

## Білет 2012 НОВІ

## Білет 1

1. Які нові ідеї використовує атомна фізика на відміну від класичної фізики?
2. Чому хвильовий пакет не може бути вдалою моделлю елементарної частинки.
3. Знайти абсолютне значення орбітального моменту для електронів в атомі ,що знаходяться в s-,p-,d-станах.
4. Як відрізнити фото електрони ,оже –електрони та електрони віддачі для ефекту Комптона ?
5. Враховуючи особливості енергії взаємодії електронів в ідеальних кристалах ,пояснити спектр їх енергій.

**1. Які нові ідеї використовує атомна фізика на відміну від класичної фізики?**

**Атомна фізика** - це розділ фізики, у якому вивчається електронна будова атомів, молекул та конденсованого стану речовини. В атомній фізиці розглядаються такі питання: *складові частини атома, взаємодія між ними, їхній рух, будова електронних оболонок атомів, електричні, магнітні та оптичні властивості атомів, здатність атомів об'єднуватись один з одним у молекулах, здатність атомів та молекул з'єднуватись в кластери (кластер - пучок) та утворювати конденсовані фази речовини (рідини та тверді тіла), механічні, електричні, оптичні, хімічні властивості речовини в зв'язку з особливостями її атомної та електронної будови.*

**Атомна фізика** використовує елементи квантової механіки. Виявляється, що *всі елементарні частинки мають властивості як матеріальних тіл - корпускул, так і хвиль.* Корпускули - локалізовані об'єкти (від грецького слова локус - місце), які рухаються по визначеним (детермінованим) траекторіям. Хвилі - делокалізовані об'єкти, які розповсюджуються у всьому просторі, заломлюються, дифрагують та інтерферують. Отже, один і той же об'єкт - елементарна частинка є кентавром, бо виявляє взаємно суперечливі з точки зору здорового глузду властивості: *локалізації та делокалізації.* Локалізована частинка повинна знаходитись у певній точці простору, а хвиля - делокалізована й повинна бути розмазаною по всьому простору. *Квантова фізика* (квантова механіка), яка вивчає *корпускулярно-хвильовий дуалізм, притаманний частинкам, фотонам і іншим об'єктам мікросвіту.*

Новою ознакою атомної фізики, як і інших розділів фізики, є відтепер те, що її стрижнем є *квантова механіка, основними творцями якої були на той час дуже молоді люди: Вернер Гейзенберг, Поль Дірак, Паскуаль Йордан, Вольфганг Паулі, всім їм було біля двадцяти років. Трохи старшим був Ервін Шредінгер, який опублікував своє знамените хвильове рівняння для мікрочастинок в віці 33-х років.* На відміну від класичної фізики *квантова фізика починає оперувати поняттям ймовірності* для опису не лише великих ансамблів частинок, але й для характеристики окремих елементарних актів, що відбуваються за участю окремих частинок. На відміну від класичних ансамблів, у яких кожна частинка розглядалась локалізованою, тобто такою, що рухається вздовж певної траекторії, у квантовій механіці втрачається локалізація, і застосовується ймовірність для характеристики окремих елементарних актів.

Виявилось також, що у квантовій механіці *порушується лапласівський принцип причинності.* На відміну від принципу причинності Лапласа, згідно якого після події А - причини однозначно відбувається подія В - наслідок, у квантовій механіці після події А - причини з певною ймовірністю відбуваються події- наслідки В, С, D тощо. Таким чином, *розширюється поняття про причинно-наслідкові зв'язки* в оточуючому нас світі. У цьому полягає *глибоке методологічне значення атомної фізики.*

**2. Чому хвильовий пакет не може бути вдалою моделлю елементарної частинки.**

Однією з перших моделей частинки була модель хвильового пакета. Хвильовий пакет - це суперпозиція плоских хвиль де Бройля. Хвильовий пакет має вигляд:

$$u(x, t) = a \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \exp\{-i(\omega t - kx)\} dk. \quad (6.7)$$

Розвинемо дисперсійне співвідношення хвилі де Бройля<sup>1</sup>  $\omega(k)$  у ряд Тейлора

$$\omega(k) = \omega_0 + \omega'_0 (k - k_0) + \dots, \quad (6.8)$$

Вираз для хвильового пакета:

$$\begin{aligned} u(x, t) &= a \exp\{-i(\omega_0 t - k_0 x)\} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \exp\{-i(k - k_0)(\omega'_0 t - x)\} dk = \\ &= 2a\Delta k \frac{\sin \xi}{\xi} \exp\{-i(\omega_0 t - k_0 x)\} = B \exp\{-i(\omega_0 t - k_0 x)\}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

$$\text{Тут } \xi = (\omega'_0 t - x)\Delta k, \quad \Delta k = k - k_0, \text{ а } B - \text{ амплітуда пакета } B = 2a\Delta k (\sin \xi / \xi) \quad (6.11)$$

Проаналізуємо вираз для хвильового пакета (6.11) і знайдемо: його фазову та групову швидкості, просторову локалізацію та протяжність у часі. Фазова швидкість пакета знаходиться із умови сталої фази  $d/dt(\omega_0 t - xk_0) = \text{const}$

$$v_{\phi.} = \omega_0 / k_0. \quad (6.12)$$

Вона, як і для плоскої хвилі де Бройля, більша за швидкість світла  $v_{\phi.} = c^2 / v > c$ .

Групова швидкість визначається із умови сталої амплітуди пакета  $\xi = \text{const}$ :

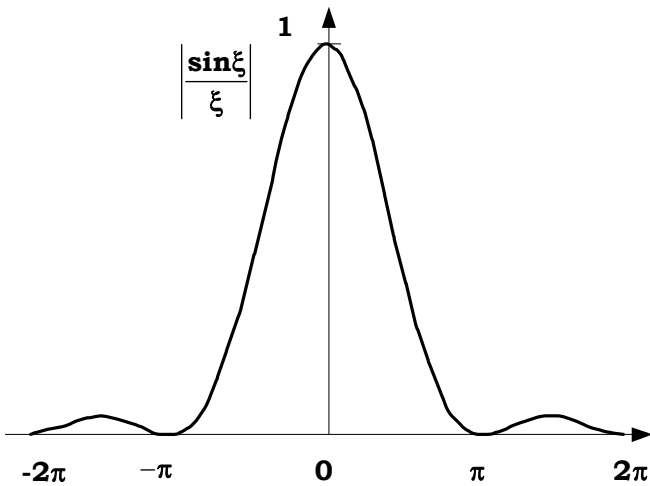
$$\begin{aligned} \frac{d\xi}{dt} &= \frac{d}{dt}(\omega'_0 t - x)\Delta k = \omega'_0 \Delta k - \frac{dx}{dt} \Delta k = 0; \\ v_{gp.} &= \frac{dx}{dt} = \omega'_0 = \frac{d\omega}{dk}_{k=k_0} = \frac{dE}{dp} = \frac{c^2 p}{E} = \frac{c^2 mv}{mc^2} = v, \end{aligned} \quad (6.13)$$

тобто *групова швидкість збігається зі швидкістю частинки.*

*Просторова локалізація хвильового пакета характеризується, згідно з (6.11), координатами,*

*при яких його амплітуда  $B \neq 0$ . На рис. наведена*

*залежність  $B^2(\xi) / B_{\max}^2 = |\sin \xi / \xi|^2$ , де  $B_{\max} = 2a\Delta k$ . Видно, що у першому наближенні протяжність пакета можна характеризувати відстанню  $\Delta \xi$  між двома першими мінімумами  $-\pi \leq \xi \leq \pi$ . Зафіксуємо тепер  $t = \text{const}$  і знайдемо  $\Delta \xi$ .*



$$\begin{aligned} \xi = +\pi &= (\omega'_0 t - x_1)\Delta k \\ \xi = -\pi &= (\omega'_0 t - x_0)\Delta k \\ \Delta \xi &= (\xi_1 - \xi_2) = 2\pi = (x_2 - x_1)\Delta k \end{aligned}$$

$$\Delta x \Delta k \geq 2\pi \quad (6.14)$$

$$\text{Помножимо ліву та праву частини нерівності (6.14) на } \hbar = h / 2\pi \quad \Delta x \Delta p \geq h \quad (6.15)$$

<sup>1</sup> Дисперсія має місце навіть у вакуумі. Дійсно  $E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$ , тоді  $\hbar^2 \omega^2 = c^2 \hbar^2 k^2 + m_0^2 c^4$ ;  $\omega \frac{d\omega}{dk} = c^2 k$ ;  $\frac{d\omega}{dk} = \frac{c^2 k}{\omega} = \frac{c^2 \hbar k}{E} = \frac{c^2 p}{\sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}} = \frac{c^2 k}{\sqrt{c^2 k^2 + m_0^2 c^4 \hbar^{-2}}}$ .

Співвідношення (6.15) має місце для довільних лінійних процесів. Воно вказує, що для створення локалізованого у просторі пакета з малим інтервалом просторової локалізації  $\Delta x$  необхідно, щоб  $\Delta p \geq h / \Delta x$ . Таким чином, чим точніше хвильовий пакет, локалізований у просторі, тим більший набір плоских хвиль де Бройля потрібно використати з різними значеннями імпульсів  $p$  або з різними довжинами хвиль де Бройля  $\lambda$  для того, щоб його утворити.

Щоб знайти протяжність пакета в час, зафіксуємо координату точки спостереження  $x = const$  і виберемо два різних значення часу  $t_1$  і  $t_2$

$$\left. \begin{aligned} \xi &= +\pi = (\omega'_0 t_1 - x) \Delta k \\ \xi &= -\pi = (\omega'_1 t_2 - x) \Delta k \end{aligned} \right\} \quad (6.16)$$

$$\Delta \xi = (\xi_1 - \xi_2) = 2\pi = \omega'_0 \Delta k (t_2 - t_1) = \Delta \omega \Delta t.$$

Помножимо ліву та праву частини виразу (6.16) на  $\hbar = h/2\pi$ , тоді

$$\Delta E \Delta t \geq h. \quad (6.16^*)$$

Виявляється, що чим коротше проміжок часу  $\Delta t$  між двома послідовними вимірами, тим більша невизначеність енергії.

На перший погляд складається таке враження, що хвильовий пакет із плоских хвиль де Бройля, може бути моделлю матеріальних частинок. Але така точка зору не підтверджується експериментом. Дійсно, коли у виразі для дисперсії  $\omega(k)$  обмежитись не тільки першим членом  $\omega'_0$  ряду Тейлора, а використати і другий член ряду  $\omega'' = d^2\omega/dk^2|_{k=k_0}$ , то хвильовий пакет починає розпливатися. Нестійкість хвильового пакету суперечить експериментальним фактам. Спробуємо оцінити час розпливання пакета. Для цього в формулі (6.9) врахуємо другий член ряду Тейлора

$$\omega(k) = \omega_0 + \omega'_0 \Delta k + \frac{1}{2} \omega''_0 (\Delta k)^2 + \dots \quad (6.17)$$

Підставимо  $\omega(k)$  із (6.17) у формулу для фази (6.9), тоді

$$\begin{aligned} \omega t - kx &= \omega'_0 t \Delta k + \omega_0 t + \frac{1}{2} \omega''_0 t \Delta k^2 - kx + k_0 x - k_0 x = \\ &= (\omega_0 t - k_0 x) + (\omega'_0 t - x) \Delta k + \frac{1}{2} \omega''_0 t \Delta k^2. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Якщо у формулі для пакета (6.8) використати вираз (6.18), то під інтегралом з'явиться експонента з показником  $\omega''_0 t \Delta k^2 / 2$ . Коли цей показник стає за порядком величини сумірним з  $2\pi$ , то лінійне розвинення (6.9) у ряд, що використовується при визначенні  $\sin \xi$ , втрачає свій зміст. Отже, хвильовий пакет за проміжок часу  $\Delta t \neq 0$  розпливається  $\omega''_0 \Delta t (\Delta k)^2 \sim 2\pi$ . .

$$\text{Комбінуючи (6.14) і (6.19), маємо} \quad \Delta t \propto \frac{2\pi}{(\Delta k)^2 \cdot \omega''_0} = \frac{\Delta x^2}{2\pi \omega''_0}. \quad (6.20)$$

$$\text{Коли } v < c, \quad d^2\omega/dk^2 = \hbar d^2E/dp^2 = \hbar/m_0, \quad \text{остаточно отримуємо} \quad \Delta t \leq m_0 (\Delta x)^2 / h \quad (6.21)$$

$$\frac{d^2E}{dp^2} = \frac{d^2(c^2 p^2 + m_0^2 c^4)^{1/2}}{dp^2} = \frac{c^2}{E} \left( \frac{m_0^2 c^2}{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} \right) = \frac{1}{m_0} \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{3/2} \approx \frac{1}{m_0}$$

Оцінімо величини  $\Delta t$  для різних частинок. Фотон має нульову масу ( $m_0 = 0$ ), тому із (6.5)  $E = pc$ , звідки  $\omega = kc$ ,  $d\omega/dk = c$ ;  $d^2\omega/dk^2 = 0$ . Це означає згідно (6.20), що час розпливання фотона  $\Delta t \rightarrow \infty$ , тобто фотон стійкий, як це й спостерігається експериментально. Для тіла з масою  $m = 1z$  (дробинка)  $\Delta t \sim (10^{-4})^2 / (6 \times 10^{-27}) = 10^{18} c = 10^9$  років, тобто макроскопічні тіла стійкі.

