схему:

$$\begin{array}{ccc} m_l & 1 & 0 & -1 \\ m_s & \uparrow & \uparrow & \end{array}$$

У цьому випадку  $M_{S\max} = 1$ , що відповідає спіновому числу  $S = 1$ , а  $M_{L\max} = 1$  – орбітальному числу  $L = 1$ , оскільки оболонка заповнена менш, ніж наполовину,  $J = L - S = 0$ . Для атома вуглецю основним буде терм  ${}^3P_0$ .

Для атома хлору схема виглядатиме так:

$$\begin{array}{ccc} m_l & 1 & 0 & -1 \\ m_s & \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow \end{array}$$

отже,  $S_{\max} = \frac{1}{2}$ ,  $L_{\max} = 1$ , основний терм атома хлору –  ${}^2P_{\frac{3}{2}}$ .

**Задача №4.** Знайти кут між спіновим та внутрішнім механічним моментами у векторній моделі атома:

а) що знаходиться у стані  ${}^3F$  з максимально можливим значенням внутрішнього механічного моменту;

б) що містить, крім заповнених підоболонки, три елек-

трони ( $p$ ,  $d$  та  $f$ ) і має максимально можливий для цієї конфігурації внутрішній механічний момент.

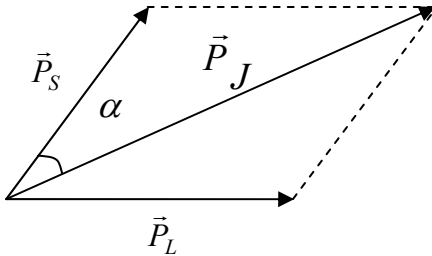


Рис. 1. Векторна діаграма механічних моментів атома

**Розв'язок:** а) На рис. 1 зображено вектори спінового, орбітального та внутрішнього механічного моментів атома в деякому стані. З векторної діаграми, використовуючи теорему косинусів, знаходимо співвідношення між цими векторами:

$$\begin{aligned} |\vec{P}_L|^2 &= |\vec{P}_S|^2 + |\vec{P}_J|^2 - 2|\vec{P}_S| \cdot |\vec{P}_J| \cos \alpha \Rightarrow \\ \cos \alpha &= \frac{|\vec{P}_S|^2 + |\vec{P}_J|^2 - |\vec{P}_L|^2}{2|\vec{P}_S| \cdot |\vec{P}_J|}. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Підставимо в (4.1) вирази для механічних моментів:

$$\begin{aligned} |\vec{P}_S|^2 &= \hbar^2 \cdot S(S+1), \\ |\vec{P}_L|^2 &= \hbar^2 \cdot L(L+1), \\ |\vec{P}_J|^2 &= \hbar^2 \cdot J(J+1), \end{aligned} \quad (4.2)$$

де  $S$ ,  $L$  та  $J$  – квантові числа, що характеризують відповідні моменти атома.

Отримаємо результат:

$$\cos \alpha = \frac{S(S+1) + J(J+1) - L(L+1)}{2\sqrt{S(S+1)} \cdot \sqrt{J(J+1)}}. \quad (4.3)$$

Квантові числа, що відповідають терму  ${}^3F$ , є такими:  $S=1$ ,  $L=3$ . Очевидно, що максимальне значення повного механічного моменту отримаємо при  $J=L+S=4$ . Підставляючи ці значення в (4.3), знаходимо:

$$\cos \alpha = \frac{2+20-12}{2\sqrt{2 \cdot 20}} = \frac{\sqrt{10}}{4} \Rightarrow \alpha \approx 38^\circ.$$

**б)** Знайдемо спочатку для цієї конфігурації квантові числа, що відповідають максимальним значенням механічних моментів (див. таблицю 5):

Очевидно, що

$$J_{\max} = L_{\max} + S_{\max} = \frac{15}{2}.$$

Підставляючи в (4.3) квантові числа  $S_{\max}$ ,  $L_{\max}$  та

$J_{\max}$ , знаходимо:

$$\cos \alpha = \frac{\frac{15}{4} + \frac{255}{4} - 42}{2\sqrt{\frac{15 \cdot 255}{16}}} \Rightarrow$$

$$\alpha = 34^\circ 30'.$$

Таблиця 5

$l_i$	1	2	3
$s_i$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$L_{\max}$	6		
$S_{\max}$	$\frac{3}{2}$		

**Задача №5.** Визначити всі можливі терми атома вуглецю для електронних конфігурацій  $1s^2 2s^2 2p^1 3l$  ( $l$  – орбітальне квантове число). Вказати всі можливі електромагнітні переходи між термами заданих конфігурацій та основним термом конфігурації  $1s^2 2s^2 2p^2$ .

**Розв'язок.** В задачі №3 ми визначили основний терм атома вуглецю —  $2^3P_0$ .

Розрахуємо всі можливі терми для збуджених конфігурацій. Зважимо на те, що при  $n=3$  можливі значення орбітального квантового числа  $l=0,1,2$ , тобто  $s$ ,  $p$  та  $d$  стани. Результати зручно звести в таблицю 6.

Підсумовуючи результат, отримаємо 4 синглетних терми:  $^1S_0$ ,  $^1P_1$ ,  $^1D_2$  та  $^1F_3$ ; та 10 триплетних термів:  $^3S_1$ ,  $^3P_{0,1,2}$ ,  $^3D_{1,2,3}$  та  $^3F_{2,3,4}$ .

Користуючись правилами відбору для квантових чисел при

дипольних переходах, а саме:

$$\Delta S = 0, \Delta L = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 1,$$

можемо визначити всі можливі переходи зі збуджених енергетичних рівнів на основний рівень  $2^3P_0$ .

Таблиця 6

Конфігурація	$S = 0$			$S = 1$		
	$L$	$J$	Терм	$L$	$J$	Терм
$2p^13s^1$	1	1	$^1P_1$	1	0, 1, 2	$^3P_{0,1,2}$
$2p^13p^1$	0	0	$^1S_0$	0	1	$^3S_1$
	1	1	$^1P_1$	1	0, 1, 2	$^3P_{0,1,2}$
	2	2	$^1D_2$	2	1, 2, 3	$^3D_{1,2,3}$
$2p^13d^1$	1	1	$^1P_1$	1	0, 1, 2	$^3P_{0,1,2}$
	2	2	$^1D_2$	2	1, 2, 3	$^3D_{1,2,3}$
	3	3	$^1F_3$	3	2, 3, 4	$^3F_{2,3,4}$

Згідно правил відбору, можливі такі переходи:

$$3^3S_1 \rightarrow 2^3P_0$$

$$3^3D_1 \rightarrow 2^3P_0'$$

тобто в цьому випадку буде спостерігатись дві спектральні лінії.

**Задача №6. Знайти спектральні терми атома, електронна конфігурація незаповненої оболонки якого  $nd^2$ .**

**Розв'язок:** Оскільки, згідно умови, два електрони мають однакові значення  $n$  та  $l$ , вони є *еквівалентними*. Для визначення термів у цьому випадку необхідно врахувати принцип Паулі. Пропонуємо два способи розв'язку задачі.

**Перший спосіб.** Запишемо значення  $m_l$  та  $m_s$  для  $d$  електронів:

$$m_{l_1} = m_{l_2} = +2, +1, 0, -1, -2; \quad m_{s_1} = m_{s_2} = \pm \frac{1}{2}.$$

Складемо таблицю для знаходження квантового числа  $M_L$ , що дорівнює  $M_L = \sum m_{l_i}$ . Для цього запишемо числа  $m_{l_1}$  та  $m_{l_2}$  й відповідні значення сумарного квантового числа  $M_L = m_{l_1} + m_{l_2}$  (таблиця 7).

Таблиця 7

$m_{l_1} \backslash m_{l_2}$	2	1	0	-1	-2
2	4	3	2	1	0
1	3	2	1	0	-1
0	2	1	0	-1	-2
-1	1	0	-1	-2	-3
-2	0	-1	-2	-3	-4

З точки зору квантової механіки, стани, що виникають в результаті перестановки електронів, є тотожні, тому значення  $M_L$ , які отримуються в результаті такої перестановки, будуть однаковими. З таблиці видно, що такими будуть значення  $M_L$ , які знаходяться вище та нижче від діагоналі. Тому всі числа в таблиці 7, які знаходяться нижче діагоналі, ми маємо відкинути. Розглянемо випадок, коли  $m_{s_1} = m_{s_2} = \frac{1}{2}$ , це означатиме, що сумарне квантове число  $M_S = 1$  і, оскільки  $(M_S)_{\max} = S$ ,  $S = 1$ . Згідно принципу Паулі, у цьому випадку електрони не повинні мати однакові значення  $m_l$ , тому діагональні стани для випадку  $S = 1$  мають бути відкинуті. У верхній частині таблиці можемо виділити два набори значень кван-



нтового числа  $M_L$ . Кожна така сукупність відповідатиме квантовому числу  $L$ , що дорівнює  $L = M_{L\max}$  для даного набору. Так, маємо сукупність значень:  $3, 2, 1, 0, -1, -2, -3$  — набір (3), який відповідає значенню  $L = 3$ , та сукупність  $1, 0, -1$  — набір (1), що відповідає значенню орбітального квантового числа  $L = 1$ . Таким чином, одержимо триплетні терми  ${}^3F_{2,3,4}$  та  ${}^3P_{0,1,2}$ .

Розглянемо тепер інший випадок, коли  $m_{IS} \neq m_{S2}$ , це означатиме, що  $M_S = 0$ ,  $S = 0$ . В цьому випадку враховуємо діагональні значення таблиці 7. Випишемо сукупності значень для квантового числа  $M_L$ :

$4, 3, 2, 1, 0, -1, -2, -3, -4$  — набір, що відповідає значенню квантового числа  $L = 4$ ;

$2, 1, 0, -1, -2$  — набір для  $L = 2$ ;

$0$  — набір для  $L = 0$ .

Отже, отримаємо три синглетні терми:  ${}^1S_0, {}^1D_2, {}^1G_4$ .

Таким чином, конфігурації  $nd^2$  відповідають наступні терми:  ${}^1G_4, {}^1D_2, {}^1S_0, {}^3F_{2,3,4}$  та  ${}^3P_{0,1,2}$ .

Д р у г и й с п о с і б. Складемо таблицю можливих розподілів електронів за квантовими станами з урахуванням принципу Паулі. По вертикалі запишемо значення квантового числа  $m_l$ , по горизонталі — можливі орієнтації спінового моменту. При цьому для наочності проекцію спіну  $m_s$  кожного електрона позначатимемо стрілкою, спрямованою вгору, якщо  $m_s = +\frac{1}{2}$ , або донизу, якщо  $m_s = -\frac{1}{2}$ . Ми не будемо враховувати тих орієнтацій електронів, які дають від'ємні значення суми проекцій  $M_L$  та  $M_S$ , оскільки вони не міститимуть нових наборів значень квантових чисел.

В отриманому наборі квантові числа  $M_L$  та  $M_S$  групуються наступним чином. Значення  $M_S = 0$  відповідають синглетним

станам ( $S=0$ ), значення  $M_S=1$  — триплетним станам ( $S=1$ ). Для визначення термів необхідно знайти стан з максимальним значенням  $M_{L\max}$  при певному  $M_S$ . Так, наявність стану з  $M_L=4$  та  $M_S=0$  вказує на те, що маємо терм  $^1G$ , отже, мають бути ще стани з  $M_L=3,2,1,0$  та  $M_S=0$  для кожного з них. (Від'ємні значення  $M_L=-4,-3,-2,-1$  ми отримали б, якби перебрали всі можливі комбінації електронів).

Таблиця 8

$m_l$	$m_s$														
2	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑	-	-	-	-	↑↓	-	-
1	↑	-	-	-	↓	-	-	-	↑	↑	↑	↑	-	↑↓	-
0	-	↑	-	-	-	↓	-	-	↑	-	↓	-	-	-	↑↓
-1	-	-	↑	-	-	-	↓	-	-	↑	-	↓	-	-	-
-2	-	-	-	↑	-	-	-	↓	-	-	-	-	-	-	-
$M_S$	1	1	1	1	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
$M_L$	3	2	1	0	3	2	1	0	1	0	1	0	4	2	0

Серед синглетних станів, що залишились, знову знаходимо  $M_{L\max}$ . У нашому випадку — це стан з  $M_L=2$  та  $M_S=0$ , що вказує на наявність терму  $^1D$ , до цього ж терму відносяться стани з  $M_L=1,0$  та  $M_S=0$ . Залишився ще стан з  $M_L=0$  та  $M_S=0$ , що відповідає терму  $^1S$ . Аналогічну схему використовуємо для станів з  $M_S=1$  (триплетних). Стани з  $M_L=3,2,1,0$  та  $M_S=1$  відповідають терму  $^3F$ , а стани  $M_L=1,0$  та  $M_S=1$  — терму  $^3P$ . Таким чином, даній конфігу-

рації відповідають п'ять типів термів:  ${}^3F$ ,  ${}^3P$ ,  ${}^1G$ ,  ${}^1D$  та  ${}^1S$ . Як бачимо, ми отримали той самий результат, що й у першому способі.

До переваги другого методу слід віднести те, що він дає можливість розрахувати терми для будь-якої кількості еквівалентних електронів, тоді як перший спосіб є більш оптимальним при розрахунку термів для двох еквівалентних електронів.

**Задача №7. Переконатись, що дві електронні конфігурації, в однієї з яких стільки ж еквівалентних електронів, скільки не вистачає іншій для заповнення підоболонки, мають однакові набори можливих типів термів:** а)  $p^2$  та  $p^4$ ; б)  $d^1$  та  $d^9$ . Визначити для даних конфігурацій основний терм, використовуючи правило Хунда.

**Розв'язок:** а) Для визначення наборів термів використаємо метод, наведений в попередній задачі. Зведемо всі можливі розподіли електронів за квантовими станами в таблицю 9:

Таблиця 9

$m_l$	$m_s$					
1	↑	↑	↑	↑	↑↓	-
0	↑	-	↓	-	-	↑↓
-1	-	↑	-	↓	-	-
$M_S$	1	1	0	0	0	0
$M_L$	1	0	1	0	2	0

Для конфігурації  $p^2$  орбітальне квантове число  $l=1$ , магнітне квантове число  $m_l=0, \pm 1$ .

Для  $M_S=0$  максимальне значення  $M_{L_{\max}}=2$ , приєднуємо до нього стани з  $M_L=1, 0$  та  $M_S=0$ . Всі ці стани відносяться до терму, який характеризується квантовими числами

$L = 2, S = 0$ , тобто терму  $^1D_2$ . Для станів з  $M_S = 1$   $M_{L\max} = 1$ , сюди ж приєднуємо стан  $M_L = 0, M_S = 1$  і отримуємо терм  $^3P_{0,1,2}$  і, нарешті, стан з  $M_S = 0$  та  $M_L = 0$  відповідає терму  $^1S_0$ . Згідно правила Хунда, для даної електронної конфігурації основним буде терм  $^3P_0$ .

Аналогічну таблицю складемо для конфігурації  $p^4$  (таблиця 10).

Таблиця 10

$m_l$	$m_s$					
1	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
0	$\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	-
-1	$\uparrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\downarrow$	-	$\uparrow\downarrow$
$M_S$	1	1	0	0	0	0
$M_L$	1	0	1	0	2	0

Як бачимо, набір можливих значень  $M_L$  та  $M_S$  ідентичний до попереднього, який було отримано для конфігурації  $p^2$ . Таким чином, для обох доповнюючих конфігурацій маємо однаковий набір термів:  $^1S_0$ ,  $^1D_2$  та  $^3P_{0,1,2}$ . Проте, для конфігурації  $p^4$  основним буде терм  $^3P_2$ .

б) як і в попередньому прикладі, результати зведемо в таблицю 11 для конфігурації  $d^1$  та в таблицю 12 — для конфігурації  $d^9$

Очевидно, що в даному випадку всі квантові числа формують один дублетний терм  $^2D_{\frac{3}{2}, \frac{5}{2}}$ . Для  $d^1$ - конфігурації основним буде терм  $^2D_{\frac{3}{2}}$ , а для  $d^9$  —  $^2D_{\frac{5}{2}}$ .

Таблиця 11

$m_l$	$m_s$		
2	↑	-	-
1	-	↑	-
0	-	-	↑
-1	-	-	-
-2	-	-	-
$M_s$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$M_L$	2	1	0

Таблиця 12

$m_l$	$m_s$		
2	↑↓	↑↓	↑↓
1	↑↓	↑↓	↑↓
0	↑↓	↑↓	↑
-1	↑↓	↑	↑↓
-2	↑	↑↓	↑↓
$M_s$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$M_L$	2	1	0

**Задача №8. Визначити валентність атомів**  
 $Li$  ( $Z = 3$ ),  $Be$  ( $Z = 4$ ),  $B$  ( $Z = 5$ ),  $C$  ( $Z = 6$ ).

**Розв'язок:** Всі елементи першої групи таблиці Менделєєва мають валентність, що дорівнює 1, оскільки в основному стані атом має спін  $s = \frac{1}{2}$  (основний терм атомів першої групи  $^2S_{\frac{1}{2}}$ ). Берилій ( $Be$ ) відноситься до елементів другої групи,

його електронна конфігурація  $1s^2 2s^2$ . Для стану  $2s^2$  спін дорівнює  $S = 0$ , а отже, валентність теж дорівнює нулевій. Атоми з  $S = 0$  (в нормальному стані) не вступають у хімічні сполуки. Але якщо електронна конфігурація збуджена, тобто, наприклад, має вигляд  $1s^2 2s^1 2p^1$ , то сумарне спінове число може дорівнювати 1 а валентність — 2.

До елементів третьої групи відноситься бор ( $B$ ). Його електронна конфігурація в основному стані  $1s^2 2s^2 2p^1$ . Валентність дорівнює 1. Для збуджених конфігурацій, наприклад таких, як  $1s^2 2s^1 2p^2$ , сумарне спінове число стає дорівнює  $S = \frac{3}{2}$  і валентність — 3.

Вуглець є елементом четвертої групи, його електронна конфігурація  $1s^2 2s^2 2p^2$  в нормальному або  $1s^2 2s^1 2p^3$  у збудженому станах. Відповідно, валентність у першому випадку дорівнюватиме 2, у другому — 4.

Для деяких елементів шостої групи, наприклад, хрому та молибдену, електронна конфігурація  $3d^5 4s^1$  (Cr)  $4d^5 5s^1$  (Mo) спінове квантове число  $S=3$ , тому валентність цих атомів для таких електронних конфігурацій дорівнює 6.

### ***Задачі для самостійної роботи***

1. Знайти можливі терми (в наближенні  $L-S$  та  $j-j$  зв'язку) для електронної конфігурації  $p^1 f^1$ .
2. Виписати можливі терми атома, що містить, крім заповнених підоболонки, три електрони ( $s, d, f$ ).
3. Використовуючи модель  $L-S$  — зв'язку, вкажіть всі можливі терми для електронної конфігурації  $ng^2$ .
4. Виписати можливі терми атома, що містить, крім заповнених підоболонки, два електрони:  $n_1 p^2$  або  $n_1 p^1 n_2 p^1$ . Порівняти ці два випадки і пояснити, чому кількість термів буде різною.
5. Визначити мультиплетність термів основних станів атомів вуглецю, азоту, кисню та фтору.
6. Знайти максимально можливий внутрішній механічний момент електронної оболонки атома в  $G$ -стані, якщо відомо, що цьому стану відповідає чотири терми однакової мультиплетності з різними значеннями квантового числа  $J$ .
7. Визначити всі можливі значення внутрішнього механічного моменту для атомів, що знаходяться в станах  $^2F, ^3D, ^4S$  та кратність виродження отриманих термів. Яким є фізичний зміст цієї величини?
8. Знайти максимально можливий кут між спіновим та повним механічним моментами атома, який знаходиться в стані з мультиплетністю 3 та кратністю виродження по  $J$ , що дорівнює 5.

9. За допомогою правила Хунда визначити основний терм атома, електронна конфігурація незаповненої підоболонки якого: а)  $nf^2$ , б)  $nd^6$ .
10. Знайти за допомогою правила Хунда кількість електронів в єдиній незаповненій підоболонці атома, основний терм якого: а)  ${}^6S_{\frac{5}{2}}$ , б)  ${}^2P_{\frac{3}{2}}$ , в)  ${}^4F_{\frac{9}{2}}$ .
11. Знайти кратність виродження основного стану атома, електронна конфігурація незаповненої підоболонки якого  $nf^4$ .
12. Вкажіть всі дозволені електродипольні переходи між термами  ${}^3P_{2,1,0}$ ,  ${}^1S_0$ ,  ${}^3S_1$ ,  ${}^1P_1$ ,  ${}^1D_2$ .
13. Показати, що кількість рівнів даної електронної конфігурації не залежить від типу зв'язку. Розгляд провести на прикладі  $npn'd$  — конфігурації для  $L-S$ - та  $j-j$ -зв'язку. Записати відповідні спектроскопічні позначення термів.
14. Визначити всі можливі терми атома марганцю для електронних конфігурацій  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4 4s^2 4l$  ( $l$  — будь-яке орбітальне квантове число). Вказати всі можливі електродипольні переходи між термами заданих конфігурацій та основним термом конфігурації  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$ .
15. Для хімічних елементів 7 групи валентність має бути 1,3,5,7. Вкажіть, для яких електронних конфігурацій це матиме місце.
16. Чому дорівнює валентність атома  $Cd$  (порядковий номер 48) в основному та у найближчих збуджених станах?
17. Атоми інертних газів можуть утворювати ексимерні молекули (збуджені). За рахунок чого це стає можливим?
18. Чому кількість неспарених за спіновими моментами електронів в атомі дорівнює  $2S$ , тобто валентності?

## Розділ 10. АТОМ ГЕЛІЮ

### Основні теоретичні відомості

Задача розрахунку квантових станів атома водню є однією з небагатьох задач, що може бути розв'язана точно. Атом гелію є найпростішим атомом після атома водню, але для нього знайти аналітичний розв'язок стаціонарного рівняння Шредінґера

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1)$$

неможливо. В (1)  $\hat{H}$  – це оператор Гамільтона системи, який можна представити у вигляді

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + V_{12}, \quad (2)$$

де  $\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{Ze^2}{r_1}$  – оператор Гамільтона для першого

електрона, який знаходиться в кулонівському полі ядра з за-

рядом  $Ze$ ,  $\hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{Ze^2}{r_2}$  – оператор Гамільтона для

другого електрона,  $V_{12} = \frac{e^2}{r_{12}}$  – енергія взаємодії двох електро-

нів,  $\Delta_1$  та  $\Delta_2$  – оператори Лапласа, які діють відповідно на координати першого  $\vec{r}_1$  та другого  $\vec{r}_2$  електронів, що знаходяться на відстані  $r_{12}$  один від одного (див. рис. 1).

Методами квантової механіки вдається визначити лише наближений розв'язок рівняння (1) – хвильову функцію  $\psi(\vec{r})$ , яка завдяки принципу тотожності частинок, має вигляд

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \pm \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)], \quad (3)$$

де  $\psi_1$  та  $\psi_2$  – хвильові функції першого та другого електронів відповідно. Знак плюс в (3) відповідає симетричній хвильовій функції  $\psi_S$ , а знак мінус – антисиметричній  $\psi_A$ .



Повна хвильова функція  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{s}_1, \vec{s}_2)$  для атома гелію є добутком координатної хвильової функції (3) та спінової  $\psi(\vec{s}_1, \vec{s}_2)$  і згідно з принципом Паулі завжди повинна бути антисиметричною.

### **Методичні вказівки та поради**

Для знаходження наближеного розв'язку рівняння (1) найчастіше застосовують метод збурень [2, 9, 33]. Для цього оператор Гамільтона (2) подають у вигляді

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (4)$$

де  $\hat{H}_0$  – оператор Гамільтона незбуреної системи, для якої розв'язок  $\psi_0$  рівняння Шредінґера  $\hat{H}_0\psi_0 = E_0\psi_0$  відомий, а  $\hat{V}$  – оператор збурення. Вважаючи, що збурення мале, можна визначити енергію системи  $E = \int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 d\vec{r}$ , використовуючи відому хвильову функцію  $\psi_0$ . Якщо врахувати (4), то можна отримати вираз для енергії:

$$E = E_0 + \Delta E^{(1)}, \quad (5)$$

де  $E_0 = \int \psi_0^* \hat{H}_0 \psi_0 d\vec{r}$ ,  $\Delta E^{(1)} = \int \psi_0^* \hat{V} \psi_0 d\vec{r}$  – перша поправка до енергії системи.

Використовуючи цей метод можна визначити також поправки вищих порядків  $\Delta E^{(n)}$ , де  $n > 1$ . На практиці, однак, найчастіше обмежуються розрахунком величини  $\Delta E^{(1)}$ , оскільки, як правило,  $|\Delta E^{(1)}| \gg |\Delta E^{(2)}| \gg \dots \gg |\Delta E^{(n)}|$ .

### **Приклади розв'язування задач**

**Задача №1.** Знайти енергію іонізації атома гелію в основному стані.

**Розв'язок:** Будемо вважати, що в атомі гелію електрони рухаються з нерелятивістськими швидкостями в кулонівському полі нерухомого ядра, оскільки маса ядра  $M \gg m$ , де  $m$  –

маса електрона. Виберемо прямокутну систему координат, початок якої сумістимо з центром ядра атома гелію (рис. 1). Тоді розташування електронів в цій системі координат буде описуватись радіус-векторами  $\vec{r}_1$  і  $\vec{r}_2$  (див. рис. 1).

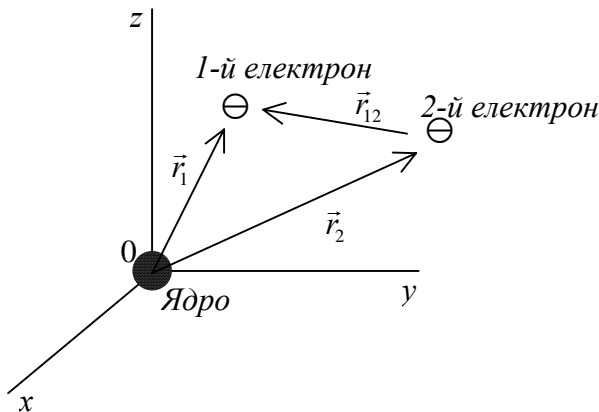


Рис. 1. Система двох електронів, що рухаються в кулонівському полі ядра атома гелію

Атом гелію має електронну конфігурацію в основному стані  $1s^2$ . Порядковий номер атома в таблиці Менделєєва  $Z = 2$ . Запишемо потенціальну енергію атома гелію:

$$U = -\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (1.1)$$

де  $r_1, r_2, r_{12}$  – відстані, вказані на рис. 1.

Перший та другий доданок в (1.1) – це потенціальна енергія взаємодії електронів з ядром. Третій доданок – потенціальна енергія взаємодії електронів між собою.

Оцінимо порядок цих енергій. Відомо, що діаметр атома гелію  $D \sim 4a_0$ , де  $a_0$  – борівський радіус, тобто  $D \approx 2,2 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ . Якщо взяти  $r_{12} = D$ , то

$$V_{12} = \frac{e^2}{r_{12}} = \frac{(4,8 \cdot 10^{-10})^2}{2,2 \cdot 10^{-8}} = 10,47 \cdot 10^{-12} \text{ ерг} \approx 6,54 \text{ eВ}. \quad (1.2)$$

Для оцінки енергії взаємодії електрона з ядром  $E$  можна

використати дані про енергію іонізації атома водню  $E_H$  :

$$E \sim E_H \cdot Z^2 = -13,56 \cdot 4 = -54,24 \text{ eB} . \quad (1.3)$$

Тобто енергія взаємодії електрона з ядром в іоні гелію в 8,3 рази більша за енергію взаємодії з іншим електроном. Це дозволяє при розв'язанні даної задачі використати метод збурень.

Запишемо стаціонарне рівняння Шредінґера для атома гелію:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{Ze^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi = 0 , \quad (1.4)$$

де  $E$  – повна енергія.

Спочатку для оцінки енергії атома гелію, знехтуємо доданком  $V_{12} = \frac{e^2}{r_{12}}$  і незбурений розв'язок рівняння (1.4) будемо шукати у вигляді

$$\psi = \psi_1(x, y, z) \cdot \psi_2(x, y, z) , \quad (1.5)$$

де  $\psi_1(x, y, z)$  – хвильова функція першого електрона,  $\psi_2(x, y, z)$  – хвильова функція другого електрона. Враховуючи (1.5), рівняння Шредінґера розділяється на два рівняння:

$$\begin{aligned} \Delta\psi_1(x, y, z) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E_1 + \frac{Ze^2}{r_1} \right) \psi_1(x, y, z) &= 0 , \\ \Delta\psi_2(x, y, z) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E_2 + \frac{Ze^2}{r_2} \right) \psi_2(x, y, z) &= 0 . \end{aligned} \quad (1.6)$$

Рівняння (1.6) є рівняннями Шредінґера для атома водню та воднеподібних іонів. Власні значення та власні функції цих рівнянь нам відомі.

Для основного стану іону гелію  $1s^1$ :

$$E_1 = E_2 = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \approx -54,3 \text{ eB} , \quad (1.7)$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp\left(-\frac{r_1}{a}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp\left(-\frac{r_2}{a}\right) , \quad (1.8)$$

де  $a = \frac{a_0}{Z}$ . Отже, з (1.7), енергія іонізації атома гелію

$$E_0 = E_1 + E_2 \approx -108,6 \text{ eV}, \quad (1.9)$$

а хвильова функція

$$\psi = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{Z}{a_0} r_1\right) \exp\left(-\frac{Z}{a_0} r_2\right). \quad (1.10)$$

Введемо нову змінну

$$\rho = \frac{2Z}{a_0} r \quad (1.11)$$

і підставимо (1.11) в (1.10):

$$\psi = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{\rho_1 + \rho_2}{2}\right) \quad (1.12)$$

Таким чином, у нульовому наближенні задача розв'язана. Проте, маємо грубу оцінку для енергії іонізації атома гелію. Згідно формули (1.9), ми одержали результат, що енергія іонізації атома гелію дорівнює  $-108,6 \text{ eV}$ , а експериментальне значення дорівнює  $E_{\text{exp}} = -78,62 \text{ eV}$ , тобто похибка біля 38%. Така велика похибка виникла тому, що ми не врахували енергію взаємодії електронів між собою.

В першому наближенні доданок  $V_{12}$  можна розглянути як мале збурення. Тоді, згідно теорії збурень [33], поправка до енергії  $\Delta E^{(1)}$  в першому наближенні дорівнює енергії збурення, усередненій по незбуреному стану, тобто

$$\Delta E^{(1)} = \int V_{12} |\psi|^2 \cdot d\tau = \int \frac{e^2}{r_{12}} |\psi|^2 \cdot d\tau, \quad (1.13)$$

де  $d\tau = r_1^2 \cdot \sin \theta_1 dr_1 d\theta_1 d\phi_1 r_2^2 \sin \theta_2 dr_2 d\theta_2 d\phi_2$ , а  $\psi$  визначається виразом (1.10);  $(r, \theta, \phi)$  – сферичні координати.

Для обчислення будемо користуватися замість змінних  $r_k$  змінними  $\rho_k$ , побудованими за правилом (1.11):

$$r_{12} = \frac{r_0}{2Z} \rho_{12}, \quad r_1 = \frac{r_0}{2Z} \rho_1, \quad r_2 = \frac{r_0}{2Z} \rho_2,$$

$$d\tau = \left( \frac{a_0}{2Z} \right)^6 \rho_1^2 \sin \theta_1 d\rho_1 d\theta_1 d\varphi_1 \cdot \rho_2^2 \sin \theta_2 d\rho_2 d\theta_2 d\varphi_2. \quad (1.14)$$

Хвильову функцію  $\psi$  представимо у вигляді (1.12). Підставимо (1.12), (1.14) в інтеграл (1.13) для  $\Delta E^{(1)}$ :

$$\Delta E^{(1)} = \frac{Ze^2}{2^5 \pi^2 a_0} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\exp(-\rho_1 - \rho_2)}{\rho_{12}} \times \\ \times \rho_1^2 d\rho_1 \sin \theta_1 d\theta_1 d\varphi_1 \cdot \rho_2^2 \sin \theta_2 d\theta_2 d\varphi_2. \quad (1.15)$$

Шестикратний інтеграл в (1.15) дорівнює  $20\pi^2$  (див. додаток. в [9]). Відповідно,

$$\Delta E^{(1)} = \frac{Ze^2}{2^5 \pi^2 a_0} \cdot 20\pi^2 = \frac{Ze^2}{2a_0} \cdot \frac{5}{4} = -\frac{5Z}{4} E_H. \quad (1.16)$$

Таким чином, у першому наближенні енергія атома гелію в основному стані дорівнює

$$E = E_0 + \Delta E^{(1)} = 2Z^2 E_H - \frac{5Z}{4} E_H = -108,6 + \frac{5 \cdot 2}{4} \cdot 13,56 = \\ = -108,6 + 33,9 = -74,7 \text{ eB}. \quad (1.17)$$

Одержаний результат близький до експериментального  $E_{\text{exp}} = -78,62 \text{ eB}$ . Наявність розходження між теоретичним і експериментальним результатом пояснюється тим, що в (1.17) врахована лише перша поправка до енергії  $\Delta E^{(1)}$ .

**Задача № 2. Чому основним термом атома гелію є  $^1S_0$ ? Чому в спектрі атома гелію можна відокремити синглетні та триплетні спектральні лінії?**

**Розв'язок:** Електронна конфігурація атома гелію в основному стані –  $1s^2$ , тобто маємо два еквівалентних електрона, для яких  $n_1 = n_2 = 1$ ;  $l_1 = l_2 = 0$ ;  $m_{l_1} = m_{l_2} = 0$ , де  $n$  – головне квантове число,  $l$  – орбітальне і  $m$  – магнітне квантове число. З векторної моделі (L-S зв'язок, див. розділ 9) формально для атома гелію одержуємо два терми  $^1S_0$  та  $^3S_1$ , що відповідають антипаралельній та паралельній орієнтації спінових моментів електронів. Але, згідно принципу Паулі, терм  $^3S_1$  неможливий, оскільки він утворюється для двох електронів, що мають од-

накову четвірку квантових чисел  $(n, l, m_l, m_s)$ . Якби це було не так, то, згідно правила Хунда, основним термом атома гелію в основному стані був би терм  $^3S_1$ . Це означає, що атом гелію має магнітний момент і виявляє парамагнітні властивості, а з експерименту відомо, що він – діамагнетик. Отже, основний терм атома гелію – це  $^1S_0$ .