Але елементарні частинки з малою масою спокою та малими розмірами, наприклад, електрони, у яких  $m_0 = 9,08 \times 10^{-28} z$  і  $\Delta x \sim r_e \sim 10^{-12} c$ , мають дуже малий час розпливання  $\Delta t < 9 \times 10^{-28} \times ((10^{-12})^2 / 6) \times 10^{-27} = 10^{-25} c$ , тобто електрони не стійкі, що суперечить експерименту.

**Розглянуті приклади дозволяють дійти висновку, що час розпливання пакета із плоских хвиль де Бройля для елементарних частинок, наприклад електронів, дуже малий, що суперечить експериментальним фактам стабільності частинок. Це примушує відмовитись від моделі частинок у вигляді хвильового пакета.**

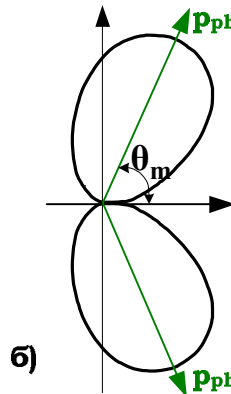
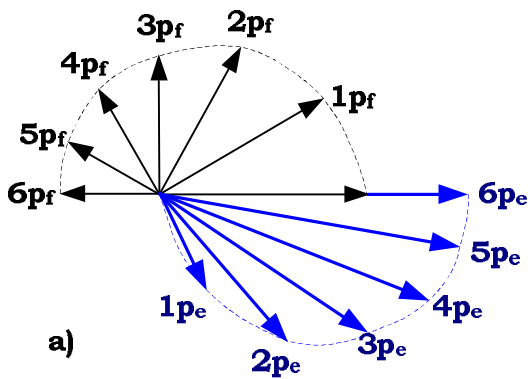
**3. Знайти абсолютне значення орбітального моменту для електронів в атомі, що знаходяться в s-,p-,d-станах.**

Використовуємо ф-лу:  $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ .

**4. Як відрізнити фотоелектрони, оже-електрони та електрони віддачі для ефекту Комптона ?**

Електрони віддачі мають більшу енергію віддачі ніж оже- чи фотоелектрони.

Одночасно з комптонівським розсіянням рентгенівських променів виникають електрони віддачі з імпульсом  $m_0\vec{v}$ , які чітко спостерігаються за допомогою камери Вільсона. Їх просторовий розподіл відрізняється від розподілу фотоелектронів більшою направленістю в напрямку розповсюдження первинних квантів  $h\nu$ .



**Рис.5.6. Схема просторового розподілу імпульсів ( $p_\gamma$ ) розсіяних  $\gamma$ -квантів і електронів віддачі ( $p_e$ ) в ефекті Комптона (а) і  $p_e$  - фотоелектронів (б) ( $h\nu = 256$  eV).**

За інтенсивністю ефект Комптона - явище другого порядку величини. Він чітко спостерігається в діапазоні енергій квантів

$10^4 < h\nu < 2 \times 10^6$  eV. При менших енергіях переважає фотоэффект, а при більших - народження пар частинок електрона та позитрона.

**Оже-ефект або автоіонізація є процесом іонізації (емісії електронів) не за допомогою зовнішньої енергії, а за рахунок енергії збудження самого атома, яка передається електрону не через поглинання кванту, а через внутрішні зв'язки системи без**

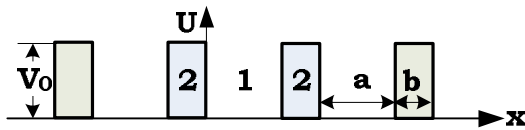
**випромінювання.**

На відміну від фотоелектронів, енергія яких пропорційна енергії квантів, що їх збуджують, енергія оже-електронів не залежить від  $h\nu$  і визначається енергетичною структурою атомів. Кожний атом має свій набір значень  $E_K, E_{L_I}, E_{L_{II}}, \dots, eV_i$ , тому він також матиме свій характерний набір кінетичних енергій для оже-електронів ( $mv_{ож}^2 / 2$ ), що емітують. Це означає, що кожному різновиду атомів

притаманний свій характерний для даного атома енергетичний спектр оже-електронів. Вимірюючи енергетичний спектр оже-електронів, можна визначити природу атома, що поглинає рентгенівський квант і емітує оже-електрон.

### 5. Враховуючи особливості енергії взаємодії електронів в ідеальних кристалах, пояснити спектр їх енергій.

Головна особливість кристалів – це їх періодичність. Положення еквівалентних точок у кристалі характеризується вектором її ґратки  $\vec{a} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ , де  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  не комплементарні вектори періодів основних трансляцій ґратки, а  $n_1, n_2, n_3$  - довільні цілі числа. Положення еквівалентних точок у кристалі характеризується вектором її ґратки  $\vec{a} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ , де  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  не комплементарні вектори періодів основних трансляцій ґратки, а  $n_1, n_2, n_3$  - довільні цілі числа. Розв'язок рівняння Шредінґера з періодичним потенціалом має вигляд періодичних власних хвильових функцій:  $\psi_{n,k}(\vec{r}) = u_{n,k}(\vec{r}) \cdot \exp\{i\vec{k} \cdot \vec{r}\}$  - ф-я Блоха. Тут  $u_{n,k}(\vec{r} + \vec{a}) = u_{n,k}(\vec{r})$ , а  $\vec{k}$  - деякий сталий вектор. Вплив періодичного потенціалу на енергетичний спектр розглянемо за допомогою одновимірного потенціалу у вигляді системи прямокутних потенціальних бар'єрів, які зображені на рис. 20.2.



Стационарні стани електрона з енергіями меншими висоти бар'єра ( $E < U_0$ ) описуються рівнянням Шредінґера

Рис.20.2. Періодичний потенціал моделі Кроніґа-Пені.

$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi = 0$ . (20.15). Його розв'язки для областей 1 і 2 (рис.20.2) мають вигляд:

$$\psi_1 = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}; \quad \psi_2 = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}, \quad (20.16), \quad \text{де } \alpha = \sqrt{2mE/\hbar^2} \text{ і } \beta = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2} \quad (20.17).$$

Тоді для областей 1 і 2 отримуємо такі функції Блоха:

$$\begin{aligned} u_1(x) &= \psi_1 \cdot e^{-ikx} = Ae^{i(\alpha-k)x} + Be^{-i(\alpha-k)x} \\ u_2(x) &= \psi_2 \cdot e^{-ikx} = Ce^{(\beta-ik)x} + De^{-(\beta+ik)x} \end{aligned} \quad (20.18)$$

Функції  $u_1(x)$  і  $u_2(x)$  та їхні похідні повинні бути неперервними в місцях змін потенціалу, тобто в точках  $x = 0$  і  $x = -b$

$$\begin{aligned} u_1(0) &= u_2(0); & du_1/dx|_{x=0} &= du_2/dx|_{x=0} \\ u_1(a) &= u_2(-b); & du_1/dx|_{x=a} &= du_2/dx|_{x=-b} \end{aligned} \quad (20.19)$$

Після підстановки  $u_1(x)$  і  $u_2(x)$  з (20.18) у (20.19), отримаємо 4 рівняння для довільних сталих  $A$ ,  $B$ ,  $C$  і  $D$ . Ця система рівнянь має не нульове рішення, коли її детермінант рівний нулю. Після алгебраїчних перетворень отримуємо рівняння, з якого визначимо **закон дисперсії – залежність  $E(k)$** :

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \operatorname{sh}(\beta b) \cdot \sin(\alpha a) + \operatorname{ch}(\beta b) \cdot \cos(\alpha a) = \cos(k(a+b)). \quad (20.20^*)$$

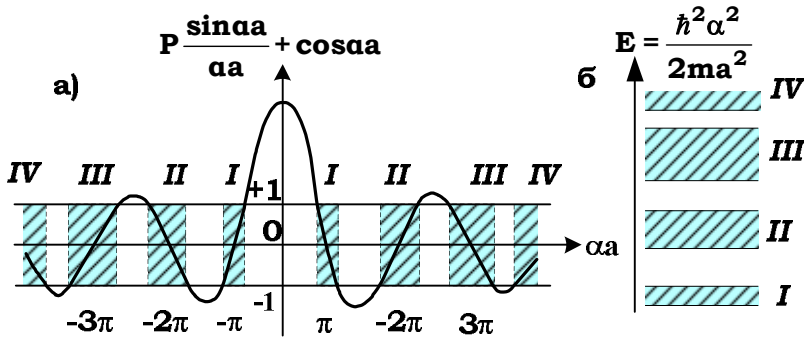


Рис.20.3. Залежність правої частини рівняння (20.20) від  $\alpha a$  та дозвалені (заштриховані I,II,III,IV) й заборонені зони (б).

$\Phi(\alpha a) = \cos(ka)$  не може бути більшою  $\pm 1$ . Тому, коли  $(|\Phi(\alpha a)| \leq 1)$ , то хвильовий вектор  $\vec{k}$  дійсний, а коли  $(|\Phi(\alpha a)| > 1)$ , то він уявний. Таким чином, значення  $\alpha = \sqrt{2mE/\hbar^2}$  розбиваються на області дійсних і уявних значень хвильового вектора  $\vec{k}$ , тобто енергетичний спектр електронів розбивається на дозвалені зони (заштриховані I,II,III,IV), де  $\vec{k}$  - дійсний вектор, і заборонені зони, де  $\vec{k}$  - уявний вектор.

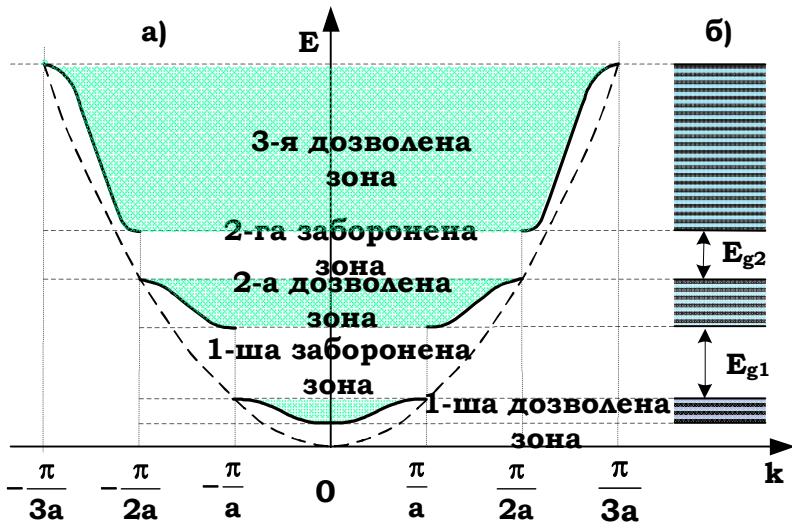


Рис. 20.4. Енергетичний спектр електронів  $E(k)$  у моделі Кроніга – Пені (розширені зони) для одновимірного кристала (а) та дозвалені й заборонені зони (б).

структурі потенціального бар'єра. Ширини заборонених зон ( $E_g$ ) зменшуються, а дозволених збільшуються для зон із більшими  $E$  і  $\vec{k}$  відповідно. У межах дозвленої зони дисперсійна крива  $E(\vec{k})$  неперервна, але вона відрізняється від дисперсійної кривої  $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$  вільного

Для вузьких ( $b \rightarrow 0$ ) і високих бар'єрів ( $U_0 \rightarrow \infty$ ), коли  $U_0 \cdot b$  залишається скінченим, закон дисперсії (20.20\*) спрощується й набуває вигляду:

$$\cos(ka) = \cos(\alpha a) + \frac{mabU_0}{\hbar^2} \cdot \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} \quad (20.20)$$

де  $\alpha$  визначається за формулою (20.17). Трансцендентне рівняння (20.20) можна розв'язати графічно. На рис.20.3 наведена права частина рівняння (20.20)

$$\Phi(\alpha a) = P \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a), \quad \text{де}$$

$$P = \frac{mabV_0}{\hbar^2}. \quad \text{Його ліва частина}$$

На рис. 20.4 наведена дисперсійна залежність  $E(\vec{k})$ , отримана в цій моделі. В її точках  $\vec{k} = \pm n\pi/a$ , де  $n$  - цілі числа, виникає розрив енергії, що вказує на появу заборонених зон.

Цей факт свідчить, як буде показано в наступному розділі, що розриви залежності ( $E(\vec{k})$ )

в точках  $\vec{k} = \pm n\pi/a$ , внаслідок чого з'являються зони, пов'язані із хвильовими властивостями електронів. За цих умов відбувається відбиття квазічастинкових електронних хвиль через дифракцію на періодичній

електрона. При збільшенні висоти бар'єрів ( $U_0$ ) ширини дозволених зон зменшуються, і їх сукупність збігається із дискретними енергетичними рівнями для окремих потенціальних ям.

### Білет 3

1. Чи впливає маса ядра на атомні спектри. Як змінюється положення серії лінії Бальмера для атома тритію по відношенню для тієї самої лінії для водню?
2. Який фізичний зміст квантового числа  $l$ ? Які значення проекцій магнітного моменту може мати стан з  $l=2$ ?
3. Побудуйте діаграму енергетичних рівнів переходу  $^3P - ^3D$  у магнітному полі і знайдіть можливі електронні переходи між цими енергетичними рівнями.
4. Які зміни викликає в коливальному спектрі ангармонізм?
5. Залежність електропровідності від температури донорного напівпровідника?

#### 1. Чи впливає маса ядра на атомні спектри. Як змінюється положення серії лінії Бальмера для атома тритію по відношенню для тієї самої лінії для водню?

Врахування маси ядра  $M$  і перехід від маси електрона  $m_0$  до приведеної маси

$$m' = \frac{m_0 M}{m_0 + M}$$

дозволило отримати значення сталої Рідберга, п'ять знаків якої збігалися з експериментальним значенням сталої Рідберга, а саме:

$$R_{H \text{ розрахункове}} = R_{H\infty} \left\{ \frac{1}{1 + m_0/M} \right\} = 109680 \text{ см},$$

$$\text{а експериментальне } R_{H \text{ експ}} = 109677,5 \text{ см}.$$

Використання приведеної маси дозволило також пояснити ізотопічний зсув спектральних ліній і використати його для визначення маси атомного ядра. Чим більша приведена маса, тим менша довжина хвилі, що випромінюється.

Тритій- 1 протон + 2 нейтрони. Маса ядра тритію = 3 маси ядра водню:  $3m_H = m_T$ . Ефективна маса:

$$m'_T = \frac{m_T m_0}{m_T + m_0} = \frac{3m_p m_0}{3m_p + m_0} = \frac{m_0}{1 + \frac{m_0}{3m_p}} = 0,9998m_0; \quad R'_T = R_{H\infty} * m'_T = 0,9998R_{H\infty}.$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right). \text{ Отже, серія зміститься в область менших довжин хвиль.}$$

#### 2. Який фізичний зміст квантового числа $l$ ? Які значення проекцій магнітного моменту може мати стан з $l=2$ ?

Побічне або орбітальн еквантове число  $l$  визначає квадрат моменту кількості руху

$$L^2 = [\vec{r}, \vec{p}]^2$$

$$L^2 = \hbar^2 l(l + 1) \quad (1)$$

і пробігає дискретні значення в інтервалі  $0 \leq l \leq n - 1$

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, n - 1 \quad (2)$$

Воно подібне до числа  $n_\phi$  в моделі Бора-Зомерфельда, проте  $l_{\max} = n_\phi - 1$ . Так як енергія стану визначається лише головним квантовим числом, то при даному  $n$  має місце  $n$ -кратне виродження – при даній енергії існує  $n$  станів руху з різними  $l$ , тобто з різними моментами кількості руху  $L = \hbar \sqrt{l(l + 1)}$ .

**Таблиця 8.3.** Кількість станів із різними значеннями квантового числа  $m$  в станах, що визначаються квантовим числом  $l$ .

Стан	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	$h$
$l$	0	1	2	3	4	5
$2l + 1$	1	3	5	7	9	1

						1
--	--	--	--	--	--	---

Задача(п.8.4)

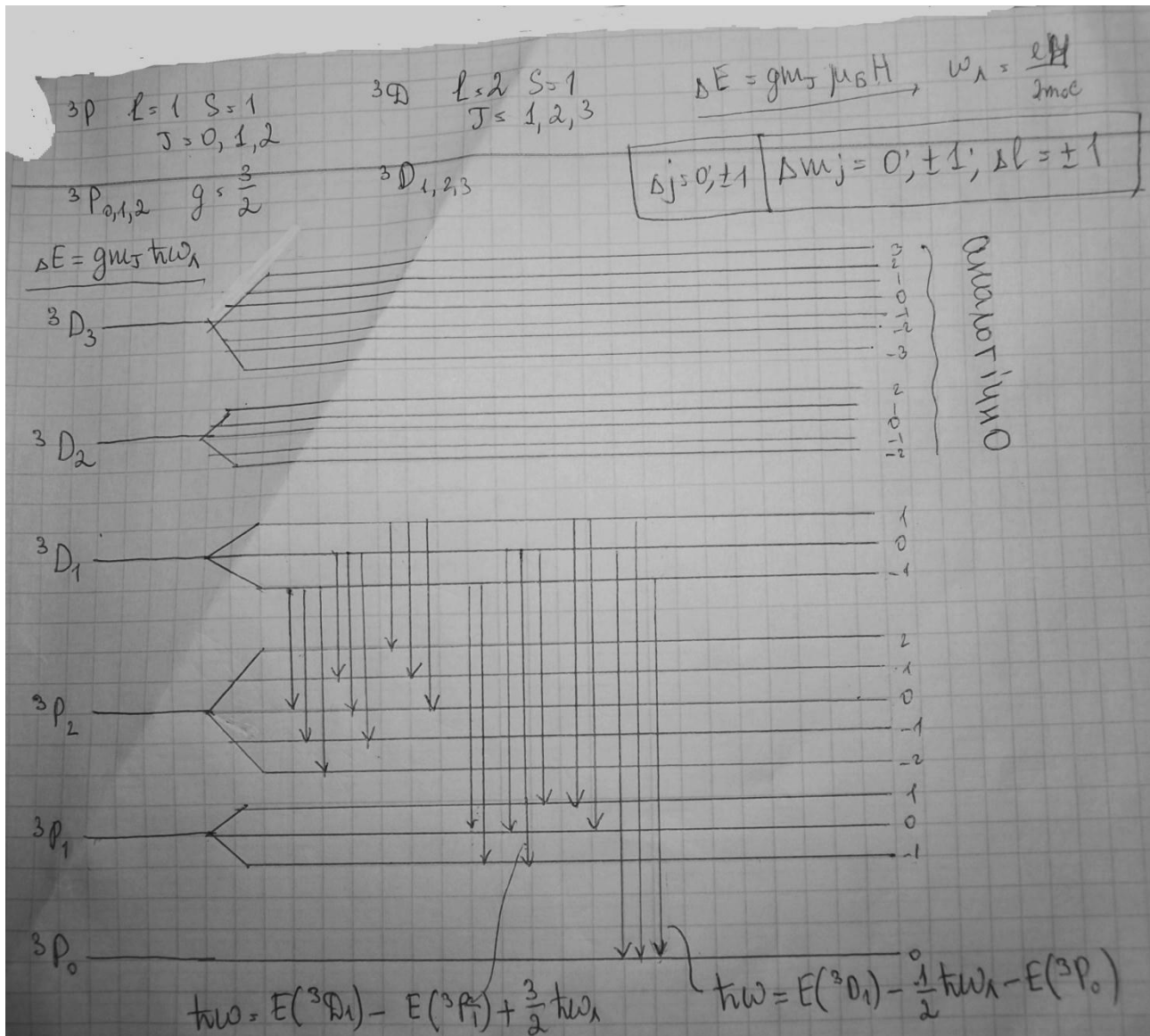
$$\frac{\mu}{L_z} = -g \frac{e}{2m_0 c}$$

$$g_l = 1,$$

$$L_z = m_l \hbar$$

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_0 c} m_l \hbar = -m_l \mu_B, m_l = 0, \pm 1, \pm 2$$

3. Побудуйте діаграму енергетичних рівнів переходу  $^3P - ^3D$  у магнітному полі і знайдіть можливі електронні переходи між цими енергетичними рівнями.



4. Які зміни викликає в коливальному спектрі ангармонізм?(п.19.3)

У випадку малих збуджень (в наближенні гармонічного осцилятора) коливальний спектр складається з однієї лінії із частотою  $\omega = \omega_v$ . Ця лінія знаходиться у інфрачервоному (ІЧ) спектральному діапазоні ( $\lambda_v = 1-25 \text{ мкм}$ ). При більших рівнях збудження (більших  $r$ ) крива потенціальної енергії  $U(r)$  починає все більше і більше відрізнятися від параболи (I), притаманній гармонічному осцилятору. Виникають відмінності в поведінці молекул від поведінки гармонічного



осцилятора. Ця особливість отримала назву *ангармонізму*. У першому наближенні ангармонізм ураховується тим, що замість параболи для функції  $U(r)$  використовується функція Морзе:

$$U(r) = D \{1 - \exp\{a(r - r_0)\}\}^2$$

де  $\alpha$  - стала, характерна для даної молекули,  $D$  - енергія її дисоціації. Якщо розв'язати рівняння Шредінгера, у якому замість параболічного потенціалу використати для  $U(r)$  функцію Морзе, то з урахування ангармонізму енергія стаціонарних станів рівна

$$E_v = \left(v - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_v - \left(v - \frac{1}{2}\right)^2 \hbar \omega_v \xi$$

Тут  $\xi$  - стала ангармонізму, яка за порядком величини дорівнює  $\xi = 0,01$ .

Ангармонізм змінює вигляд коливального спектра молекул:

1. частоту нульових коливань при  $v = 0$  (віброне квантове число)

$$\omega'(v = 0) = \frac{\omega_v}{2} \left(1 - \frac{\xi}{2}\right), \omega_v = \sqrt{\frac{k}{m'}}$$

2. частоту основного стану ( $v = 0 \rightarrow v' = 1$ )

$$\omega'_v = \omega_v (1 - 2\xi)$$

3. правила відбору, з'являються нові правила відбору

$$\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots,$$

що призводить до появи обертонів з частотами:

$$\omega'_{v(\Delta v = +1)} = \omega_v (1 - 2\xi)$$

$$\omega'_{v(\Delta v = +2)} = 2\omega_v (1 - 3\xi)$$

## 5. Залежність електропровідності від температури донорного напівпровідника?(п. особливості напівпровідників, 19.8)

Повна електропровідність напівпровідника ( $\sigma$ ) є сумою її електронної та діркової частин:

$$\sigma = \sigma_e + \sigma_p = en_e \mu_e + ep_p \mu_p,$$

де  $n_e$  та  $n_p$  - концентрації електронів та дірок, а  $\mu_e$  та  $\mu_p$  - їхні рухливості відповідно. Отже, електропровідність залежить від концентрації носіїв заряду. Розглянемо на прикладі донорних домішок вплив температури на концентрацію носіїв. При низьких температурах основним джерелом електронів провідності будуть донорні домішки, а не валентна зона, бо  $E_d < E_g$ . Наявність домішок суттєво впливає на концентрацію носіїв та електропровідність напівпровідника. Зокрема, для донорного напівпровідника з концентрацією донорів  $N_d$  на глибині  $-E_d$  від дна зони провідності кількість іонізованих донорів, при умові  $N_d^+ < N_d$ , дорівнює

$$N_d^+ = \frac{N_d}{g} \exp\left\{-\frac{E_d + \mu}{k_B T}\right\}$$

де  $g$ - фактор виродження, який залежить від природи домішкового центру, наприклад, для мілких донорів  $g = 1/2$ . З умови нейтральності  $n = N_d^+$

$$N_c = \exp\left\{\frac{\mu}{k_B T}\right\} = \frac{N_d}{2} \exp\left(-\frac{E_d + \mu}{k_B T}\right)$$

знаходимо вираз для  $\mu$

$$\mu = -\frac{E_d}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_d}{2N_c}$$

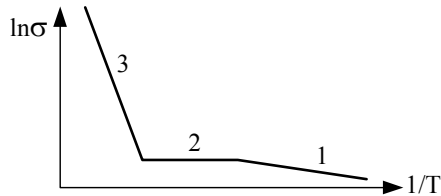
Видно, що рівень  $\mu$  знаходиться між дном зони провідності й рівнем донорних домішок. Підставивши цей вираз для  $\mu$  у попереднє рівняння, знайдемо концентрацію електронів у зоні провідності донорного напівпровідника

$$n = \sqrt{\frac{N_c N_d}{2}} \exp\left\{-\frac{E_d}{2k_B T}\right\}$$

$N_c = \frac{2(2\pi m^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$  називається *ефективним числом станів зони провідності, приведеним до дна цієї зони*.