Розглянемо для атома гелію електронні конфігурації, що відповідають збудженим станам:  $1s\ ns$  та  $1s\ np$ , де  $n = 2, 3, 4, \dots$ ;  $1s\ nd$ , де  $n = 3, 4, 5, \dots$ . Розпишемо квантові числа для обох електронів та знайдемо терми, згідно векторної моделі атома (див. розділ 9):

$$1s\ ns: \quad l_1 = l_2 = 0, \quad s_1 = s_2 = \frac{1}{2};$$

$$L = 0, \quad S = 0 - ^1S_0;$$

$$L = 0, \quad S = 1 - ^3S_1.$$

$$1s\ np: \quad l_1 = 0, \quad l_2 = 1, \quad s_1 = s_2 = \frac{1}{2};$$

$$L = 1, \quad S = 0 - ^1P_1;$$

$$L = 1, \quad S = 1 - ^3P_0, ^3P_1, ^3P_2.$$

$$1s\ nd: \quad l_1 = 0, \quad l_2 = 2, \quad s_1 = s_2 = \frac{1}{2};$$

$$L = 2, \quad S = 0 - ^1D_2;$$

$$L = 2, \quad S = 1 - ^3D_1, ^3D_2, ^3D_3.$$

Тобто, атом гелію має синглетні (плетність  $\kappa = 2S + 1 = 1$ ) та триплетні (плетність  $\kappa = 3$ ) терми. Атом гелію в синглетному стані називається паргелієм, в триплетному – ортогелієм.

У випадку L-S зв'язку виконується правило відбору  $\Delta S = 0$ , тому в спектрі атома гелію виникає серія синглетних ліній та серія триплетних ліній, що відповідають переходам між відповідними термами.

**Задача № 3. Чому ймовірності електродипольних переходів між синглетними та триплетними рівнями в атомі гелію дорівнюють нулю?**

**Розв'язок:** Імовірність переходу між двома станами, що ха-

рактизуються хвильовими функціями  $\psi_m$  та  $\psi_n$ , залежить від матричних елементів

$$x_{mn} = \int \psi_m^* x \psi_n d\tau, \quad y_{mn} = \int \psi_m^* y \psi_n d\tau, \quad z_{mn} = \int \psi_m^* z \psi_n d\tau. \quad (3.1)$$

Ці матричні елементи є квантовомеханічними аналогами проєкцій дипольного моменту в класичній фізиці.

Розглянемо випадок, коли стану  $n$  відповідає синглетний терм, а стану  $m$  – триплетний. Відомо, що координатна частина хвильової функції для синглетного стану  $\psi_n \equiv \psi_S$  є симетричною, а для триплетного  $\psi_m \equiv \psi_A$  – антисиметричною. Це впливає з властивості антисиметричності хвильової функції для ферміонів (електронів). Тому, наприклад, матричний елемент  $x_{mn}$  з (3.1) запишеться у вигляді

$$x_{mn} = \int \psi_A^* x \psi_S d\tau. \quad (3.2)$$

Якщо електрони в атомі гелію міняються місцями, то завдяки принципу тотожності частинок, матричні елементи (3.1), (3.2) не повинні змінюватись. З іншого боку, добуток  $\psi_A^* \psi_S$  при цьому повинен змінити знак, оскільки  $\psi_A$  – антисиметрична хвильова функція. Це може бути в єдиному випадку, коли інтеграл в (3.2) дорівнює нулю.

Це строго виконується в тому випадку, коли ми не враховуємо спін-орбітальну взаємодію, тобто вважаємо, що хвильова функція не залежить від спінових координат.

**Задача № 4.** Що таке обмінне виродження і за яких умов воно "знімається"? Показати це на прикладі атома гелію. Яка симетрія просторових та спінових компонент хвильових функцій пара- та ортогелію? Чому триплетні терми атома гелію розташовані нижче, ніж синглетні?

**Розв'язок:** У нульовому наближенні стан атома гелію описується хвильовою функцією

$$\psi_{n_1, n_2}(1, 2) = \psi_{n_1}(1) \cdot \psi_{n_2}(2), \quad (4.1)$$

де  $\psi_{n_1}(1)$  – характеризує стан першого електрона,  $\psi_{n_2}(2)$  – характеризує стан другого електрона. Поміняємо обидва еле-

ктрони місцями, тоді новий стан буде описуватись хвильовою функцією

$$\psi_{n_1, n_2}(2, 1) = \psi_{n_1}(2) \cdot \psi_{n_2}(1). \quad (4.2)$$

Згідно принципу тотожності частинок, ці хвильові функції є розв'язками рівняння Шредінґера  $\hat{H}\psi = E\psi$  для атома гелію і відповідають одному значенню енергії  $E$ . Таким чином, кожен стан з енергією  $E$  є двократно виродженим (одному значенню енергії  $E$  відповідають два стани з хвильовими функціями  $\psi_{n_1, n_2}(1, 2)$ ,  $\psi_{n_1, n_2}(2, 1)$ ). Це виродження називається обмінним виродженням. Покажемо, що для збуджених станів атома гелію це виродження "знімається".

Оскільки функції  $\psi_{n_1, n_2}(1, 2)$ ,  $\psi_{n_1, n_2}(2, 1)$  задовольняють рівняння Шредінґера, то його буде задовольняти і їх лінійна комбінація

$$\psi = \alpha \{ \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) \pm \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1) \}. \quad (4.3)$$

Коефіцієнт  $\alpha$  знайдемо з умови нормування:

$$\int_0^\infty \psi^* \psi d\tau = 2\alpha^2 = 1, \quad (4.4)$$

звідки  $\alpha = 1/\sqrt{2}$ . Таким чином, з (4.3) можна утворити дві хвильові функції: симетричну

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) + \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1) \} \quad (4.5)$$

та антисиметричну

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) - \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1) \}. \quad (4.6)$$

Функція  $\psi_S$  не змінює знак при перестановці електронів місцями, а  $\psi_A$  – змінює знак. З (4.6) також випливає, що для електронів, які знаходяться в однаковому стані при  $n_1 = n_2$ ,  $\psi_A = 0$ .

Розглянемо тепер, як симетрія хвильових функцій впливає на значення енергії  $E$ . Як відомо (див. (8) в розділі 4),

$$E = \int \psi^* \hat{E} \psi d\tau, \quad (4.7)$$



де  $\hat{E} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + U_1 + U_2 + U_{12}$  – оператор енергії,

$$\hat{T}_1 = \hat{T}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta, \quad U_1 = -\frac{Ze^2}{r_1}, \quad U_2 = -\frac{Ze^2}{r_2}, \quad U_{12} = \frac{e^2}{r_{12}}, \quad \psi - \text{одна з}$$

хвильових функцій (4.5), (4.6). Враховуючи, що

$$\hat{E}_1 \psi_{n_1} = E_1 \psi_{n_1}, \quad \hat{E}_2 \psi_{n_2} = E_2 \psi_{n_2}, \quad (4.8)$$

маємо:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} \int \left\{ \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) \pm \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1) \right\}^* \times \\ &\times \left[ \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + U_1 + U_2 + U_{12} \right] \left\{ \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) \pm \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1) \right\} d\tau = \\ &= \frac{1}{2} \cdot 2(E_1 + E_2) + \frac{1}{2} \int \psi_{n_1}^*(1) \psi_{n_2}^*(2) U_{12} \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) d\tau + \\ &+ \frac{1}{2} \int \psi_{n_1}^*(2) \psi_{n_2}^*(1) U_{12} \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1) d\tau \pm \\ &\pm \frac{1}{2} \int \psi_{n_1}^*(1) \psi_{n_2}^*(2) U_{12} \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1) d\tau \pm \\ &\pm \frac{1}{2} \int \psi_{n_1}^*(2) \psi_{n_2}^*(1) U_{12} \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) d\tau. \end{aligned} \quad (4.9)$$

З (4.9) випливає, що

$$E = E_0 + K \pm A, \quad (4.10)$$

де  $E_0 = E_1 + E_2$ ,  $K = \int_0^\infty \psi_{n_1}^2 U_{12} \psi_{n_2}^2 d\tau$  – інтеграл, що характеризує

енергію відштовхування двох електронних хмар (кулонівський

інтеграл),  $A = \int_0^\infty \psi_{n_1}^*(1) \psi_{n_2}(1) U_{12} \psi_{n_2}^*(2) \psi_{n_1}(2) d\tau$  – обмінний

інтеграл. Як бачимо, обмінний інтеграл залежить від змішаних станів, що виникають при перестановці електронів в атомі гелію.

Для симетричної хвильової функції  $\psi_S$  з (4.10) маємо

$$E_S = E_0 + K + A, \quad (4.11)$$

а для антисиметричної хвильової функції  $\psi_A$

$$E_A = E_0 + K - A. \quad (4.12)$$

Відповідна енергетична діаграма показана на рис. 2.

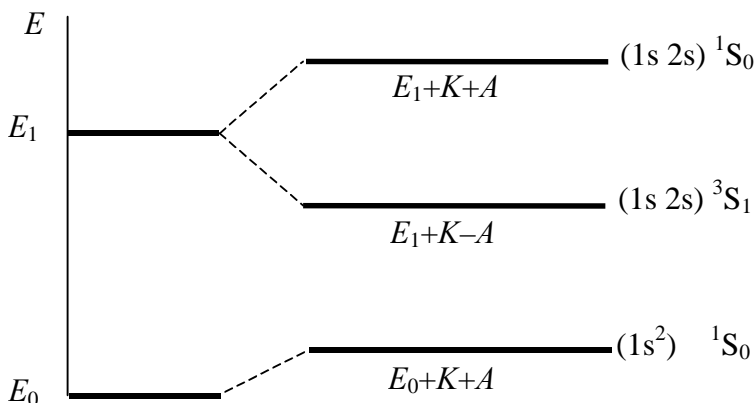


Рис. 2. Система енергетичних рівнів для атома гелію

Повна хвильова функцію для атома гелію в першому наближенні є добутком координатної частини хвильової функції (4.5), (4.6) та спінової функції, що залежить від спінових координат. Повна хвильова функція, згідно принципу Паулі, має бути антисиметричною.

Для синглетних станів ( $S = 0$  ( $\uparrow\downarrow$ ),  $m_{s_1} = \frac{1}{2}$ ,  $m_{s_2} = -\frac{1}{2}$ ) спінова функція буде антисиметричною. Тоді координатна частина повної хвильової функції має бути симетричною.

Для триплетних станів ( $S = 1$  ( $\uparrow\uparrow$ ),  $m_{s_1} = \frac{1}{2}$ ,  $m_{s_2} = \frac{1}{2}$ ) спінова функція є симетричною. Тоді координатна частина повної хвильової функції буде антисиметричною.

Тепер зрозуміло, що енергія синглетних станів буде  $E_0 + K + A$ , а триплетних  $E_0 + K - A$ , тобто триплетні терми на діаграмі енергій будуть знаходитися нижче, ніж синглетні (див. рис. 2).

### **Задачі для самостійної роботи**

1. Користуючись методом збурень, визначити енергію осно-

вного стану для іону літію  $Li^+$  ( $Z = 3$ ).

2. Визначте терми для атома гелію, якщо він має збуджену електронну конфігурацію  $1s4p$ .
3. Визначити енергію основного стану та енергію іонізації іону водню  $H^-$ .
4. Розрахувати енергію першого збудженого стану іону водню  $H^-$ .
5. Розрахувати енергію основного та першого збудженого стану іону  $Be^{++}$ .
6. Які спектральні лінії буде випромінювати атом гелію, якщо електрон збуджений до стану  $3s$ ?
7. Скільки буде спостерігатися спектральних ліній, якщо атом гелію збуджений до рівня  $4^3P_2$ ?
8. Зобразити систему термів для орто- та паргелію.
9. Чому в спектрі атома гелію можна спостерігати слабку лінію з довжиною хвилі  $591,6 \text{ \AA}$ , що виникає під час переходу  $^3P_1 \rightarrow ^1S_0$ ?
10. Першим резонансним лініям атома гелію відповідають довжини хвиль  $\lambda_1 = 58,4 \text{ нм}$  та  $\lambda_2 = 53,7 \text{ нм}$ . Вкажіть, між якими переходами виникають ці спектральні лінії. Підрахуйте енергію збуджених рівнів.
11. При спостереженнях сонячних протуберанців в спектрі Сонця була зареєстрована лінія з довжиною хвилі  $587,6 \text{ нм}$  (1868 рік). В 30-х роках XX ст. за допомогою спектрометра з високою роздільною здатністю були знайдені спектральні лінії з довжинами хвиль  $587,562 \text{ нм}$ ,  $587,565 \text{ нм}$ ,  $587,599 \text{ нм}$ . Вкажіть, переходам між якими енергетичними рівнями атома гелію відповідають ці лінії?

## Розділ 11. АТОМ У МАГНІТНОМУ ПОЛІ

### Основні теоретичні відомості

Магнетизм атома обумовлений трьома причинами:

1) орбітальним рухом електрона; 2) наявністю у електрона власного механічного моменту (спіну); 3) наявністю у ядер спінових моментів.

Орбітальний магнітний момент атома визначається за формулою:

$$\mu_L = \mu_B \sqrt{L(L+1)}, \quad (1)$$

де  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c}$  — магнетон Бора, який є одиницею вимірювання атомних та молекулярних магнітних моментів,  $L$  — орбітальне квантове число. Проекція магнітного орбітального моменту на напрямок магнітного поля

$$\mu_{LH} = \mu_B m_L, \quad (2)$$

тут  $m_L$  — магнітне орбітальне квантове число, яке набуває значення  $m_L = L, L-1, \dots, -L$ , всього  $2L+1$  значень.

Спіновий магнітний момент атома

$$\mu_S = 2\mu_B \sqrt{S(S+1)} \quad (3)$$

та його проекція на напрямок магнітного поля

$$\mu_{SH} = 2\mu_B m_S, \quad (4)$$

де  $m_S$  може приймати  $2S+1$  значень.

Ефективний магнітний момент атома з урахуванням спін-орбітальної взаємодії дорівнює

$$\mu_J = \mu_B g \sqrt{J(J+1)}, \quad (5)$$

де  $J$  — квантове число, що відповідає повному механічному моменту атома,  $g$  — множник Ланде, або  $g$ -фактор, який характеризує взаємну орієнтацію векторів орбітального та спінового моментів :

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \quad (6 \text{ a})$$

або в іншій формі запису:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (6 \text{ б})$$

Множник Ланде  $g = 1$  для станів з  $S = 0$  та  $g = 2$ , якщо  $L = 0$ .

Відношення магнітного моменту електрона до його механічного моменту називається гіромагнітним відношенням

$$\frac{\mu_J}{P_J} = \gamma = -g \frac{e}{2m_0} (CI) = -g \frac{e}{2m_0 c} (Гаус). \quad (7)$$

Знак "–" у співвідношенні (7) вказує на те, що вектори  $\vec{\mu}_J$  та  $\vec{P}_J$  взаємно протилежні за напрямком (у класичному розумінні).

Якщо атом знаходиться в „слабкому” магнітному полі, тобто такому, де взаємодія векторів  $\vec{\mu}_L$  та  $\vec{\mu}_S$  між собою буде значно більшою за їх взаємодію із зовнішнім магнітним полем, то атом буде себе вести як магнітний диполь з моментом (5), причому проекція магнітного моменту на напрямок поля визначатимуться так:

$$\mu_{JH} = \mu_B g m_J, \quad (8)$$

де  $m_J = J, J-1, \dots, -J$  — магнітне квантове число, що приймає  $2J+1$  значень. Додаткова потенціальна енергія взаємодії магнітного моменту із зовнішнім магнітним полем дорівнює:

$$\Delta E = -(\vec{\mu}_J \vec{H}) = \mu_B g H m_J. \quad (9)$$

Для атомів, що знаходяться у "слабких" полях, у спектрах випромінювання спостерігається ефект Зеемана, який полягає в розщепленні спектральної лінії в магнітному полі. Величина розщеплення визначається так:

$$\Delta\omega = \omega - \omega_0 = \frac{eH}{2m_0 c} (g_1 m_{J1} - g_2 m_{J2}), \quad (10)$$

де  $\frac{eH}{2m_0 c} = \omega_L$  — ларморівська частота прецесії орбітального

моменту навколо напрямку магнітного поля, індекси 1,2 стосуються, відповідно, початкового та кінцевого станів, між якими відбувається перехід,  $\omega_0$  — частота цього переходу за від-

сутності магнітного поля. Правила відбору для магнітного квантового числа

$$\Delta m_J = 0, \pm 1. \quad (11)$$

У випадку, коли множники Ланде для обох станів,  $g_1 = g_2 = 1$ , тобто для синглет–синглетних переходів, спостерігається нормальний ефект Зеемана, величина розщеплення при цьому дорівнює

$$\Delta\omega = \omega - \omega_0 = \frac{eH}{2m_0c} \Delta m_J. \quad (12)$$

Враховуючи правила відбору (11), отримаємо три компоненти зееманівського розщеплення

$$\omega = \omega_0, \omega_0 \pm \omega_L. \quad (13)$$

Незміщена компонента називається  $\pi$ -компонентою, а компоненти з частотами  $\omega = \omega_0 \pm \omega_L$  — відповідно,  $\sigma^+$ - та  $\sigma^-$ -компонентами.

Якщо для енергетичних переходів  $g_{1,2} \neq 1$ , тобто є спіно-орбітальна взаємодія, спостерігається аномальний ефект Зеемана, причому частота  $\pi$ -компоненти ( $\Delta m = 0$ ) дорівнює

$$\omega = \omega_0 + \omega_L m_J (g_1 - g_2), \quad (14)$$

а для  $\sigma$ -компонент ( $\Delta m = \pm 1$ )

$$\omega = \omega_0 + \omega_L (g_1 m_{J1} - g_2 (m_{J1} \pm 1)). \quad (15)$$

У сильних полях, (таких, що викликають розщеплення енергетичного рівня, яке помітно перевищує природне мультиплетне розщеплення), спостерігається ефект Пашена-Бака. При цьому додаткова енергія атома в магнітному полі становитиме

$$\Delta E = \mu_B (m_L + 2m_S) H. \quad (16)$$

Величина розщеплення спектральної лінії:

$$\Delta\omega = \omega_L (\Delta m_L + 2\Delta m_S). \quad (17)$$

Враховуючи правила відбору для магнітних спінового та орбітального квантових чисел  $\Delta m_L = 0, \pm 1; \Delta m_S = 0$ , отримаємо три лінії розщеплення (без урахування тонкої структури ефекту Пашена-Бака)

$$\Delta\omega = \omega - \omega_0 = 0, \pm\omega_L \quad . \quad (18)$$

$\pi$ - та  $\sigma$ -компоненти відрізняються одна від одної поляризацією.  $\pi$ -компоненти завжди лінійно поляризовані вздовж напрямку магнітного поля.  $\sigma$ -компоненти поляризовані циркулярно, якщо спостереження ведеться вздовж напрямку магнітного поля і лінійно поляризовані (перпендикулярно до напрямку поля) при поперечному спостереженні. Саме завдяки своїй поляризації  $\pi$ -компоненти не спостерігаються у повздовжньому ефекті Зеемана.

Магнітні резонансні переходи відбуваються між підрівнями одного терму, розщепленого в магнітному полі, і спостерігаються в НВЧ – діапазоні. Оскільки, згідно правил відбору, для фіксованого квантового числа  $J$   $\Delta m_J = \pm 1$ , то частота переходу між сусідніми підрівнями буде дорівнювати

$$\nu_{pez} = g \frac{\mu_B H}{h} = g \frac{eH}{4\pi m_0 c}, \quad (19)$$

де  $\mu_B$  – магнетон Бора,  $g$  – множник Ланде.

Діамагнетизм речовин обумовлений прецесією електронних орбіт в магнітному полі. В чистому вигляді проявляється для атомів, у яких магнітний момент дорівнює нулеві. Магнітна сприйнятливість діамагнетика [2,3, 9]

$$\chi = -\frac{e^2 n}{6m_0 c^2} N_0 \overline{r_0^2}, \quad (20)$$

де  $N_0$  – число валентних електронів,  $n$  – концентрація атомів,  $\overline{r_0^2}$  – середнє значення квадрата радіуса зовнішньої оболонки,  $e, m_0$  – заряд та маса спокою електрона. Часто діамагнітні властивості характеризують молярною магнітною сприйнятливістю. В цьому випадку у формулі (20) концентрацію  $n$  потрібно замінити на число Авогадро.

Магнітна сприйнятливість парамагнетика (речовини, атоми якої мають магнітний момент) дорівнює

$$\chi = \frac{\mu_J^2 n}{3kT}, \quad (21)$$

де  $n$  – концентрація атомів,  $T$  – температура,  $\mu_J$  – ефекти-

вний магнітний момент атома.

У сильно неоднорідному магнітному полі пучок атомів, у яких є магнітний момент, розщеплюється на декілька компонент (дослід Штерна та Герлаха). Сила, що діє з боку неоднорідного магнітного поля з градієнтом  $\frac{dH}{dx}$  на магнітний диполь з моментом  $\vec{\mu}$ :

$$F_x = \mu \frac{dH}{dx} \cos \alpha, \quad (22)$$

тут  $\alpha$  — кут, що визначає орієнтацію диполя відносно напрямку магнітного поля.

### **Методичні вказівки та поради**

1. Для обчислення магнітного моменту атома та додаткової енергії, яку він отримує в магнітному полі, необхідно починати з визначення квантових чисел  $L, S, J$ , які характеризують терм атома. Після цього обчислюється множник Ланде  $g$  за формулою (6). Якщо він не дорівнює нулю, далі можна розраховувати магнітний момент, його проекції на напрямок поля та додаткову енергію (9).
2. Розв'язуючи задачі з цієї теми, необхідно спочатку визначити, який ефект має місце: нормальний, аномальний ефект Зеємана чи ефект Пашена-Бака. Тільки після цього, використовуючи правила відбору, справедливі для даного ефекту, визначають кількість спектральних ліній та значення частот. Якщо в умові задачі не сказано, про яке поле – сильне чи слабе – йдеться, необхідно оцінити величину магнітного поля самостійно. Для цього розщеплення в магнітному полі порівнюється зі спін-орбітальним розщепленням (див. задачу №4).
3. У задачах, пов'язаних з розрахунком розщеплення пучка атомів у неоднорідному магнітному полі (дослід Штерна та Герлаха), звичайно знаходять кількість смуг, які утворюються на екрані та найбільшу відстань між ними. Для відповіді на перше запитання визначають кількість проекцій магнітного моменту на напрямок поля (8), що й визначатиме кількість смуг на екрані. Для відповіді на друге запи-



тання необхідно визначити множник Ланде та проінтегрувати рівняння руху атома в неоднорідному магнітному полі (див. задачу №3).

4. В задачах з теми "Магнітні резонанси" необхідно визначити тип магнітного резонансу, зобразити розщеплення енергетичного рівня в магнітному полі та визначити частоту переходу між компонентами зееманівського розщеплення терму за формулою (19).
5. В задачах з теми "Діамагнетизм та парамагнетизм атомів" найчастіше треба визначити магнітні сприйнятливості за формулами (20) та (21) або середній розмір зовнішньої орбіти  $\sqrt{r_0^2}$  з формули (20). При розв'язку задач необхідно звертати увагу на систему одиниць (СІ або гаусівська).

### **Приклади розв'язування задач**

**Задача №1.** Визначити величину  $g$ -фактора для атома  $Mn$ , якщо відомо, що електронний парамагнітний резонанс речовини, що містить атоми  $Mn$ , спостерігається при значенні напруженості магнітного поля  $H = 3,6 \cdot 10^3$  Е та частоті  $\nu_{рез} = 10^{10}$  Гц. Співставити одержаний результат з теоретично розрахованим.

**Розв'язок:** Визначимо спочатку основний терм атома  $Mn$  ( $Z = 25$ ). Електронна конфігурація незаповненої підоболонки  $Mn$  –  $3d^5$ . Згідно правила Хунда, основним буде терм  ${}^6S_{\frac{5}{2}}$  (пропонуємо переконатись у цьому самостійно). Оскільки

це стан з нульовим орбітальним моментом  $L = 0$ , для нього теоретичне значення  $g$ -фактору  $g = 2$ . Знайдемо тепер експериментальне значення множника Ланде. Взаємодія магнітного моменту атома із зовнішнім полем призводить до розщеплення енергетичного рівня  ${}^6S_{\frac{5}{2}}$ . За умови:

$$h\nu = g\mu_B H \quad (1.1)$$

буде спостерігатись резонанс. З (1.1) отримуємо експериментальне значення  $g$ -фактора:

$$g = \frac{h\nu_{\text{рез}}}{\mu_B H} = \frac{6,62 \cdot 10^{-27} \cdot 10^{10}}{0,927 \cdot 10^{-20} \cdot 3,6 \cdot 10^3} = 1,983.$$

Невелику різницю між теоретичним та експериментальним значеннями можна пояснити впливом на атом кристалічного поля, форми зразка та точністю визначення резонансної частоти.

**Задача №2. Визначити ефективний магнітний момент атома, що знаходиться в стані  $^3P_2$ , значення можливих проекцій магнітного моменту на напрямок зовнішнього магнітного поля та максимальну величину енергії взаємодії з магнітним полем  $H = 1 \text{ E}$  в одиницях магнетона Бора.**

**Розв'язок:** Для атома в стані  $^3P_2$  значення квантових чисел  $J = 2, S = 1, L = 1$ . Підставляючи ці числа у формулу (6б), отримуємо  $g = \frac{3}{2}$ . Ефективний магнітний момент атома:

$$\mu = \mu_B g \sqrt{J(J+1)} = \frac{3}{2} \sqrt{6} \mu_B \approx 3,67 \mu_B. \quad (2.1)$$

Проекції магнітного моменту на напрямок зовнішнього поля:

$$\mu_H = \mu_B g m_J. \quad (2.2)$$

В нашому випадку  $m_J = 0, \pm 1, \pm 2$ , тому для проекцій (2.2) отримуємо:

$$\mu_H = 0, \pm \frac{3}{2} \mu_B, \pm 3 \mu_B.$$

Енергія взаємодії магнітного моменту атома з магнітним полем

$$\Delta E = -(\vec{\mu} \vec{H}) = \mu_H H = \mu_B g m_J H. \quad (2.3)$$

Максимального значення енергія набуватиме при  $m_{J_{\text{max}}} = \pm 2$ ,

$$\Delta E_{\text{max}} = \pm 3 \mu_B H = \pm 3 \cdot 0,927 \cdot 10^{-20} \cdot 1 = \pm 2,78 \cdot 10^{-20} \text{ ерг}, \quad \text{тобто}$$

терм  $^3P_2$  в магнітному полі розщепиться на 5 підрівнів, причому максимальне зміщення енергетичного рівня відносно нульового значення (без поля) становитиме  $2,78 \cdot 10^{-20} \text{ ерг}$ .

**Задача №3.** В досліді Штерна та Герлаха використовується пучок атомів ванадію (основний стан  $^4F_{\frac{3}{2}}$ ), що ру-

хаються зі швидкістю  $v_0 = 400 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ . Якою буде відстань між крайніми компонентами розщепленого пучка на екрані, якщо розмір області неоднорідного магнітного поля  $l = 5 \text{ см}$ , відстань від магніту до екрану  $b = 10 \text{ см}$ ,

$\frac{dH}{dz} = 23 \text{ кЕ/см}$  (рис.1).

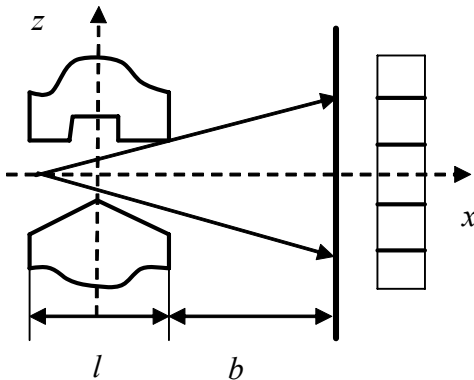


Рис.1 Розщеплення пучка атомів у неоднорідному магнітному полі

**Розв'язок:** Якщо атом, який має магнітний момент, помістити в неоднорідне магнітне поле, на нього діятиме з боку поля сила

$$F_z = \mu \frac{dH}{dz} \cos(\vec{\mu}_J \vec{H}) \quad (3.1)$$

Ефективний магнітний момент атома

$\mu = \mu_B g \sqrt{J(J+1)}$ , проекція магнітного моменту на напрямок поля

$\vec{H} \quad \mu_H = g \mu_B m_J$ , звідси

знаходимо кут між векторами внутрішнього механічного моменту та напруженості магнітного поля:

$$\cos(\vec{\mu}_J \vec{H}) = \frac{\mu_H}{\mu} = \frac{m_J}{\sqrt{J(J+1)}}. \quad (3.2)$$

Підставляючи (3.2) у (3.1), отримуємо для сили наступний вираз:

$$F_z = \mu_B g \frac{dH}{dz} m_J. \quad (3.3)$$

Під дією цієї сили атоми будуть зміщуватись вздовж напрямку поля або в бік збільшення, або в бік зменшення напруженості зовнішнього магнітного поля, в залежності від значення магнітного квантового числа  $m_J$ .

Обрахуємо множник Ланде для атома ванадію в стані  $^4F_{\frac{3}{2}}$ :

$$g = \frac{3}{2} + \frac{\frac{15}{4} - 12}{\frac{15}{2}} = \frac{2}{5}.$$

Магнітне квантове число при  $J = \frac{3}{2}$  набуватиме чотирьох значень:  $\pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$ , тобто пучок атомів в магнітному полі розщеплюється на чотири-компоненти, причому крайніми будуть ті, для яких  $m_J = m_{J_{\max}} = \pm \frac{3}{2}$  (див. рис.1).

Під дією сили  $F_z$  атоми в області дії магнітного поля отримують прискорення в напрямку осі Z:  $a = \frac{F_z}{m_V}$ , де  $m_V$  — маса атома ванадію. При цьому змінюється вектор швидкості так, що на виході з магніту проекції швидкості набуватимуть значення:

$$v_x = v_0, v_z = \frac{F_z l}{m_V v_0}. \quad (3.4)$$

Час, який витратиметься на проходження цієї ділянки шляху,  $t_1 = \frac{l}{v_0}$ , зміщення вздовж осі  $z$  становитиме

$$\Delta z_1 = \frac{a t_1^2}{2} = \frac{F_z l^2}{2 m_V v_0^2}. \quad (3.5)$$

Ділянку шляху від магніту до екрану атоми проходять з

постійною швидкістю (3.4). Час, що витрачається на це,  $t_2 = \frac{b}{v_0}$ , додаткове зміщення вздовж осі  $z$  на цій ділянці

$$\Delta z_2 = v_z t_2 = \frac{F_z l b}{m_\nu v_0^2}. \quad (3.6)$$

Сумарне зміщення для пучка атомів, для яких проекція магнітного моменту на напрямок поля визначатиметься магнітним квантовим числом  $m_{J\max} = \frac{3}{2}$ , становитиме

$$\Delta z_1 + \Delta z_2 = \frac{F_z l^2}{2m_\nu v_0^2} + \frac{F_z l b}{m_\nu v_0^2} = \frac{F_z l(l + 2b)}{2m_\nu v_0^2}.$$

Для атомів з  $m_{J\max} = -\frac{3}{2}$  зміщення буде з іншим знаком,

але таким самим за величиною, тому відстань між крайніми компонентами розщепленого в магнітному полі пучка буде вдвічі більшою. Враховуючи вираз для сили (3.3), остаточно отримаємо:

$$\Delta z = 2(\Delta z_1 + \Delta z_2) = \mu_B g \frac{dH}{dz} m_{J\max} \frac{l(l + 2b)}{m_\nu v_0^2}. \quad (3.7)$$

Підставивши в (3.7) дані, знайдемо відстань між розщепленими компонентами пучка атомів ванадію:

$$\Delta z = 9,27 \cdot 10^{-21} \cdot \frac{2}{5} \cdot 23 \cdot 10^3 \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{5 \cdot 25}{51 \cdot 1,66 \cdot 10^{-24} \cdot 16 \cdot 10^8} = 1,18 \text{ мм}.$$

**Задача №4.** Визначити розщеплення спектральної лінії  ${}^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow {}^2S_{\frac{1}{2}}$  в слабкому магнітному полі. Для натрію ця лінія є короткохвильовою компонентою ( $\lambda = 589 \text{ нм}$ ) подвійної лінії D з відстанню між компонентами  $\Delta\lambda = 0,6 \text{ нм}$ . Які магнітні поля в цьому випадку можна вважати слабкими?

**Розв'язок:** Обрахуємо множники Ланде для термів, між якими

відбувається спектральний перехід. Для терму  $^2P_{\frac{3}{2}}$

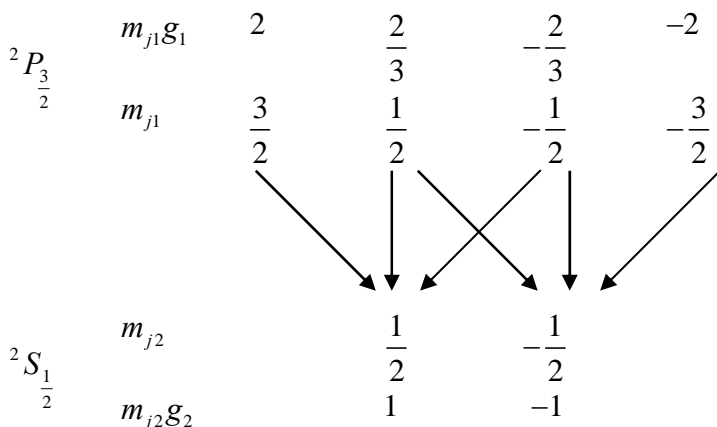
$$s = \frac{1}{2}, l = 1, j = \frac{3}{2}, \text{ тому } g_1 = \frac{3}{2} + \frac{\frac{3}{4} - 2}{\frac{15}{2}} = \frac{4}{3}, \text{ а для терму } ^2S_{\frac{1}{2}}$$

$g_2 = 2$ , оскільки в цьому стані орбітальний момент атома  $L = 0$ . Внаслідок взаємодії магнітного моменту атома з магнітним полем відбувається розщеплення спектральних термів. Зеєманівське розщеплення спектральної лінії в магнітному полі можна знайти з формули

$$\Delta v = (m_{j1}g_1 - m_{j2}g_2) \frac{\mu_B H}{h}, \quad (4.1)$$

враховуючи правила відбору для магнітного квантового числа  $m_j$ :  $\Delta m_j = 0, \pm 1$ .

Зміщені компоненти, для яких  $\Delta m_j = 0$ , називаються  $\pi$ -компонентами. Вони поляризовані вздовж напрямку магнітного поля. Компоненти, для яких  $\Delta m_j = \pm 1$ , називаються  $\sigma$ -компонентами. Їх поляризація є лінійною при спостереженні ефекту Зеємана перпендикулярно до напрямку поля або циркулярною при спостереженні вздовж напрямку поля. Переходи між термами  $^2P_{\frac{3}{2}}$  та  $^2S_{\frac{1}{2}}$  зручно зобразити у вигляді схеми:



Прямими стрілками на схемі показано переходи, що відповідають  $\pi$ -компонентам, діагональними —  $\sigma$ -компонентам. Легко побачити, що стрілки, направлені зліва направо, відповідають переходу з  $\Delta m_j = +1$ , ті, що направлені справа наліво відповідають переходу з  $\Delta m_j = -1$ .

З цієї ж схеми одразу можемо розрахувати частотне зміщення зєсманівських компонент в одиницях  $\frac{\mu_B H}{h}$ , використовуючи формулу (4.1):

$$\Delta v_\pi = \left\{ \pm \frac{1}{3} \right\} \frac{\mu_B H}{h}; \quad \Delta v_\sigma = \left\{ \pm \frac{3}{3}; \pm \frac{5}{3} \right\} \frac{\mu_B H}{h}.$$

Зміщені лінії розташовані симетрично (по три з кожного боку) відносно нерозщепленої ( $^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow ^2S_{\frac{1}{2}}$ ), яка в даному випадку при накладанні магнітного поля пропадає. Всього маємо 6 компонент зєсманівського розщеплення.

Магнітне поле можна вважати слабким, якщо розщеплення спектрального терму в магнітному полі набагато менше за спин-орбітальне розщеплення. Відстань між сусідніми підрівнями, на які розщеплюється терм в магнітному полі:

$$\Delta E_H = h\Delta v = g\mu_B H = g \frac{eh}{4\pi m_0 c} H, \\ \Delta \omega_H = g \frac{eH}{2m_0 c}, \quad (4.3)$$

тобто частота переходу між цими підрівнями дорівнює ларморівській частоті прецесії вектора внутрішнього механічного моменту навколо напрямку поля. Зауважимо, що такі переходи досліджуються резонансними методами, про які йтиметься далі. Відстань між компонентами вихідного мультиплету ( $D$  лінії  $Na$ ):

$$\Delta E_{LS} = \hbar \Delta \omega = \frac{2\pi \hbar c \Delta \lambda}{\lambda^2}, \quad (4.4)$$

оскільки  $\Delta \omega_{LS} = \frac{2\pi c \Delta \lambda}{\lambda^2}$ . Для того, щоб магнітне поле можна було вважати слабким, повинна виконуватись умова:

$$g \frac{eH}{2m_0c} \ll \frac{2\pi c \Delta\lambda}{\lambda^2} \Rightarrow H \ll \frac{4\pi m_0 c^2 \Delta\lambda}{eg\lambda^2}. \quad (4.5)$$

Для D лінії натрію ця умова приводить до наступної вимоги:

$$H \ll \frac{4 \cdot 3,14 \cdot 0,9 \cdot 10^{-27} \cdot 9 \cdot 10^{20} \cdot 0,6 \cdot 10^{-9}}{2 \cdot 4,8 \cdot 10^{-10} \cdot 5,89^2 \cdot 10^{-14}} = 1,8 \cdot 10^7 \text{ E}.$$

В таких магнітних полях для спектральної лінії  $\lambda = 589 \text{ нм}$  буде спостерігатись аномальний ефект Зеемана.

Коли виконується нерівність

$$H \gg \frac{4\pi m_0 c^2 \Delta\lambda}{eg\lambda^2}, \quad (4.6)$$

аномальний ефект Зеемана переходить в ефект Пашена-Бака, а магнітне поле називається *сильним*. За умови

$$H_{кр} = \frac{4\pi m_0 c^2 \Delta\lambda}{eg\lambda^2}, \quad (4.7)$$

магнітне поле називається *критичним*.

**Задача №5.** Графічно представити розщеплення енергетичних термів в сильному магнітному полі та вказати можливі переходи для мультиплету  $^3P \rightarrow ^3S$  (такі переходи спостерігаються, наприклад, у спектрах атомів гелію).

**Розв'язок:** Магнітне поле прийнято вважати сильним для даного переходу в атомах, якщо відстань між компонентами магнітного розщеплення перевищує відстань між компонентами мультиплетного розщеплення. В цьому випадку вектори орбітального  $\vec{P}_L$  та спінового  $\vec{P}_S$  моментів атома будуть незалежно один від одного прецесувати навколо напрямку магнітного поля. Додаткова енергія терму за рахунок такої взаємодії виражатиметься формулою

$$\Delta E = (m_L + 2m_S)\mu_B H. \quad (5.1)$$

Квантові числа  $m_L$ ,  $m_S$  та їх суми наведено в таблиці 1. Переходи між компонентами розщеплення підпорядковуються правилам відбору

$$\Delta m_S = 0, \Delta m_L = 0, \pm 1.$$



Таблиця 1

Терм	$m_L$	$m_S$	$m_J = m_L + m_S$	$m_L + 2m_S$
${}^3S_1$	0	+1	+1	+2
	0	0	0	0
	0	-1	-1	-2
${}^3P_{0,1,2}$	+1	+1	+2	+3
	+1	0	+1	+1
	+1	-1	0	-1
	0	+1	+1	+2
	0	0	0	0
	0	-1	-1	-2
	-1	+1	0	+1
	-1	0	-1	-1
	-1	-1	-2	-3

В проміжних магнітних полях картина виявляється складною. Для точного визначення ходу енергетичних рівнів у проміжних полях використовують правило Неймана–Вігнера. Згідно цього правила, хід компонент зі збільшенням магнітного поля має бути таким, щоб зберігалось значення суми  $m_J = m_L + m_S$ , та компоненти з однаковим  $m_J$  не перетинались. На рис.2 зображено розщеплення мультиплету  ${}^3P \rightarrow {}^3S$  за відсутності поля, в слабкому та сильному полях. Пунктирними лініями показано хід компонент розщеплення при поступовому збільшенні магнітного поля. В місцях перетину пунктирних ліній енергія термів виявляється однаковою. Таке співпадіння називається випадковим виродженням.

**Задача №6.** Газ, що складається з атомів, які знаходяться в стані  ${}^2D_{\frac{3}{2}}$ , помістили в схрещені магнітні поля, одне з

яких є постійним з напруженістю  $H$  та перпендикулярне йому змінне магнітне поле з частотою  $\nu = 2,8 \text{ ГГц}$ . При якому значенні  $H$  виникає резонансне поглинання енергії?

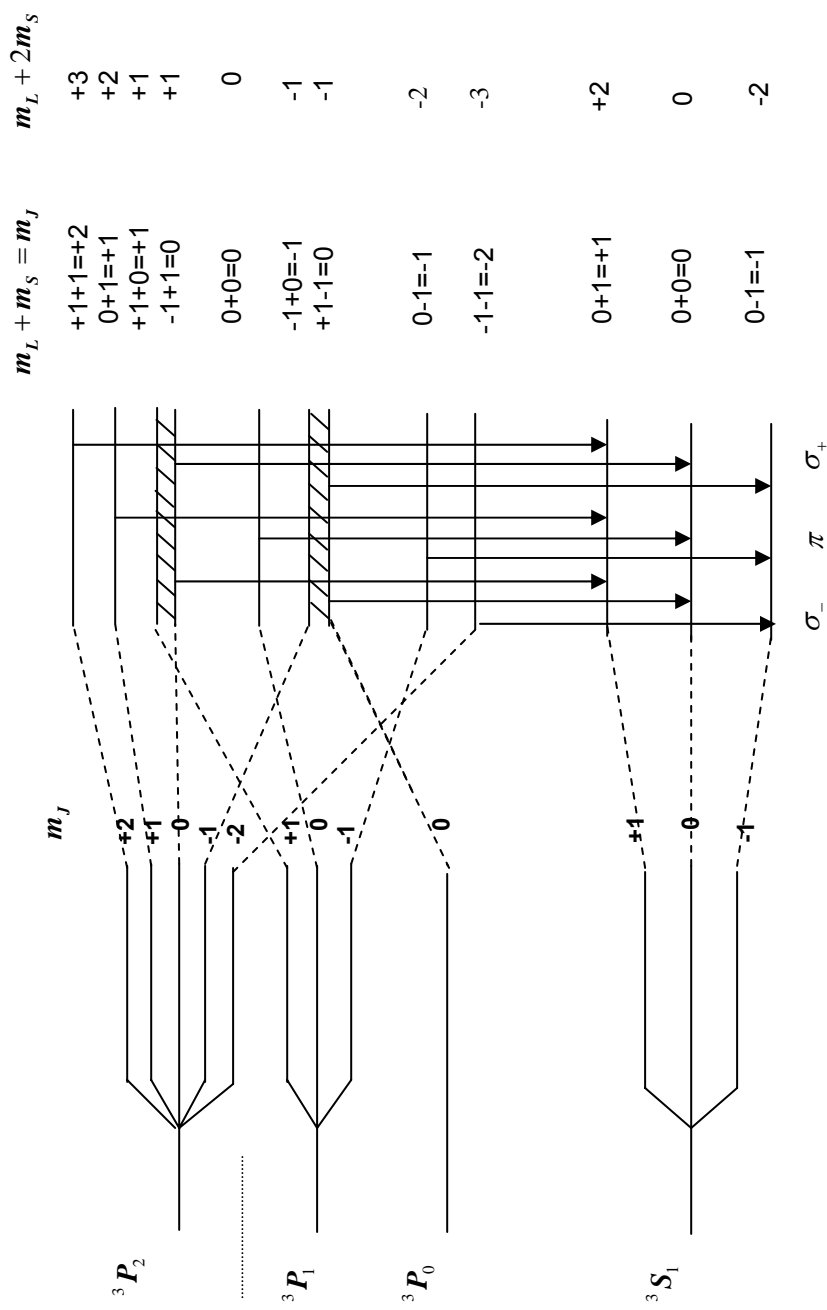


Рис. 2. Розщеплення спектральної лінії, що відповідає переходу  $^3P \rightarrow ^3S$ , за відсутності магнітного поля, у слабкому та сильному полях

**Розв'язок:** В постійному магнітному полі з напруженістю  $H$  магнітні моменти атомів орієнтуються певним чином відносно вектора  $\vec{H}$  згідно правилам просторового квантування. Зміна орієнтації магнітного моменту може відбутись лише в результаті поглинання кванту енергії змінного поля, коли його величина дорівнює різниці енергій двох станів (орієнтацій). Таким чином:

$$h\nu = g\mu_B H(m_{J1} - m_{J2}) = g\mu_B H \Delta m_J. \quad (6.1)$$

Враховуючи правило відбору для магнітного квантового числа  $\Delta m_J = \pm 1$  (при фіксованому  $J$ ), отримаємо в результаті:

$$h\nu = g\mu_B H. \quad (6.2)$$

Виразимо з (6.2) напруженість магнітного поля:

$$H = \frac{h\nu}{g\mu_B}. \quad (6.3)$$

Множник Ланде для терму  $^2D_{\frac{3}{2}}$  становить:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{\frac{3}{2} - 6}{\frac{15}{2}} = \frac{4}{5}.$$

Підставивши це значення в (6.3), отримаємо для напруженості постійного магнітного поля

$$H = \frac{h\nu}{g\mu_B} = \frac{6,62 \cdot 10^{-27} \cdot 2,8 \cdot 10^9}{0,8 \cdot 0,927 \cdot 10^{-20}} = 2,5 \text{ кЕ}.$$

**Задача №7.** На якій частоті спостерігається електронний парамагнітний резонанс на іонах ітербію  $Yb^{+++}$  в магнітному полі з напруженістю  $H = 10^3 \text{ Е}$ , якщо його електронна конфігурація така:  $Xe + 4f^{13}5s^25p^6$ ? Якою буде магнітна сприйнятливість  $Yb^{+++}$  при нормальних умовах?

**Розв'язок:** Частоту парамагнітного резонансу визначимо за формулою:

$$\nu_0 = \frac{\mu_B g H}{h}, \quad (7.1)$$

причому в системі СІ  $\mu_B = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ Кл} \cdot \text{м}$ ,  
 $H = 10^3 \text{ Е} = 0,1 \text{ А/м}$ .

Основний терм  $Yb^{+++}$ , згідно правила Хунда,  $^2F_{7/2}$ . Визначимо  $g$ -фактор для цього терму за формулою (6б):

$$g = \frac{3}{2} + \frac{\frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - 3(3+1)}{2 \cdot \frac{7}{2} \left( \frac{7}{2} + 1 \right)} = \frac{8}{7}. \quad (7.2)$$

З формули (7.1), з урахуванням (7.2), одержимо для частоти парамагнітного резонансу

$$\nu_0 = \frac{9,27 \cdot 10^{-24} \cdot \frac{8}{7} \cdot 10^3 \cdot 10^{-4}}{6,6 \cdot 10^{-34}} = 1,6 \cdot 10^9 \text{ Гц} = 1,6 \text{ ГГц}.$$

Розрахуємо тепер магнітну сприйнятливості іону ітербію за формулою (21):

$$\chi = \frac{\mu_J^2 n}{3kT}, \quad (7.3)$$

тут  $n = 2,7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3} = 2,7 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$  — число Лошмідта. Ефективний магнітний момент  $\mu_J$  іону  $Yb^{+++}$  в основному стані :

$$\mu_J = \mu_B g \sqrt{J(J+1)} = 9,27 \cdot 10^{-24} \cdot \frac{8}{7} \cdot \sqrt{\frac{7}{2} \left( \frac{7}{2} + 1 \right)} = 4,2 \cdot 10^{-23}. \quad (7.4)$$

Підставляючи значення магнітного моменту (7.4) та температуру  $T = 300 \text{ К}$  в (7.3), отримуємо для магнітної сприйнятливості ітербію за нормальних умов

$$\chi = \frac{(4,2 \cdot 10^{-23})^2 \cdot 2,7 \cdot 10^{25}}{3 \cdot 300 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}} = 0,91 \text{ (од.СІ)}.$$

**Задача №8.** Оцінити радіус зовнішньої електронної обо-

лонки для атома *He*, якщо експериментально визначена величина молярної діамagnetної сприйнятливості дорівнює  $\chi_\mu = -2,5 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3 / \text{моль}$ .

**Розв'язок:** Використаємо формулу (20), врахувавши, що  $N_0 = 2, n = N_A$

$$\chi_\mu = -\frac{e^2 N_A}{3m_0 c^2} \overline{r_0^2}. \quad (8.1)$$

Звідси виразимо радіус зовнішньої електронної оболонки:

$$\overline{r_0^2} = \frac{3\chi_\mu m_0 c^2}{e^2 N_A}. \quad (8.2)$$

Підставивши в (8.2) дані з умови задачі, знаходимо

$$\overline{r_0^2} = \frac{3 \cdot 2,5 \cdot 10^{-6} \cdot 9,1 \cdot 10^{-28} \cdot 9 \cdot 10^{20}}{(4,8 \cdot 10^{-10})^2 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}} = 4,4 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2,$$

і радіус зовнішньої оболонки

$$\overline{r_0} = \sqrt{\overline{r_0^2}} = 6,63 \cdot 10^{-9} \text{ см} = 0,663 \text{ Å}.$$

### **Задачі для самостійної роботи**

1. Визначити магнітний момент атома водню, що знаходиться в основному стані.
2. Визначити величину магнітного моменту атома, що знаходиться в стані  $^3D_2$  та його проекції на напрямок зовнішнього магнітного поля.
3. Що відбуватиметься з пучком атомів із задачі №3, якщо його пропустити через систему двох послідовно схрещених поперечних сильно неоднорідних магнітних полів?
4. На скільки компонент розщепиться пучок атомів ртуті, що знаходяться в основному стані, в досліді Штерна та Герлаха?
5. При якому значенні градієнта магнітного поля незбуджений атом азоту висітиме в полі сили тяжіння?
6. Оцінити критичну величину магнітного поля, при якій аномальний ефект Зеємана переходить в ефект Пашена-Бака

для резонансної дублетної лінії цезію ( $\lambda_1 = 852,1 \text{ нм}$ ;  $\lambda_2 = 894,3 \text{ нм}$ ).

7. Для якої лінії серії Лаймана магнітне поле з напруженістю  $H = 0,5 \text{ Е}$  буде критичним?
8. Спектральним приладом з роздільною здатністю  $\mathfrak{R} = 10^5$  необхідно розділити компоненти спектральної лінії  $\lambda = 536 \text{ нм}$ , обумовленої переходом між двома синглетними термами атома. При якому мінімальному значенні індукції магнітного поля це можливо, якщо спостереження ведеться: а) паралельно та б) перпендикулярно до напрямку поля.
9. Зобразити розщеплення в слабкому магнітному полі першої лінії серії Лаймана атомарного водню з урахуванням тонкої структури.
10. Побудувати схему можливих переходів в слабкому магнітному полі між станами  $^2D$  та  $^2P$ , визначити кількість спектральних ліній та їх поляризацію при поперечному та поздовжньому ефектах Зеемана.
11. Скільки ліній спостерігатиметься в слабкому магнітному полі при переходах між рівнями  $^1D_2 \rightarrow ^1P_1$  та  $^3D_2 \rightarrow ^3P_1$ ?
12. Знайдіть відстань між  $\sigma$ - та  $\pi$ -компонентами при розщепленні спектральної лінії  $^3S_1 \rightarrow ^3P_0$  в магнітному полі з напруженістю  $H = 10^4 \text{ Е}$ .
13. На енергетичній діаграмі зобразити розщеплення термів  $^2S$  та  $^2P$  в слабкому та сильному магнітних полях та можливі переходи між термами в обох випадках.
14. Знайдіть відстань між  $\sigma$  та  $\pi$  компонентами при розщепленні лінії  $^3S_1 \rightarrow ^3P_0$  в магнітному полі з напруженістю  $H = 1 \text{ Тл}$ .
15. На скільки компонент розщепиться перша лінія резонансної серії в спектрі  $\text{Na}$ , якщо врахувати спин ядра ( $I = \frac{3}{2}$ )?
16. Який тип ефекту Зеемана буде спостерігатись для атомів  $\text{He}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{Na}$ ,  $\text{Cl}$ ?
17. На якій лінії серії Лаймана в атомарному водні при напру-

- женості магнітного поля  $H = 0,3 E$  буде спостерігатись ефект Пашена-Бака?
18. Скільки ліній буде спостерігатись в спектрі ЕПР для атома з енергетичним рівнем  $^2P_{\frac{1}{2}}, ^2D_{\frac{5}{2}}$  ?
19. Атом знаходиться в стані  $^3P_2$ . Знайти частоту магнітного резонансу, якщо значення напруженості магнітного поля становить  $H = 1000 E$ .
20. Магнітним резонансним методом досліджували магнітні властивості молекул  $^7Li^{19}F$ , у яких механічний момент електронної оболонки дорівнює нулю. При значенні індукції магнітного поля  $B = 5 \text{ кГс}$  було знайдено два резонансних піки на частотах змінного магнітного поля  $\nu_1 = 8,3 \text{ МГц}$  та  $\nu_2 = 20,0 \text{ МГц}$ , які, як показали контрольні досліди, відносяться, відповідно, до ядер літію та фтору. Знайти магнітні моменти цих ядер, якщо ядерні спіни літію  $I_{Li} = \frac{3}{2}$  та фтору  $I_F = \frac{1}{2}$ .
21. Оцінити радіуси зовнішніх електронних оболонок атомів водню та хлору, якщо значення діамагнітних сприйнятливостей для цих атомів дорівнюють  $\chi_1 = -15,4 \cdot 10^{-6}$ ,  $\chi_2 = -24,2 \cdot 10^{-6}$ .
22. Знайдіть молярну діамагнітну сприйнятливість  $\chi_\mu$  атомарного водню в стані  $1^2S_{\frac{1}{2}}$ .

## Розділ 12. РЕНТГЕНІВСЬКІ СПЕКТРИ

### *Основні теоретичні відомості*

При розв'язуванні задач на тему "Рентгенівські спектри" слід користуватися наступними визначеннями і законами.

*Гальмівне рентгенівське випромінювання*, яке має неперервний спектр, виникає внаслідок гальмування швидких електронів у кулонівському полі ядра атома із зарядом  $Ze$  ( $Z$  – кількість протонів в ядрі атома,  $e$  – елементарний заряд). *Короткохвильова границя*  $\lambda_0$  цього випромінювання визначається з рівності

$$\hbar\omega_0 = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_0} = E_K, \quad (1)$$

де  $E_K$  – кінетична енергія електрона, що гальмується,  $\omega_0$  – кругова частота електромагнітного випромінювання, що відповідає максимальному значенню  $E_K$ ,  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  – стала Планка,  $c$  – швидкість світла у вакуумі. Якщо електрон має енергію, меншу за  $\sim 200 \text{ кеВ}$ , то його можна вважати нерелятивістським, і тоді  $E_K$  пов'язане рівністю з прискорюючою різницею потенціалів  $U$

$$E_K = \frac{m_0 v^2}{2} = eU, \quad (2)$$

де  $m_0$  – маса спокою електрона,  $v$  – його швидкість. Якщо ж енергія прискореного електрона більша за  $\sim 200 \text{ кеВ}$ , то енергію  $E_K$  треба обчислювати за релятивістськими формулами:

$$E_K = m_0 c^2 \left( \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1 \right); \quad \beta = \frac{v}{c}. \quad (3)$$

*Характеристичне рентгенівське випромінювання* виникає лише тоді, коли енергія електрона перевищує певну величину, характерну для даної речовини, з якої виготовлено анод. Спектр характеристичного випромінювання є лінійчас-



тим. Якщо було іонізовано К-оболонку атома, то утворюється рентгенівська К-серія, L-оболонку – L-серія і т. д. Якщо атомні енергетичні рівні мають тонку структуру, то й лінії рентгенівських спектрів мають відповідну тонку структуру.

Довжини хвиль характеристичного випромінювання визначаються *законом Мозлі*:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R(Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (4)$$

де  $R = 1,097 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$  – стала Рідберга,  $Z$  – порядковий номер в таблиці Менделєєва атома речовини, з якої виготовлено анод,  $\sigma$  – стала екранування, різна для різних серій;  $m > n$ ;  $n = 1$  для К-серії,  $n = 2$  для L-серії і т. д. Для  $K_{\alpha}$ -лінії, наприклад, закон Мозлі набуває вигляду

$$\tilde{\nu}_{K_{\alpha}} = \frac{1}{\lambda_{K_{\alpha}}} = \frac{3}{4} R(Z - \sigma)^2. \quad (5)$$

Якщо врахувати зв'язок між довжиною хвилі  $\lambda$  та частотою  $\nu$ , залежність (4) можна представити в еквівалентній формі

$$\nu = R'(Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (6)$$

де  $R' = cR = 3,28 \cdot 10^{15} \text{ Гц}$  – стала Рідберга.

Для легких елементів сталу екранування  $\sigma$  можна вважати наближено рівною одиниці  $\sigma \approx 1$  при  $n = 1$  (К-серія).

У виразах (4)–(6) не враховується спін-орбітальна взаємодія, а також залежність маси електрона від його швидкості. З урахуванням цих чинників хвильове число, що характеризує положення терму описується формулою

$$\tilde{\nu} = R \left[ \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2} + \frac{\alpha^2 (Z - C)^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right], \quad (7)$$

де  $\alpha = \frac{1}{137}$  – стала тонкої структури,  $\sigma$  – поправка екранування, що залежить від розподілу всіх електронів в атомному залишку,  $C$  – поправка екранування, що визначається електронами внутрішніх оболонок, які знаходяться поблизу від ядра,  $n$  – головне квантове число,  $j$  – внутрішнє квантове чис-

ло.

Під час проходження рентгенівських променів крізь речовину їх інтенсивність зменшується за законом

$$I(x) = I_0 \exp(-\mu x), \quad (8)$$

де  $I_0$  – початкове значення інтенсивності (на поверхні речовини),  $x$  – товщина шару речовини,  $\mu$  – лінійний коефіцієнт ослаблення (екстинції). Окрім лінійного коефіцієнта ослаблення часто також користуються поняттям масового  $\mu_m$  та атомного  $\mu_a$  коефіцієнтів ослаблення, які пов'язані між собою співвідношеннями

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho}, \quad \mu_a = \mu \frac{A}{\rho}, \quad (9)$$

де  $\rho$  – густина речовини,  $A$  – атомна маса.

Ослаблення рентгенівських променів в речовині є наслідком двох процесів: поглинання та розсіяння, отже, атомний коефіцієнт ослаблення  $\mu_a$  можна представити у вигляді

$$\mu_a = \tau_a + \sigma_a, \quad (10)$$

де  $\tau_a$  – атомний коефіцієнт поглинання,  $\sigma_a$  – атомний коефіцієнт розсіяння. Для лінійного  $\mu$  та масового  $\mu_m$  коефіцієнтів ослаблення можна записати формули, аналогічні (10):

$$\mu = \tau + \sigma, \quad \mu_m = \tau_m + \sigma_m, \quad (11)$$

де  $\tau$ ,  $\sigma$  – лінійні коефіцієнти поглинання та розсіяння,  $\tau_m$ ,  $\sigma_m$  – масові коефіцієнти поглинання та розсіяння.

Експериментальні дослідження показали, що атомний коефіцієнт поглинання  $\tau_a$  суттєво залежить від довжини хвилі рентгенівського випромінювання  $\lambda$  та від атомного номера  $Z$  атомів, з яких складається речовина:

$$\tau_a = GZ^4\lambda^3, \quad (12)$$

де  $G$  – коефіцієнт, який є сталою величиною для певного діапазону довжин хвиль.

Рентгенівське випромінювання виникає внаслідок взаємодії атома зі швидким електроном, але можливий і обернений процес, коли в атом потрапляє квант світла з високою енергією.

єю та іонізує атом. Важливим випадком такого ефекту є *ефект Оже*. В цьому процесі енергія кванта світла виявляється достатньою для вибивання електрона з внутрішньої заповненої електронної оболонки атома. В цій оболонці (наприклад, К-шару) утворюється вакансія, яка заповнюється іншим електроном, що раніше знаходився на верхній електронній оболонці. Надлишок енергії або призводить до випромінювання характеристичного рентгенівського кванта, або зумовлює виліт одного з електронів (ефект Оже) верхніх оболонок. Таким чином, у цьому процесі може спостерігатись два електрона: фотоелектрон та Оже-електрон, та характеристичне випромінювання менших частот (L-, M-серій). Наприклад, при вибиванні електрона з внутрішньої К-оболонки та іонізації L-електрона маємо

$$E_K = \hbar\omega_{K\alpha} - |E_L|, \quad (13)$$

де  $E_K$  – кінетична енергія вибитого електрона,  $E_L$  – енергія зв'язку електрона L-оболонці,  $\omega_{K\alpha}$  – кругова частота випромінювання, що відповідає  $K_\alpha$ -лінії.

### **Методичні вказівки та поради**

1. У задачах, в яких розглядаються властивості неперервного рентгенівського випромінювання, звичайно пропонується знайти граничну довжину хвилі (або кругову частоту) такого випромінювання, максимальну величину енергії рентгенівського кванта, тощо. Для відповіді на ці питання, як правило, досить використати формули (1) – (4), (6) – (7).
2. За допомогою формули (4), (6) або (7) можна розв'язувати задачі таких типів:
  - а) обчислення сталих екранування  $\sigma$ ,  $C$ , якщо відомі довжини хвиль (або частоти) і тип серії (К-, L-серія і т. д.);
  - б) визначення, яким елементам належать лінії з даними довжинами хвиль або частотами випромінювання. Поправки  $\sigma$  в даному разі або задані, або їх треба взяти з таблиць, відповідно до назви серії. Для К-серії часто досить взяти наближене значення  $\sigma = 1$ ;
  - в) визначення довжини хвилі короткохвильової границі

певної серії або максимальної частоти чи енергії кванта рентгенівського випромінювання, яким у формулах (4), (6) – (7) відповідає  $m = \infty$ . Визначення границі серії таким способом є наближеним, оскільки стала екранування залежить від числа  $m$  у формулах (4), (6) – (7), так що, наприклад, якщо для  $K_{\alpha}$ -лінії можна покласти  $\sigma = 1$ , то для границі цієї серії стала  $\sigma$  матиме інше значення. Взагалі, в задачах, в яких мова йде про короткохвильові границі K-, L-, ... серій, краще користуватись експериментально знайденими довжинами хвиль  $\lambda_0$  (чи частотами  $\nu_0$ ) цих границь, які звичайно наводяться в підручниках або задачниках (див. Додаток №5).

Знаючи граничні довжини хвиль  $\lambda_0$  для K-, L-, ... серій, можна визначити енергію іонізації K-, L-, ... оболонок (вона дорівнює, очевидно, величині  $E_i = h\nu_0 = \frac{hc}{\lambda_0}$ ), кінетичну

енергію іонізованого електрона, визначити, чи може характеристичне випромінювання даного елемента зумовити іонізацію певного атома іншого елемента тощо.

3. При розв'язанні задач на ослаблення рентгенівських променів використовують формули (8) – (12). Якщо невідома стала  $G$  в (12), в задачі обчислюють відносні коефіцієнти атомного поглинання та всі інші величини, що з ними пов'язані.

Якщо речовина-поглинач має складну хімічну формулу, для кожного хімічного елемента, що входить до складу речовини, окремо розраховують коефіцієнти поглинання, а потім отримані результати додають в тій же пропорції, в який представлені відповідні елементи в хімічній формулі.

4. Табличні значення короткохвильових границь  $\lambda_0$  різних серій можуть бути корисними також у задачах на ефект Оже, оскільки знання цих границь дає можливість знайти відстань між енергетичними рівнями атома, а також їх відстань від рівня вакууму (в останньому випадку ця відстань за абсолютною величиною дорівнює енергії іонізації відповідної оболонки атома). В таких задачах корисною виявляється формула (13).

## Приклади розв'язування задач

**Задача №1.** Вкажіть основні особливості гальмівного рентгенівського випромінювання.

**Розв'язок:** При співударах електронів з атомами речовини в рентгенівській трубці виникає два типи рентгенівського випромінювання: гальмівне й характеристичне. Графік розподілу інтенсивності гальмівного випромінювання представлений на рис. 1. Він характеризується максимумом випромінювання та короткохвильовою границею.

Гальмівне випромінювання – це електромагнітне випромінювання, що виникає під час гальмування зарядженої частинки в речовині за рахунок взаємодії частинки з електричним полем ядер та електронних хмар атомів.

Запишемо закон збереження енергії:

$$\frac{mv^2}{2} = h\nu + \Delta E, \quad (1.1)$$

де  $\frac{mv^2}{2}$  – кінетична енергія

частинки з масою  $m$ ,  $h\nu$  –

енергія фотона,  $\Delta E$  – частина енергії, що була передана атомам речовини. Оскільки в цьому рівнянні жодна з величин не є квантованою, спектр випромінювання буде суцільним (неперервним).

Короткохвильову границю  $\lambda_0$  знайдемо з умови, що вся кінетична енергія частинки піде на випромінювання:

$$\frac{mv^2}{2} = |q|U = h\nu, \quad (1.2)$$

де  $U$  – різниця потенціалів, яку пройшла частинка,  $q$  – її заряд. Звідси

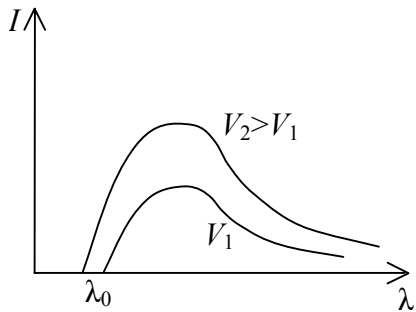


Рис. 1. Залежність інтенсивності  $I$  гальмівного рентгенівського випромінювання від довжини хвилі  $\lambda$

$$\lambda_0 = \frac{c}{v} = \frac{ch}{|q|U}. \quad (1.3)$$

Або, підставивши числові значення для констант  $c, h, q$ , у випадку електрона, одержимо:

$$\lambda_0 [\text{\AA}] = \frac{12,399}{U[\kappa B]}, \quad (1.4)$$

що добре узгоджується з експериментальним значенням для  $\lambda_0$ .

Розподіл енергії в спектрі гальмівного випромінювання можна приблизно описати виразом

$$I(\lambda) = \frac{B}{\lambda_0 \cdot \lambda^3} (\lambda - \lambda_0), \quad (1.5)$$

де  $B$  – константа, що залежить від виду матеріалу.

Максимум випромінювання знайдемо з умови, що  $I'(\lambda) = 0$ , звідки довжина електромагнітної хвилі  $\lambda_{\max}$ , що відповідає максимуму інтенсивності  $I_{\max}$ ,

$$\lambda_{\max} = \frac{3}{2} \lambda_0, \quad (1.6)$$

а максимальне значення інтенсивності гальмівного рентгеновського спектра

$$I_{\max} = \frac{4B}{27\lambda_0^3}. \quad (1.7)$$

Наведене співвідношення (1.5) для  $I(\lambda)$  і більш детальний опис гальмівного випромінювання можна одержати за допомогою методів класичної електродинаміки. Покажемо, що інтегральна енергія випромінювання суттєво залежить від величини електричного заряду ядра атома матеріалу та від маси частинки, яка гальмується в електричному полі цього атома.