$m^*$  - ефективна маса квазічастинки,  $k_B$  - стала Больцмана

При збільшенні температур домішки виснажуються, і тому подальша температурна залежність буде визначатися збудженням електронів із валентної зони в зону провідності, тобто температурна залежність при високих температурах буде визначатися не енергією активації  $E_d$  а енергією активації  $E_g$ . Температурна залежність електропровідності в широкому інтервалі температур матиме такий вигляд, як показано на схематичному рис.1. При низьких температурах (область 1) рівень хімічного потенціалу знаходиться між дном зони



**Рис. 1 Залежність  $\sigma(T)$  напівпровідника р-типу: 1- домішкова, 2 - насичення, 3 – власна (збудження носіїв із валентної зони).**

провідності й рівнем домішкових центрів. Нахил цієї залежності в напівлогарифмічному масштабі становить  $E_d/2$ , тому що концентрація електронів у зоні провідності утворюється іонізацією донорних домішок. При збільшенні температури, коли домішки стають іонізованими й  $n = N_d$ , утворюється 2-га область, яка називається областю насичення. У цій області електропровідність слабо залежить від температури. При ще більших температурах починається збудження носіїв із валентної зони. Рівень хімічного потенціалу опускається нижче рівня домішок, і температурна залежність електропровідності визначається, головним чином, енергією активації, що дорівнює половині ширини забороненої зони як для власного напівпровідника (остання формула). Аналогічні залежності можна отримати й для напівпровідників р-типу з акцепторними домішками.

## Білет 4

**1. Чому розсіювання  $\alpha$  частинок краще використовувати для визначення розмірів атомного ядра, ніж електрони з енергіями - 500 еВ?**

З дослідів Дж. П.Томсона з був зроблений висновок про те, що речовина в атомі розподілена не рівномірно. Найбільша її густина в центрі, а на периферії вона значно менша. Проте *малі енергії електронів  $E < 500$  кеВ*, що використовувались у досліді з їх розсіювання атомами, *не дали змогу в цих дослідіх позбавитись впливу електронів атома*, які досить інтенсивно розсіюють електрони малих енергій, що використовуються в цих дослідіх. Тому розміри атомного ядра не були точно визначені. Тому **Ернест Резерфорд** у 1911 році, разом зі своїми учнями вирішили використати для цього розсіювання  $\alpha$ -частинок.

$\alpha$ -частинки це двічі іонізовані атоми гелію ( $He^{2+}$ ). Маса її набагато більша за масу електрона ( $M_\alpha > m_0$ ). Це означає, що центр мас системи  $\alpha$ -частинки й електрона майже збігається з центром  $\alpha$ -частинки ( $M_{ef,\alpha,e} = M_\alpha \cdot m / (M_\alpha + m) = m / (1 + m/M_\alpha) \cong m$ ). Отже,  $\alpha$ -частинки майже не будуть змінювати напрямку свого руху при їх пружному розсіянні на електронах атомних оболонок, тобто їх розсіянням електронами атомів можна знехтувати.

Оскільки  $M_{ядра} > M_\alpha$ , то приведена маса<sup>3</sup> системи  $\alpha$ -частинки й ядра майже збігається з масою  $\alpha$ -частинки  $M_{ef,\alpha-ядра} \approx M_\alpha$ . Внаслідок цього вона буде розсіюватися відносно майже нерухомого атомного ядра, тобто початок координат можна розмістити у центрі атомного ядра. Крім того, в дослідіх використовувались досить швидкі  $\alpha$ -частинки з  $v_\alpha = 9 \times 10^9$  см  $\times$  с<sup>-1</sup> ( $E \approx 4,78$  МеВ). Їх

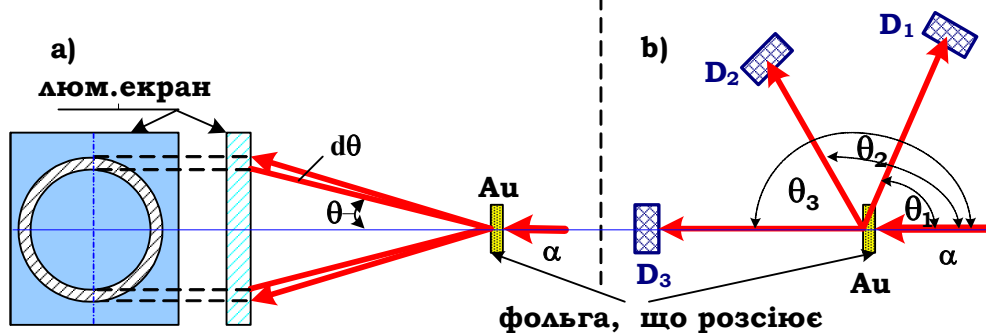
<sup>3</sup> Приведена маса системи, що складається з атомного ядра (наприклад атома золота) і  $\alpha$ -частинки, дорівнює  $M_{ef,\alpha,ядро} = M_\alpha M_{Au} / (M_\alpha + M_{Au}) = M_\alpha (1 / (1 + 4/196)) \cong M_\alpha$ .

довжина хвилі де Бройля була малою  $\lambda = h / (M_{\alpha} v) = 10^{-13} \text{ см}$ , меншою за розміри атомів ( $\lambda < r_{\text{атома}}$ ), тому можна було знехтувати хвильовими властивостями й розглядати майже класичний випадок пружного розсіювання.

**Тому краще використовувати  $\alpha$ -частинки, ніж електрони з енергіями-500 еВ.**

Експериментальний прилад схематично наведений на рис.3.1. Він складався з трьох частин: (1) - джерела направленої потоку  $\alpha$ -частинок, (2) - камери розсіювання з тонкою фольгою речовини, що розсіює, і (3) - детектора розсіяних  $\alpha$ -частинок. Як детектор використовують флуоресцентний екран або лічильник Гейгера.

Досліджувався кутовий розподіл пружно розсіяних  $\alpha$ -частинок, котрий знаходився за допомогою просторового розподілу інтенсивності флуоресценції екрану під дією  $\alpha$ -частинок, або за допомогою лічильника, який міг обертатися навколо зразка. Ці способи реєстрації розсіяних  $\alpha$ -частинок схематично зображені на рис.3.2.



**Рис. 3.2.** Схема реєстрації розсіяних  $\alpha$  частинок у досліді Резерфорда: а - фотопластинка або люмінесцентний екран, б – лічильник Гейгера, що може змінювати положення у просторі.

**2. При яких товщинах металевих плівок, що знаходяться при температурі 10К не можна знехтувати дискретним характером енергетичного спектра електронів?**

За даної температури, енергію електронів у плівці можна записати так:

$$E = \frac{p^2}{2m_e} = k_B T,$$

де  $m_e$  - маса електрона. Звідси можна виразити імпульс:

$$p \rightarrow \Delta p = \sqrt{2m_e k_B T}.$$

Використаємо співвідношення невизначеності Гейзенберга:  $\Delta p \Delta x \geq h$ :

$$\Delta x \geq \frac{h}{\sqrt{2m_e k_B T}} = \frac{6.626 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 * 9.1 \times 10^{-31} * 1.38 \times 10^{-23} * 10}} = 4.2 \times 10^{-8} [\text{м}]$$

**3. Які основні спрощуючі положення використовуються у векторній моделі атома?**

Визначення електронних станів багатоелектронних атомів - дуже складна задача. Тому на практиці їх аналіз здійснюють за допомогою наближених методів, наприклад, векторної моделі атома, яка дозволяє систематизувати квантові стани. Вихідним її положенням є те, що енергія електрона в складному атомі визначається електронною конфігурацією - розподілом електронів між наявними орбіталями і комбінацією можливих спінових і орбітальних внесків, що призводять до повного кутового моменту атома. Електронна конфігурація знаходиться за допомогою принципу

Паулі, згідно якого в електронному стані з чотирма квантовими числами (наприклад,  $n, \ell, m_\ell, m_s$  або  $n, \ell, j, m_j$ ) може знаходитись тільки один електрон. Терми позначають через сумарні кутові моменти, які дає векторна модель. Оскільки в основне рівняння кутових моментів не входить потенціал  $U(r)$ , то це значно спрощує аналіз багатоелектронних атомів. Визначення сумарного (повного) вектора кутового моменту (моменту кількості руху) зводиться у векторній моделі до алгебраїчного складання квантових чисел, що характеризують вектори кутових моментів електронів. Отже, у векторній моделі замість розв'язку складної задачі знаходження енергетичних рівнів атомів здійснюються класифікація або систематизація квантових станів. Вона полягає у знаходженні відповідних квантових чисел складної системи за допомогою комбінаторики квантових чисел більш простих (одноелектронних) систем і визначенні набору енергетичних рівнів, які належать одному терму, тобто мультиплетності термів.

Ця задача спрощується ще й тому, що електрони всіх заповнених оболонок, крім валентної, мають нульовий кутовий момент ( $L_L = 0, L_S = 0, L_J = 0$ ) і, замість розгляду внесків усіх  $Z$  електронів, можна обмежитись розглядом лише валентних електронів. Для спрощення складання кутових моментів валентних електронів прийнято розрізняти два граничних випадки моделей зв'язку: нормального ( $L-S$  або Рассел-Саундерівського) та  $j-j$  зв'язку.

Нормальним називається зв'язок, коли енергії взаємодії орбітальних ( $E_{\ell-\ell}$ ) і спінових моментів ( $E_{s-s}$ ) кількості руху, в основі яких лежить електростатична квантова взаємодія, більші за енергію спін-орбітальної взаємодії ( $E_{\ell-s}$ ), магнітна взаємодія якої пропорційна квадрату сталої тонкої структури,

$$|E_{\ell-\ell}| \text{ та } |E_{s-s}| > |E_{\ell-s}|. \quad (1)$$

$J-J$  зв'язком називається випадок, коли енергії орбітальної ( $E_{\ell-\ell}$ ) та спін-спінової ( $E_{s-s}$ ) взаємодій менші за енергію спін-орбітальної взаємодії ( $E_{\ell-s}$ )

$$|E_{\ell-\ell}| \text{ та } |E_{s-s}| < |E_{\ell-s}| \quad (2)$$

Жодна із розглянутих моделей не дає точного уявлення про справжній стан, тому що завжди існує внутрішня конкуренція між різними типами взаємодій. Навіть в одному атомі різні електрони взаємодіють за різними схемами. Але для легких атомів, у яких незначна спін-орбітальна взаємодія, нормальна (Рассел-Саундерса) модель дозволяє описувати поведінку валентних електронів. У важких атомів, здебільшого, переважає  $j-j$  зв'язок, бо у них суттєво збільшується спін-орбітальна взаємодія. Взагалі векторна модель відіграє допоміжну роль мнемонічного правила.

#### **4. Проаналізуйте процеси в атомах, які збуджує квант рентгенівських променів, що поглинається.**

- При поглинанні рентгенівських променів у заповнених шарах атомів утворюється вакансія, яка заповнюється електронами, що переходять на неї з менш глибоких шарів, і випромінюється характеристичний спектр К-, L-, M-, і т.д. залежно від того, на якій оболонці виникла вакансія. У цьому випадку виникає **рентгенівська флуоресценція**. Тому відсутній ефект обертання лінії спектра, притаманний оптичним спектрам.

- Кожен шар атома характеризується певною кількістю можливих термів. Ця кількість визначає тонку структуру краю поглинання. *Причиною тонкої структури спектрів поглинання є спін-орбітальна й електростатична взаємодія, які відповідають за мультиплетність термів;*

- Далеко від країв смуги поглинання має місце кубічна залежність коефіцієнта поглинання від довжини хвилі рентгенівських променів, що поглинаються,  $\tau_A = KZ^4\lambda^3$ ;

- Поглинання квантів рентгенівських променів, крім флуоресценції, може збуджувати також **рентгенівський фотоефект (емісію фотоелектронів)**. Кінетична енергія фотоелектронів, що

емітують, залежить при  $\hbar\omega = \text{const}$  від енергії оболонки ( $eV_i$ ), з якої збуджуються електрони  $mv^2/2 = h\nu - e\phi - eV_i$ , де  $e\phi$  -робота виходу електронів з твердих тіл. Ця особливість фотоелектронної емісії використовується в *електронній спектроскопії для хімічного аналізу (ЕСХА)*.