В кулонівському полі ядра атома із зарядом  $+Ze$  на заряджену частинку з зарядом  $q$  діє сила

$$m\vec{a} = q\vec{E}, \quad (1.8)$$

де  $\vec{E} = \frac{Ze}{r^3} \vec{r}$  – напруженість електростатичного поля в точці,

що характеризується радіус-вектором  $\vec{r}$ ,  $a = -\frac{Zqe}{mr^3} \vec{r}$  – при-

скорення зарядженої частинки при гальмуванні,  $Z$  – порядковий номер атома речовини в таблиці Менделєєва.

Згідно класичної електродинаміки, енергія, що випромінюється зарядженою частинкою з прискоренням  $\vec{a}$  за час  $dt$ , описується виразом [2]

$$dE = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} (\vec{a}^2) dt = \frac{2}{3} \frac{e^4 q^2 Z^2}{c^3 m^2 r^4} dt. \quad (1.9)$$

Таким чином, гальмівні втрати на випромінювання прямо пропорційні квадрату атомного номера  $Z^2$ , та обернено пропорційні квадрату маси частинки  $m^2$ , що гальмується.

Гальмівне випромінювання має наступні особливості:

- його спектр суцільний;
- спектр має короткохвильову границю  $\lambda_0$ , яка залежить тільки від величини прискорюючої напруги  $U$ ;
- спектр має максимум випромінювання, який спостерігається при  $\lambda_{\max} = \frac{3}{2} \lambda_0$ ;
- енергія гальмівного випромінювання на важких елементах більша, ніж на легких (за рахунок залежності  $\frac{dE}{dt} \sim Z^2$ );
- інтенсивність гальмівного випромінювання суттєво залежить від маси зарядженої частинки  $m$ . Тому, наприклад, для електронів гальмівне випромінювання буде значно більш інтенсивним, ніж для протонів, маса яких приблизно в 1836 разів більше.

**Задача №2.** Знайдіть хвильові числа для  $K_\alpha$ - і  $K_\beta$ -ліній молибдену, враховуючи, що поправка екранування для  $K$ -рівня  $\sigma \approx 1$ . Покажіть, що можна отримати такі самі значення хвильових чисел  $K_\alpha$ - і  $K_\beta$ -ліній, якщо взяти різницю хвильових чисел для границь  $K$ -,  $L$ - і  $M$ -смуг поглинання (примітка: знехтувати тонкою структурою, розрахунок

провести для ізолюваного атома).

**Розв'язок:** Згідно закону Мозлі (4), хвильові числа К-серії можна записати таким чином:

$$\tilde{\nu}_K = R(Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = R(Z - 1)^2 \left( 1 - \frac{1}{m^2} \right), \quad (2.1)$$

де при переході з  $m = 2 \rightarrow n = 1$  одержимо  $K_\alpha$ -лінію, а при переході з  $m = 3 \rightarrow n = 1$  одержимо  $K_\beta$ -лінію (рис. 2).

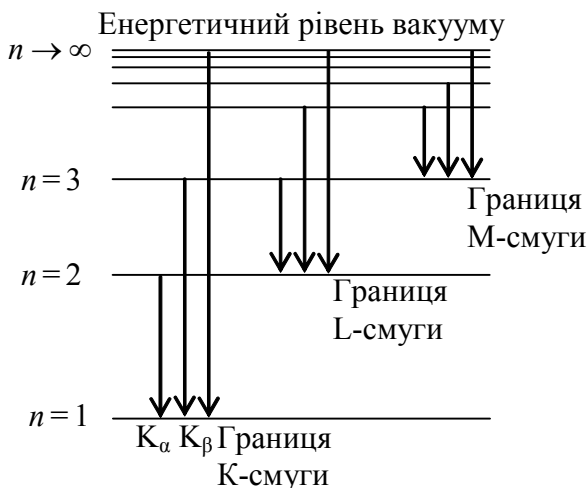


Рис. 2. Діаграма енергетичних рівнів без урахування тонкої структури спектральних ліній

Порядковий номер молібдену  $Z = 42$ , отже:

$$\begin{aligned} \tilde{\nu}_{K_\alpha} &= 1,1 \cdot 10^5 (42 - 1)^2 \left( 1 - \frac{1}{4} \right) = 13868,25 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}, \\ \tilde{\nu}_{K_\beta} &= 1,1 \cdot 10^5 (42 - 1)^2 \left( 1 - \frac{1}{9} \right) = 16436,45 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} \end{aligned} \quad (2.2)$$

або в довжинах хвиль

$$\lambda_{K_\alpha} = \frac{1}{\tilde{\nu}_{K_\alpha}} = \frac{1}{13868,25 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}} = 0,721 \text{ Å},$$



$$\lambda_{K_{\beta}} = \frac{1}{\tilde{\nu}_{K_{\beta}}} = \frac{1}{16436,45 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}} = 0,608 \text{ Å} . \quad (2.3)$$

Знайдемо тепер хвильове число, що відповідає краю К-смуги поглинання ( $m \rightarrow \infty$  в (2.1)):

$$\tilde{\nu}_{K_{\infty}} = R \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2} = \frac{1,1 \cdot 10^5 (42 - 1)^2}{1^2} = 18491 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} . \quad (2.4)$$

Хвильове число, що відповідає межах L- та М-смуг поглинання ( $m \rightarrow \infty$  в (2.1)):

$$\begin{aligned} \tilde{\nu}_{L_{\infty}} &= R \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2} = \frac{1,1 \cdot 10^5 (42 - 1)^2}{2^2} = 4622,8 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} , \\ \tilde{\nu}_{M_{\infty}} &= R \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2} = \frac{1,1 \cdot 10^5 (42 - 1)^2}{3^2} = 2054,55 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} . \end{aligned} \quad (2.5)$$

Шляхом безпосередньої підстановки числових значень (2.2), (2.4), (2.5) легко переконатись, що виконуються співвідношення

$$\tilde{\nu}_{K_{\alpha}} = \tilde{\nu}_{K_{\infty}} - \tilde{\nu}_{L_{\infty}} , \quad \tilde{\nu}_{K_{\beta}} = \tilde{\nu}_{K_{\infty}} - \tilde{\nu}_{M_{\infty}} . \quad (2.6)$$

Дійсно,

$$\begin{aligned} \tilde{\nu}_{K_{\alpha}} &= \tilde{\nu}_{K_{\infty}} - \tilde{\nu}_{L_{\infty}} = 18491 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} - 4622,8 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = \\ &= 13868,2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} , \\ \tilde{\nu}_{K_{\beta}} &= \tilde{\nu}_{K_{\infty}} - \tilde{\nu}_{M_{\infty}} = 18491 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} - 2054,55 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = \\ &= 16436,45 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} , \end{aligned} \quad (2.7)$$

що відповідає значенням, які були раніше розраховані за формулою (2.1). Найбільш наочно це впливає з рис. 2, де схематично показані енергетичні рівні та структура спектральних переходів (без урахування тонкої структури спектральних ліній). Виходячи з рис. 2, можна також записати загальну формулу, що описує хвильове число  $\tilde{\nu}(n, m)$ , що відповідає переходу електрона з рівня  $n$  на рівень  $m > n$  через хвильові числа границь К-, L-, М-смуг, ...:

$$\tilde{\nu}(n, m) = \tilde{\nu}(n, \infty) - \tilde{\nu}(m, \infty) , \quad (2.8)$$

де величина  $\tilde{\nu}(n, m)$  описується виразом

$$\tilde{v}(n, m) = R(Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right). \quad (2.9)$$

**Задача №3.** Для молібдену ( $Z = 42$ ) довжина хвилі  $\lambda_{K_\infty}$  краю К-смуги поглинання дорівнює  $\lambda_{K_\infty} = 61,9 \text{ нм}$ , а для краю L-смуги поглинання (без урахування тонкої структури)  $\lambda_{L_\infty} = 430 \text{ нм}$ . З цих даних знайти поправки екранування  $\sigma_K$ ,  $\sigma_L$  та довжини хвиль  $K_\alpha$ -,  $K_\beta$ -,  $L_\alpha$ -,  $L_\beta$ -ліній в характеристичному рентгенівському спектрі.

**Розв'язок:** Поправки екранування можна знайти, скориставшись законом Мозлі (4)

$$\tilde{v} = \frac{1}{\lambda} = R(Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right). \quad (3.1)$$

Якщо  $n = 1$ , а  $m \rightarrow \infty$ , з (3.1) ми отримаємо хвильове число, що відповідає краю К-смуги поглинання

$$\tilde{v}_{K_\infty} = \frac{1}{\lambda_{K_\infty}} = R(Z - \sigma_K)^2. \quad (3.2)$$

Якщо  $n = 2$ , а  $m \rightarrow \infty$ , то з (3.1) одержимо

$$\tilde{v}_{L_\infty} = \frac{1}{\lambda_{L_\infty}} = \frac{1}{4} R(Z - \sigma_L)^2, \quad (3.3)$$

що відповідає краю L-смуги поглинання.

Звідси

$$\sigma_K = Z - \sqrt{\frac{1}{\lambda_{K_\infty} R}}, \quad \sigma_L = Z - \sqrt{\frac{4}{\lambda_{L_\infty} R}}. \quad (3.4)$$

Підставляючи числові значення, одержимо

$$\begin{aligned} \sigma_K &= 42 - \sqrt{\frac{1}{1,1 \cdot 10^5 \cdot 61,9 \cdot 10^{-10}}} = 3,677 \approx 3,7, \\ \sigma_L &= 42 - \sqrt{\frac{4}{1,1 \cdot 10^5 \cdot 430 \cdot 10^{-10}}} = 12,91 \approx 12,9. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Знайдемо тепер довжини хвиль  $\lambda_{K_\alpha}$  та  $\lambda_{K_\beta}$ :

$$\begin{aligned}\tilde{\nu}_{K_{\alpha}} &= \frac{1}{\lambda_{K_{\alpha}}} = R(Z - \sigma_K)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = \\ &= 1,1 \cdot 10^5 (42 - 3,7)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = 12102 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}, \\ \lambda_{K_{\alpha}} &= 8,26 \cdot 10^{-9} \text{ см} = 0,826 \text{ Å};\end{aligned}\quad (3.6)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\nu}_{K_{\beta}} &= \frac{1}{\lambda_{K_{\beta}}} = R(Z - \sigma_K)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = \\ &= 1,1 \cdot 10^5 (42 - 3,7)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 14343 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}, \\ \lambda_{K_{\beta}} &= 6,97 \cdot 10^{-9} \text{ см} = 0,697 \text{ Å}.\end{aligned}\quad (3.7)$$

Для  $L_{\alpha^-}$ ,  $L_{\beta^-}$ -ліній, відповідно, одержимо:

$$\begin{aligned}\tilde{\nu}_{L_{\alpha}} &= \frac{1}{\lambda_{L_{\alpha}}} = R(Z - \sigma_L)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = \\ &= 1,1 \cdot 10^5 (42 - 12,9)^2 \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 1294 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}, \\ \lambda_{L_{\alpha}} &= 7,73 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 7,73 \text{ Å};\end{aligned}\quad (3.8)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\nu}_{L_{\beta}} &= \frac{1}{\lambda_{L_{\beta}}} = R(Z - \sigma_L)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = \\ &= 1,1 \cdot 10^5 (42 - 12,9)^2 \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right) = 1746,5 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}, \\ \lambda_{L_{\beta}} &= 5,73 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 5,73 \text{ Å}.\end{aligned}\quad (3.9)$$

**Задача №4.** Намалюйте діаграму енергетичних К- та L-рівнів для молібдену без урахування та з урахуванням тонкої структури. Розрахуйте зсув енергетичних рівнів, величину розщеплення  $K_{\alpha}$ -лінії з урахуванням спінорбітальної взаємодії, хвильові числа для енергетичних рівнів К,  $L_1$ ,  $L_2$ ,  $L_3$ . Поправки екранування  $\sigma_K = 3,67$ ,  $\sigma_L = 13$ ,  $C_K = C_{L_1} = 2$ ,  $C_{L_2} = C_{L_3} = 3,5$ ;  $Z = 42$ ; стала тонкої

**структури**  $\alpha = 1/137$ ;  $1 \text{ см}^{-1} = 1,24 \cdot 10^{-4} \text{ eB}$ .

**Розв'язок:** Розрахуємо хвильові числа для К- та L-рівнів без урахування спин-орбітальної взаємодії, для чого застосуємо закон Мозлі (4) при умові, що  $m \rightarrow \infty$ :

$$\begin{aligned}\tilde{\nu}_{K0} &= \frac{R(Z - \sigma_K)^2}{n^2} = \frac{1,1 \cdot 10^5 \cdot (42 - 3,67)^2}{1^2} = \\ &= 16161 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = 20,04 \text{ кеВ}, \\ \tilde{\nu}_L &= \frac{R(Z - \sigma_L)^2}{n^2} = \frac{1,1 \cdot 10^5 (42 - 13)^2}{2^2} = \\ &= 2312 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = 2,866 \text{ кеВ}\end{aligned}\quad (4.1)$$

Відповідна діаграма енергетичних рівнів без урахування спин-орбітальної взаємодії показана на рис. 2.

Врахуємо тепер тонку структуру. З урахуванням спин-орбітальної взаємодії та релятивістських поправок положення енергетичного рівня визначається формулою (7):

$$\tilde{\nu} = R \left[ \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2} + \frac{\alpha^2 (Z - C)^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right], \quad (4.2)$$

де  $\alpha$  – стала тонкої структури,  $\sigma$  – поправка екранування, що залежить від розподілу всіх електронів в атомному залишку,  $C$  – поправка екранування, що визначається електронами, які знаходяться тільки поблизу ядра. Для випадку L-оболонки  $C \neq \sigma$ . Ці поправки важко розрахувати теоретично; тому вони, як правило, визначаються емпірично з положення границь смуг поглинання.

З урахуванням тонкої структури, поправки до хвильових чисел будуть описуватись виразами (відповідну енергетичну діаграму наведено на рис. 3):

**Рівень К** (квантові числа  $n = 1$ ,  $l = 0$ ,  $j = 1/2$ , поправка екранування  $C = 2$ ):

$$\Delta \tilde{\nu}_K = \frac{R \alpha^2 (Z - C)^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) =$$

$$\frac{1,1 \cdot 10^5 \left(\frac{1}{137}\right)^2 (42-2)^4}{1^3} \left(1 - \frac{3}{4 \cdot 1}\right) =$$

$$= 375,1 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = 465,1 \text{ eB}; \quad (4.3)$$

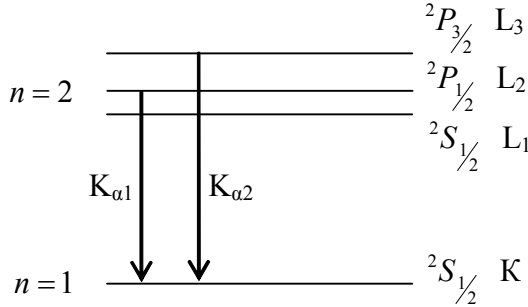


Рис. 3. Діаграма енергетичних рівнів з урахуванням спін-орбітальної взаємодії

**Рівень  $L_1$**  (квантові числа  $n=2$ ,  $l=0$ ,  $j=\frac{1}{2}$ , поправка екранування  $C=2$ ):

$$\Delta \tilde{\nu}_{L_1} = \frac{R\alpha^2 (Z-C)^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) = \frac{1,1 \cdot 10^5 \left(\frac{1}{137}\right)^2 (42-2)^4}{2^3} \times$$

$$\times \left( 1 - \frac{3}{4 \cdot 2} \right) = 117,2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = 145,3 \text{ eB}; \quad (4.4)$$

**Рівень  $L_2$**  (квантові числа  $n=2$ ,  $l=1$ ,  $j=\frac{1}{2}$ , поправка екранування  $C=3,5$ ):

$$\Delta \tilde{\nu}_{L_2} = \frac{R\alpha^2 (Z-C)^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) = \frac{1,1 \cdot 10^5 \left(\frac{1}{137}\right)^2 (42-3,5)^4}{2^3} \times$$

$$\times \left( 1 - \frac{3}{4 \cdot 2} \right) = 100,5 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = 124,6 \text{ eB}; \quad (4.5)$$

**Рівень  $L_3$**  (квантові числа  $n = 2$ ,  $l = 1$ ,  $j = \frac{3}{2}$ , поправка екранування  $C = 3,5$ ):

$$\Delta \tilde{\nu}_{L_3} = \frac{R\alpha^2 (Z-C)^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) = \frac{1,1 \cdot 10^5 \left( \frac{1}{137} \right)^2 (42-3,5)^4}{2^3} \times \\ \times \left( \frac{1}{2} - \frac{3}{4 \cdot 2} \right) = 20,1 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = 24,9 \text{ eB}. \quad (4.6)$$

Величину спін-орбіального розщеплення  $K_\alpha$ -лінії знайдемо за формулою

$$\Delta \tilde{\nu} = \tilde{\nu}_{K_{\alpha_1}} - \tilde{\nu}_{K_{\alpha_2}} = \frac{R\alpha^2 (Z-C)^4}{n^3} \times \\ \times \left[ \left( \frac{1}{j_1 + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) - \left( \frac{1}{j_2 + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right] = \\ = \frac{1,1 \cdot 10^5 \left( \frac{1}{137} \right)^2 (42-3,5)^4}{2^3} \cdot \left( 1 - \frac{1}{2} \right) = \\ = 80,5 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = 99,8 \text{ eB}, \quad (4.7)$$

де враховано, що  $n = 2$ ,  $j_1 = \frac{1}{2}$ ,  $j_2 = \frac{3}{2}$ ,  $C = 3,5$ .

Оскільки поправки до хвильових чисел, що обумовлені спін-орбіальною взаємодією, вже нами знайдені, легко визначити самі хвильові числа:

$$\tilde{\nu}_K = \tilde{\nu}_{K_0} + \Delta \tilde{\nu}_K = 16536,1 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = 20,5 \text{ кеВ}, \\ \tilde{\nu}_{L_1} = \tilde{\nu}_L + \Delta \tilde{\nu}_{L_1} = 2429,2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = 3012 \text{ eB}, \\ \tilde{\nu}_{L_2} = \tilde{\nu}_L + \Delta \tilde{\nu}_{L_2} = 2412,5 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = 2991,5 \text{ eB}, \\ \tilde{\nu}_{L_3} = \tilde{\nu}_L + \Delta \tilde{\nu}_{L_3} = 2332,1 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1} = 2891,8 \text{ eB}. \quad (4.8)$$

**Задача №5. Потенціал збудження К-серії ртуті дорівнює  $U_K = 83,1 \text{ кВ}$ , а границі L-серії, відповідно,  $U_{L_1} = 14,8 \text{ кВ}$ ,  $U_{L_2} = 14,2 \text{ кВ}$ ,  $U_{L_3} = 12,3 \text{ кВ}$ . Обчислити на основі цих да-**

**них довжини хвиль тонкої структури  $K_{\alpha}$ -лінії.**

**Розв'язок:** Довжини хвиль тонкої структури  $K_{\alpha}$ -лінії задовольняють рівності (див. рис. 3)

$$h\nu_{K_{\alpha}} = e(U_K - U_L). \quad (5.1)$$

Отже,

$$\frac{hc}{\lambda_{K_{\alpha}}} = e(U_K - U_L). \quad (5.2)$$

Звідси одержимо, що

$$\lambda_{K_{\alpha}} = \frac{hc}{e(U_K - U_L)} \text{ або } \lambda_{K_{\alpha}} [\text{\AA}] = \frac{12,399}{(U_K - U_L)[\text{кВ}]}. \quad (5.3)$$

Підстановка в цей вираз значень для потенціалів  $U_{L_1}$ ,  $U_{L_2}$ ,  $U_{L_3}$  дозволяє, відповідно, одержати три значення довжин хвиль:

$$\lambda_1 = 0,1815 \text{ \AA}, \lambda_2 = 0,1799 \text{ \AA}, \lambda_3 = 0,1751 \text{ \AA}. \quad (5.4)$$

Лінія з довжиною хвилі  $\lambda_1 = 0,1815 \text{ \AA}$  в емісійному спектрі не буде спостерігатись, оскільки, за правилом відбору  $\Delta l = \pm 1$ , перехід  $2^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 1^2S_{\frac{1}{2}}$  заборонений. Отже,  $K_{\alpha}$ -лінія буде дублетною, і довжини хвиль ліній, що відповідають дублету, будуть становити  $\lambda_2 = 0,1799 \text{ \AA}$ ,  $\lambda_3 = 0,1751 \text{ \AA}$ .

**Задача №6.** Для елементів у кінці періодичної системи Менделєєва поправки екранування  $\sigma$  в законі Мозлі суттєво відрізняються від одиниці. Показати це на прикладі олова ( $Sn$ ,  $Z = 50$ ), цезію ( $Cs$ ,  $Z = 55$ ) та вольфраму ( $W$ ,  $Z = 74$ ), довжини хвиль  $K_{\alpha}$ -ліній яких дорівнюють  $\lambda_{Sn} = 49,2 \text{ нм}$ ,  $\lambda_{Cs} = 40,2 \text{ нм}$ ,  $\lambda_W = 21,0 \text{ нм}$ .

**Розв'язок:** Виходячи із закону Мозлі для  $K_{\alpha}$ -ліній (5)

$$\tilde{\nu}_{K_{\alpha}} = \frac{1}{\lambda_{K_{\alpha}}} = \frac{3}{4} R (Z - \sigma_{K_{\alpha}})^2, \quad (6.1)$$

легко отримати наступний вираз для поправки екранування

$\sigma_{K_\alpha}$  :

$$\sigma_{K_\alpha} = Z - \sqrt{\frac{4}{3\lambda_{K_\alpha} R}}. \quad (6.2)$$

Підставляючи числові значення, одержимо:

$$\begin{aligned} \sigma_{Sn} &= Z - \sqrt{\frac{4}{3\lambda_{Sn} R}} = 50 - \sqrt{\frac{4}{3 \cdot 49,2 \cdot 10^{-10} \cdot 1,1 \cdot 10^5}} = 0,365; \\ \sigma_{Cs} &= Z - \sqrt{\frac{4}{3\lambda_{Cs} R}} = 55 - \sqrt{\frac{4}{3 \cdot 40,2 \cdot 10^{-10} \cdot 1,1 \cdot 10^5}} = -0,0897 \approx 0; \\ \sigma_W &= Z - \sqrt{\frac{4}{3\lambda_W R}} = 74 - \sqrt{\frac{4}{3 \cdot 21,0 \cdot 10^{-10} \cdot 1,1 \cdot 10^5}} = -1,973. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Отже, як видно з одержаних результатів, зі збільшенням атомного номеру  $Z$  поправка екранування  $\sigma_{K_\alpha}$  для  $K_\alpha$ -ліній швидко зменшується і може стати навіть від'ємною величиною. Отже, постає також питання про можливість застосування закону Мозлі для важких елементів.

**Задача №7. Визначити напругу на рентгенівській трубці з нікелевим анодом ( $Ni$ ,  $Z = 28$ ), якщо різниця довжин хвиль  $K_\alpha$ -лінії і короткохвильової границі суцільного рентгенівського спектра дорівнює  $\Delta\lambda = 84$  нм.**

**Розв'язок:** На основі закону Мозлі (4) та відомостей про гальмівне рентгенівське випромінювання (див. задачу №1 цього розділу), різницю довжин хвиль  $K_\alpha$ -лінії  $\lambda_{K_\alpha}$  та короткохвильової границі  $\lambda_0$  суцільного рентгенівського спектра можна представити у вигляді:

$$\Delta\lambda = \lambda_{K_\alpha} - \lambda_0 = \frac{4}{3R(Z - \sigma)^2} - \frac{ch}{eU}, \quad (7.1)$$

де  $U$  – шукана напруга на рентгенівській трубці. З цього співвідношення легко одержати вираз для напруги  $U$ :



$$U = \frac{ch}{e^{\left( \frac{4}{3R(Z-\sigma)^2} - \Delta\lambda \right)}}. \quad (7.2)$$

Вважаючи, що поправка екранування  $\sigma$  для нікелю, як для легкого елемента  $\sigma \approx 1$  (при  $n=1$ ), можна знайти числове значення напруги  $U$ :

$$U = \frac{3 \cdot 10^{10} \cdot 6,6 \cdot 10^{-27}}{4,8 \cdot 10^{-10} \left( \frac{4}{3 \cdot 1,1 \cdot 10^5 (28-1)^2} - 84 \cdot 10^{-10} \right)} = 15,04 \text{ кВ} \approx 15 \text{ кВ}. \quad (7.3)$$

**Задача №8.** Визначити константу  $G$  з (12), лінійний та атомний коефіцієнти ослаблення для заліза, хрому та їх сплаву  $FeCr$ , якщо масові коефіцієнти поглинання заліза та хрому, відповідно, дорівнюють  $\tau_{mFe} = 374 \text{ см}^2 / \text{г}$ ,  $\tau_{mCr} = 307 \text{ см}^2 / \text{г}$  [31]. Як джерело рентгенівського випромінювання використовується  $K_{\alpha 1}$ -лінія нікелю, у якого границі  $K$ - та  $L_2$ -смуг поглинання дорівнюють  $\lambda_K = 148,6 \text{ нм}$ ,  $\lambda_L = 1411 \text{ нм}$ , відповідно. У скільки разів зменшиться інтенсивність рентгенівського випромінювання під час проходження його крізь плівку із заліза, з хрому, крізь плівку зі сплаву  $FeCr$  з товщиною  $d = 5 \text{ мкм}$ ? Як зміниться одержаний результат, якщо вважати, що коефіцієнт поглинання рентгенівських променів втричі перевищує коефіцієнт розсіяння?

**Розв'язок:** Знайдемо спочатку атомні та лінійні коефіцієнти ослаблення для заліза та хрому, вважаючи, що розсіяння рентгенівських променів відсутнє (існує лише поглинання). Тоді, відповідно до (9)–(11), маємо:

$$\mu = \mu_m \rho = \tau_m \rho, \quad \mu_a = \mu_m \frac{M}{N_A} = \tau_m \frac{M}{N_A}, \quad (8.1)$$

де  $M$  – молярна маса,  $N_A$  – стала Авогадро.

Для заліза густина  $\rho_{Fe} = 7,8 \text{ г/см}^3$ , маса атома  $m_{Fe} = \frac{M_{Fe}}{N_A} = 55,85 \cdot 1 \text{ а.о.м.} = 92,71 \cdot 10^{-24} \text{ г}$ . Для хрому

$\rho_{Cr} = 7,19 \text{ г/см}^3$ ,  $m_{Cr} = \frac{M_{Cr}}{N_A} = 52 \text{ а.о.м.} = 86,32 \cdot 10^{-24} \text{ г}$ . Отже,

$$\mu_{Fe} = \tau_{mFe} \rho_{Fe} = 374 \cdot 7,8 = 2917,2 \text{ см}^{-1},$$

$$\mu_{aFe} = \tau_{mFe} m_{Fe} = 374 \cdot 92,71 \cdot 10^{-24} = 3,467 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2, \quad (8.2)$$

$$\mu_{Cr} = \tau_{mCr} \rho_{Cr} = 307 \cdot 7,19 = 2207,3 \text{ см}^{-1},$$

$$\mu_{aCr} = \tau_{mCr} m_{Cr} = 307 \cdot 86,32 \cdot 10^{-24} = 2,650 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2. \quad (8.3)$$

Оскільки в сплаві FeCr кількість атомів заліза та хрому однакова, то середня густина сплаву  $\rho_{FeCr}$  та усереднена маса атома в сплаві  $m_{FeCr}$  будуть дорівнювати

$$\rho_{FeCr} = \frac{1}{2}(\rho_{Fe} + \rho_{Cr}), \quad m_{FeCr} = \frac{1}{2}(m_{Fe} + m_{Cr}). \quad (8.4)$$

Коефіцієнти ослаблення для цього сплаву знайдемо за формулами:

$$\mu_{mFeCr} = \frac{1}{2}(\mu_{mFe} + \mu_{mCr}) = 0,5(374 + 307) = 340,5 \text{ см}^2 / \text{г},$$

$$\mu_{FeCr} = \frac{1}{2}(\mu_{Fe} + \mu_{Cr}) = 0,5(2917,2 + 2207,3) = 2562,25 \text{ см}^{-1},$$

$$\mu_{aFeCr} = \frac{1}{2}(\mu_{aFe} + \mu_{aCr}) = 0,5(3,467 \cdot 10^{-20} + 2,650 \cdot 10^{-20}) =$$

$$= 3,058 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2. \quad (8.5)$$

Довжину хвилі  $\lambda$ , що відповідає  $K_{\alpha 1}$ -лінії нікелю легко визначити зі співвідношення (див. задачу №2, рис. 2):

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_K} - \frac{1}{\lambda_L} = \frac{\lambda_L - \lambda_K}{\lambda_K \lambda_L}, \quad (8.6)$$

звідки

$$\lambda = \frac{1411 \cdot 148,6}{1411 - 148,6} = 166,1 \text{ нм}. \quad (8.7)$$

Константу  $G$  можна знайти зі співвідношення (12), оскільки раніше було використане припущення, що розсіяння відсутнє:

$$\tau_a = GZ^4\lambda^3. \quad (8.8)$$

З (8.8) випливає, що

$$G = \frac{\tau_a}{Z^4\lambda^3}. \quad (8.9)$$

Підставимо числові дані:

$$\begin{aligned} G_{Fe} &= \frac{\tau_{aFe}}{Z_{Fe}^4\lambda^3} = \frac{3,467 \cdot 10^{-20}}{26^4 \cdot (166,1 \cdot 10^{-10})^3} = 0,0165 \text{ см}^{-1}, \\ G_{Cr} &= \frac{\tau_{aCr}}{Z_{Cr}^4\lambda^3} = \frac{2,65 \cdot 10^{-20}}{24^4 \cdot (166,1 \cdot 10^{-10})^3} = 0,0174 \text{ см}^{-1}, \\ G_{FeCr} &= \frac{\tau_{aFeCr}}{Z_{FeCr}^4\lambda^3} = \frac{3,058 \cdot 10^{-20}}{25^4 \cdot (166,1 \cdot 10^{-10})^3} = 0,0171 \text{ см}^{-1}. \end{aligned} \quad (8.10)$$

Визначимо інтенсивність пучків рентгенівських променів після проходження плівки товщиною  $d$  за допомогою (8):

$$\begin{aligned} \frac{I_{Fe}(d)}{I_0} &= \exp(-\mu_{Fe}d) = \exp(-2917,2 \cdot 10^2 \cdot 5 \cdot 10^{-6}) = 0,2325, \\ \frac{I_{Cr}(d)}{I_0} &= \exp(-\mu_{Cr}d) = \exp(-2207,3 \cdot 10^2 \cdot 5 \cdot 10^{-6}) = 0,3319, \\ \frac{I_{FeCr}(d)}{I_0} &= \exp(-\mu_{FeCr}d) = \exp(-2562,25 \cdot 10^2 \cdot 5 \cdot 10^{-6}) = \\ &= 0,2777. \end{aligned} \quad (8.11)$$

Врахуємо тепер наявність розсіювання рентгенівських променів. Якщо матеріалом плівки поглинається лише 75% випромінювання, то інша частина випромінювання (25%) – розсіюється. Раніше ми вважали (оскільки не було сказано протилежне), що зменшення інтенсивності пучка є наслідком лише поглинання. З умов задачі

$$\tau = 3\sigma, \quad (8.12)$$

де величини  $\tau$ ,  $\sigma$  – коефіцієнти поглинання та розсіювання, визначені в (11). Враховуючи (11), можна написати, що коефіцієнт лінійного ослаблення з урахуванням розсіювання рентгенівських променів  $\mu'$  пов'язаний з коефіцієнтом поглинання  $\tau$  співвідношенням

$$\mu' = \tau + \sigma = \tau + \frac{\tau}{3} = \frac{4}{3}\tau. \quad (8.13)$$

Тоді зміна інтенсивності пучка рентгенівських променів під час проходження плівки з товщиною  $d$  з урахуванням розсіювання запишеться у вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{I'_{Fe}(d)}{I_0} &= \exp(-\mu'_{Fe}d) = \exp\left(-\frac{4}{3} \cdot 2917,2 \cdot 10^2 \cdot 5 \cdot 10^{-6}\right) = 0,143, \\ \frac{I'_{Cr}(d)}{I_0} &= \exp(-\mu'_{Cr}d) = \exp\left(-\frac{4}{3} \cdot 2207,3 \cdot 10^2 \cdot 5 \cdot 10^{-6}\right) = 0,2296, \\ \frac{I'_{FeCr}(d)}{I_0} &= \exp(-\mu'_{FeCr}d) = \exp\left(-\frac{4}{3} \cdot 2562,25 \cdot 10^2 \cdot 5 \cdot 10^{-6}\right) = \\ &= 0,1811. \end{aligned} \quad (8.14)$$

**Задача №9.** Енергія зв'язку електронів на К- і L-оболонках в атомі ртуті дорівнює  $E_K = 83,1 \text{ кеВ}$  і  $E_L = 14,8 \text{ кеВ}$ , відповідно. Визначити довжину хвилі монохроматичного рентгенівського випромінювання, при якій кінетична енергія фотоелектрона, звільненого з К-оболонки, в два рази менша за кінетичну енергію звільненого Оже-електрона.

**Розв'язок:** Запишемо кінетичну енергію фотоелектрона  $E_1$ , звільненого з К-оболонки:

$$E_1 = \hbar\omega - E_K. \quad (9.1)$$

Оже-електрон виникає внаслідок безвипромінювального переходу одного з електронів L-оболонки на К-оболонку і передачі енергії збудження іншому електрону L-оболонки. Тому кінетична енергія Оже-електрона  $E_2$  буде дорівнювати

$$E_2 = (E_K - E_L) - E_L. \quad (9.2)$$

Оскільки з умови задачі  $E_2 = 2E_1$ , то підставивши (9.1) в (9.2), одержимо рівняння

$$2(\hbar\omega - E_K) = E_K - 2E_L. \quad (9.3)$$

Звідки

$$\hbar\omega = \frac{3}{2} E_K - E_L = 109,85 \text{ кеВ} . \quad (9.4)$$

### **Задачі для самостійної роботи**

1. Довжини хвиль  $K_\alpha$ -ліній хімічних елементів дорівнюють  $\lambda_1 = 1,785 \text{ \AA}$  і  $\lambda_2 = 2,285 \text{ \AA}$ . Визначити, що це за хімічні елементи.
2. Показати, що величини розщеплення рентгенівських дублетів за шкалою довжин хвиль  $\Delta\lambda$  для елементів з великим атомним номером  $Z$  не залежать від  $Z$ .
3. Чи можливе використання рентгенівського випромінювання при напрузі на аноді рентгенівської трубки  $100 \text{ кВ}$  для спостереження фотоелекту з К-оболонки  ${}_{92}^{238}\text{U}$ ?
4. Починаючи з якого елемента періодичної таблиці можна спостерігати рентгенівські К-, L- та M-серії?
5. Знайти границю К-смуги поглинання елементів  $\text{Mo}$ ,  $\text{Cu}$ ,  $\text{Fe}$ .
6. В процесі роботи матеріал деяких анодів окислюється. Чи буде рентгенівська трубка при цьому випромінювати  $K_\alpha$ -лінію?
7. Короткохвильовій границі суцільного рентгенівського спектру алюмінію відповідає довжина хвилі  $\lambda_0 = 5 \text{ \AA}$ . Чи буде при цьому спостерігатись  $K_\alpha$ -лінія характеристичного рентгенівського випромінювання?
8. Які електрони можуть заповнювати вакансію в К-оболонці?
9. При якій енергії рентгенівського кванта, що іонізує атом, енергія фотоелектрона, що вилітає, дорівнює енергії Оже-електрона?
10. Як відомо, у рідкоземельних елементів внутрішня оболонка f заповнюється після заповнення зовнішніх оболонок. Таким чином, всередині електронної конфігурації атома є незаповнені місця. Чи може відбуватися спонтанне рентгенівське випромінювання при заповненні цих вакансій? Чому?
11. Порівняти коефіцієнти поглинання рентгенівських променів

нів для кісток та тканин. (Врахувати, що речовина кісток є фосфорно-кислий кальцій  $Ca_3(PO_4)_2$ , а поглинання в тканинах, в основному, обумовлено водою).

12. Користуючись формулою Томсона для атомного коефіцієнта розсіювання, підрахувати кількість електронів в атомах азоту та фтору, якщо відомі їх масові числа та масовий коефіцієнт розсіювання рентгенівських променів ( $0,2 \text{ см}^2 / \text{г}$ ).
13. Довжини хвиль  $K_\alpha$ - і  $K_\beta$  спектральних ліній, що випромінює нікелевий анод рентгенівської трубки, дорівнюють  $1,66 \text{ \AA}$  та  $1,5 \text{ \AA}$ , відповідно. Підібрати симетрично-поглинаючий рентгенівський фільтр та розрахувати його масову товщину ( $\rho d$ ), при якій ослаблення інтенсивності  $K_\beta$ -лінії буде в 10 раз більшим, ніж для  $K_\alpha$ -лінії.
14. Для алюмінію масовий коефіцієнт ослаблення рентгенівських променів для довжини хвилі  $K_\alpha$ -лінії молібдену ( $\lambda_{K_\alpha} = 0,61 \text{ \AA}$ ) дорівнює  $5,3 \text{ см}^2 / \text{г}$ . Розрахуйте для цього матеріалу значення коефіцієнтів ослаблення, поглинання, розсіювання (лінійний, масовий, атомний).
15. Вказати спектральний символ рентгенівського терма, якщо є вакансія в  $p$ -оболонці (наприклад,  $1s^2 2s^2 2p^5 3s^2$ ).
16. Побудувати систему K-, L-, M-термів атома та вказати тонку структуру K-, L-, M-серій характеристичних рентгенівських спектрів.
17. Чим відрізняються рентгенівські спектри від спектрів лужних металів?
18. Чому при побудові термів та їх запису через квантові числа застосовується такий самий метод, як і для воднеподібних атомів?
19. Розрахувати кількість компонент тонкої структури L-серії характеристичного рентгенівського випромінювання.
20. При збільшенні напруги на рентгенівській трубці від  $U_1 = 10 \text{ кВ}$  до  $U_2 = 20 \text{ кВ}$  різниця довжин хвиль  $K_\alpha$ -лінії і короткохвильової границі суцільного рентгенівського спектра збільшилась у  $\eta = 3,0$  рази. З якого хімічного елементу зроблено анод?

21. Знайти порядковий номер легкого елемента, у якого в спектрі поглинання рентгенівського випромінювання різниця частот К- та L-границь смуг поглинання дорівнює  $\Delta\omega = 6,85 \cdot 10^{18} \text{ c}^{-1}$ .
22. Знайти кінетичну енергію фотоелектронів, що іонізуються з К-оболонки атомів молібдену під дією  $K_{\alpha}$ -випромінювання срібла.
23. Чому в спектрі поглинання рентгенівського випромінювання край К-смуги простий, L-смуги – потрійний, М-смуги – п'ятикратний?
24. Під час опромінювання атомів криптону рентгенівським випромінюванням з довжиною хвилі  $\lambda$  виявлено, що в деяких випадках з атомів спостерігається емісія двох електронів: фотоелектрона К-оболонки і електрона L-оболонки, що іонізується за рахунок ефекту Оже. Енергія зв'язку К- та L-електронів, відповідно, дорівнює  $14,4 \text{ кеВ}$  та  $2,0 \text{ кеВ}$ . Визначити: а) кінетичну енергію обох електронів, якщо  $\lambda = 65 \text{ нм}$ ; б) довжину хвилі  $\lambda$ , при якій енергії обох електронів однакові.
25. Визначити енергію зв'язку електрона для атома урана в станах 1s, 2s, 2p.

## Розділ 13. ШИРИНА ТА ІНТЕНСИВНІСТЬ СПЕКТРАЛЬНИХ ЛІНІЙ

### *Основні теоретичні відомості*

Ширина спектральної лінії визначається інтервалом частот  $\Delta\nu$  або довжин хвиль  $\Delta\lambda$  на половині висоти інтенсивності контуру спектральної лінії. Часто ширину спектральної лінії називають напівшириною і позначають як  $\Delta\nu_{1/2}$ . Відносна ширина спектральної лінії  $\frac{\Delta\nu}{\nu}$  характеризує ступінь монохроматичності спектральної лінії і має важливе значення при оптичних дослідженнях.

Ширина спектральної лінії зумовлена, в основному, трьома причинами:

- радіаційними втратами (класична точка зору) або невизначеністю енергії  $\Delta E$ , якщо збуджений атом має певний обмежений час життя  $\tau$  ( $\Delta E \cdot \tau \approx \hbar$ ) з квантової точки зору;
- впливом зіткнень атомів та молекул;
- впливом теплового руху атомів, що призводить до ефекту Доплера.

Залежно від причини уширення, ширина спектральної лінії називається радіаційною, ударною, доплерівською. При великих електричних та магнітних полях на ширину спектральної лінії суттєво може впливати розширення енергетичних рівнів (фактично, розщеплення) за рахунок ефекту Штарка та Зеемана. При великій інтенсивності світла на ширину спектральної лінії також може впливати “динамічний” ефект Штарка.

Радіаційна ширина спектральної лінії  $\Delta\nu_{rad}$  є прямим наслідком принципу невизначеностей Гейзенберга  $\Delta E \cdot \tau \approx \hbar$ :

$$\Delta\nu_{rad}(n, m) = \frac{1}{2\pi \sum_{i=1}^N \frac{1}{A_{ni}}} + \frac{1}{2\pi \sum_{j=1}^M \frac{1}{A_{mj}}}, \quad (1)$$

де  $A_{ni}$  та  $A_{mj}$  – коефіцієнти спонтанного випромінювання,



обернено пропорційні до часу життя  $\tau_{ni}$ ,  $\tau_{mj}$  атома в збуджених станах  $n$  та  $m$ , відповідно. Якщо один зі станів ( $n$  або  $m$ ) є стабільним, необхідно покласти для цього стану  $\tau = \infty$ ,  $A = 1/\tau = 0$ . В (1) величини  $N$  та  $M$  визначають кількість можливих переходів зі станів  $n$  та  $m$ , відповідно.

Доплерівське уширення  $\Delta\lambda$  спектральної лінії з довжиною хвилі  $\lambda$  у випадку повздовжнього ефекту Доплера описується виразом:

$$\Delta\lambda = A \frac{\lambda}{c} \sqrt{\frac{kT}{m}} = A \frac{\lambda}{c} \sqrt{\frac{RT}{M}}, \quad (2)$$

де  $A = 2\sqrt{2 \ln 2} = 2,355$ ,  $T$  – середня температура атомів чи молекул речовини (газу),  $k$  – стала Больцмана,  $m$  – маса атома чи молекули,  $R$  – універсальна газова стала,  $M$  – молярна маса,  $c$  – швидкість світла. Відповідний розподіл інтенсивності  $I_\nu$  спектральної лінії від частоти  $\nu$  має вигляд

$$I_\nu = I_0 \exp\left(-\frac{a(\nu - \nu_0)^2}{\nu_0^2}\right), \quad (3)$$

де  $I_0$  – максимальне значення інтенсивності, що відповідає частоті  $\nu_0$ ,  $a = \frac{mc^2}{2kT}$ .

Наявність зіткнень атомів та молекул призводить до наступної залежності інтенсивності спектральної лінії  $I_\nu$  від частоти  $\nu$ :

$$I_\nu = I_0 \frac{\left(\frac{1}{\tau_0}\right)^2}{4\pi^2(\nu_0 - \nu)^2 + \left(\frac{1}{\tau_0}\right)^2}, \quad (4)$$

де  $\tau_0$  – проміжок часу між двома зіткненнями.

Інтенсивність спектральної лінії – це потужність електромагнітного випромінювання, поглинутого або випроміненого (спонтанно чи вимушено) одиницею об'єму речовини. Іnten-

сивність ліній, що виникають під час квантових переходів між рівнями  $E_i$  та  $E_k$ , визначається коефіцієнтами Ейнштейна  $A_{ik}, B_{ki}, B_{ik}$  для відповідних переходів (рис.1), населеністю рівнів та енергією фотонів:

$$I_{ik}^{cn} = h\nu A_{ik} n_i, [Bm]; \quad (5)$$

$$I_{ik}^{вум} = h\nu B_{ik} n_i \rho(\nu), [Bm].$$

$$I_{ki}^{ногл} = h\nu B_{ki} n_k \rho(\nu), [Bm], \quad (6)$$

де  $\rho(\nu)$  – спектральна густина випромінювання,  $\rho(\nu) = \frac{I}{c}$ ,  $I$  – інтенсивність падаючого світла,  $n_i, n_k$  – населеності рівнів з енергією  $E_i$  та  $E_k$  (рис.1).

Коефіцієнт Ейнштейна для спонтанного випромінювання записуються наступним чином:

$$A_{ik} = \frac{4}{3} \frac{\omega_{ik}^3}{\hbar c^3} |D_{ik}|^2 \quad (7)$$

і відповідає кількості актів випромінювання, що приходяться на один атом за одиницю часу,  $D_{ik}$  – матричний елемент дипольного моменту переходу між рівнями  $i$  та  $k$ :

$$D_{ik} = \int_0^\infty \Psi_i^* e r \Psi_k dV, \quad (8)$$

який розраховується методами квантової механіки. Крім того,

$A_{ik} = \frac{1}{\tau_{ik}}$ , де  $\tau_{ik}$  – час життя збудженого атома в стані з енергією  $E_i$ .

Коефіцієнти  $B_{ki}, B_{ik}$  – це коефіцієнти Ейнштейна для вимушених переходів (поглинання та випромінювання).

Інтенсивність спектральної лінії поглинання, що вимірюється в дослідах, завжди менша за  $I_{ki}^{ногл}$ , оскільки одночасно виникає вимушене випромінювання. Реальне значення інтенсивності поглинання дорівнює

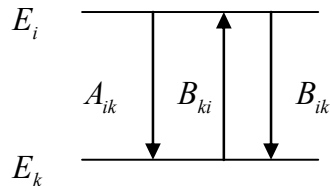


Рис. 1. Схема переходів у дво-рівневій квантовій системі

$$I^{нозл} = I_{ki} \left( 1 - \frac{n_i g_k}{n_k g_i} \right), \quad (9)$$

де використана рівність  $B_{ki} g_k = B_{ik} g_i$ ,  $g_i, g_k$  – статистичні ваги або кратності виродження квантових станів  $i$  та  $k$ , які для термів розраховуються так:

$$g_i = (2L + 1)(2S + 1) = 2J + 1, \quad (10)$$

$J$  – внутрішнє квантове число атома. Між коефіцієнтами спонтанного та вимушеного переходів існує зв'язок [2, 9]:

$$A_{ik} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} B_{ik}. \quad (11)$$

Населеність рівня суттєво залежить від способу збудження атомів (теплове, оптичне, електронний удар і т.п.), середовища, температури, наявності електричного та магнітного полів тощо. Найпростіше розрахувати населеність при термодинамічній рівновазі (теплові джерела, частково дугові розряди). Згідно закону Максвелла-Больцмана

$$n_i = \frac{n_0 g_i e^{-\frac{E_i}{kT}}}{\sum_l g_l e^{-\frac{E_l}{kT}}} = \frac{n_0 g_i e^{-\frac{E_i}{kT}}}{Z}, \quad (12)$$

де  $n_0$  – початкова концентрація атомів, величина  $\sum_l g_l e^{-\frac{E_l}{kT}} = Z$  називається статистичною сумою, її можна представити у вигляді ряду

$$Z = g_1 e^{-\frac{E_1}{kT}} + g_2 e^{-\frac{E_2}{kT}} + \dots = g_1 e^{-\frac{E_1}{kT}} \left( 1 + \frac{g_2}{g_1} e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}} + \frac{g_3}{g_1} e^{-\frac{E_3 - E_1}{kT}} + \dots \right), \quad (13)$$

де  $g_1, E_1$  – статистична вага та енергія основного стану. Ряд, який представляє статистичну суму, обривається на тих членах, для яких  $E_l - E_1 \gg kT$ , оскільки їх вклад до загальної суми є незначним. З фізичної точки зору це означає, що населеність цих рівнів  $n_l \approx 0$  при тепловому збудженні.

Коефіцієнт  $B_{ki}$  можна експериментально визначити, якщо відомий інтегральний коефіцієнт поглинання, за формулою

$$B_{ki} = \frac{1}{N} \frac{c}{h\nu_{ki}} \int_0^{\infty} k(\nu) d\nu, \quad (14)$$

де  $\int_0^{\infty} k(\nu) d\nu$  – інтегральний коефіцієнт поглинання. Знаючи

$B_{ki}$ , можна розрахувати і коефіцієнт спонтанного випромінювання  $A_{ik}$  за формулою (3), враховуючи зв'язок між коефіцієнтами  $B_{ki}$  та  $B_{ik}$ .

Іншим методом визначення ймовірності квантових переходів є метод Д.С. Рождественського, який базується на вивченні аномальної дисперсії газів. З курсу оптики відомо [8], що залежність коефіцієнта заломлення від частоти електромагнітної хвилі має вигляд

$$n^2 - 1 = \frac{Ne^2}{\pi m} \sum_i \frac{f_{ik}}{\nu_{ik}^2 - \nu^2}, \quad (15)$$

де  $N$  – концентрація електронів у атомах, з яких складається середовище,  $f_{ik}$  – сила осцилятора, пов'язана з ймовірністю відповідних квантових переходів  $A_{ik}$

$$\begin{aligned} f_{ik} &= \frac{g_i}{g_k} \frac{mc^3}{8\pi^2 e^2 \nu_{ik}^2} A_{ik}, \\ A_{ik} &= \frac{g_k}{g_i} \frac{8\pi^2 e^2 \nu_{ik}^2}{mc^3} f_{ik}. \end{aligned} \quad (16)$$

Через  $i$  позначено верхній рівень,  $k$  – нижній рівень. Якщо у формулі (16) перейти від частот до довжин хвиль і підставити значення констант  $m, e$ , то одержимо зручну формулу для оцінки  $A_{ik}$ :

$$A_{ik} = \frac{g_k}{g_i} \frac{0,67}{\lambda_{ik}^2} f_{ik}. \quad (17)$$

У формулі (17)  $\lambda_{ik}$  визначається в  $см$ . Якщо відоме значення сили осцилятора  $f_{ik}$ , можемо розрахувати  $A_{ik}$ , а за форму-

лами (11), (14) і  $B_{ik}$ .

### **Методичні вказівки та поради**

1. При розв'язуванні задач з теми "Ширина та інтенсивність спектральних ліній" можна виділити такі типи задач:
  - а) оцінка уширення спектральних ліній;
  - б) розрахунок потужності спонтанного випромінювання при тепловому збудженні;
  - в) розрахунок статистичних сум для певних атомів;
  - г) розрахунок абсолютних та відносних заселеностей рівнів, коефіцієнтів Ейнштейна;
  - д) розрахунок відносних інтенсивностей складових тонкої структури спектральних ліній.
2. При розрахунку ширини спектральної лінії необхідно в першу чергу визначити, які ефекти в основному впливають на її уширення. Так, радіаційне уширення не залежить від температури та тиску, в той час як доплерівське та ударне уширення суттєво залежать від цих параметрів. Найбільш суттєвим фактором при температурах  $T \sim 300\text{ K}$  або більших в газорозрядних лампах при низьких тисках є уширення за рахунок теплового руху атомів та молекул.
3. Для знаходження доплерівського уширення спектральної лінії зручно скористатись формулою для зсуву частоти в наближенні поперечного або повздовжнього ефекту Доплера (або скористатись загальною формулою для руху під довільним кутом). В цій формулі треба дослідити зміну частоти при зміні швидкості джерела (атома чи молекули) відносно приймача. Для опису розподілу за швидкостями зручно скористатись розподілом Максвелла. Для швидкого розрахунку зсуву довжини хвилі при повздовжньому ефекті Доплера може бути використане співвідношення (2), яке виведено в задачі №1.
4. Якщо відомий розподіл інтенсивності  $I_\nu(\nu)$ , то з умови

$$I_\nu(\nu') = \frac{1}{2} I_\nu(\nu_0) = \frac{1}{2} I_0 \text{ можна знайти частоту } \nu', \text{ який від-}$$

повідає рівень половинної інтенсивності спектральної лінії. Тоді ширина спектральної лінії  $\Delta\nu$  буде описуватись ви-

разом  $\Delta\nu = 2|v' - v_0|$ .

5. Відносна заселеність рівнів  $i$  та  $k$  визначається за формулою

$$\frac{n_i}{n_k} = \frac{g_i}{g_k} e^{-\frac{(E_i - E_k)}{kT}}.$$

Таким чином, відносна заселеність визначається відношенням статистичних ваг, температурою та частотою переходу  $h\nu = E_i - E_k$ . Відносні інтенсивності двох спектральних ліній спонтанного випромінювання з довжинами хвиль  $\lambda_1$  та  $\lambda_2$  розраховуються за формулою

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \frac{A_1}{A_2} \frac{n_1}{n_2},$$

згідно формул для інтенсивностей спектральних ліній.

6. При розв'язку задач корисно знати, що  $kT = 0,84 \cdot 10^{-4} \cdot T [eB]$ , довжині хвилі  $\lambda = 1 \text{ мкм}$  відповідає енергія фотона  $E = 1,24 \text{ eB}$ .

### **Приклади розв'язування задач**

**Задача №1.** Розрахувати ширину головної спектральної лінії серії Бальмера  $\lambda = 6563 \text{ Å}$  для атома водню, якщо в якості джерела використовується газорозрядна лампа при тиску  $p = 1 \text{ мм рт. ст.}$  і температурі  $T = 400 \text{ K}$ .

**Розв'язок:** Згідно теорії, ширина спектральної лінії

$$\Delta\nu = \Delta\nu_{rad} + \Delta\nu_D + \Delta\nu_{y\delta}, \quad (1.1)$$

де  $\Delta\nu_{rad}$  – радіаційна ширина спектральної лінії,  $\Delta\nu_D$  – ширина лінії, що обумовлена ефектом Доплера,  $\Delta\nu_{y\delta}$  – ширина лінії, що виникає за рахунок зіткнень атомів та молекул. Розрахуємо окремо всі ці величини:  $\Delta\nu_{rad}$ ,  $\Delta\nu_D$ ,  $\Delta\nu_{y\delta}$ .

З точки зору квантової механіки, природна, або радіаційна, ширина спектральної лінії обумовлена невизначеністю енергії стаціонарних станів атома згідно співвідношення невизначе-

ностей. Енергія системи  $E$  має невизначеність  $\Delta E$ , яка пов'язана з  $\tau$  співвідношенням

$$\Delta E \cdot \tau \approx \hbar, \quad (1.2)$$

де  $\tau$  – час життя атома в збудженому стані. Звідси

$$\Delta \nu = \frac{\hbar}{h\tau} = \frac{1}{2\pi\tau} \quad (1.3)$$

визначає природну ширину лінії, якщо перехід відбувається зі збудженого стану до основного (в основному стані  $\tau \rightarrow \infty$ , в збудженому  $\tau \sim 10^{-8} \text{ c}$ ). Якщо перехід відбуватиметься між двома збудженими станами, то

$$\Delta \nu_{n,m} = \frac{1}{2\pi\tau_n} + \frac{1}{2\pi\tau_m}, \quad (1.4)$$

де  $\tau_n$ ,  $\tau_m$  – часи життя збудженого атома в стані  $n$  та  $m$ , відповідно (не враховуються безвипромінювальні переходи). Час життя  $\tau$  пов'язаний з ймовірністю переходу або коефіцієнтом спонтанного випромінювання  $A$ :

$$\tau_n = \frac{1}{A_n}, \quad (1.5)$$

якщо з рівня  $n$  є тільки один перехід, або

$$A_n = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\tau_{ni}}, \quad (1.6)$$

якщо є декілька ( $N$ ) переходів зі спонтанним випромінюванням.

Лінія з довжиною хвилі  $\lambda = 6563 \text{ \AA}$  є головною лінією серії Бальмера і відповідає переходу з енергетичного рівня  $n=3$  на рівень  $n=2$ , де  $n$  – головне квантове число (рис. 2).

Скористаємося співвідношеннями (1.3), (1.4):

$$\hbar \Delta \nu \cdot \tau = \hbar \Rightarrow$$

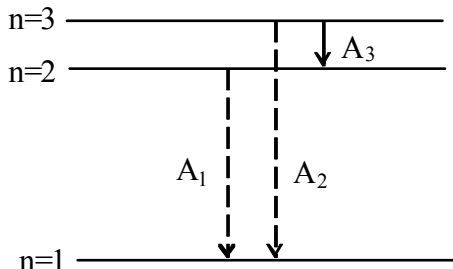


Рис. 2. Діаграма спектральних переходів для атома водню

$$\Delta v_{3 \rightarrow 2} = \frac{1}{2\pi\tau_{n3}} + \frac{1}{2\pi\tau_{n2}}, \quad (1.7)$$

де внаслідок (1.5)

$$\tau_2 \approx 10^{-8} \text{ c}, \quad \frac{1}{\tau_3} = \frac{1}{\tau_{32}} + \frac{1}{\tau_{31}} = 2 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1} \quad (1.8)$$

і вважається, що коефіцієнт спонтанного випромінювання  $A = \frac{1}{\tau} \approx 10^8 \text{ c}^{-1}$ . Підставляючи числові значення, одержуємо:

$$\Delta v_{\text{рад}} = \frac{1}{2\pi} (10^8 + 2 \cdot 10^8) = 0,48 \cdot 10^8 \text{ Гц} = 48 \text{ МГц}. \quad (1.9)$$

**Розрахуємо тепер доплерівську ширину лінії.** Відомо, що внаслідок ефекту Доплера, частота світла  $\nu$ , що реєструє спектральний прилад від рухомого джерела, дорівнює

$$\nu = \nu_0 \left( 1 + \frac{v \cos \theta}{c} \right) \quad (1.10)$$

(повздовжній ефект), де  $\nu_0$  – частота світла від нерухомого джерела,  $v$  – числове значення швидкості джерела світла відносно приладу,  $T = 300 \text{ K}$  – швидкість світла,  $\theta$  – кут між вектором швидкості  $\vec{v}$  та напрямком руху від джерела до приладу. Якщо джерелом світла є атоми, вектори швидкостей  $\vec{v}$  яких розподілені в просторі ізотропно, то ефект Доплера призводить до симетричного розширення спектральної лінії. Таке розширення спектральної лінії називається доплерівським розширенням.

У випадку хаотичного теплового руху атомів та молекул імовірність  $dP$  того, що частинка має швидкість в інтервалі від  $v_x$  до  $v_x + dv_x$  дорівнює (згідно розподілу Максвелла)

$$dP = \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}} \exp \left\{ -\frac{M}{2RT} v_x^2 \right\} dv_x, \quad (1.11)$$

де  $R$  – універсальна газова стала,  $T$  – температура,  $M$  – молярна маса,  $v_x$  – швидкість атома чи молекули в напрямку осі  $x$ , яка співпадає з напрямком руху від джерела до приладу.

Використаємо формулу (1.10) за умови, що  $\theta = 0$ , і визна-



чимо величини  $v_x$  та  $dv_x$ :

$$v_x = \frac{c}{v_0}(v - v_0) \quad (1.12)$$

Отже,

$$dv_x = \frac{c}{v_0} dv. \quad (1.13)$$

Після підстановки виразів для  $v_x$  та  $dv_x$  в (1.11), знайдемо, що

$$dP = \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}} \exp \left\{ -\frac{M}{2RT} c^2 \left( \frac{v - v_0}{v_0} \right)^2 \right\} \frac{c}{v_0} dv. \quad (1.14)$$

Інтенсивність випромінювання  $I_v dv$  в інтервалі частот  $(v, v + dv)$ , звичайно, буде пропорційна до кількості частинок з такою складовою швидкості  $v_x$ , що частота їх випромінювання  $v$  приходить на цей інтервал частот. Але кількість таких частинок буде також пропорційна  $dP$  (1.11). Таким чином, розподіл інтенсивності в спектральній лінії, розширеної внаслідок повздовжнього ефекту Доплера, визначається виразом

$$I = I_0 \exp \left\{ -\frac{M}{2RT} c^2 \left( \frac{v - v_0}{v_0} \right)^2 \right\}, \quad (1.15)$$

Звідки випливає, що спектральна лінія має гаусівську форму.

Визначимо ширину лінії з умови  $I_v = \frac{1}{2} I_{\max}$ :

$$\frac{1}{2} = \exp \left\{ -\frac{M}{2RT} c^2 \left( \frac{v - v_0}{v_0} \right)^2 \right\} \Rightarrow \frac{M}{2RT} c^2 \left( \frac{v - v_0}{v_0} \right)^2 = \ln 2. \quad (1.16)$$

Звідки

$$v - v_0 = \pm \frac{v_0}{c} \sqrt{\frac{2 \ln 2 RT}{M}}. \quad (1.17)$$

Таким чином, ширина доплерівського контуру

$$\Delta v_D = \frac{2v_0}{c} \sqrt{\frac{2 \ln 2RT}{M}}. \quad (1.18)$$

Або, враховуючи, що  $v_0 = \frac{c}{\lambda_0}$ , одержимо

$$\Delta v_D = \frac{2}{\lambda_0} \sqrt{\frac{2 \ln 2RT}{M}}. \quad (1.19)$$

Підставляючи числові дані, отримаємо

$$\Delta v_D = \frac{2}{6563 \cdot 10^{-8}} \sqrt{\frac{2 \cdot 0,69 \cdot 8,3 \cdot 10^7 \cdot 400}{1}} = 6522 \text{ МГц}. \quad (1.20)$$

**Розрахуємо ударну ширину спектральної лінії.** Згідно теорії, ударна і статистична теорія розширення спектральних ліній дає вираз для інтенсивності спектральної лінії (4):

$$I_v = I_0 \frac{\left(\frac{1}{\tau_0}\right)^2}{4\pi^2 (v_0 - v)^2 + \left(\frac{1}{\tau_0}\right)^2}, \quad (1.21)$$

де  $\tau_0$  – час вільного пробігу атома між двома зіткненнями.

Формула для інтенсивності  $I_v$ , аналогічна виразу для зату-

хаючого осцилятора, якщо замінити  $\frac{1}{\tau_0}$  на коефіцієнт згасан-

ня  $\gamma$ .

Знайдемо ширину спектральної лінії на рівні половинної інтенсивності:

$$\frac{1}{2} I_0 = I_0 \frac{\frac{1}{\tau_0^2}}{4\pi^2 (v_0 - v)^2 + \left(\frac{1}{\tau_0}\right)^2}. \quad (1.22)$$

З цього рівняння витікає, що

$$4\pi^2 (v_0 - v)^2 = \left(\frac{1}{\tau_0}\right)^2 \quad (1.23)$$

і, отже,

$$2\pi\Delta\nu = \frac{1}{\tau_0} \Rightarrow \Delta\nu = \frac{1}{2\pi\tau_0} \Rightarrow \Delta\nu_{1/2} = 2\Delta\nu = \frac{1}{\pi\tau_0}. \quad (1.24)$$

З кінетичної теорії газів відомо, що  $\tau_0 = \frac{\bar{\Lambda}}{\bar{v}}$ , де  $\bar{v} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}}$  – середня швидкість,  $\bar{\Lambda} = \frac{1}{\sqrt{2}\pi n\sigma^2}$  – середня довжина вільного пробігу,  $\pi\sigma^2$  – ефективний переріз розсіяння,  $\sigma$  – газокінетичний радіус атома,  $n = \frac{p}{kT}$  – концентрація атомів при температурі  $T$  та тиску  $p$ ,  $k$  – стала Больцмана.

Підставивши  $\bar{v}$ ,  $\bar{\Lambda}$  і  $\tau_0$  у формулу (1.24), для  $\Delta\nu_{1/2}$ , одержимо:

$$\Delta\nu_{1/2} = 4 \frac{p\sigma^2}{kT} \sqrt{\frac{RT}{\pi M}}. \quad (1.25)$$

Врахуємо, що для атома водню  $M = 1 \text{ г / моль}$ ,  $\sigma = 0,5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ ;  $R = 8,3 \cdot 10^7 \text{ ерг / моль} \cdot K$ ,  $k = 1,38 \cdot 10^{-16} \text{ ерг / K}$ ,  $1 \text{ мм рт. ст.} = 133 \text{ Па} = 1330 \text{ дин / см}^2$ .

Підставимо числові дані:

$$\Delta\nu_{\text{yd}} = 4 \cdot \frac{1330 \cdot 0,25 \cdot 10^{-16}}{1,38 \cdot 10^{-16} \cdot 400} \sqrt{\frac{8,3 \cdot 10^7 \cdot 400}{3,14 \cdot 1}} = 0,24 \text{ МГц}. \quad (1.26)$$

Отже, загальна ширина спектральної лінії

$$\Delta\nu = \Delta\nu_{\text{rad}} + \Delta\nu_{\text{д}} + \Delta\nu_{\text{yd}} = 6570,24 \text{ МГц} \quad (1.27)$$

при  $\nu_0 = 4,571 \cdot 10^{14} \text{ Гц}$ .

Як бачимо з розрахунків, в газорозрядних джерелах світла при низьких тисках основний внесок в ширину спектральних ліній дає ефект Доплера.

Розрахуємо тепер ширину спектральної лінії в довжинах хвиль. Як відомо,

$$\lambda = \frac{c}{\nu}, \quad \nu = \frac{c}{\lambda} \quad (1.28)$$

і, отже,

$$\Delta\nu = \frac{c}{\lambda^2} \Delta\lambda, \quad \Delta\lambda = \frac{\Delta\nu \cdot \lambda^2}{c}. \quad (1.29)$$

Враховуючи ці співвідношення, отримаємо

$$\Delta\lambda = \frac{6570,24 \cdot 10^6 \cdot 6563^2 \cdot 10^{-16}}{3 \cdot 10^{10}} = 9,42 \cdot 10^{-10} \text{ см} \approx 0,094 \text{ \AA}. \quad (1.30)$$

**Задача №2.** Довжина хвилі резонансної лінії ртуті  $\lambda = 253,65 \text{ н.м}$  (що відповідає переходу з першого збудженого стану до основного). Середній час життя резонансного рівня  $\tau = 150 \text{ нс}$ . Визначити відношення доплерівського уширення цієї лінії при температурі  $T = 300 \text{ К}$  до її природної ширини.

**Розв'язок:** Знайдемо спочатку радіаційну ширину спектральної лінії за формулою (1):

$$\Delta\nu_{\text{рад}} = \frac{1}{2\pi\tau} = \frac{1}{6,28 \cdot 150 \cdot 10^{-9}} = 1,062 \cdot 10^6 \text{ Гц} = 1,062 \text{ МГц}. \quad (2.1)$$

Для визначення доплерівського уширення лінії використаємо (2):

$$\begin{aligned} \Delta\lambda &= A \frac{\lambda}{c} \sqrt{\frac{kT}{m}} = 2,355 \cdot \frac{253,65 \cdot 10^{-7}}{3 \cdot 10^{10}} \sqrt{\frac{1,38 \cdot 10^{-16} \cdot 300}{200,59 \cdot 1,66 \cdot 10^{-24}}} = \\ &= 222 \cdot 10^{-13} \text{ см}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Для знаходження величини частотного уширення спектральної лінії розглянемо диференціал від виразу

$$\nu = \frac{c}{\lambda}. \quad (2.3)$$

Одержимо

$$d\nu = -\frac{c}{\lambda^2} d\lambda. \quad (2.4)$$

Відкинемо в цьому виразі знак мінус та перейдемо від диференціалів  $d\nu$ ,  $d\lambda$  до малих змін  $\Delta\nu$ ,  $\Delta\lambda$ . При цьому одержимо остаточний вираз для доплерівської ширини лінії  $\Delta\nu_{\text{д}}$ :

$$\Delta\nu_{\text{д}} = \frac{c}{\lambda^2} \Delta\lambda = \frac{3 \cdot 10^{10}}{253,65^2 \cdot 10^{-14}} \cdot 222 \cdot 10^{-13} =$$

$$= 1,035 \cdot 10^9 \text{ Гц} = 1035 \text{ МГц} . \quad (2.5)$$

Отже, відношення доплерівського уширення спектральної лінії до її природної ширини

$$\frac{\Delta \nu_D}{\Delta \nu_{\text{рад}}} = \frac{1035}{1,062} = 974,6 . \quad (2.6)$$

**Задача №3.** Знайдіть відношення числа атомів газоподібного літію, що знаходиться в збудженому стані  $2P$ , до числа атомів в основному стані при температурі  $T = 3000 \text{ К}$ . Довжина хвилі резонансної лінії літію  $2P \rightarrow 2S$   $\lambda = 670,8 \text{ нм}$ .