• При поглинанні рентгенівських променів, крім флуоресценції та рентгенівського фотоэффекту, може відбуватись автоіонізація або *оже-електронна емісія*. Оже-електронна емісія переважає над флуоресценцією в речовинах із малими атомними номерами  $Z$ , тоді як при великих  $Z$  переважає рентгенівська флуоресценція.

**Оже-ефект або автоіонізація є процесом іонізації (емісії електронів) не за допомогою зовнішньої енергії, а за рахунок енергії збудження самого атома, яка передається електрону не через поглинання кванту, а через внутрішні зв'язки системи без випромінювання.**

На відміну від фотоелектронів, енергія яких пропорційна енергії квантів, що їх збуджують, енергія оже-електронів визначається енергетичною структурою атомів. Кожний атом має свій набір значень  $E_K, E_{L_I}, E_{L_{II}}, \dots, eV_i$ , тому він також матиме свій характерний набір кінетичних енергій для оже-електронів, що емітують. Оже-електронна емісія досить розповсюджене явище. Вона навіть більш інтенсивна, ніж рентгенівська флуоресценція атомів із малими атомними номерами  $Z$ .

### 5. Що таке зони Бріллюена? Наведіть зони Бріллюена у одновірній моделі кристалів.

Розриви енергетичного спектра, що призводять до утворення заборонених зон, мають місце при умові

$$k_{\text{гp}} = n \frac{\pi}{a}, \quad (1)$$

де  $n$  - ціле число. Підставимо у (1) значення  $k$  через довжину хвилі де Бройля  $\lambda (k = 2\pi/\lambda)$ . Тоді умова розриву зон стає подібною до формули Вульфа - Брегга для одновимірної ґратки ( $2a \cdot \sin\theta = n\lambda$  при  $\theta = \pi/2$  має вигляд  $2a = n\lambda$ )

$$2a = n\lambda. \quad (2)$$

Отже, розрив зон виникає, коли замість біжучої електронної хвилі виникає стояча хвиля внаслідок дифракції Брегга на періодичній структурі кристалу. Електрон із хвильовим вектором  $k = \pm n\pi/a$  знаходиться значний час біля атомних залишків або знаходиться в просторі між ними. *Області значень хвильових векторів  $k$  квазічастинок-електронів (рис.1.а), у межах яких енергія електрона змінюється майже неперервно, а на її границях відбувається розрив, називаються зонами Бріллюена.* Для одновимірної ґратки (рис.1) перша зона Бріллюена знаходиться при  $-\pi/a < k < \pi/a$ , друга - при  $-2\pi/a < k < -\pi/a$  і

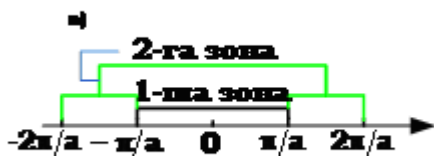
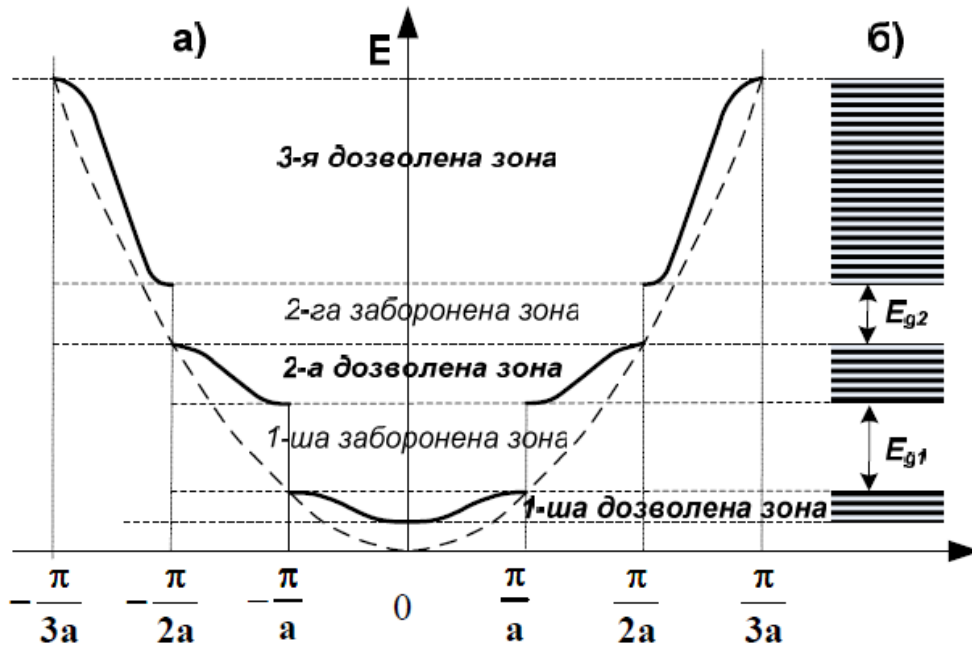


рис.1 Перші зони Бріллюена для одновимірного кристалу

$\pi/a < k < 2\pi/a$  і т. д. Усі зони Бріллюена для одновимірної ґратки мають однакову протяжність, що дорівнює  $2\pi/a$ .



**Рис. 20.4. Енергетичний спектр електронів  $E(k)$  у моделі Кроніґа – Пені (розширені зони) для одновимірного кристала (а) та дозволені й заборонені зони (б).**

## Білет 5

//частично совпадає со старим білетом №24

1. Чим відрізняються пружне, непружне і над пружне розсіяння? Приклади.
2. Правила відбору на квантові числа. Як вони встановлюються?
3. За яких умов існує лінійний і квадратичний ефект Штарка?
4. Які фізичні параметри вдається визначити при дослідженні обертальних спектрів молекул?
5. Густина станів у валентній зоні та зоні провідності напівпровідників.

1. Пружне розсіювання - змінюються лише імпульси (а значить і кінетичні енергії) взаємодіючих частинок. Внутрішні стани взаємодіючих частинок не змінюються, акти народження/розпаду/перетворення частинок не спостерігаються (Релеєвське розсіяння). Непружне розсіювання - в результаті взаємодії (зіткнення) змінюються крім імпульсів внутрішні стани частинок і/або відбуваються їх перетворення (іонізація, збудження атома, ефект Комптона, комбінаційне розсіяння світла (стоксова область)). Надпружне розсіювання - в результаті взаємодії внутрішня енергія частинок переходить у кінетичну (обернений ефект Комптона, комбінаційне розсіяння світла (антистоксова область)). //в скобках - приклади (кэп)

2. //дальше копіює лекції без лишніх слів

Розглянемо перехід із одного стаціонарного стану з  $E_n$  і  $\Psi_n$  в інший з  $E_k$  і  $\Psi_k$ . Хвильові функції цих стаціонарних станів мають такий вигляд

$$\Psi_{t,n,k} = \Psi_{n,k}(\mathbf{x}) e^{-i \frac{E_{n,k}}{\hbar} t} \quad (8.70)$$

Знайдемо середнє значення  $\langle x \rangle$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{t,n,k}^* x \Psi_{t,n,k} dx = \int \Psi_{n,k}^* x \Psi_{n,k} dx \quad (8.71)$$

Із формули (8.71) видно, що в стаціонарних станах середнє значення  $\langle x \rangle$  не залежить від часу. Тому і середній дипольний момент  $e\langle x \rangle$  не залежить від часу. Незалежність дипольного моменту від часу означає, що в цьому випадку не відбувається випромінювання електромагнітних хвиль.

Розглянемо тепер перехід із одного стаціонарного стану з квантовим числом  $n$  в інший з квантовим числом  $k$ <sup>5</sup>. В перехідному стані виникає змішаний стан, котрий є суперпозицією цих двох станів  $n$  і  $k$  з хвильовою функцією  $\Psi_t$

$$\Psi_t = C_n \Psi_{t,n} + C_k \Psi_{t,k} \quad (8.72)$$

де  $|C_n^* C_n|$  та  $|C_k^* C_k|$  є ймовірності системи знаходитись в стані  $n$  або в стані  $k$ . Умова нормування дає  $C_n^* C_n + C_k^* C_k = 1$  (8.73)

Обчислимо тепер середнє значення  $\langle x \rangle$  для змішаного стану

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} (C_n^* \Psi_{t,n}^* + C_k^* \Psi_{t,k}^*) (C_n \Psi_{t,n} + C_k \Psi_{t,k}) x dx = \\ &= C_n^2 \int \Psi_n^* x \Psi_n dx + C_k^2 \int \Psi_k^* x \Psi_k dx + \\ &+ C_k^* C_n \int \Psi_k^* x \Psi_n e^{i\frac{t}{\hbar}(E_k - E_n)} dx + C_n^* C_k \int \Psi_n^* x \Psi_k e^{-i\frac{t}{\hbar}(E_k - E_n)} dx \end{aligned} \quad (8.74)$$

В окремому випадку зв'язаної системи з двома станами цю задачу можна спростити, тому що для такої системи  $\Psi_n^* \Psi_k = \Psi_k^* \Psi_n$  і  $C_n^* C_k = C_k^* C_n$  і формула (8.74) набуває такого вигляду

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= C_n^2 \langle x \rangle_n + C_k \langle x \rangle_k + C_n^* C_k \langle x \rangle_{n,k} (e^{i\omega_{kn} t} + e^{-i\omega_{kn} t}) = \\ &= C_n^2 \langle x \rangle_n + C_k^2 \langle x \rangle_k + 2C_n^* C_k \langle x \rangle_{nk} \cos \omega_{kn} t \end{aligned}$$

$$\text{де } \omega_{kn} = \frac{1}{\hbar} (E_k - E_n) \quad \langle x \rangle_{kn} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* x \Psi_n dx \quad (8.75)$$

Цей вираз (8.75) називається матричним елементом переходу електрона із одного стану з квантовим числом  $n$  в другий стан з квантовим числом  $k$ . Якщо під час цього переходу матричний елемент  $\langle x \rangle_{kn}$  не рівний нулеві ( $\langle x \rangle_{kn} \neq 0$ ), то і дипольний момент  $e\langle x \rangle_{kn} \neq 0$ . Це означає, що при такому переході диполь буде випромінювати електромагнітні хвилі з частотою, котра визначається за правилом частот Бора  $\hbar\omega = E_k - E_n$ . Таким чином, величина матричного елемента визначає дозволені і заборонені переходи:  $\langle x \rangle_{mn} = 0$  заборонені переходи;  $\langle x \rangle_{mn} \neq 0$  дозволені переходи (8.76)

Формула (8.76) називається правилом відбору. Визначимо для прикладу правило відбору для магнітного числа  $m$  для дипольних переходів у випадку хвильових функцій електрона в атомі водню, для якого

$$\Psi_{n,\ell,m} = R_n^\ell(r) \Theta_\ell^m(\theta) \Phi_m(\varphi) \quad (8.77)$$

Знайдемо середнє значення  $x = r \sin\theta \cos\varphi$

$$\langle x \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R_n^{\ell*} R_n^\ell r \Theta_\ell^{*m} \Theta_\ell^m \sin\theta \Phi_m^* \cos\varphi \Phi_m r^2 \sin\theta d\theta d\varphi \quad (8.78)$$

<sup>5</sup> В даному випадку  $n$  і  $k$  є квантові числа двох стаціонарних станів.

Інтеграл в формулі (8.78) можна записати як добуток трьох інтегралів по  $r$ ,  $\theta$  і  $\varphi$ , тому що функції  $R(r)$ ,  $\theta(\theta)$  і  $\Phi(\varphi)$  залежать лише від своєї змінної  $r$ ,  $\theta$  або  $\varphi$ . Із умови, що  $\langle x \rangle \neq 0$ , знаходимо дозволений перехід. Це означає, що всі три інтеграл в (8.78) повинні бути не рівні нулеві. Обмежимося розглядом інтеграла по змінній  $\varphi$ .