**Розв'язок:** Відношення заселеностей основного та збудженого рівнів знайдемо з (14):

$$\frac{n_{2P}}{n_{2S}} = \frac{g_{2P}}{g_{2S}} \exp \left\{ -\frac{E_{2P} - E_{2S}}{kT} \right\} . \quad (1.1)$$

Енергія переходу

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{6,708 \cdot 10^{-7} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 1,85 \text{ eB} .$$

При  $T = 3000 \text{ К}$  значення  $kT = 0,86 \cdot 10^{-4} \cdot 3000 = 0,258 \text{ eB}$

Розрахуємо статистичну вагу основного та збудженого станів. Для стану  $2S$  квантові числа  $n_1 = 2, l_1 = 0, s_1 = \frac{1}{2}$ , отже,

статистична вага  $g_1 = \left(2\frac{1}{2} + 1\right) = 2$ . Аналогічно, для стану  $2P$

$$n_2 = 2, l_2 = 1, s_2 = \frac{1}{2} \Rightarrow g_2 = (2+1) \left(2\frac{1}{2} + 1\right) = 6 . \text{ Підставляючи}$$

отримані значення параметрів у формулу (1.1), знаходимо відносну заселеність рівнів

$$\frac{n_{2P}}{n_{2S}} = \frac{6}{2} \exp \left\{ -\frac{1,85}{0,258} \right\} = 2,3 \cdot 10^{-3} .$$

**Задача №4.** При тискові  $p = 1 \text{ мм.рт.ст.}$  та температурі

$T = 2000\text{ K}$  пари натрію займають об'єм  $V = 0,1\text{ л}$ . Знайдіть інтенсивність випромінювання спектральної лінії  $\lambda = 589,6\text{ нм}$ , що виникає під час переходу  $3P \rightarrow 3S$ , якщо відомо, що час життя атома в збудженому  $3P$  стані складає  $1,6 \cdot 10^{-8}\text{ с}$

**Розв'язок:** Інтенсивність спектральної лінії, що виникає під час переходу  $3P \rightarrow 3S$  ( $2 \rightarrow 1$ ), згідно формули (5), дорівнює

$$I = h\nu N_2 A_{21}, \quad (4.1)$$

де  $N_2$  – заселеність рівня  $3P$ ,  $\nu$  – частота переходу,  $A_{21}$  – коефіцієнт Ейнштейна для спонтанного переходу:

$$A_{21} = \frac{1}{\tau} = \frac{1}{1,6 \cdot 10^{-8}} = 0,63 \cdot 10^8\text{ с}^{-1}.$$

Заселеність збудженого рівня з (14) та (15):

$$N_2 \approx N_0 \frac{g_2}{g_1} \exp\left\{-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right\} \left(1 + \frac{g_2}{g_1} \exp\left\{-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right\}\right)^{-1}, \quad (4.2)$$

де  $N_0 = \frac{pV}{kT}$  – кількість атомів, що знаходиться в об'ємі  $V$  при тискові  $p$  та температурі  $T$ .

Статистична вага рівнів

$$g_1(3S) = (2L+1)(2S+1) = 1 \cdot \left(2 \cdot \frac{1}{2} + 1\right) = 2,$$

$$g_2(3P) = (2 \cdot 1 + 1) \left(2 \cdot \frac{1}{2} + 1\right) = 6.$$

Енергія переходу

$$E_2 - E_1 = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1,24 \cdot 10^{-4}\text{ еВ} \cdot \text{см}}{5,896 \cdot 10^{-5}} = 2,1\text{ еВ},$$

$$kT = 0,84 \cdot 10^{-4} \cdot 2000 = 0,168\text{ еВ} \Rightarrow$$

$$\exp\left\{-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right\} = \exp\left\{-\frac{2,1}{0,168}\right\} = 3,72 \cdot 10^{-6}.$$

З розрахунків видно, що другим доданком в знаменнику

(2.2) можна знехтувати. Таким чином, заселеність рівня  $N_2$  можна записати так:

$$N_2 = N_0 \frac{g_2}{g_1} \exp \left\{ -\frac{E_2 - E_1}{kT} \right\} = \frac{pV}{kT} \frac{g_2}{g_1} \exp \left\{ -\frac{E_2 - E_1}{kT} \right\}. \quad (4.3)$$

Підставивши (2.3) у (2.1), отримаємо для інтенсивності (потужності) випромінювання:

$$I = h\nu \frac{pV}{kT} \frac{g_2}{g_1} \frac{1}{\tau} \exp \left\{ -\frac{E_2 - E_1}{kT} \right\}. \quad (4.4)$$

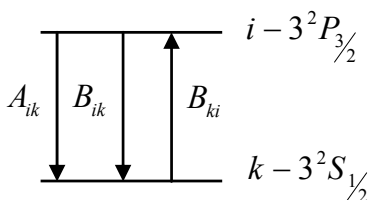
Числове значення інтенсивності:

$$I = \frac{2,1}{0,168} \cdot 133 \cdot 0,1 \cdot 10^{-3} \cdot 3 \cdot 3,72 \cdot 10^{-6} \cdot 0,63 \cdot 10^8 \approx 117 \text{ Вт},$$

тут враховано, що  $1 \text{ мм.рт.ст.} = 133 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}$ ,  $1 \text{ л} = 10^{-3} \text{ м}^3$ .

**Задача №5.** За методом крюків Різдівського експериментально визначили силу осцилятора  $f_{ik}$  для переходу  $3^2S_{\frac{1}{2}} \leftrightarrow 3^2P_{\frac{1}{2}}$ :  $f_{ik} = 0,76$ , довжина хвилі, що відповідає даному переходу,  $\lambda = 589,0 \text{ нм}$ . Оцініть значення коефіцієнтів Ейнштейна  $A_{ik}$ ,  $B_{ik}$ ,  $B_{ki}$ .

**Розв'язок:** На рис.3 зображено схему переходів між рівнями  $3^2P_{\frac{3}{2}}$  та  $3^2S_{\frac{1}{2}}$  зі вказаними коефіцієнтами Ейнштейна. Знай-



демо статистичну вагу рівнів:

$$g_i = 2 \frac{3}{2} + 1 = 4;$$

$$g_k = 2 \frac{1}{2} + 1 = 2.$$

Рис. 3. Схема переходів між рівнями  $3^2S_{\frac{1}{2}}$  та  $3^2P_{\frac{3}{2}}$

Згідно формули (18), коефіцієнт спонтанного випромінювання

$$A_{ik} = \frac{g_k}{g_i} \frac{0,67}{\lambda_{ik}^2} f_{ik} = \frac{2}{4} \cdot \frac{0,67}{5,89^2 \cdot 10^{-10}} \cdot 0,76 = 7,34 \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}.$$

За формулою (13) визначаємо коефіцієнт вимушеного випромінювання (в системі СІ):

$$B_{ik} = \frac{A_{ik} c^3}{8\pi h \nu^3} = \frac{A_{ik} \lambda^3}{8\pi h} = \frac{7,34 \cdot 10^7 \cdot 5,89^3 \cdot 10^{-21}}{8 \cdot 3,14 \cdot 6,62 \cdot 10^{-34}} = 9 \cdot 10^{20} \frac{\text{м}^3}{\text{Дж} \cdot \text{с}^2}.$$

Нарешті, використавши співвідношення  $B_{ki} g_k = B_{ik} g_i$ , отримаємо значення коефіцієнта  $B_{ki}$ , який визначає імовірність поглинання

$$B_{ki} = \frac{g_i}{g_k} B_{ik} = 1,8 \cdot 10^{21} \frac{\text{м}^3}{\text{Дж} \cdot \text{с}^2}.$$

**Задача №6. Знайдіть відношення інтенсивностей складових дублету спектральної лінії  $n_2^2 S_{\frac{1}{2}} \rightarrow n_1^2 P_{\frac{1}{2}}$**

**( $\lambda_1 = 377,5 \text{ нм}$ ),  $n_2^2 S_{\frac{1}{2}} \rightarrow n_1^2 P_{\frac{3}{2}}$  ( $\lambda_2 = 535,05 \text{ нм}$ ) ( $n_2 > n_1$ ) атома  $Ti$  для яких, згідно експерименту, сили осциляторів  $f_1 \approx f_2$ .**

**ма  $Ti$  для яких, згідно експерименту, сили осциляторів  $f_1 \approx f_2$ .**

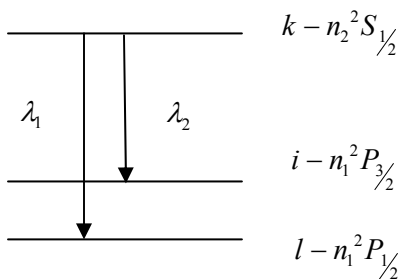


Рис. 4. Схема переходів, що відповідають дублету  $\lambda_1 = 377,5 \text{ нм}$ ,  $\lambda_2 = 535,05 \text{ нм}$  атома  $Ti$

**Розв'язок:** Відношення інтенсивностей двох спонтанних переходів, вказаних на рис. 4,

$$\frac{I_2}{I_1} = \frac{g_i}{g_l} \frac{A_{ki}}{A_{kl}} \frac{v_{ki}}{v_{kl}}.$$

Згідно формул (18), (20), цей вираз можна переписати наступним чином:

$$\frac{I_2}{I_1} = \frac{g_i^2}{g_l^2} \frac{f_{ki}}{f_{kl}} \left( \frac{v_{ki}}{v_{kl}} \right)^3 =$$



$$= \frac{g_i^2}{g_l^2} \frac{f_{ki}}{f_{kl}} \left( \frac{\lambda_{kl}}{\lambda_{ki}} \right)^3.$$

Знайдемо кратність виродження нижніх рівнів  ${}^2P_{\frac{1}{2}}(l)$ ,  ${}^2P_{\frac{3}{2}}(i)$ :

$$g_i = 2 \frac{3}{2} + 1 = 4; g_l = 2 \frac{1}{2} + 1 = 2.$$

Враховуючи, що  $\frac{g_i^2}{g_l^2} = 4$  та  $f_{ki} \approx f_{kl}$ , отримаємо відношення інтенсивностей

$$\frac{I_2}{I_1} = 4 \cdot \left( \frac{377,5}{535,0} \right)^3 = 1,43.$$

**Задача №7.** Чому дорівнює відношення інтенсивностей складових дублету головної (резонансної) серії для лужних металів (рис. 5)? Відомо, що  $f_{ik} = 2f_{il}$ .

**Розв'язок:** Як і в задачі №4, відношення інтенсивностей двох компонентів дублету складатиме

$$\frac{I_{ki}}{I_{li}} = \frac{N_k}{N_l} \frac{A_{ki}}{A_{li}} \frac{v_{ki}}{v_{li}} = \frac{g_l}{g_k} \frac{N_k}{N_l} \frac{f_{ik}}{f_{il}} \left( \frac{v_{ki}}{v_{li}} \right)^3. \quad (7.1)$$

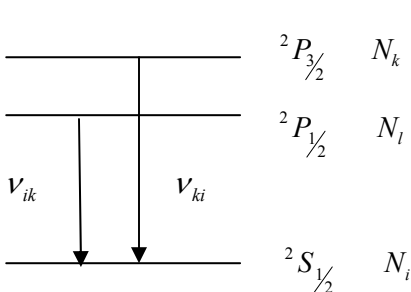


Рис. 5. Переходи, що відповідають резонансному дублету лужних металів

Проте, на відміну від попередньої задачі, де розглядалась різка серія, тут відношення інтенсивностей суттєво залежить від  $\frac{N_k}{N_l}$ , тобто від заселеностей рівнів  $k$  та  $l$ , а отже, від методу збудження. У випадку теплового рівноважного заселення

маємо:

$$\frac{N_k}{N_l} = \frac{g_k}{g_l} \exp \left\{ -\frac{E_k - E_l}{kT} \right\},$$

і формула (7.1) набуває вигляду

$$\frac{I_{ki}}{I_{li}} = \frac{f_{ik}}{f_{il}} \left( \frac{v_{ki}}{v_{li}} \right)^3 \exp \left\{ -\frac{E_k - E_l}{kT} \right\}. \quad (7.2)$$

У випадку вузьких дублетів при слабкій спіно-орбітальній взаємодії можна вважати, що  $v_{ki} \approx v_{li}$  та  $\exp \left\{ -\frac{E_k - E_l}{kT} \right\} \approx 1$ . Тоді

$$\frac{I_{ki}}{I_{li}} = \frac{f_{ik}}{f_{il}}. \quad (7.3)$$

Для дублетів головної серії визначено, що  $\frac{f_{ik}}{f_{il}} \approx \frac{2}{1}$ , тобто

$$\frac{I_{ki}}{I_{li}} = 2.$$

**Задача №8.** Вивести формулу для відношення інтенсивностей компонент триплету дифузної серії в спектрах випромінювання одноелектронних атомів. Показати, що  $I(a) : I(b) : I(c) =$

$$9 : 1 : 5$$

(рис.6).

**Розв'язок:**

Згідно правил відбору для квантового числа  $j$  в триплеті дифузної серії виникають три лінії  $a, b, c$  (див. рис.6). Для визначен-

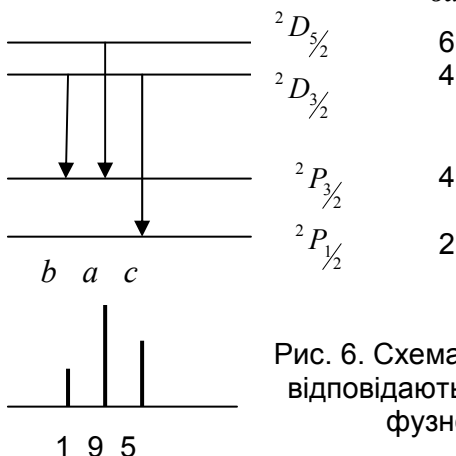


Рис. 6. Схема переходів, що відповідають триплету дифузної серії

ня відношення інтенсивностей скористаємось наступним правилом: якби рівні  $^2D_{\frac{3}{2}}$  та  $^2D_{\frac{5}{2}}$  співпадали, то спостерігалось

би наступне відношення інтенсивностей компонент:

$$\frac{I_a + I_b}{I_c} = \frac{4}{2}. \quad (8.1)$$

Якби співпадали рівні  $^2P_{\frac{3}{2}}$  та  $^2P_{\frac{1}{2}}$ , відношення інтенсивностей становило б

$$\frac{I_c + I_b}{I_a} = \frac{4}{6}. \quad (8.2)$$

З рівнянь (8.1) та (8.2) знайдемо відношення  $\frac{I_a}{I_b}$  та  $\frac{I_a}{I_c}$ . З

(8.1) виразимо  $\frac{I_a}{I_b}$ :

$$\frac{I_a}{I_b} = \frac{4}{2} \frac{I_c}{I_b} - 1. \quad (8.3)$$

З (8.2) знаходимо вираз для  $\frac{I_c}{I_b}$ :

$$\frac{I_c}{I_b} = \frac{4}{6} \frac{I_a}{I_b} - 1 \quad (8.4)$$

та підставляємо його у (8.3):

$$\frac{I_a}{I_b} = \frac{4}{3} \frac{I_a}{I_b} - 3 \Rightarrow \frac{I_a}{I_b} = \frac{9}{1}. \quad (6.5)$$

Підставивши (8.5) у (8.4), знаходимо:  $\frac{I_c}{I_b} = \frac{36}{6} - 1 = \frac{5}{1}$ . Остаточ-

но отримуємо відношення інтенсивностей компонент триплету:  $I_a : I_b : I_c = 9 : 1 : 5$  (рис.6).

### **Задачі для самостійної роботи**

1. Розрахувати ширину спектральної лінії  $\lambda = 1215 \text{ \AA}$  головної лінії серії Лаймана, якщо в газорозрядній водневій

лампи тиск  $p = 1 \text{ мм. рт. ст.}$ , а температура газу  $T = 500 \text{ К}$ .

2. Розрахувати доплерівську ширину спектральної лінії неону  $\lambda = 6328 \text{ \AA}$  за умови, що тиск в неоновій лампі  $p = 1 \text{ мм. рт. ст.}$ , а температура газу  $T = 300 \text{ К}$ .
3. Середній час життя атома водню в збудженому стані  $2p$  дорівнює  $1,6 \cdot 10^{-9} \text{ с}$ . Порівняти між собою три величини: 1) природну ширину лінії; 2) доплерівську ширину лінії при умові, що  $T = 300 \text{ К}$ ; 3) величину тонкого розщеплення рівня  $2p$  (тобто різницю між рівнями  $2P_{1/2}$ ,  $2P_{3/2}$ ).
4. Вивести значення природної ширини спектральної лінії з класичних уявлень, вважаючи атом згасаючим осцилятором.
5. При яких температурах газу головна лінія серії Лаймана ( $\lambda = 1215 \text{ \AA}$ ) атома водню може мати природну ширину спектральної лінії. Час життя атома водню в стані  $2^2P \sim 10^{-8} \text{ с}$ . За яких умов можна значно зменшити вплив ефекту Доплера на ширину спектральної лінії, не зменшуючи при цьому температуру газу?
6. Спектральна лінія  $\lambda = 532,0 \text{ нм}$  виникає в результаті переходу між двома збудженими станами атома, середній час життя яких дорівнює  $12 \text{ нс}$  і  $20 \text{ нс}$ , відповідно. Оцініть природну ширину цієї лінії  $\Delta\lambda$ . Оцініть ступінь монохроматичності цієї лінії та визначте значення довжини когерентності.
7. Температуру газових хмар у космічному просторі можна оцінити за доплерівським уширенням спектральних ліній, що випромінюють атоми газу. Для цього часто використовують водневу лінію  $\lambda = 21 \text{ см}$ . Оцініть температуру  $T$  газової водневої хмари, якщо відповідна спектральна лінія має ширину  $\Delta\nu = 5 \text{ кГц}$ .
8. Оцініть вплив зіткнень атомів неону на ширину спектральної лінії  $\lambda = 0,63 \text{ мкм}$ , що використовується в гелій-неоновому лазері за таких умов:  $T = 400 \text{ К}$ , коефіцієнт

дифузії атомів неону  $D = 100 \text{ см}^2 / \text{с}$ .

9. Для отримання спектральних ліній без доплерівського уширення використовують вузький пучок збуджених атомів, що слабо розходиться, спостереження здійснюють у напрямку, перпендикулярному до пучка. Визначте кут розходження пучка атомів натрію, при якому доплерівське уширення резонансної лінії  $\lambda = 589,6 \text{ нм}$  на порядок менше її природної ширини, якщо швидкість атомів  $v = 1000 \text{ м/с}$  і середній час життя в стані резонансного збудження  $\tau = 16 \text{ нс}$ .
10. Довжина хвилі  $\lambda$  фотона, що випромінюється атомом, дорівнює  $\lambda = 0,6 \text{ мкм}$ . Вважаючи, що час життя атома в збудженому стані  $\Delta t = 10^{-8} \text{ с}$ , визначити відношення природної ширини енергетичного рівня, на який був збуджений електрон, до енергії кванта, що випромінює атом.
11. Запропонуйте методи визначення коефіцієнта спонтанного випромінювання. Обґрунтуйте відповідь.
12. Оцініть відношення доплерівської ширини лінії до природної для резонансної лінії ртуті, якщо час життя збудженого стану дорівнює  $\tau = 10^{-7} \text{ с}$ . Довжина хвилі дорівнює  $\lambda = 2537 \text{ Å}$ .
13. Знайти відношення інтенсивностей складових дублета різкої серії для  $\text{Cs}$   $n_2^2 S_{\frac{1}{2}} \rightarrow n_1^2 P_{\frac{1}{2}}$  ( $\tilde{\nu}_1 = 14694,8 \text{ см}^{-1}$ ),  $n_2^2 S_{\frac{1}{2}} \rightarrow n_1^2 P_{\frac{3}{2}}$  ( $\tilde{\nu}_2 = 13588,1 \text{ см}^{-1}$ ). Відношення сил осциляторів для цих переходів  $\frac{f_1}{f_2} \approx 1$ .
14. Для резонансної лінії ртуті  $\lambda = 2537 \text{ Å}$  середній час спонтанного випромінювання складає  $\tau = 10^{-7} \text{ с}$ . Визначити коефіцієнт Ейнштейна для вимушеного переходу.
15. Розріджені пари ртуті, атоми якої знаходяться в основному стані, освітлюють резонансною лінією ртутної лампи ( $\lambda = 253,65 \text{ нм}$ ). При цьому було знайдено, що потужність випромінювання цієї лінії парами ртуті складає

$P = 35 \text{ мВт}$ . Знайти кількість атомів в стані резонансного збудження, середній час життя якого  $\tau = 0,15 \text{ мкс}$ .

16. Для парів натрію, що знаходяться при температурі  $T = 2000 \text{ К}$ , з досліду відомо, що на кожен атом  $\text{Na}$  випромінюється  $n = 2000$  квантів ( $\lambda = 589 \text{ нм}$ ) за 1 с. Знайти середню тривалість  $t$  життя збудженого атома натрію.

17. Розподіл інтенсивності випромінювання в межах спектральної лінії з природним уширенням має вигляд:

$$I_{\omega} = I_0 \frac{(\gamma/2)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}, \text{ де } I_0 - \text{спектральна інтенсив-}$$

ність в центрі лінії (при  $\omega = \omega_0$ ),  $\gamma$  – константа згасання,

$\gamma = \frac{1}{\tau}$ ,  $\tau$  – середній час життя збудженого стану. Знайти за

допомогою цієї формули: а) природну ширину лінії  $\delta\omega$ , якщо відоме значення  $\gamma$ ; б) середній час життя атомів ртуті в стані  $6^1P$ , якщо відомо, що під час переходу в основний стан випромінюється лінія  $\lambda = 185 \text{ нм}$  з природною шириною  $\delta\lambda = 1.5 \cdot 10^{-5} \text{ нм}$ .

18. Оцінити доплерівську ширину спектральних ліній жовтого дублету  $\text{Na}$  ( $\lambda_1 = 5890 \text{ \AA}$ ,  $\lambda_2 = 5896 \text{ \AA}$ ), якщо температура в лампі з парами натрію дорівнює  $T = 383 \text{ К}$ . При яких температурах доплерівське уширення спектральних ліній стане більшим за спін-орбітальне розщеплення лінії?

19. Довжина хвилі резонансної лінії ртуті  $\lambda = 253,65 \text{ нм}$ . Середній час життя резонансного рівня  $\tau = 0,15 \text{ мкс}$ . Визначити відношення доплерівського уширення цієї лінії при  $T = 300 \text{ К}$  до її природної ширини.

20. Середній час життя атома водню в збудженому стані  $2P$  дорівнює  $\tau = 1,6 \cdot 10^{-9} \text{ с}$ . Порівняти між собою три величини: 1) природну ширину лінії, яка зумовлена скінченням часом життя цього стану; 2) величину тонкого розщеплення рівня  $2P$  (тобто різницю між рівнями  $2^2P_{\frac{3}{2}}$  та  $2^2P_{\frac{1}{2}}$ ); 3) величину доплерівського уширення. В останньому випадку

вважати, що спостереження ведеться вздовж напрямку руху атома водню, швидкість якого дорівнює середній тепловій швидкості атомів при температурі  $T = 300\text{ K}$ .

## Розділ 13. СПЕКТРИ ДВОХАТОМНИХ МОЛЕКУЛ

### *Основні теоретичні відомості*

Під час переходу молекули з одного електронного стану до іншого одночасно відбувається зміна коливального та обертового станів. Покладаючи, що в першому наближенні має місце адитивність трьох видів енергії, енергію молекули можна представити у вигляді суми енергій обертового, коливального та електронного рухів. Відповідно, спектри молекул поділяються на обертові, коливальні та електронні. Розглянемо окремо кожен тип спектрів молекул.

#### **Обертальні спектри двохатомної молекули**

Енергія  $E$  обертового стану жорсткої двохатомної молекули (незмінна відстань  $r$  між атомами) задається формулою

$$\frac{E}{hc} = \tilde{\nu} = \frac{h}{8\pi^2 cI} J(J+1) \left[ \text{см}^{-1} \right], \quad (1)$$

де  $J = 0, 1, 2, \dots$  – обертове квантове число, для якого діє правило відбору  $\Delta J = \pm 1$ ;  $c = 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}$ ,  $I$  – момент інерції молекули. Момент інерції за визначенням дорівнює  $I = \mu r^2$ ,

де  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  – зведена маса молекули,  $r$  – відстань між

атомами, що входять до складу молекули.

Якщо ввести обертову сталу:

$$B = \frac{h}{8\pi^2 cI} \left[ \text{см}^{-1} \right], \quad (2)$$

то енергія запишеться так:

$$\frac{E}{hc} = BJ(J+1) \left[ \text{см}^{-1} \right]. \quad (3)$$

Момент інерції виражається через обертову сталу наступним чином:

$$I = \frac{h}{8\pi^2 cB}, \quad (4)$$



Під час переходу молекули зі стану  $J$  в стан  $J + 1$  хвильове число, що відповідає переходу,

$$\tilde{\nu}_{J \rightarrow J+1} = B(J+1)(J+2) - BJ(J+1) = 2B(J+1). \quad (5)$$

Переходу  $J = 0 \rightarrow J = 1$  відповідатиме хвильове число  $\tilde{\nu}_{0 \rightarrow 1} = 2B$ . Таким чином, в моделі жорсткого ротатора обертальний спектр молекули складається з серії ліній, які знаходяться на однаковій відстані, що дорівнює  $2B$ .

У випадку нежорсткої молекули, розв'язок рівняння Шредінгера приводить до наступної формули для енергії:

$$\frac{E_J}{hc} = BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2 \left[ \text{см}^{-1} \right], \text{ де} \quad (6)$$

$$D = \frac{h^3}{32\pi^4 I^2 r^2 k c} - \quad (7)$$

стала відцентрового розтягу,  $k$  – коефіцієнт (силова константа), який впливає на частоту коливань,

$$k = 4\pi^2 \tilde{\nu}_k^2 c^2 \mu, \quad (8)$$

де  $\tilde{\nu}_k$  – частота коливань (в  $\text{см}^{-1}$ ).

### **Методичні вказівки та поради**

1. При розв'язуванні задач з теми «Обертальні спектри молекул» необхідно звернути увагу на те, якою є молекула: жорсткою, нежорсткою, лінійною, нелінійною, двохатомною чи багатоатомною. В курсі атомної фізики, що розрахований на студентів, які вивчають загальний курс фізики, як правило, обмежуються розглядом двохатомних молекул. В задачах за наведеними формулами нескладно визначити відповідні моменти інерції молекул, їх лінійні розміри, ізотопічний зсув, заселеність обертальних рівнів, якщо відомі частоти обертального спектра. Типовими є задачі 1,2,3.

### **Приклади розв'язування задач**

**Задача №1.** Визначити момент інерції та довжину зв'язку в молекулі монооксида вуглецю  $CO$ , якщо відомо, що в

**обертальному спектрі поглинання перша лінія**

$$\tilde{\nu}_{0 \rightarrow 1} = 3,84235 \text{ см}^{-1}.$$

**Розв'язок:** Під час переходу молекули зі стану  $J$  до стану  $J+1$  хвильове число, що відповідає переходу, запишеться так

$$\tilde{\nu}_{J \rightarrow J+1} = B(J+1)(J+2) - BJ(J+1) = 2B(J+1). \quad (1.1)$$

Переходу  $J=0 \rightarrow J=1$  відповідатиме хвильове число  $\tilde{\nu}_{0 \rightarrow 1} = 2B$ , звідки знаходимо:

$$B = \frac{\tilde{\nu}_{0 \rightarrow 1}}{2} = 1,92118 \text{ см}^{-1}.$$

Момент інерції виражається через обертальну сталу  $B$ .

Якщо врахувати, що  $B = \frac{\tilde{\nu}_{0 \rightarrow 1}}{2}$ , то момент інерції, згідно (4), запишеться так:

$$I = \frac{h}{4\pi^2 c \tilde{\nu}_{0 \rightarrow 1}}. \quad (1.2)$$

З іншого боку, момент інерції за визначенням є  $I = \mu r^2$ , де

$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  – зведена маса молекули,  $r$  – відстань між ато-

мами, що входять до складу молекули. Таким чином, довжина зв'язку дорівнює:

$$r = \sqrt{\frac{I}{\mu}} = \sqrt{\frac{I(m_1 + m_2)}{m_1 m_2}}. \quad (1.3)$$

Підставимо числові значення і знайдемо з (1.2) момент інерції молекули  $CO$

$$I_{CO} = \frac{6,626 \cdot 10^{-27}}{4 \cdot \pi^2 \cdot 3 \cdot 10^{10} \cdot 3,84236} = 14,56 \cdot 10^{-40} \text{ з} \cdot \text{см}^2. \quad (1.4)$$

Врахуємо тепер, що маса атома кисню складає  $m_O = m_1 \cong 16 \text{ а.о.м.}$ , маса атома вуглецю  $m_C = m_2 \cong 12 \text{ а.о.м.}$ ,  $1 \text{ а.о.м.} = 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ з}$ , тобто зведена маса молекули

$$\mu_{CO} = \frac{16 \cdot 12}{16 + 12} \cdot 1,66 \cdot 10^{-24} = 11,38262 \cdot 10^{-24} \text{ з}, \quad (1.5)$$

Відстань між атомами знаходимо з (1.3), врахувавши (1.4) та (1.5):

$$r_{CO} = \sqrt{\frac{14,56 \cdot 10^{-40}}{11,38 \cdot 10^{-24}}} = 1,13 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 1,13 \text{ \AA}.$$

**Задача №2.** Оцінити величину сталої відцентрового розтягу  $D$  для нежорсткої молекули, якщо коливальна частота  $\tilde{\nu}_k \approx 10^3 \text{ см}^{-1}$ , обертальна стала  $B = 2 \text{ см}^{-1}$ .

**Розв'язок:** Згідно (7), стала відцентрового розтягу

$$D = \frac{h^3}{32\pi^4 I^2 r^2 c k} \quad (2.1)$$

Враховуючи формулу для силової константи (8), та обертової сталої (2), виразимо сталу (2.1) через параметри задачі:

$$D = \frac{h^3}{32\pi^4 I^2 r^2 c k} = \frac{h^3}{128\pi^6 I^2 r^2 c^3 \mu \tilde{\nu}_k^2} \Rightarrow$$

$$D = \frac{h^3}{128\pi^6 I^3 c^3 \tilde{\nu}_k^2} = \frac{4B^3}{\tilde{\nu}_k^2}.$$

Підставляючи дані задачі, знаходимо сталу відцентрового розтягу

$$D = \frac{4 \cdot 8}{10^6} = 3,2 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}.$$

Як видно з розрахунку, величина  $D$  є малою, порівняно з  $B$ . Тому, при невеликих значеннях  $J \leq 10$ , поправкою  $DJ^2(J+1)^2$  можна знехтувати. Але при  $J > 10$  її вклад буде вже помітним. Рівні обертальної енергії при переході від жорсткого ротатора до нежорсткого при  $J > 10$  будуть знижуватись, що призведе до порушення еквідистантності ліній обертального спектра.

**Задача №3.** Розрахувати відношення кількості молекул кисню на обертальних рівнях  $J = 0$  та  $J = 1$ . Знайти, для

якого  $J$  заселеність обертального рівня буде максимальною при  $T = 300\text{ K}$ . Між'ядерна відстань для молекули  $O_2$  дорівнює  $r = 1,207\text{ Å}$ .

**Розв'язок:** В основному стані обертальна енергія дорівнює нулю ( $J = 0$ ). Нехай в цьому стані знаходиться  $N_0$  молекул. Тоді кількість молекул на збудженому рівні, згідно розподілу Больцмана, дорівнюватиме:

$$\frac{N_J}{N_0} = (2J+1) \exp\left(-\frac{hcBJ(J+1)}{kT}\right), \quad (3.1)$$

де  $B$  – обертальна стала,  $I = \mu r^2 = \frac{m_O}{2} r^2$  – момент інерції молекули кисню,  $(2J+1)$  – статистична вага рівня. Для  $J = 1$  формула (3.1) набуватиме вигляду

$$\frac{N_1}{N_0} = 3 \exp\left(-\frac{2Bhc}{kT}\right) = 3 \exp\left(-\frac{\hbar^2}{\mu r^2 kT}\right). \quad (3.2)$$

Підставивши числові значення в (3.2), знайдемо відношення кількості молекул на основному та першому збудженому обертових рівнях:

$$\begin{aligned} \frac{N_1}{N_0} &= 3 \cdot \exp\left(-\frac{1,05^2 \cdot 10^{-54}}{8 \cdot 1,66 \cdot 10^{-24} \cdot 1,207^2 \cdot 10^{-16} \cdot 1,38 \cdot 10^{-16} \cdot 300}\right) = \\ &= 3 \cdot \exp(-0,014) = 2,958. \end{aligned}$$

Знайдемо тепер число  $J$ , на якому заселеність рівня буде максимальною. Для цього необхідно дослідити функцію (3.1) на екстремум:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial J} &= 2 \exp\left(-\frac{hcBJ(J+1)}{kT}\right) - (2J+1)^2 \frac{hcB}{kT} \exp\left(-\frac{hcBJ(J+1)}{kT}\right) = 0 \\ \Rightarrow 2 \frac{kT}{hcB} &= (2J_{\max} + 1)^2 \Rightarrow J_{\max} = \sqrt{\frac{kT}{2hcB}} - \frac{1}{2} = \frac{r}{\hbar} \sqrt{kT\mu} - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Знайдемо  $J_{\max}$  при  $T = 300\text{ K}$ :

$$J_{\max} = \frac{1,207 \cdot 10^{-10}}{1,05 \cdot 10^{-34}} \sqrt{1,38 \cdot 3 \cdot 8 \cdot 1,66 \cdot 10^{-48}} - \frac{1}{2} \approx 8.$$

Графік залежності  $\frac{N_J}{N_0}$  від значення обертового квантового числа  $J$  для молекули кисню при  $T = 300\text{ K}$  зображено на рис.1

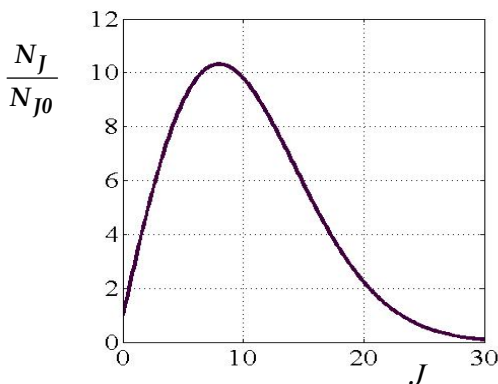


Рис. 1. Відносна кількість молекул кисню на збуджених обертових рівнях при  $T = 300\text{ K}$

### **Задачі для самостійної роботи**

1. Чому дорівнює обертова стала  $B$  (в  $eB$ ) для молекули  $H_2$ , якщо між'ядерна відстань дорівнює  $r = 0,741 \cdot 10^{-8}\text{ см}$ ?
2. Визначити між'ядерну відстань в молекулі  $HBr$ , якщо лінії її обертового спектра розділені інтервалом  $\Delta \tilde{\nu} = 17\text{ см}^{-1}$
3. Оцініть вплив ізотопічного ефекту на обертові спектри двохатомної молекули.
4. В чому полягають відмінності обертових спектрів для лінійних та нелінійних, гомоядерних та гетероядерних молекул?
5. Чи можливо спостерігати обертові спектри молекул в комбінаційному розсіюванні?

6. Визначити хвильові числа перших десяти ліній в обертальному спектрі поглинання молекули  ${}^1\text{H}^{19}\text{F}$ , якщо між'ядерна відстань  $r_0 = 0,917 \text{ \AA}$ .
7. Визначити середнє значення моменту інерції та рівноважну між'ядерну відстань для молекули  ${}^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ , якщо в обертальному спектрі перші одинадцять ліній мають такі значення хвильових чисел  $\tilde{\nu}$ : 3,845; 7,690; 11,534; 15,379; 19,222; 23,065; 26,907; 30,748; 34,588; 38,426; 42,263  $\text{cm}^{-1}$ .
8. Перша лінія обертального спектра молекули  ${}^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  має хвильове число  $\tilde{\nu}_1 = 3,84235 \text{ cm}^{-1}$ , а молекули  ${}^{13}\text{C}^{16}\text{O}$  –  $\tilde{\nu}_2 = 3,67337 \text{ cm}^{-1}$ . Розрахуйте обертальні сталі та масу атома  ${}^{13}\text{C}$ . Зміною між'ядерної відстані при заміщенні ізотопу  ${}^{12}\text{C}$  ізотопом  ${}^{13}\text{C}$  знехтувати.

### ***Коливальні спектри двохатомної молекули***

Пружна сила для двохатомних молекул при малих амплітудах описується рівнянням:

$$F = -k_e(r - r_e), \quad (9)$$

де  $F$  – сила взаємодії між атомами,  $k_e (H/\text{м})$  – силова константа,  $r_e$  – рівноважна між'ядерна відстань. Розв'язок рівняння Шредингера для гармонічного осцилятора дає такі значення енергії коливань:

$$E_{\text{кол}} = h\nu_0 \left( v + \frac{1}{2} \right), \quad (10)$$

де  $\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_e}{\mu}}$  – власна частота гармонічних коливань осцилятора,  $v$  – коливальне квантове число,  $\mu$  – зведена маса молекули. Формулу (10) можна записати через хвильове число  $\tilde{\nu}_0 = \frac{1}{\lambda_0}$ :

$$E_{\text{кол}} = hc\tilde{\nu}_0 \left( v + \frac{1}{2} \right). \quad (11)$$

(В інфрачервоній та мікрохвильовій спектроскопії частіше використовують хвильові числа).

При великих амплітудах коливань осцилятор вже не буде гармонічним. Потенціальна енергія взаємодії атомів буде записуватись потенціалом Морзе:

$$U_r = D_e \left( 1 - e^{-a(r-r_e)} \right)^2, \quad (12)$$

$D_e$  – енергія дисоціації молекули,  $D_e = \frac{hc\tilde{\nu}_0}{4x_e}$ ,  $a$  – константа,

$$a = \sqrt{\frac{8\pi^2 \mu \tilde{\nu}_0 c x_e}{h}}, \quad x_e \text{ – коефіцієнт ангармонічності. Коливаль-}$$

на енергія в такому випадку дорівнює

$$E_{\text{кол}} = hc\tilde{\nu}_0 \left( v + \frac{1}{2} \right) - hc\tilde{\nu}_0 x_e \left( v + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (13)$$

Енергія переходу між двома коливальними рівнями:

$$hc\tilde{\nu} = E_{\text{кол}, v_2} - E_{\text{кол}, v_1},$$

де  $\tilde{\nu}$  – хвильове число лінії поглинання в коливальному спектрі.

Для ангармонічного осцилятора правила відбору для коливального квантового числа  $v$  є наступними:  $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ , на відміну від гармонічного осцилятора, для якого  $\Delta v = \pm 1$ . Враховуючи правила відбору для числа  $v$ , з формули (13) одержимо значення хвильових чисел, що відповідають максимумам смуг поглинання:

$$\begin{aligned} \tilde{\nu}_1 &= \tilde{\nu}_0 - 2\tilde{\nu}_0 x_e \text{ – основний тон } (v = 0 \rightarrow v' = 1), \\ \tilde{\nu}_2 &= 2\tilde{\nu}_0 - 6\tilde{\nu}_0 x_e \text{ – перший обертон } (v = 0 \rightarrow v' = 2), \\ \tilde{\nu}_3 &= 3\tilde{\nu}_0 - 12\tilde{\nu}_0 x_e \text{ – другий обертон } (v = 0 \rightarrow v' = 3). \end{aligned} \quad (14)$$

Максимальне значення коливального числа знаходиться з умови  $\frac{dE_v}{dv} = 0$ :

$$hc\tilde{\nu}_0 - 2hc\tilde{\nu}_0x_e \left( v_{\max} + \frac{1}{2} \right) = 0 \Rightarrow v_{\max} + \frac{1}{2} = \frac{1}{2x_e}. \quad (15)$$

Підставивши (15) у (13), знайдемо максимальну енергію молекули:

$$E_{v_{\max}} = \frac{hc\tilde{\nu}_0}{4x_e}. \quad (16)$$

Для визначення енергії дисоціації молекули потрібно від максимальної енергії (16) відняти енергію при  $v = 0$  (від цього рівня робиться відлік значень енергії):

$$D = \frac{hc\tilde{\nu}_0}{4x_e} - \frac{hc\tilde{\nu}_0}{2} + \frac{hc\tilde{\nu}_0}{4}x_e = \frac{hc\tilde{\nu}_0}{4x_e}(1 - 2x_e + x_e^2) \Rightarrow$$

$$D = \frac{hc\tilde{\nu}_0}{4x_e}(1 - x_e)^2. \quad (17)$$

### **Коливально-обертальні спектри двохатомної молекули**

Якщо речовина знаходиться в газоподібному стані, то зі збудженням коливального руху одночасно збуджується й обертальний рух. В цьому випадку спостерігається коливально – обертальний спектр (для молекул з дипольним моментом). Енергія коливально – обертального руху дорівнює

$$E_{\text{кол-об}} = E_{\text{кол}} + hcB_v J(J+1),$$

де  $B_v$  – обертальна стала в стані з коливальним числом  $v$ .

Зміна енергії поглинання під час переходу  $v = 0 \rightarrow v' = 1$ ,  $J \rightarrow J'$  буде дорівнювати

$$\Delta E = \nu_0(1 - 2x_e) + hcB_v(J'(J'+1) - J(J+1)) \quad (18)$$

в наближенні, коли  $B_v = B_{v+1}$ .

Якщо виконується правило відбору по обертальному квантовому числу  $\Delta J = J' - J = +1$ , в коливально – обертальному спектрі з'являється  $R$ -гілка, значення хвильового числа першого обертона

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_0(1 - 2x_e) + 2B_v(J+1). \quad (19)$$

При  $\Delta J = -1$  в спектрі з'являється  $P$ -гілка, формула якої



$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_0(1 - 2x_e) - 2B_v J. \quad (20)$$

### **Методичні вказівки та поради**

Задачі з теми "Коливальні та коливально-обертальні спектри" досить об'ємні і вимагають уважного ознайомлення з теоретичним матеріалом. Типовими для цієї теми є задачі 4,5,6.

### **Приклади розв'язування задач**

**Задача №4.** У спектрі поглинання молекул  $FBr$  було зафіксовано основну інтенсивну смугу поглинання з  $\tilde{\nu}_1 = 663,6 \cdot 10^2 \text{ м}^{-1}$  та перший обертон з  $\tilde{\nu}_2 = 1318 \cdot 10^2 \text{ м}^{-1}$ . З цих експериментальних даних визначити власну частоту  $\tilde{\nu}_0$  коливань атомів в молекулі в гармонічному наближенні та коефіцієнт ангармонічності  $x_e$ .

**Розв'язок:** Згідно формули (14), для хвильових чисел основного тону та першого обертону

$$\tilde{\nu}_1 = \tilde{\nu}_0 - 2\tilde{\nu}_0 x_e, \quad (4.1)$$

$$\tilde{\nu}_2 = 2\tilde{\nu}_0 - 6\tilde{\nu}_0 x_e. \quad (4.2)$$

Помножимо рівняння (4.1) на 3 та віднімемо від нього рівняння (4.2). Отримаємо для власної частоти коливань атомів:

$$\tilde{\nu}_0 = 3\tilde{\nu}_1 - \tilde{\nu}_2.$$

Підставивши це значення в (4.1), знайдемо коефіцієнт ангармонічності

$$x_e = \frac{\tilde{\nu}_0 - \tilde{\nu}_1}{2\tilde{\nu}_0} = \frac{2\tilde{\nu}_1 - \tilde{\nu}_2}{6\tilde{\nu}_1 - 2\tilde{\nu}_2}.$$

Використовуючи дані з умови задачі, отримаємо числові значення:

$$\tilde{\nu}_0 = (3 \cdot 663,6 - 1318) \cdot 10^2 = 672,8 \cdot 10^2 \text{ м}^{-1},$$

$$x_e = \frac{2 \cdot 663,6 - 1318}{6 \cdot 663,6 - 2 \cdot 1318} = 6,84 \cdot 10^{-3}.$$

**Задача №5.** Використовуючи розв'язок попередньої задачі, для молекули  $FBr$  визначити:

- 1) максимальне коливальне число  $\nu_{\max}$ ;
- 2) енергію молекули на нижньому коливальному рівні;
- 3) енергію молекули на максимальному коливальному рівні
- 4) енергію дисоціації;
- 5) енергію хімічного зв'язку  $A$  ( $\text{Дж} \cdot \text{моль}^{-1}$ );
- 6) побудувати графік залежності енергії коливального руху від коливального квантового числа;
- 7) оцінити вплив ангармонічності на енергію коливального руху атомів в молекулі на коливальних рівнях  $\nu = 0, 1, 2, 3, 8, 20, 30, 72$ .
- 8) визначити відносну кількість молекул, що знаходяться на коливальних рівнях  $\nu = 0$  та  $\nu = 1$  при  $T_1 = 300\text{K}$ ,  $T_2 = 1000\text{K}$ .

**Розв'язок: 1)** Врахуємо, що, згідно (15),  $\nu_{\max} + \frac{1}{2} = \frac{1}{2x_e}$ . Використовуючи значення коефіцієнту ангармонічності з попередньої задачі, отримаємо

$$\nu_{\max} = \left[ \frac{1}{2x_e} - \frac{1}{2} \right] = \left[ \frac{10^3}{2 \cdot 6,84} - \frac{1}{2} \right] = [72,6] = 72,$$

оскільки коливальне число може набувати лише цілих значень.

**2) Енергія коливального руху**

$$E_{\text{кол}} = hc\tilde{\nu}_0 \left( \nu + \frac{1}{2} \right) - hc\tilde{\nu}_0 x_e \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (5.1)$$

Взявши значення  $\tilde{\nu}_0 = 672,8 \cdot 10^2 \text{ м}^{-1}$  для молекули  $FBr$  і підставивши  $\nu = 0$ , з (5.1) отримаємо енергію нульового коливального рівня

$$E_0 = \frac{hc\tilde{\nu}_0}{2} \left( 1 - \frac{1}{2} x_e \right) \Rightarrow$$

$$E_0 = \frac{1,24 \cdot 10^{-4} \text{ eB} \cdot \text{см} \cdot 672,8 \text{ см}^{-1}}{2} \left( 1 - \frac{6,84 \cdot 10^{-3}}{2} \right) \approx 0,042 \text{ eB}.$$

**3)** Для знаходження максимальної коливальної енергії використаємо формулу (16)

$$E_{\text{vmax}} = \frac{hc\tilde{\nu}_0}{4x_e}.$$

Підставляючи числові значення, отримаємо

$$E_{\text{max}} = \frac{1,24 \cdot 10^{-4} \cdot 672,8}{4 \cdot 6,84 \cdot 10^{-3}} = 3,05 \text{ eB}.$$

**4)** Енергія дисоціації  $D = E_{\text{max}} - E_0 = 3,05 - 0,042 \approx 3,01 \text{ eB}$ .

**5)** Енергія хімічного зв'язку дорівнює добутку енергії дисоціації на число Авогадро:

$$\begin{aligned} A = D \cdot N_A &= 3,01 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \cdot 6,023 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1} = \\ &= 290,1 \cdot 10^3 \text{ Дж} / \text{моль} \approx 290 \text{ кДж} / \text{моль} \end{aligned}$$

**6)** Використаємо формулу (5.1), підставивши значення  $\tilde{\nu}_0$  та  $x_e$ . Отримаємо функцію

$$\begin{aligned} E(\text{eB}) &= 0,083 \left( v + \frac{1}{2} - \right. \\ &\quad \left. - 6,84 \cdot 10^{-3} \left( v + \frac{1}{2} \right)^2 \right). \end{aligned}$$

Графік функції  $E(v)$  зображено на рис. 2.

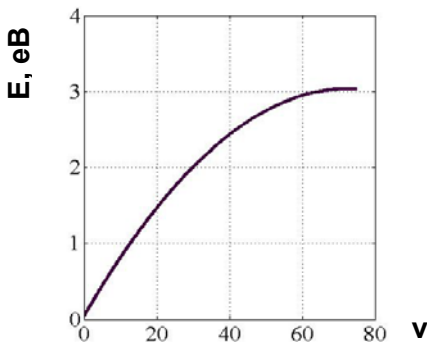


Рис. 2. Графік залежності енергії коливального руху молекули  $FBr$  від коливального квантового числа

**7)** Зі збільшенням квантового числа  $v$  вклад ангармонічності зростає. На пер-

ших рівнях ( $v = 0, 1, 2$ ) цей вклад є незначним. Результати обрахунку для різних значень квантового числа  $v$  зведемо у таблицю 1.

8) Кількість молекул на нульовому коливальному рівні дорівнює  $N_0$ . Кількість молекул на першому коливальному рівні

$$N_{v=1} = N_0 e^{-\frac{E_1 - E_0}{kT}} \Rightarrow \frac{N_{v=1}}{N_0} = e^{-\frac{E_1 - E_0}{kT}}. \quad (5.2)$$

Таблиця 1

$v$	$hc\tilde{\nu}_0 \left( v + \frac{1}{2} \right) \times 10^{-3}, eB$	$hc\tilde{\nu}_0 x_e \left( v + \frac{1}{2} \right)^2 \times 10^{-3}, eB$	$E \cdot 10^{-3}, eB$
0	41,7	0,143	41,56
1	125,1	1,283	123,82
2	208,5	3,563	204,94
3	291,9	6,983	284,92
8	708,9	41,183	667,72
20	1709,7	239,543	1470,16
30	2543,7	530,243	2013,46
72	6046,5	2996,063	3050,44

Енергії коливальних рівнів з  $v = 1$  та  $v = 0$ :

$$E_1 = hc\tilde{\nu}_0 \left( \frac{3}{2} - \frac{9}{4} \cdot x_e \right) = 0,083(1,5 - 0,015) = 0,123 eB,$$

$$E_0 = hc\tilde{\nu}_0 \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \cdot x_e \right) = 0,083(0,5 - 0,015) = 0,042 eB.$$

При  $T = 300K$  енергія теплових коливань становить  $kT_1 = 0,862 \cdot 10^{-4} eB/K \cdot 300 K = 0,0259 eB$ , а при  $T_2 = 1000K$   $kT_2 = 0,0862 eB$ . Підставляючи ці значення в (5.2), знаходимо відносну кількість молекул в коливальних станах з  $v = 0$  та  $v = 1$  при  $T = 300K$ :

$$\frac{N_{v=1}}{N_0} = \exp\left(-\frac{0,081}{0,026}\right) = 0,044$$

та при  $T = 1000K$  :

$$\frac{N_{v=1}}{N_0} = \exp\left(-\frac{0,081}{0,0862}\right) = 0,391.$$

**Задача №6.** Визначити молярну коливальну теплоємність  $C_v$  газу, що складається з молекул  $HCl$  при  $T = 800K$ , якщо власна частота гармонічних коливань молекули  $\tilde{\nu}_0 = 2989,7 \text{ см}^{-1}$  (хвильове число). Примітка:  $hc = 1,24 \cdot 10^{-4} \text{ eB} \cdot \text{см}$ ,  $k = 0,862 \cdot 10^{-4} \text{ eB} / K$ .

**Розв'язок:** Молекула  $HCl$  є лінійною. Вона має один коливальний ступінь вільності ( $3N - 5 = 3 \cdot 2 - 5 = 1$ ). Розглянемо молекулу  $HCl$  як осцилятор, який коливається з частотою  $\nu_0$ .

Згідно теорії Планка, середня енергія осцилятора дорівнює

$$\bar{E} = \frac{h\nu_0}{2} + \frac{h\nu_0}{e^{\frac{h\nu_0}{kT}} - 1}.$$

Середня енергія одного молю  $E_v = N_A \bar{E}$ . Молярну теплоємність знайдемо так:

$$C_v = \frac{\partial E_v}{\partial T} = \frac{N_A \cdot k \cdot \left(\frac{h\nu_0}{kT}\right)^2 \cdot e^{\frac{h\nu_0}{kT}}}{\left[e^{\frac{h\nu_0}{kT}} - 1\right]^2}, \text{ або}$$

$$C_v = \frac{R \cdot Z^2 \cdot e^Z}{(e^Z - 1)^2}, \quad (6.1)$$

де  $Z = \frac{h\nu_0}{kT} = \frac{hc\tilde{\nu}_0}{kT}$ ,  $R = N_A k = 8,314 \text{ Дж} \cdot K^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$  – універсальна газова стала. Використовуючи дані з умови задачі, знайдемо

$$Z = \frac{1,24 \cdot 10^{-4} \cdot 2989,7}{0,862 \cdot 10^{-4} \cdot 800} = 5,38.$$

Підставивши це значення в (6.1), визначимо молярну теплоємність

$$C_V = \frac{8,314 \cdot 5,38^2 \cdot e^{5,38}}{(e^{5,38} - 1)^2} = 1,12 \text{ Дж}/(K \cdot \text{моль}).$$

### **Задачі для самостійної роботи**

9. Знайдіть коефіцієнт квазіпружної сили для молекул  $H_2$  та  $CO$ , якщо їх власні хвильові числа коливань дорівнюють  $\tilde{\nu}_1 = 4395,2 \text{ см}^{-1}$ ,  $\tilde{\nu}_2 = 2309,5 \text{ см}^{-1}$ .
10. Як можна графічно знайти енергію дисоціації молекули, якщо відома залежність енергії переходу між сусідніми коливальними рівнями від коливального числа  $\nu$ ?
11. Частота власних коливань молекули  $Cl_2$   $\tilde{\nu} = 564,9 \text{ см}^{-1}$ , відстань між ядрами  $r = 1,99 \text{ \AA}$ . До якого обертового числа потрібно збудити молекулу, щоб її обертова енергія дорівнювала коливальній енергії на першому збудженому рівні, якщо відомо, що хвильове число  $\tilde{\nu} = 564,9 \text{ см}^{-1}$  відповідає першому переходу, а  $x_e \tilde{\nu} = 4 \text{ см}^{-1}$ , де  $x_e$  – коефіцієнт ангармонічності.
12. Знайдіть величину максимальної коливальної енергії двохатомної молекули, власна частота коливань якої  $\omega_0$ , а коефіцієнт ангармонічності  $x_e$ .
13. Яка енергія дисоціації молекули водню, якщо частота її коливань в основному стані дорівнює  $1,32 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ , а стала ангармонізму  $x_e = 0,0285$ .
14. Визначте силову константу  $k(H/m)$  для молекули  $HF$ , якщо власна частота  $\tilde{\nu}_0 = 4,141 \cdot 10^5 \text{ м}^{-1}$ .
15. Визначте відхилення від рівноважної відстані  $r - r_0$  для

молекули  $HBr$  на коливальних квантових рівнях  $v = 0, v = 5, v = 20$ .

16. Знайдіть хвильові числа смуг поглинання в колиально-обертальному спектрі молекули  $^{19}F^{79}Br$  для  $R$  та  $P$  гілок, якщо  $\tilde{\nu}_0 = 672,6 \cdot 10^2 \text{ м}^{-1}$ ,  $\tilde{\nu}_0 x_e = 450 \text{ м}^{-1}$ ,  $B = 0,714 \cdot 10^2 \text{ м}^{-1}$ .
17. Знайдіть молярну колиальну теплоємність для молекули  $H_2$  при  $T = 1000^\circ C$ . Власна частота коливань цієї молекули  $\tilde{\nu}_0 = 4395,2 \text{ см}^{-1}$ .
18. Визначте максимальне колиальне квантове число, енергію коливань на нульовому та максимальному квантових рівнях для молекули  $^1H^{19}F$ .
19. Знайдіть енергію коливань на нульовому та першому коливальних квантових рівнях для молекули  $^1H^{35}Cl$ , якщо  $\tilde{\nu}_0 = 2990,95 \text{ см}^{-1}$ ,  $\tilde{\nu}_0 x_e = 52,82 \text{ см}^{-1}$ .

### Систематика молекулярних термів

Стан електрона в двохатомній молекулі характеризується чотирма квантовими числами  $n, l, \lambda, m_s(\sigma)$ .  $n$  – головне квантове число,  $l$  – орбітальне квантове число,  $m_s$  – магнітне спінове квантове число електрона,  $\lambda$  – квантове число, яке характеризує проекцію орбітального моменту електрона на вісь двохатомної молекули, яка з'єднує ядра (вісь симетрії електричного поля в молекулі). Це число набуває тільки позитивних значень.

Електрони, що мають значення  $\lambda = 0, 1, 2, 3$  називаються  $\sigma$ -,  $\pi$ -,  $\delta$ -,  $\phi$ -електронами, відповідно. Якщо електронна оболонка утворена декількома електронами, вводиться сумарне квантове число  $\Lambda$ , яке дорівнює сумі квантових чисел  $\lambda_i$ :

$$\Lambda = \sum_i \lambda_i.$$

Терми молекули позначаються буквами  $\Sigma, \Pi, \Delta$ , які

відповідають значенням  $\Lambda = 0, 1, 2$ . Повну проекцію спінових моментів характеризує число  $\Sigma$ , яке дорівнює  $\Sigma = \sum_i m_{si}$ .

Мультиплетність терму молекули дорівнює  $2\Sigma+1$ , де  $\Sigma$  – сумарне спінове число електронів. Повна сума проєкцій всіх моментів (орбітальних та спінових) визначається за допомогою квантового числа  $\Omega$ , яке дорівнює  $\Omega = \Lambda + \Sigma, \Lambda + \Sigma - 1, \dots, \Lambda - \Sigma$ , причому  $\Omega$  може набувати й від’ємних значень. Правила відбору для квантових чисел при дипольних переходах мають наступний вигляд:

$$\Delta\Sigma = 0; \Delta\Lambda = 0, \pm 1; \Delta\Omega = 0, \pm 1.$$

Терми молекули позначаються аналогічно до атомних термів в моделі  $L-S$  зв’язку:

$$^{2\Sigma+1}\Lambda_{\Omega}.$$

Стани з  $\lambda_i = 0$  є не виродженими, стани з  $\lambda_i \neq 0$  – двократно вироджені, оскільки енергія молекули не залежить від знаку проєкції орбітального моменту на вісь молекули.

### ***Електронно-коливальні спектри двохатомних молекул***

Під час переходу між двома електронними енергетичними станами змінюється одночасно коливальна та оберտальна енергії молекули. Повна зміна енергії під час такого переходу в першому наближенні, (коли має місце адитивність трьох видів енергії), дорівнює

$$\Delta E = \Delta E_{el} + \Delta E_{кол} + \Delta E_{об}.$$

Кожен перехід між двома електронними термами характеризується певною коливальною структурою, яка складається зі смуг, причому кожна смуга має певну обертальну структуру.

Розглянемо коливальну структуру двох електронних термів (основного та збудженого). Для основного стану

$$E_{кол} = \nu_e \left( v + \frac{1}{2} \right) - x_e \nu_e \left( v + \frac{1}{2} \right)^2.$$

Для збудженого стану

$$E'_{кол} = \nu'_e \left( v' + \frac{1}{2} \right) - x'_e \nu'_e \left( v' + \frac{1}{2} \right)^2.$$

Значення власних частот та констант ангармонізму для різних електронних рівнів не співпадають:  $\nu_e \neq \nu'_e$ ,  $x'_e \neq x_e$ .



Як правило, в збудженому стані  $\nu'_e < \nu_e$ , що пов'язано зі зменшенням сили хімічного зв'язку. Обмеження на зміну коливального квантового числа  $\nu$  немає, тому комбінувати можуть будь-які коливальні рівні. Повна система коливальних смуг для заданого електронного переходу одержується, якщо змінювати як  $\nu'_e$ , так і  $\nu_e$ . Можливі переходи запишемо у вигляді таблиці, де стовпці відповідають квантовому числу  $\nu_e$ , а ряди – квантовому числу  $\nu'_e$ .

$\nu \backslash \nu'$	0	1	2	3	...
0	$\nu_{00}$	$\nu_{10}$	$\nu_{20}$	$\nu_{30}$	
1	$\nu_{01}$	$\nu_{11}$	$\nu_{21}$	$\nu_{31}$	
2	$\nu_{02}$	$\nu_{12}$	$\nu_{22}$	$\nu_{32}$	
3	$\nu_{03}$	$\nu_{13}$	$\nu_{23}$	$\nu_{33}$	
...					

Таку схему називають схемою Деландра (див. рис.3). Тут  $^1\Sigma$  та  $^1\Pi$  – основний та збуджений електронні стани молекули, відповідно.

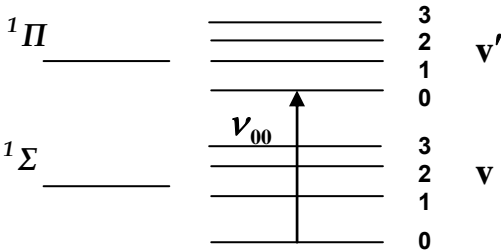


Рис. 3. Коливальна структура основного та збудженого електронних рівнів молекули.  $\nu_{00}$  – частота чисто електронного переходу

## **Обертальна структура електронно-коливальних спектрів**

Якщо одночасно змінюються всі три складові енергії молекули: електронна, коливальна та обертальна, то частота світла, що випромінюється під час переходу між двома електронними рівнями, буде дорівнювати ( в  $\text{см}^{-1}$  )

$$\nu = \frac{1}{hc} (\Delta E_{el} + \Delta E_{кол} + \Delta E_{об}).$$

Введемо позначення  $\frac{\Delta E_{el} + \Delta E_{кол}}{hc} = \nu_e + \nu_k = \nu_0$ , тоді формула для обертальної структури електронно-коливального переходу запишеться так:

$$\nu = \nu_0 + \frac{\Delta E_{об}}{hc}.$$

Враховуючи, що обертальні сталі  $B$  та  $B'$  в різних електронних станах будуть різними, вираз для частоти електронного переходу запишеться так:

$$\nu = \nu_0 + B'J'(J'+1) - BJ(J+1), \quad (19)$$

де  $B', J'$  – обертальна стала та обертальне квантове число для збудженого (верхнього) рівня, а  $B, J$  – відповідно, для незбудженого (нижнього).

Правила відбору для обертального квантового числа  $J$ :  $\Delta J = 0, \pm 1$ ,  $J' = 0 \nrightarrow J = 0$  для двохатомних молекул. В спектрах електронно-коливальних переходів буде спостерігатись обертальна структура, яка призводить до появи смугастих спектрів. При цьому в електронному спектрі з'являються три гілки коливально-обертального спектра:  $R$ -гілка ( $\Delta J = J' - J = +1$ ),  $P$ -гілка ( $\Delta J = J' - J = -1$ ) та  $Q$ -гілка ( $\Delta J = 0$ ). Якщо знехтувати ангармонізмом, частоти  $R, P$ - та  $Q$ -гілок визначатимуться формулами:

$$R(\Delta J = 1): \nu = \nu_0 + 2B' + (3B' - B)J + (B' - B)J^2; J = 0, 1, 2, \dots \quad (20)$$

$$P(\Delta J = -1): \nu = \nu_0 - (B' + B)J + (B' - B)J^2; J = 1, 2, 3, \dots \quad (21)$$

$$Q(\Delta J = 0): \nu = \nu_0 + (B' - B)J(J+1); J = 0, 1, 2, \dots \quad (22)$$

### ***Методичні вказівки та поради***

Задачі з теми „Електронні спектри молекул” поділяються на три типи:

- 1) визначення електронних станів двохатомної молекули та визначення термів (задачі №7,8,9);
- 2) розрахунок енергії дисоціації в основному та збудженому електронних станах (задача №10);
- 3) розрахунок параметрів молекули за даними електронно–коливально–обертальних спектрів (задачі №11,12).

### ***Приклади розв’язування задач***

**Задача №7. Визначити максимальну кількість еквівалентних електронів в  $\sigma, \pi, \delta$ -оболонках молекули, використовуючи принцип Паулі.**

**Розв’язок:** Квантові числа для  $\sigma$  – електронів:  $l = 0, m_l = 0, \lambda = 0, m_s = \pm \frac{1}{2}$ , тобто на  $\sigma$ -оболонці може знаходитись тільки два електрони, отже, маємо  $\sigma^2$ -конфігурацію. Для  $\pi$ -електронів  $\lambda_i = \pm 1, m_s = \pm \frac{1}{2}$ , і кількість електронів у цьому випадку дорівнює 4, тобто конфігурація  $\pi^4$ . Аналогічно, для  $\delta$ -електронів існують стани з  $\lambda_i = \pm 2$  і конфігурація запишеться як  $\delta^4$ . Таким чином, в молекулі на оболонці не може бути більше, ніж чотири електрони.

**Задача №8. Знайти можливі електронні стани молекули, якщо вона має наступні електронні конфігурації:**

- а) два нееквівалентних  $\sigma$ -електрони;
- б) два нееквівалентних  $\pi$ -електрони;
- в) два еквівалентних  $\pi$ -електрони;
- г) один  $\sigma$ - та один  $\pi$ -електрон.

**Розв'язок:** Розпишемо квантові числа в кожному випадку:

$$\text{а) } \lambda_1 = \lambda_2 = 0 \Rightarrow \Lambda = 0; m_{s1} = m_{s2} = \pm \frac{1}{2} \Rightarrow \Sigma = 1, 0.$$

Отримаємо набір термів:  $^1\Sigma, ^3\Sigma$  (в даному випадку квантове число  $\Omega$  не вказується, оскільки  $\Lambda = 0 \Rightarrow \Omega = \Sigma$ );

б)  $\lambda_1 = \lambda_2 = 1 \Rightarrow \Lambda = 2, 0; \Sigma = 1, 0$ . Набір термів в цьому випадку буде таким:  $^1\Sigma, ^3\Sigma, ^1\Delta_2, ^3\Delta_{3,2,1}$ ;

в)  $\lambda_1 = \lambda_2 = 1 \Rightarrow \Lambda = 2, 0; \Sigma = 1, 0$ . Отримаємо терми  $^1\Sigma, ^3\Sigma, ^1\Delta_2$ . Терм  $^3\Delta_{3,2,1}$  не реалізується згідно принципу Паулі;

г)  $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 1 \Rightarrow \Lambda = 1, m_{s1} = m_{s2} = \pm \frac{1}{2} \Rightarrow \Sigma = 1, 0$ . Маємо терми  $^1\Pi, ^3\Pi$ .

**Задача №9.** Визначити терми молекули  $OH$ , яка формується з кисню ( $^3P$ ), та водню ( $^2S$ ), що знаходяться в основному стані.