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^* \cos\varphi \Phi_m^1 d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m^1)\varphi} \cos\varphi d\varphi = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m^1)\varphi} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) d\varphi =$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} [e^{i(m-m^1+1)\varphi} + e^{i(m-m^1-1)\varphi}] d\varphi \neq 0 \quad (8.79)$$

Умова (8.79) виконується лише тоді, коли  $\Delta m = \pm 1$

Із умови  $\langle z \rangle \neq 0$ , де  $z = r \cos\theta$  таким самим чином отримаємо ще одну умову відбору  $\Delta m = 0$ . Тому правило відбору для магнітного квантового числа  $m$  для дипольних переходів має такий вигляд  $\Delta m = 0; \pm 1$ . Аналогічно, аналізуючи інтеграл по  $\theta$ , знайдемо правила відбору для орбітального числа  $\ell$ , яке має такий вигляд  $\Delta \ell = \pm 1$ . Головне квантове число  $n$  може змінюватись на будь-яке число одиниць.

Ці правила відбору справедливі лише для спонтанних дипольних переходів. Для інших випадків більш складних переходів та для вимушених переходів ці правила відбору можуть бути порушені. //как вы,наверное, догадались это мы доказали ток для атома водорода, но в более сложных атомах пространственный вид определенных орбиталей сохраняет основные черты(симметрию относительно оси OZ например), что позволяет нам применять правила отбора и для более сложных атомов.

**3. Ефект Штарка**- це явище, яке полягає в тому, що в зовнішньому електричному полі енергетичні рівні атомів, молекул та кристалів зміщується і розщеплюються на підрівні. Воно проявляється в зміщенні і розщепленні спектральних ліній в спектрах випромінювання і вбирання (поглинання). Кожна лінія в електричному полі розщеплюється на певне число компонентів, тим більше, чим більше номер серії спектральної лінії  $n$  (головне квантове число змінного терму).

**Лінійний ефект Штарка** ( $\Delta v \sim E$ ) має місце тоді, коли збуджені атоми мають не нульовий дипольний момент ( $P = \langle ez \rangle \neq 0$ ). В цьому випадку в зовнішньому електричному полі електричний диполь має додаткову енергію, рівну  $\Delta E = -(\vec{P} \cdot \vec{E}) = -(ezE)$

**Квадратичний ефект Штарка** ( $\Delta v \sim E^2$ ) має місце тоді, коли в атомах відсутнє виродження (\*виродження в том, что несколькими состояниями атома(с одной и той же энергией) соответствовала одна и та же поляризуемость  $\alpha$ , а наблюдать можна потому, что отсутствует более сильный линейный эффект \*) таке, як у атома водню, лінійний ефект відсутній, діє дуже велика напруженість електричного поля. В цьому випадку в зовнішньому електричному полі виникає наведений дипольний момент:  $\vec{P} = \alpha \vec{E}$ , де  $\alpha$  - поляризованість атома. Додаткова енергія за рахунок взаємодії наведеного дипольного моменту з зовнішнім електричним полем квадратично залежить від

$$\text{напруженості поля } \mathbf{E}: \Delta E = -\int_0^E P dE = -\int_0^E \alpha E dE = -\frac{\alpha E^2}{2}$$

**4.** -сталу Ейнштейна  $V = \hbar/2J$ , із якої можна вирахувати момент інерції  $J$ , або знайти її розмір, якщо відомі маси атомів, що входять до складу молекули

- розподіл молекул по енергіям
- визначити чи молекули оптично неактивні.



- І якщо оптично неактивні молекули стають оптично активними, то наявність зовнішнього поля, котре наводить дипольний момент і створюють наведену анізотропію. А тоді і саму величину цього поля.

- Визначити дзигую якого типу з багато атомна молекула
- Сталі розтягу молекули(нежорсткість)
- Електричні та магнітні моменти при накладанні зовнішнього поля

5. Кожна зона має свій енергетичний спектр - залежність енергії квазічастинок від квазіімпульсу  $E(p) = E(\hbar k)$ , яку також називають дисперсійною залежністю. Дисперсійна залежність визначає таку важливу характеристику твердих тіл як густину станів  $g(E)$ . Густиною станів називається кількість можливих фізично

нееквівалентних енергетичних станів у малому інтервалі енергій  $E$ , віднесеному до ширини інтервалу  $\Delta E$ :

$$g(E) = \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \frac{\Delta \Gamma}{\Delta E}$$

де  $\Delta \Gamma$  - кількість станів з енергіями в інтервалі від  $E$  до  $E + \Delta E$  з урахуванням виродження  $2s+1$ , де  $s$  - спін частинки в одиницях  $\hbar$  (для електронів  $s = 1$ ). Так як частинки підлягають законам квантової механіки, то у відповідності із співвідношенням невизначеності вони займають у фазовому просторі  $\{p_x, p_y, p_z, x, y, z\}$  скінчений об'єм:  $\Delta V_{ph} = \Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = h^3$  або  $\Delta V_p = \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = \frac{h^3}{V}$

де  $V$  - об'єм, в якому квазічастинка вільно рухається. Для визначення  $\Delta \Gamma$  в формулі потрібно знайти кількість елементарних фазових комірок в інтервалі квазіімпульсів від  $p$  до  $p + dp$  і помножити їх на  $(2s+1)$  - кількість спінових станів квазічастинки в елементарній фазовій комірці. Виберемо у фазовому просторі дві ізоенергетичні поверхні (поверхні з  $E = \text{Const}$ ), які відрізняються за енергією одна від одної на величину  $\Delta E$ . Виберемо на одній з ізоенергетичних поверхонь малу площу  $dS$ . Тоді об'єм, обмежений  $dS$  і цими

поверхнями, визначиться інтегралом:  $\int \frac{dS}{|\nabla_p E(p)|}$ , де  $|\nabla_p E(p)|$  - найкоротша відстань між двома ізоенергетичними поверхнями. Якщо цей об'єм поділити на об'єм елементарної комірки у фазовому просторі  $\Delta V_p$  і помножити на виродження - можливу кількість спінових станів у комірці  $(2s+1)$ , то отримаємо густину станів:  $g(E) = \frac{(2s+1)V}{h^3} \int \frac{dS}{|\nabla_p E(p)|}$ . Наближення квазівільних електронів:  $E(p) = \frac{p^2}{2m}$ ,

$$dS = p^2 \sin \theta d\theta d\varphi - \text{елемент площі в сферичних координатах. Тоді: } g(E) = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} V \sqrt{E}.$$

Для напівпровідників: Виберемо початок координат для енергії на дні зони провідності, коли  $E = E_c$ . Густина станів у зоні провідності та валентній зоні згідно формули (19.27) мають такий вигляд:

$$g(E) = \frac{4\pi(2m_c^*)^{3/2}}{h^3} V \sqrt{E} - \text{електронів у зоні провідності, } g(E) = \frac{4\pi(2m_v^*)^{3/2}}{h^3} V \sqrt{E_v - E} - \text{дірок у валентній зоні}$$

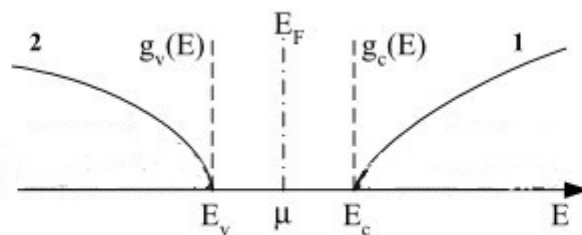


Рис.19.10. Енергетичний розподіл густини станів (1 і 2) електронів та дірок у зонах провідності та валентній зоні

## Білет 6

1. Принцип Франка-Кондора. Інтенсивність ліній молекулярних спектрів. (Метода Находкіна розділ 19.6 ст.484)

2. Необхідні умови для опису фізичної величини розв'язками рівняння Шредінгера. (Метода Находкіна - 7 розділ (в основному 7.1))

3. Побудуйте векторні діаграми складання спінових і орбітальних моментів електрона на s-орбіталі. *норм Методичка Находкіна – розділ 11*
4. Відмінність поглинання в рентгенівських і оптичному діапазоні. *норм (розд. 15.1 ст.363)*
5. Відмінність в зонній структурі металів діелектриків. *норм (Розд. 20.5 ст. 520)*

### 1. Принцип Франка-Кондора. Інтенсивність ліній молекулярних спектрів.

*Принцип Франка-Кондона враховує, що електронні переходи в молекулі відбуваються так швидко, що за час переходу не змінюється ні відносне положення, ні швидкості її атомних ядер. Він заснований на тому, що через велику різницю мас ядерного остову й електронів час електронних переходів значно менший за час коливальних переходів ( $\tau_E \ll \tau_V$ ). На енергетичних схемах електронні переходи за принципом Франка-Кондона зображаються вертикальними лініями. В рамках класичної моделі вертикальні переходи відбуваються переважно між точками, які лежать на потенціальних кривих. Участь коливального руху при цьому пояснюється тим, що відбуваються переходи в стани стисненої або розтягнутої молекули, яка після електронного переходу починає коливатись.*

Принцип Франка - Кондона можна використовувати під час розгляду оптичних переходів із поглинанням або випромінюванням квантів, а також неоптичних переходів, наприклад, під час розгляду предисоціації або при передачі електронного збудження при зіткненнях. Він використовується для якісного пояснення інтенсивностей окремих ліній в електронно-коливальних смугах поглинання й електронно-коливальних спектрах випромінювання. Для того, щоб зрозуміти, як змінюються інтенсивності ліній молекулярних спектрів у залежності від  $\omega$ ,  $j$ , або від різновиду переходу необхідно:

- розглядати вертикальні переходи на діаграмі  $U(r)$ , де  $r$  –міжядерна відстань;
- урахувати розподіл густини ймовірності  $|\psi^* \psi|$  на різних коливальних станах із вібронними квантовими числами, які беруть участь у формуванні спектральних ліній, враховуючи що інтенсивність лінії пропорційною добутку густин ймовірності на не збудженому (нормальному) і збудженому станах, між якими відбувається перехід.

Найбільш просто застосувати принцип Франка-Кондона до двоатомних молекул. На рис.19.16 схематично зображені криві молекулярної енергії і густини ймовірностей у двох електронних станах двоатомної молекули. Видно, що густини ймовірностей нерівномірно розподілені вздовж рівня сталої енергії (рівня з  $v = \text{Const}$ ) і залежать від стану збудження. Ця обставина впливає на імовірність переходів, бо вони пропорційні добутку ймовірностям зайняти енергетичний рівень у збудженому й у не збудженому станах. Найбільша ймовірність переходу має місце, коли густина електронних станів на верхньому й нижньому рівнях у точках перетину з вертикальною лінією переходу максимальна. Якщо для різних переходів вона змінюється, то змінюється й інтенсивність спектральних ліній.

У різних станах збудження змінюється рівноважна відстань між атомними ядрами в молекулі ( $r$ ), тому цікаво розглянути стани з різними рівноважними значеннями  $r$ . Розглянемо декілька конкретних прикладів двох атомних молекул, які відрізняються різними між'ядерними відстанями  $r$  в збудженому й нормальному станах, можливістю дисоціації молекули на із атоми або переходом синглетного в триплетний стан.

**Приклад перший - зменшення інтенсивності спектральних ліній від частоти**, коли між'ядерна відстань не змінюється при електронному збудженні молекул, тобто коли  $r_{m1}(E_1) = r_{m2}(E_2)$ .

**Приклад другий - поява екстремуму на залежності інтенсивності спектра поглинання від частоти**, коли між'ядерна відстань двоатомної молекули в збудженому стані більша відстані в не збудженому стані  $r_{m2}(E_2) > r_{m1}(E_1)$ .

**Приклад третій - смуга поглинання.** Нехай при збудженні двоатомної молекули між'ядерна відстань сильно збільшується  $r_{m2} \gg r_{m1}$ , а крива потенціальної енергії молекули в збудженому стані змінюється так, що енергія зв'язку атомів у неї зменшується. У такій системі виникає неперервне поглинання, бо починаючи з переходу 0-4 енергія збудження стає більшою від енергії зв'язку атомів у збудженій молекулі. Молекула за таких умов переходить у незв'язаний стан із неперервним енергетичним спектром. Електрони при збудженні переходять на енергетичні рівні неперервного спектра, і виникає суцільна смуга поглинання (континуум).