**Розв'язок:** У цьому випадку для кисню квантові числа мають наступні значення:  $l_1 = 1, s_1 = 1, \lambda_1 = 1, 0$ . Для водню

$l_2 = 0, s_2 = \frac{1}{2}, \lambda_2 = 0$ . Знайдемо тепер сумарні квантові числа:

$S = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ ;  $\Lambda = 1, 0$ . Терми для молекули  $OH$  будуть такими:

$$^2\Sigma, ^4\Sigma, ^2\Pi_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}}, ^4\Pi_{\frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}.$$

**Задача №10.** Для молекули йоду ( $I_2$ ) частота чисто електронного переходу дорівнює  $\tilde{\nu}_{0-0} = 15979 \text{ см}^{-1}$ . Гранична частота, при якій електронно-коливальний спектр переходить до суцільного, становить  $\tilde{\nu}_{zp} = 19840 \text{ см}^{-1}$ . У збудженому електронному стані молекула  $I_2$  дисоціює на

атоми  $I$ , які знаходяться в станах  $^2P_{\frac{3}{2}}$  (основний стан) та  $^2P_{\frac{1}{2}}$  (збуджений стан). Довжина хвилі переходу  $^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow ^2P_{\frac{3}{2}}$   $\lambda = 1,315 \text{ мкм}$ . З цих даних визначити енергію дисоціації молекули  $I_2$  в основному та в збудженому електронному станах (рис.4).

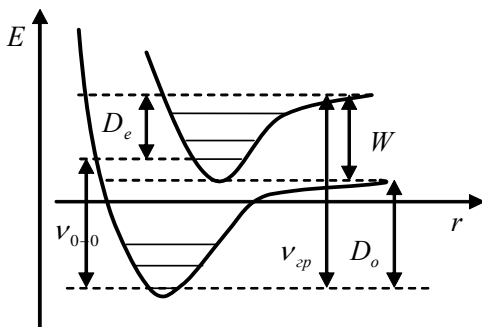


Рис. 4. Потенціальна енергія молекули  $I_2$  в основному та збудженому електронних станах

**Розв'язок:** Згідно рис. 4, енергія дисоціації в збудженому електронному стані дорівнює

$$D_e = hc(\tilde{\nu}_{zp} - \tilde{\nu}_{0-0}).$$

Числове значення знайдемо, підставивши дані:

$$D_e = 1,24 \cdot 10^{-4} (19840 - 15979) \approx 0,48 \text{ eV}.$$

Розрахуємо енергію продуктів дисоціації:

$$W = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1,24 \cdot 10^{-4} \text{ eV} \cdot \text{см}}{1,315 \cdot 10^{-4} \text{ см}} = 0,94 \text{ eV}.$$

Енергія дисоціації в основному стані дорівнює

$$D_0 = hc\tilde{\nu}_{zp} - W = 1,24 \cdot 10^{-4} \cdot 19840 - 0,94 = 1,52 \text{ eV}.$$

**Задача №11.** Використовуючи схему Деландра, визначити, які частоти будуть спостерігатись в спектрах поглинання, а які – в спектрах люмінесценції під час збудження джерелом з суцільним спектром та монохроматичним світлом.

**Розв'язок:** Спектр поглинання буде відповідати переходам з  $\nu$  на  $\nu'$ . При низьких температурах це будуть переходи з  $\nu=0$  на  $\nu'=0,1,2,\dots$ , тобто ці частоти відповідають першому

стовпчику в схемі Деландра (поперечна серія Деландра). При  $kT \approx h\nu_{\text{кол}}$  можуть спостерігатись лінії 2,3,... стовпчиків.

При збудженні молекул широким спектром (в смузі частот, в якій знаходиться спектр поглинання молекули), випромінювання, як правило, буде спостерігатись з нижніх рівнів стану  $^1\Pi$  на всі можливі рівні стану  $^1\Sigma$  (див. рис.3), оскільки у збудженому стані  $^1\Pi$  відбувається безвипромінювальна релаксація молекули на нижні коливальні рівні. Ці частоти відповідають рядам у схемі Деландра (повздовжні серії Деландра).

При збудженні монохроматичним світлом в конденсованих станах при низьких температурах можна спостерігати так звану „гарячу” люмінесценцію, тобто випромінювання зі стану  $v' > 1$  на нижні стани  $v$  основного електронного стану.

**Задача №12.** Побудувати залежність  $\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0 = f(J)$  для  $P, Q$  - та  $R$  -гілок електронно-коливального спектра, якщо оберտальна стала для молекули в основному стані  $B = 2 \text{ см}^{-1}$ , а  $B'$  менше за  $B$  на 10%, тобто хімічний зв'язок в молекулі при електронному збудженні послаблюється. Як зміниться залежність  $\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0 = f(J)$ , якщо  $B' > B$ ?

**Розв'язок:** Знаходимо значення обертальної сталої на збудженому електронному рівні:  $B' = 0,9 \cdot B = 1,8 \text{ см}^{-1}$ .

Враховуючи значення  $B$  та  $B'$ , згідно формул (20) – (22) отримаємо рівняння для  $R, P, Q$  -гілок:

$$(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0)_R (\text{см}^{-1}) = 3,6 + 3,4J - 0,2J^2$$

$$(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0)_P (\text{см}^{-1}) = -0,2J^2 - 3,8J$$

$$(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0)_Q (\text{см}^{-1}) = -0,2J(J+1)$$

Графік залежності  $\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0 = f(J)$  зображено на рис.5.

У випадку, коли  $B' > B$ , значення  $B' = 2,2 \text{ см}^{-1}$  і рівняння для  $P, Q$  - та  $R$  -гілок мають вигляд:

$$(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0)_R = 4,4 + 4,6J + 0,2J^2,$$

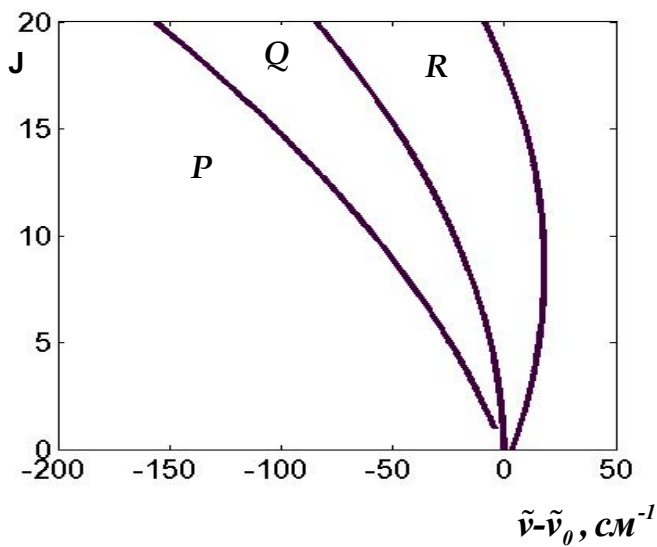


Рис. 5.  $P, Q, R$ -гілки електронно-коливального спектра,  $B' < B$

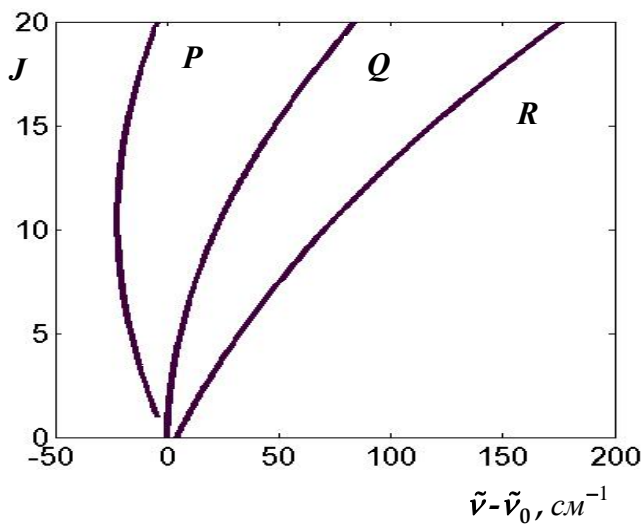


Рис. 6.  $P, Q, R$ -гілки електронно-коливального спектра,  $B' > B$

$$(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0)_P = -4, 2J + 0, 2J^2,$$

$$(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0)_Q = 0, 2J(J + 1).$$

Графік залежності  $\nu - \nu_0 = f(J)$  для такого випадку зображено на рис. 6. Зауважимо, що для  $R$ - та  $Q$ -гілок квантове число  $J$  набуває значень  $J = 0, 1, 2, \dots$ , а для  $P$ -гілки —  $J = 1, 2, 3, \dots$ , оскільки при  $\Delta J = -1$  першим у цій гілці буде перехід  $J = 1 \rightarrow J' = 0$ , де  $J, J'$  — обертальні квантові числа, відповідно, нижнього та верхнього коливального станів. У спектрі  $Q$ -гілки для двохатомних молекул не буде спостерігатись лінія, що відповідає переходу  $J = 0 \rightarrow J' = 0$ .

### **Задачі для самостійної роботи**

- 22.** В електронному спектрі поглинання молекули  $O_2$  коливальна структура переходить в суцільний спектр при  $\tilde{\nu} = 56876 \text{ см}^{-1}$ . У верхньому електронному стані молекула дисоціює на не збуджений та збуджений атоми кисню. Енергія збудження атома кисню складає  $\tilde{\nu}_{зб} = 15675 \text{ см}^{-1}$ . Оцінити енергію дисоціації молекули  $O_2$  в основному стані. Значення виразити в  $eV$ .
- 23.** За допомогою принципу Паулі знайти максимальне число електронів на  $\sigma, \pi, \delta$ -оболонках молекули.
- 24.** Які молекулярні терми утворюються в молекулі водню, якщо вона складається: а) з двох атомів, що знаходяться в  $1s$  стані; б) з атомів у  $1s$  та  $2p$  станах?
- 25.** Визначити терми у випадку двох еквівалентних  $\sigma^2$ -електронів та двох нееквівалентних  $\sigma\sigma$ -електронів.
- 26.** Визначити терми гомоядерної молекули, що відповідає  $\pi - \pi$  конфігурації для двох випадків: нееквівалентних  $\pi\pi$ - та еквівалентних  $\pi^2$ -електронів.
- 27.** Визначити можливі типи електронних термів молекули  $OH$ , якщо основним термом кисню є  $^3P_2$ , а водню —  $^2S_{\frac{1}{2}}$ .



**Значення фундаментальних фізичних сталих**

**Універсальні сталі**

Швидкість світла у вакуумі

$$c = 2,99792458 \cdot 10^{10} \text{ см} \cdot \text{с}^{-1} = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$$

Гравітаційна стала

$$G = 6,67259 \cdot 10^{-8} \text{ дин} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{г}^{-2} = 6,67259 \cdot 10^{-11} \text{ Н} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{кг}^{-2}$$

Стала Планка

$$h = 6,6260755 \cdot 10^{-27} \text{ ерг} \cdot \text{с} = 6,6260755 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} = \\ = 4,1356692 \cdot 10^{-15} \text{ еВ} \cdot \text{с}$$

Приведена стала Планка

$$\hbar = 1,0545726 \cdot 10^{-27} \text{ ерг} \cdot \text{с} = 1,0545726 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} = \\ = 6,5821220 \cdot 10^{-16} \text{ еВ} \cdot \text{с}$$

**Фізико-хімічні сталі**

Стала Авогадро

$$N_A = 6,0221367 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$$

Атомна одиниця маси

$$1 \text{ а.о.м.} = 1,6605402 \cdot 10^{-24} \text{ г} = 1,6605402 \cdot 10^{-27} \text{ кг} \\ (931,49432 \text{ Мев})$$

Універсальна газова стала

$$R = 8,314510 \cdot 10^7 \text{ ерг} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{К}^{-1} = 8,314510 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$$

Стала Больцмана

$$k = 1,380658 \cdot 10^{16} \text{ ерг} \cdot \text{К}^{-1} = 1,380658 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1}$$

Стала Стефана-Больцмана

$$\sigma = 5,67051 \cdot 10^{-5} \text{ ерг} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{К}^{-4} = 5,67051 \cdot 10^{-8} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-4}$$

**Електромагнітні сталі**

Елементарний заряд

$$e = 4,80319199 \cdot 10^{-10} \text{ од. СГСЕ} = 1,60217733 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$$

Стала Фарадея

$$F = 28931,127 \cdot 10^{10} \text{ од. СГСЕ} \cdot \text{моль}^{-1} = 96485,309 \text{ Кл} \cdot \text{моль}^{-1}$$

Електрична стала

$$\epsilon_0 = 8,854187817 \cdot 10^{-12} \text{ Ф} \cdot \text{м}^{-1}; \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8,9875518 \cdot 10^9 \text{ м} \cdot \text{Ф}^{-1}$$

Магнітна стала

$$\mu_0 = 12,5663706 \cdot 10^{-7} \text{ Гн} \cdot \text{м}^{-1}; \frac{\mu_0}{4\pi} = 10^{-7} \text{ Гн} \cdot \text{м}^{-1}$$

### **Атомні сталі**

Перший борівський радіус

$$a_0 = 0,529177249 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 0,529177249 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

Стала Рідберга

$$R_\infty = 1,0973731 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1} = 1,0973731 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1} = 13,6056981 \text{ eВ}$$

Стала тонкої структури

$$\alpha = 7,29735308 \cdot 10^{-3} = \frac{1}{137,0359895}$$

Магнетон Бора

$$\begin{aligned} \mu_B &= 9,2740154 \cdot 10^{-21} \text{ ерг} \cdot \text{Гс}^{-1} = 9,2740154 \cdot 10^{-24} \text{ Дж} \cdot \text{Тл}^{-1} = \\ &= 5,78838263 \cdot 10^{-9} \text{ eВ} \cdot \text{Гс}^{-1} = 5,78838263 \cdot 10^{-5} \text{ eВ} \cdot \text{Тл}^{-1} \end{aligned}$$

Ядерний магнетон

$$\begin{aligned} \mu_N &= 5,0507866 \cdot 10^{-24} \text{ ерг} \cdot \text{Гс}^{-1} = 5,0507866 \cdot 10^{-27} \text{ Дж} \cdot \text{Тл}^{-1} = \\ &= 3,15245166 \cdot 10^{-12} \text{ eВ} \cdot \text{Гс}^{-1} = 3,15245166 \cdot 10^{-8} \text{ eВ} \cdot \text{Тл}^{-1} \end{aligned}$$

### **Електрон**

Маса спокою

$$\begin{aligned} m_e &= 9,1093897 \cdot 10^{-28} \text{ г} = 9,1093897 \cdot 10^{-31} \text{ кг} = \\ &= 5,48579903 \cdot 10^{-4} \text{ а.о.м.} \end{aligned}$$

Енергія спокою

$$E_{e0} = 8,1871111 \cdot 10^{-7} \text{ ерг} = 8,1871111 \cdot 10^{-14} \text{ Дж} =$$

$$= 0,51099906 \text{ MeV}$$

Питомий заряд

$$-\frac{e}{m_e} = -5,2727923 \cdot 10^{17} \text{ од. CGSE} \cdot \text{с}^{-1} =$$

$$= -1,75881962 \cdot 10^{11} \text{ Кл} \cdot \text{кг}^{-1}$$

Класичний радіус електрона

$$r_e = 2,81794092 \cdot 10^{-13} \text{ см} = 2,81794092 \cdot 10^{-15} \text{ м}$$

Комптонівська довжина хвилі

$$\Lambda_e = 2,42631058 \cdot 10^{-10} \text{ см} = 2,42631058 \cdot 10^{-12} \text{ м}$$

Власний магнітний момент ( $L = 0, S = \frac{1}{2}$ )

$$\mu_e = 1,60816934 \cdot 10^{-20} \text{ ерг} \cdot \text{Гс}^{-1} = 1,60816934 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{Тл}^{-1} =$$

$$= 1,734059384 \cdot \mu_B$$

g-фактор

$$g_e = 2,0023193044 \quad (L = 0, S \neq 0)$$

$$g_e = 1,00115966 \quad (L \neq 0, S = 0)$$

## **Протон**

Маса спокою

$$m_p = 1,6726231 \cdot 10^{-24} \text{ с} = 1,6726231 \cdot 10^{-27} \text{ кг} =$$

$$= 1,007276470 \text{ а.о.м.}$$

Відношення маси спокою протона до маси спокою електрона

$$\frac{m_p}{m_e} = 1836,152701$$

Енергія спокою

$$E_{p0} = 1,50327861596 \cdot 10^{-3} \text{ ерг} = 1,50327861596 \cdot 10^{-10} \text{ Дж} =$$

$$= 938,27231 \text{ MeV}$$

Питомий заряд

$$\frac{e}{m_p} = 2,871652311 \cdot 10^{14} \text{ од. CGSE} \cdot \text{с}^{-1} = 9,5788309 \cdot 10^7 \text{ Кл} \cdot \text{кг}^{-1}$$

Комптонівська довжина хвилі

$$\Lambda_p = 1,32141002 \cdot 10^{-13} \text{ см} = 1,32141002 \cdot 10^{-15} \text{ м}$$

Магнітний момент

$$\begin{aligned} \mu_p &= 1,41060761 \cdot 10^{-23} \text{ ерг} \cdot \text{Гс}^{-1} = 1,41060761 \cdot 10^{-26} \text{ Дж} \cdot \text{Тл}^{-1} = \\ &= 2,792847386 \cdot \mu_{\text{я}} \end{aligned}$$

### **Нейтрон**

Маса спокою

$$\begin{aligned} m_n &= 1,6749286 \cdot 10^{-24} \text{ г} = 1,6749286 \cdot 10^{-27} \text{ кг} = \\ &= 1,008664904 \text{ а.о.м.} \end{aligned}$$

Відношення маси спокою нейтрона до маси спокою протона

$$\frac{m_n}{m_p} = 1,001378404$$

Енергія спокою

$$\begin{aligned} E_{n0} &= 1,5053507412 \cdot 10^{-3} \text{ ерг} = 1,5053507412 \cdot 10^{-10} \text{ Дж} = \\ &= 939,56563 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Комптонівська довжина хвилі

$$\Lambda_n = 1,31959110 \cdot 10^{-13} \text{ см} = 1,31959110 \cdot 10^{-15} \text{ м}$$

Магнітний момент

$$\begin{aligned} \mu_n &= -0,96623707 \cdot 10^{-23} \text{ ерг} \cdot \text{Гс}^{-1} = \\ &= -0,96623707 \cdot 10^{-26} \text{ Дж} \cdot \text{Тл}^{-1} = -1,9130427526 \cdot \mu_{\text{я}} \end{aligned}$$

## ДОДАТОК №2

### Правила переходу з гаусової системи одиниць до системи одиниць СІ

Фізична величина	Назва одиниці в системі одиниць СГС	1 одиниця СГС дорівнює	Повна назва одиниці СІ
Маса	грам	$10^{-3}$	кілограм
Швидкість	сантиметр на секунду	$10^{-2}$	метр на секунду
Прискорення	сантиметр на секунду в квадраті	$10^{-2}$	метр на секунду в квадраті
Сила	дина	$10^{-5}$	ньютон
Тиск	дина на квадратний сантиметр	0,1	паскаль
Енергія, робота	ерг	$10^{-7}$	джоуль
Потужність	ерг в секунду	$10^{-7}$	ват
Момент інерції	грам на квадратний сантиметр	$10^{-7}$	кілограм на квадратний метр
Струм	одиниця СГС	$3,335 \times 10^{-10} A$	ампер
Заряд	одиниця СГС	$3,335 \times 10^{-10} Кл$	кулон
Напруга	одиниця СГС	$299,8 B$	вольт
Напруженість електричного поля $E$	одиниця СГС	$2,998 \times 10^4 B/m$	вольт на метр
Індукція електричного поля $D$	одиниця СГС	$3,335 \times 10^{-6} Кл/m^2$	кулон на квадратний метр
Напруженість магнітного поля $H$	ерстед	$79,58 A/m$	ампер на метр

Фізична величина	Назва одиниці в системі одиниць СГС	1 одиниця СГС дорівнює	Повна назва одиниці СІ
Індукція магнітного поля $B$	гаус	$10^{-4} \text{ Тл}$	тесла
Електричний опір	одиниця СГС	$0,8988 \times 10^{12} \text{ Ом}$	ом
Електрична провідність	одиниця СГС	$1,1126 \times 10^{-12} \text{ См}$	сіменс
Електрична ємність	см	$1,1126 \times 10^{-12} \text{ Ф}$	фарад(а)
Магнітний потік	максвелл	$10^{-8} \text{ Вб}$	вебер
Магніторухлива сила	гільберт	$0,7958 \text{ А}$	ампер
Індуктивність	одиниця СГС	$10^{-9} \text{ Гн}$	генрі
Питома електрична провідність	$\text{с}^{-1}$	$1,1126 \times 10^{-10} \text{ См/м}$	сіменс на метр
Об'ємна густина заряду	одиниця СГС	$3,335 \times 10^{-4}$	кулон на кубічний метр

Зв'язок між одиницями атомної фізики

Одиниці	$\text{см}^{-1}$	$\text{с}^{-1}$	$\text{ерг}$	$\text{Дж}$	$\text{еВ}$	$K$
$1 \text{ см}^{-1}$	1	$2,9979 \cdot 10^{10}$	$1,9864 \cdot 10^{-16}$	$1,9864 \cdot 10^{-23}$	$1,2398 \cdot 10^{-4}$	1,4388
$1 \text{ с}^{-1} = 1 \text{ Гц}$	$3,3356 \cdot 10^{-11}$	1	$6,6257 \cdot 10^{-27}$	$6,6257 \cdot 10^{-34}$	$4,1354 \cdot 10^{-15}$	$4,7994 \cdot 10^{-11}$
$1 \text{ ерг}$	$5,0348 \cdot 10^{15}$	$1,5094 \cdot 10^{26}$	1	$10^{-7}$	$6,2414 \cdot 10^{11}$	$7,2440 \cdot 10^{15}$
$1 \text{ Дж}$	$5,0344 \cdot 10^{22}$	$1,5092 \cdot 10^{33}$	$10^7$	1	$6,2414 \cdot 10^{18}$	12262,5
$1 \text{ еВ}$	8066,0	$2,41811 \cdot 10^{14}$	$1,6022 \cdot 10^{-12}$	$1,6022 \cdot 10^{-19}$	1	11605,4
$1 K$	0,6959	$2,0836 \cdot 10^{10}$	$1,3806 \cdot 10^{-16}$	$1,3806 \cdot 10^{-23}$	$0,8617 \cdot 10^{-4}$	1

## Основні формули атомної фізики в системі СІ

Стала Рідберга

$$R_{\infty} = \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4}{4\pi c \hbar^3} \left[ \text{см}^{-1} \right]$$

Перший борівський радіус

$$a_0 = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

Енергія зв'язку електрона в атомі водню

$$E_{\text{зв}} = \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$$

Класичний радіус електрона

$$r_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e c^2}$$

Стала тонкої структури

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c}$$

Магнетон Бора

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

Гіромагнітне співвідношення для електрона

$$\gamma = \left| \frac{\mu_e}{L_e} \right| = g \frac{e}{2m_e},$$

де  $g$  – фактор Ланде.



**Границі К- та L-смуг поглинання рентгенівського  
випромінювання**

<i>Z</i>	Елемент	Межа смуги поглинання $\lambda$ , нм			
		К	L <sub>1</sub>	L <sub>2</sub>	L <sub>3</sub>
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	72,2

## Константи двохатомних молекул

Молекула	Основний терм	Міжатомна відстань $d, \text{нм}$	Частота коливань $\omega, 10^{14} \text{ c}^{-1}$	Ангармонічність $x, 10^{-3}$	Енергія дисоціації $D, \text{eB}$
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

## СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

### Підручники

1. Барсуков О.А., Ельяшевич М.А. Основы атомной физики. – М.: Научный мир, 2006. – 647 с.
2. Белый М.У., Охрименко Б.А. Атомная физика. – К.: Вища шк., 1984. – 271 с.
3. Електронний підручник з атомної фізики, <http://edu.uninet.kiev.ua>
4. Матвеев А.Н. Атомная физика. – М.: Высш. шк., 1989. – 439 с.
5. Милантьев В.П. Атомная физика. – М.: Изд. РУДН, 1999. – 373 с.
6. Савельев И.В. Курс общей физики: В 5-и кн. Книга 5. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. – М.: АСТ, Астрель, 2006. – 368 с.
7. Сивухин Д.В. Общий курс физики: В 5-и т. Т. 5. Атомная и ядерная физика. – М.: Физматлит, 2006. – 784 с.
8. Фриш С.Э., Тиморева А.В. Курс общей физики: В 3-х т. Т. III. Оптика. Атомная физика. – М.: Лань, 2007. – 656 с.
9. Шпольский Э.В. Атомная физика: В 2-х т. – М.: Наука, 1984. – 552 с. – 438 с.

### Навчальні посібники та збірники задач

10. Венгер Э.Ф., Грибань В.М., Мельничук О.В. Збірник задач з квантової механіки: Навч. посіб. – К.: Вища шк., 2003. – 230 с.
11. Венгер Э.Ф., Грибань В.М., Мельничук О.В. Основы квантовой механіки: Навч. посіб. – К.: Вища шк., 2002. – 286 с.
12. Гинзбург В.Л., Левин Л.М., Рабинович М.С., Сивухин Д.В. Общий курс физики. Сборник задач: В 5 книгах. Книга 5. Атомная физика. Физика ядра и элементарных частиц. – М.: Физматлит, Лань, 2006. – 184 с.
13. Гречко Л.Г., Сугаков В.И., Томасевич О.Ф., Федорченко А.М. Сборник задач по теоретической физике. – М.: Высш. шк., 1972. – 333 с.

14. Иродов И.Е. Атомная и ядерная физика. Сборник задач. – М.: Лань, 2002. – 288 с.
15. Иродов И.Е. Задачи по квантовой физике: Учеб. пособие для физ. спец. вузов. – М.: Высш. шк., 1991. – 175 с.
16. Иродов И.Е. Задачи по квантовой физике. – М.: Лаборатория базовых знаний, 2001. – 216 с.
17. Кондиленко И.И., Коротков П.А. Введение в атомную спектроскопию: Учебн. пособие. – К.: Вища шк., 1976. – 304 с.
18. Красильников С.С., Попов А.М., Тихонова О.В. Сто одиннадцать задач по атомной физике. – М.: Изд. УНЦ ДО, 2003. – 18 с.
19. Овечко В.С., Харченко Н.П. Атомна фізика. Фізичний практикум: Навчальний посібник. – К.: ВПЦ "Київський університет", 2005. – 131 с.
20. Остроухов А.А., Стрижевський В.Л., Цвелих М.Г., Цяченко Ю.П. Розв'язування задач з курсу загальної фізики. – К.: Радянська школа, 1966. – 504 с.
21. Сборник задач по общему курсу физики. Часть 3: Атомная и ядерная физика. – М.: Изд. МФТИ, 2001. – 420 с.
22. Сивухин Д.В. Сборник задач по общему курсу физики. Атомная физика, физика ядра и элементарных частиц. – М.: Наука, 1981. – 223 с.
23. Трофимова Т.И. Основы физики. В 5 книгах. Книга 5. Атом, атомное ядро и элементарные частицы. – М.: Высш. шк., 2007. – 216 с.
24. Трофимова Т.И. Оптика и атомная физика: законы, проблемы, задачи. – М.: Высш. шк, 1999. – 288 с.
25. Харченко Н.П., Полозов С.Б. Тестові завдання з курсу "Атомна фізика". – К.: Академдрук, 2007. – 70 с.

### **Довідкова література**

26. Ахиезер А.И. Атомная физика. Справочное пособие. – К.: Наукова думка, 1988. – 268 с.
27. Зайдель А.Н. и др. Таблицы спектральных линий. 4-е изд. – М.: Наука, 1977. – 797 с.
28. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. – М.: Атомиздат, 1980. – 235 с.
29. Сена Л.А. Единицы физических величин и их

размерности. – М.: Наука, 1977. – 336 с.

30. Физическая энциклопедия: В 5 т. / под ред. А.М. Прохорова. – М.: Советская энциклопедия, Большая Российская Энциклопедия, 1988. – 704 с.; – 1990. – 704 с.; – 1992. – 672 с.; – 1994. – 704 с.; – 1998. – 692 с.
31. Физические величины: Справочник / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина и др.; под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.

### **Література для поглибленого вивчення матеріалу**

32. Бете Г. Квантовая механика. – М.: Мир, 1965. – 333 с.
33. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. – М.: Наука, 1983. – 664 с.
34. Борн М. Атомная физика. – М.: Мир, 1970. – 484 с.
35. Вакарчук І.О. Квантова механіка: Підручник. – Львів: ЛДУ ім. І.Франка, 1998. – 616 с.
36. Гейзенберг В., Шредингер Э., Дирак П. Современная квантовая механика. Три нобелевских доклада. – Л.-М.: ГТТИ, 1934. – 76 с.
37. Герцберг Г. Атомные спектры и структура атома. – М.: ИЛ, 1948. – 280 с.
38. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. – М.: ИЛ, 1949. – 381 с.
39. Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. – М.: Мир, 1969. – 771 с.
40. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. – М.: Физматлит, 1962. – 892 с.
41. Находкін М.Г., Шека Д.І. Фізичні основи мікро- та наноелектроніки: Підручник. – К.: ВПЦ "Київський університет", 2005. – 431 с.
42. Овечко В.С., Шека Д.І. Фізика атома та атомних структур (від класики до квантів). – К.: ВПЦ "Київський університет", 2006. – 184 с.
43. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. – М.: Физматгиз, 1963. – 640 с.
44. Соколов А.А., Тернов И.М. Квантовая механика и атомная физика. – М.: Просвещение, 1970. – 423 с.
45. Спектры и строение двухатомных молекул / под ред. В.Н. Кондратьева. – М.: ИЛ, 1949. – 403 с.

46. Ферми Э. Лекции по атомной физике. – Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2001. – 144 с.
47. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. – М.-Л.: Физматгиз, 1963. – 640 с.
48. Хедвич П. Прикладная квантовая химия. – М.: Мир, 1977. – 595 с.
49. Ципенюк Ю.М. Квантовая микро- и макрофизика. – М.: Физматкнига, 2006. – 638 с.
50. Шредингер Э. Избранные труды по квантовой механике. – М.: Наука, 1976. – 424 с.

# ПЕРІОДИЧНА СИСТЕМА ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ Д. І. МЕНДЕЛІЄВА

ГРУПИ ЕЛЕМЕНТІВ																			
Період		I		II		III		IV		V		VI		VII		VIII			
I	1	(H)														Визначення елемента			
II	2	Li 6,939	Be 9,0122	3 B 10,811	4 C 12,01115	5 N 14,0067	6 O 15,9994	7 F 18,9984	8 Ne 20,179									2 He 4,0026	
III	3	Li 6,939	Be 9,0122	11 Mg 22,9898	12 Al 26,9815	13 Si 28,086	14 P 30,9738	15 S 32,064	16 Cl 35,453	17 Ar 39,948									9 Ne 20,179
IV	4	Na 22,9898	Mg 24,305	19 K 39,102	20 Ca 40,08	21 Sc 44,956	22 Ti 47,90	23 V 50,942	24 Cr 51,996	25 Mn 54,9380	26 Fe 55,847	27 Co 58,9330	28 Ni 58,71	Відносна атомна маса					
V	5	Cu 63,546	Zn 65,37	30 Ga 69,72	31 Ge 72,64	32 As 74,9216	33 Se 78,96	34 Br 79,904	35 Kr 83,80									36 Kr 83,80	
	6	Rb 85,47	Sr 87,62	37 Y 88,905	38 Zr 91,22	39 Nb 92,906	40 Mo 95,94	41 Tc 101,07	42 Ru 101,07	43 Rh 102,905	44 Pd 106,4	45 Ag 107,868	46 Cd 112,40						
VI	7	Ag 107,868	Cd 112,40	48 In 114,82	49 Sn 118,69	50 Sb 121,75	51 Te 127,60	52 I 126,9044	53 Xe 131,30									54 Xe 131,30	
	8	Cs 132,905	Ba 137,34	55 La* 138,91	56 Hf 178,49	57 Ta 180,948	58 W 183,85	59 Re 186,2	60 Os 190,2	61 Ir 192,2	62 Pt 195,09	Платина							
VII	9	Au 196,967	Hg 200,59	80 Tl 204,37	81 Pb 207,19	82 Bi 208,980	83 Po [210]*	84 At [210]	85 Rn [222]									86 Rn [222]	
	10	Fr [223]	Ra [226]	87 Ac** [227]	88 Rf [261]	89 Db [262]	90 Sg [263]	91 Bh [262]	92 Hs [265]	93 Mt [266]	94 Lr [262]	Мейтнерій							
Лантаноїди	58	Ce 140,12	Pr 144,24	59 Nd 147,07	60 Eu 151,96	61 Gd 157,25	62 Tb 158,924	63 Dy 162,50	64 Ho 164,930	65 Er 167,26	66 Tm 168,934	67 Yb 173,04	68 Lu 174,967						
	90	Th 232,038	Pa [231]	91 U 238,03	92 Np [244]	93 Pu [243]	94 Am [247]	95 Cm [252]	96 Bk [257]	97 Cf [259]	98 Es [265]	99 Fm [269]	100 Md [271]	101 No [285]	102 Lr [293]				
Актиноїди	90	Th 232,038	Pa [231]	91 U 238,03	92 Np [244]	93 Pu [243]	94 Am [247]	95 Cm [252]	96 Bk [257]	97 Cf [259]	98 Es [265]	99 Fm [269]	100 Md [271]	101 No [285]	102 Lr [293]				
	104	La [232]	Pr [233]	105 Ce [235]	106 Nd [237]	107 Eu [239]	108 Gd [241]	109 Tb [243]	110 Dy [245]	111 Ho [247]	112 Er [249]	113 Tm [251]	114 Yb [253]	115 Lu [255]	116 Hf [257]				

**Навчальний посібник**

**ХАРЧЕНКО** Надія Павлівна

**ПРОКОПЕНКО** Олександр Володимирович

**КАРЛАШ** Ганна Юріївна

## **АТОМНА ФІЗИКА В ЗАДАЧАХ**

Літературний редактор

Зайченко Олена Сергіївна

Підписано до друку 12.11.2007. Замовлення № АД-1106-07.

Формат 60х84/16. Гарнітура Arial.

Папір офсетний. Друк офсетний.

Ум.-друк. арк. 10,5. Наклад 100 примірників.

Віддруковано в друкарні видавництва "Академдрук"

Україна, 01011, м. Київ, вул. П. Мирного, 26.

Тел.: (044) 280-2425