**Приклад четвертий – предисоціація.** Розглянемо випадок такої двоатомної молекули, для якої залежність  $U_2(r)$  потенціальної енергії молекули в зв'язаному збудженому стані ( $AB^*$ ) перетинається із кривою  $U_3(r)$  потенціальної енергії незв'язаного збудженого стану двох атомів  $(A+B)^*$ . Не зв'язаний стан  $(A+B)^*$  має потенціальну криву без мінімуму, бо він не стабільний. Атоми в цьому стані відштовхуються. При збудженні молекули, наприклад, квантом енергії  $h\nu$ , електрон переходить у вертикальному напрямку (за принципом Франка-Кондона) з основного стану на кривій  $U_1(r)$  до збудженого електронно-коливального стану на кривій  $U_2(r)$ . Із збудженого стану за участю коливального руху молекули можливий перехід без випромінювання (процес подібний до оже-процесу) на криву незв'язаного збудженого стану  $U_3(r)$ , що призведе до дисоціації молекули. Безвипромінювальний перехід у точці перетину кривих  $U_2(r)$  і  $U_3(r)$  відбувається за час менший періоду обертання молекули. Внаслідок цього зникають обертальні особливості переходу. Але за час сумірний із періодом коливання система переходить із лівої частини кривої  $U_2(r)$  у точку перетину кривих  $U_2(r)$  і  $U_3(r)$  і спектр стає неперервним, бо в стані  $(A+B)^*$  не має коливальних рівнів. Цей перехід молекули без випромінювання зі стійкого електронного стану в нестійкий стан із тією самою енергією, що супроводжується дисоціацією молекули, називається предисоціацією. Предисоціація виникає при певній енергії збудження  $h\nu \approx E_{II}$ , де  $E_{II}$  - енергія в точці перетину двох потенціальних кривих зв'язаного  $(AB)^*$  і не зв'язаного  $(A+B)^*$  станів. Коли система переходить на коливальний рівень, що збігається з енергетичним рівнем перетину потенціальних кривих  $U_2(r)$  і  $U_3(r)$  зв'язаного й не зв'язаних станів.

**П'ятий приклад - флуоресценція.** Збуджені молекули можуть витратити частину своєї енергії без випромінювання на збудження коливальних переходів, і тому випромінювати кванти світла з меншими енергіями ( $\hbar\omega_{ph} < \hbar\omega_0$ ) – стоксівська область флуоресценції. Тут  $\hbar\omega_{ph}$  і  $\hbar\omega_0$  - енергії квантів флуоресцентного збуджуючого світла відповідно. Флуоресценція – це нерівноважне явище, для якого втрачається поняття температури. Флуоресценція затухає із середнім часом  $\tau_{ph} \sim 10^{-8} - 10^{-5}$  с. Крім стоксівської області флуоресценції може мати місце й антистоксівська область (рис.19.21.Б), де внаслідок передачі частини коливально-обертальної енергії молекул збільшується енергія квантів, що випромінюються ( $\hbar\omega_{ph} > \hbar\omega_0$ ).

**Шостий приклад - фосфоресценція.** У молекулярних спектрах  $\Delta S \neq \pm 1$ , як і для атомів.

Для випадку молекули, коли є синглетний і триплетний збуджені стани. У цьому разі енергія, що поглинається, переводить молекулу з основного стану в збуджений синглетний стан. Після цього частина енергії може бути витрачена на збудження коливальних станів, які відбуваються без випромінювання квантів. Якщо, крім того, матиме місце перетин кривих потенціальної енергії синглетного й триплетних станів, то збуджена молекула перейде з збудженого синглетного до збудженого триплетного стану без випромінювання кванта, здійснивши інтеркомбінаційний перехід. Радіаційний перехід молекули із триплетного в основний синглетний стан заборонений правилами відбору. Тому цей рівень метастабільний зі значним часом життя.

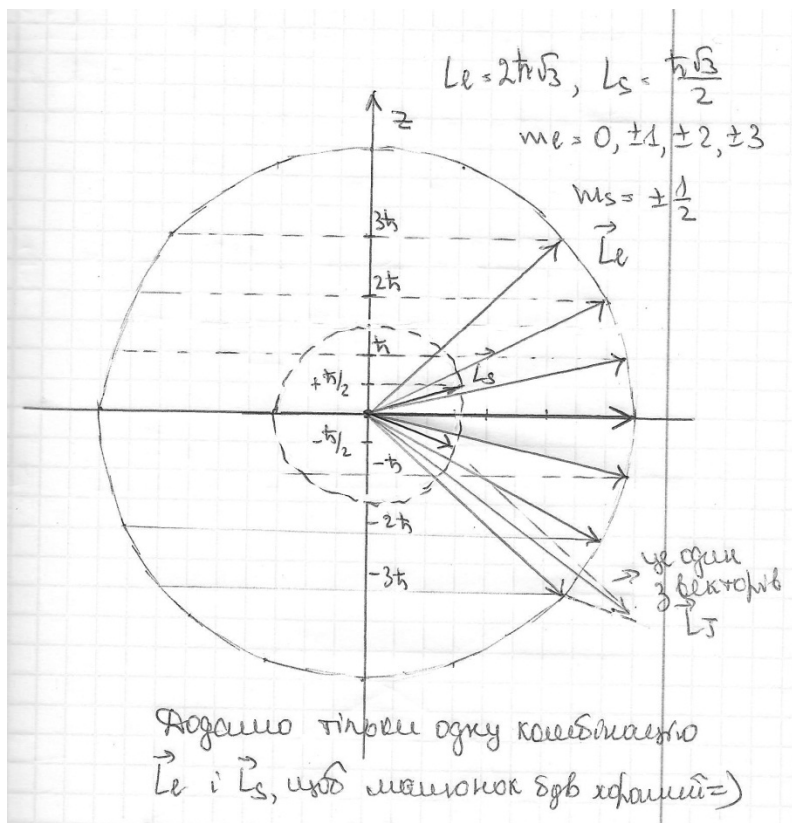
## 2. Необхідні умови для опису фізичної величини розв'язками рівняння Шредінгера.

З усіх можливих розв'язків рівняння Шредінгера  $\Delta\psi(r) + \frac{2m_0}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi(r) = 0$  вибирають лише хвильові функції, які **задовольняють такі вимогам: неперервності, однозначності, скінченності, ортонормованості.**

Аналіз показує, що для випадків, коли  $U(r) \neq 0$ , задовольнити умовам скінченності, однозначності, неперервності й ортонормованості можна **лише при певних власних значеннях  $E$ , які можуть бути дискретними або неперервними.** Тому розв'язок рівняння Шредінгера дає: - спектр власних значень  $E$  та - набір ортонормованих хвильових функцій  $\psi_1, \psi_2, \psi_3$ .

### 3. Побудуйте векторні діаграми складання спінових і орбітальних моментів електрона на s-орбіталі.

Оскільки  $l = 3$ ,  $s = 1/2$ , то  $L_l = \hbar\sqrt{l(l+1)} = 2\hbar\sqrt{3}$ ,  $\vec{L}_s = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \frac{\hbar\sqrt{3}}{2} \rightarrow \vec{L}_j = \vec{L}_s + \vec{L}_l$ .  
 Можливі значення  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ ,  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ .



### 4. Відмінність поглинання в рентгенівських і оптичному діапазоні.

**Спектр поглинання рентгенівських променів  $\tau(\nu)$  має такі властивості:**

- 1) **відсутній ефект обертання ліній спектра**, притаманний оптичним спектрам. Цей ефект зв'язаний з тим, що при поглинанні рентгенівських променів у заповнених шарах атомів утворюється вакансія, яка заповнюється електронами, що переходять на неї з менш глибоких шарів (шарів з меншими  $n$ ), і випромінюється характеристичний спектр К-, L-, M-, і т.д., або L-, M-, і т.д. залежно від того, на якій оболонці виникла вакансія. Кажуть, що в цьому разі має місце **рентгенівська флуоресценція**;
- 2) **край поглинання має тонку структуру**: К-край один стрибок, L-край- 3 стрибки  $L_I, L_{II}, L_{III}$ , M-край- 5 стрибків. Кількість можливих стрибків визначається кількістю можливих підтермів (оболонки) у даному шарі атома. **Причиною тонкої структури спектрів поглинання є спіно-орбітальна й електростатична взаємодія, які відповідальні за мультиплетність термів**;
- 3) краї поглинання мають також **тонку протяжну структуру для конденсованих фаз речовини**, що відображає густину енергетичного розподілу вільних електронних станів у цій речовині (рис.15.8), інтенсивність поглинання пропорційна густині вільних станів (1 – 7 на рис.15.8), на які переходять електрони, збуджені квантами, що поглинаються;
- 4) далеко від країв смуги поглинання має місце кубічна залежність коефіцієнта поглинання від довжини хвилі рентгенівських променів, що вбираються,  $\tau_A = KZ^4\lambda^3$ ;

5) поглинання квантів рентгенівських променів, крім флуоресценції, може збуджувати також **рентгенівський фотоелектрний ефект** (емісію фотоелектронів). Кінетична енергія фотоелектронів, що емітують, залежить при  $h\nu = \text{const}$  від енергії оболонки ( $eV_i$ ), з якої збуджуються електрони  $mv^2/2 = h\nu - e\phi - eV_i$ . Ця особливість фотоелектронної емісії використовується в **електронній спектроскопії для хімічного аналізу (ЕСХА)**.

6) при поглинанні рентгенівських променів, крім флуоресценції та рентгенівського фотоелектрального ефекту, може відбуватись автоіонізація або **оже-електронна емісія**. Оже-електронна емісія переважає над флуоресценцією в речовинах із малими атомними номерами  $Z$ , тоді як при великих  $Z$  переважає рентгенівська флуоресценція.

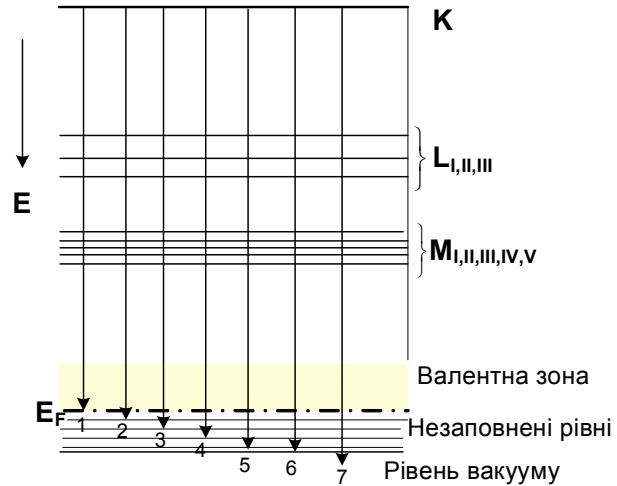


Рис. 15.8. Схема утворення тонкої протяжної структури К-краю спектра поглинання. 1 – 7 незаповнені рівні у валентній зоні.

**5. Відмінність в зонній структурі металів діелектриків.**

Оскільки на  $s$  - рівні може знаходитись 2 електрона, на  $p$  - рівні 6 електронів, на  $d$  - рівні - 10 електронів і т. д. Тому в зонах, що походять від різних атомних рівнів, може знаходитись лише скінчена кількість електронів:  $2N$  в  $s$  - зоні,  $6N$  в  $p$  - зоні тощо. Окремі атомні рівні не завжди повністю заповнені, що створює умови для появи не повністю заповнених зон у кристалах (рис.).

Тому в кристалах можуть утворюватись заповнені, частково заповнені й не заповнені зони. Зона, що утворюється в результаті розщеплення енергетичних рівнів, на яких знаходяться валентні електрони, називається **валентною зоною**.

Якщо б електрони не підлягали принципу Паулі, то не виникало б різниці між металами й діелектриками. Принцип Паулі обмежує заповнення енергетичних рівнів і зон електронами, і тим самим створює різницю в заповненні енергетичних зон металів і діелектриків: метали мають напівзаповнені зони, а діелектрики - заповнені та не заповнені зони, розділені енергетичним інтервалом ( $E_g$ ), який називається забороненою зоною. У заборонену зону не потрапляє жодна з гілок енергетичного спектра квазічастинок  $E(k)$ .

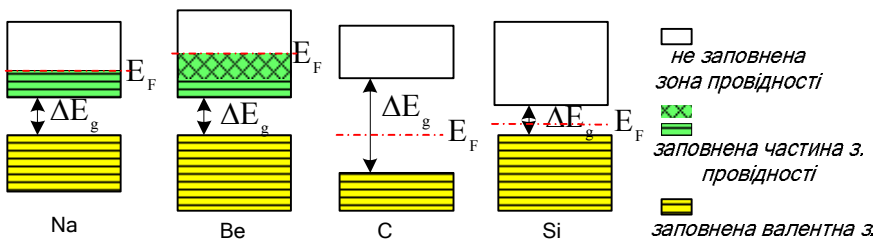


Рис. 20.9. Заповнення зон металів (Na і Be), діелектриків (С-алмаз) і напівпровідників (Si).  $\Delta E_g$  – заборонена зона,  $E_F$  – рівень Фермі.

її заповнення електронами має місце при нульовій температурі ( $T = 0$  K) до енергії, котра називається енергією або енергетичним **рівнем Фермі** ( $E_F$ ). У **діелектриках** між повністю заповненою валентною зоною й не заповненою зоною знаходиться **заборонена зона** ( $E_g$ ). Найближча до валентної зони не заповнена зона називається **зоною провідності**. Метали проводять електричний струм, а діелектрики

енергетичного спектра квазічастинок  $E(k)$ .

У залежності від заповнення валентної зони тверді тіла мають різні електричні властивості. Тверді тіла поділяються на дві великих групи: металів і діелектриків. У **металах валентна зона** не

не проводять. Між цими двома групами речовин виділяють широкий клас речовин із менш широкою забороненою зоною, які називаються *напівпровідниками*. При низьких температурах вони схожі на діелектрики, а при підвищених температурах частина електронів із валентної зони збуджуються в зону провідності, внаслідок чого вони проводять струм. Стає зрозуміло, що поділ речовин на діелектрики й напівпровідники досить умовний.

## Білет 7

**1. Чи залежить ефективний переріз розсіювання й довжина вільного пробігу електронів від їх енергії? Якщо так, то як?** Норм. Розділи 2.6-2.10 стор. 28-35. Текст у шпорі починаючи зі стор. 30 (Розділ 2.7)

**2. Дайте визначення оператора фізичної величини.** Не дороблено. Не написано, що саме є оператор фізичної величини, а одразу розписано на прикладі хвильової функції. Про сам оператор у Находкіна нема але є у вікіпедії. Про хвильову функцію : Розділ 6.3 стор 142

**3. Побудуйте векторні діаграми складання спінових і орбітальних моментів електрона на s-орбіталі.** Задача вирішена але я не можу оцінити її правильність так як ми такого не робили. Теорія до задачі з Глави 11 (задача буде вирішена першою групою)

**4. Проаналізувати причину появи тонкої структури країв спектру вбирання рентгенівських променів.** Норм. Глава 11. Текст шпори на стор 368 Розділ 15.1

**5. Дайте визначення одночастинкової функції Блоха.** Відсутнє, розділ 20.2 стор. 520 перші 2 сторінки – багато води(потім вже власне **функції Блоха**)

**1) Чи залежить ефективний переріз розсіювання й довжина вільного пробігу електронів від їх енергії? Якщо так, то як?** (Метода Находкіна розділ 2.6-2.10)

Для кількісної характеристики актив розсіювання використовують **ефективний переріз розсіювання**. Він характеризує ймовірність переходу системи двох частинок, що стикаються, із початкового стану в кінцевий.

$$\sigma = \frac{\Delta N}{I_0 \Delta \Omega n}, \text{ де } \Delta N - \text{кількість розсіяних частинок, що збирає детектор, розташований під кутом } \theta$$

до напрямку падаючого пучка, за одиницю часу,  $\Delta \Omega$ - тілесний кут збору детектором розсіяних частинок. У загальному випадку на відміну від абсолютно пружного розсіювання кульок ефективний переріз розсіювання залежить від швидкості (кінетичної енергії) частинок. З експерименту Резерфорда випливає, що диференціальний переріз (як і ефективний переріз) обернено пропорційно залежить від квадрата кінетичної енергії.

Довжина вільного пробігу – це середня відстань, яку частинки, що розсіюється, проходять без актив зіткнення в речовині.

$$\langle x \rangle = \ell = \int_0^{\infty} x f(x) \sigma_t n dx = \int_0^{\infty} x \sigma_t n \exp\{-\sigma_t n x\} dx = 1/\sigma_t n, \text{ де } \sigma_t - \text{інтегральний переріз. А він залежить}$$

від енергії.

**2) Дайте визначення оператора фізичної величини.**

Оператори фізичних величин повинні задовольняти двом умовам:

*по-перше*, лінійності, бо їх власні функції задовольняють принципу суперпозиції;

*по-друге*, само спряженості  $\left( \int \psi^* \hat{f} \psi dv = \int (\hat{f} \psi)^* \psi dv \right)$ , бо їх середні значення – це дійсні

спостережувальні фізичні величини. Такі оператори називаються *ермітовими операторами*.

Таким чином, у *квантовій механіці зв'язок між числовими значеннями фізичних величин замінюється операторним зв'язком цих величин*. Хвильові функції дозволяють знаходити середні значення фізичних величин за формулою  $\langle f \rangle = \int \psi^* \hat{f} \psi dV$ , де  $\hat{f}$  - оператор фізичної величини.

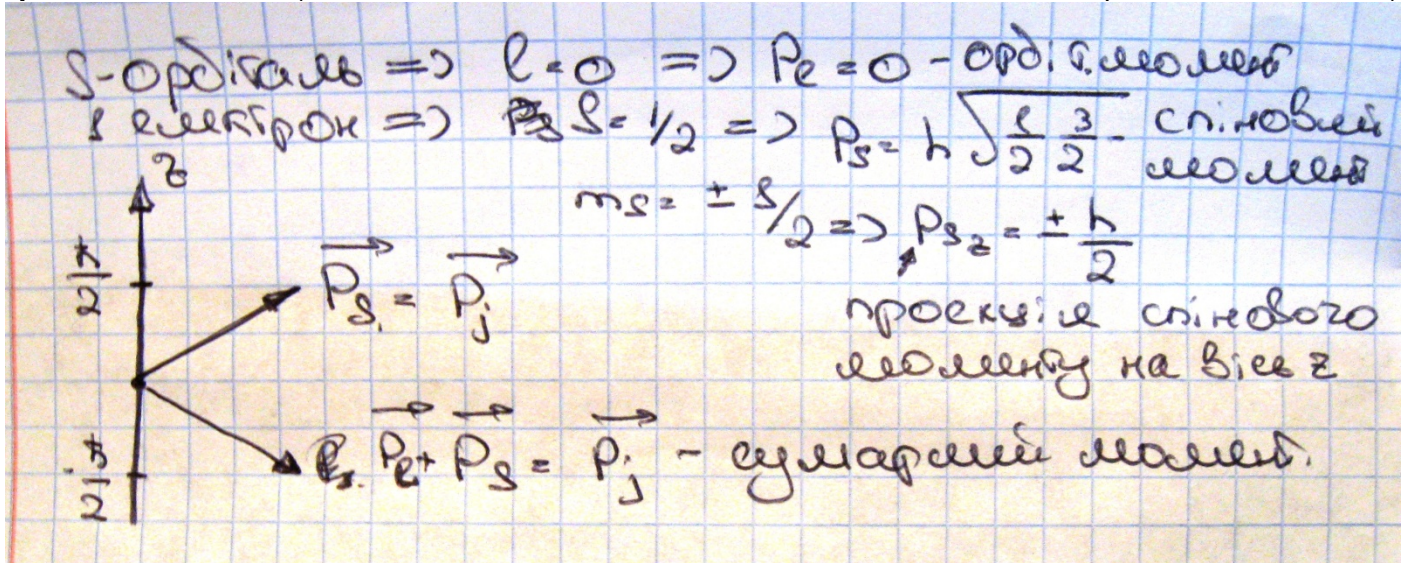
Коротше оператор фізичної величини – це оператор, який потрібно застосувати до хвильової функції, щоб отримати середнє значення відповідної фізичної величини.



## ВАРІАНТ ВІКВРЕДІ

Оператором називають рецепт, за яким за заданою функцією  $\psi(x)$  знаходять іншу функцію  $\phi(x)$ .

**3) Побудуйте векторні діаграми складання спінових і орбітальних моментів електрона на s-орбіталі.** (Методичка Находкіна – розділ 11)



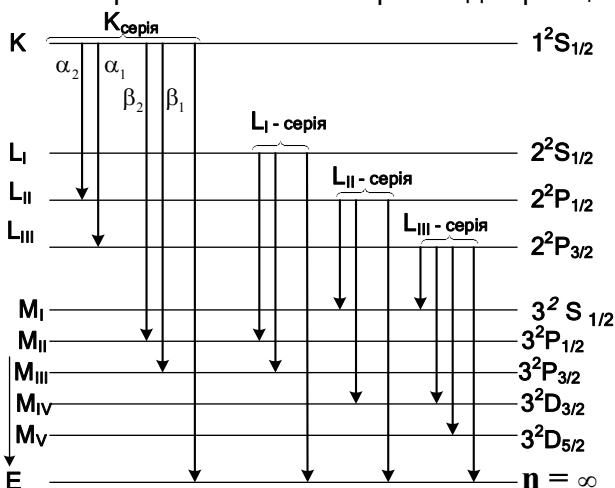
**5) Дайте визначення одночастинкової функції Блоха.** (Метода Находкіна - 20 розділ)

За своєю внутрішньою структурою розрізняють *одночастинкові* збудження, коли частинка рухається в оточенні інших частинок, з якими вона взаємодіє, наприклад, електрон, дірка. Розв'язок рівняння Шредінгера з періодичним потенціалом має вигляд періодичних власних хвильових функцій:

$\psi_{n,k}(\vec{r}) = u_{n,k}(\vec{r}) \cdot \exp\{i\vec{k} \cdot \vec{r}\}$  - Це і є функція Блоха.  $u(\vec{r})$  - її амплітуда, модуль квадрата якої  $|u(\vec{r})^* \cdot u(\vec{r})|$  характеризує густину ймовірності знаходження електрона в точці кристала з координатами  $\vec{r}$ . Таким чином, амплітуда функції Блоха описує квазічастинку - електрон, який належить усьому кристалу.

**4) Проаналізувати причину появи тонкої структури країв спектру вбирання рентгенівських променів.** (Метода Находкіна 15 розділ)

Для того, щоб отримати рентгенівські спектральні серії, необхідно використати правила відбору при дипольних переходах  $\Delta L = \pm 1, \Delta J = 0; \pm 1$ . Ми бачимо, що, хоча через *спін-орбітальну та електростатичну взаємодії мультиплетність рентгенівських термів подібна до мультиплетності квазіодноелектронного атома*, але спектральні рентгенівські лінії внаслідок правил відбору мають більш складну мультиплетність: К-серії дублетні, L-серія складається з 7 компонент і розбивається на окремі підсерії.  $L_I$  і  $L_{II}$  - підсерії дублетні, а лінії  $L_{III}$  - підсерії триплетні.



Край поглинання має тонку структуру: К-край один стрибок, L-край- 3 стрибки  $L_I, L_{II}, L_{III}$ , M-край- 5 стрибків. Кількість можливих стрибків визначається кількістю можливих підтермів (оболонок) у

даному шарі атома. **Причиною тонкої структури спектрів поглинання є спин-орбітальна й електростатична взаємодія, які відповідальні за мультиплетність термів;**

## Білет 9

1. При розсіюванні рентгенівських променів із довжиною хвилі  $\lambda = 0,01$  нм утворився електрон віддачі. Його швидкість напрямлена під кутом  $60^\circ$  до напрямку розповсюдження рентгенівського променя, що падає. Знайти довжину хвилі розсіяних рентгенівських променів.

2. Дайте визначення атомної орбіталі. Доведіть, що  $P_x$  орбіталь має вигляд  $\sim \cos\theta$ .

3. Від чого залежить мультиплетність термів. Наведіть приклад і

4. Які зміни в обертально-коливальному спектрі виникають при значних збудженнях, при яких не можна нехтувати ангармонізмом?

5. Проаналізуйте особливості густини станів на дні зони провідності та біля стелі валентної зони.

**Ефект Комптона:**  $\Delta\lambda = 2\lambda \times \sin^2 \frac{\varphi}{2}$ , де  $\lambda = \frac{h}{m_0c} = 0,024 \text{ \AA}$  - комптонівська довжина хвилі електрона

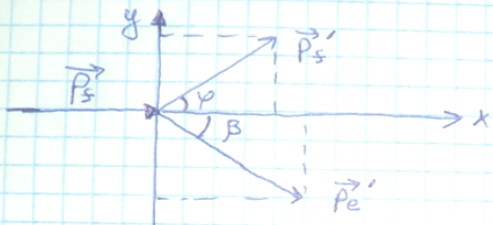
!!! Якщо б у задачі був даний кут  $\varphi$ , і він би  $= 60^\circ$  тоді б задача вирішувалась у одну строчку, а саме: (походу так і задумувалось)  $\lambda' = \lambda + 2 \cdot \lambda \cdot \sin^2 \frac{\varphi}{2} = 0,1 \text{ \AA} + 2 \cdot 0,024 \cdot 0,25 \text{ \AA} = 0,112 \text{ \AA}$  !!!!!

Але оскільки, у задачі чітко написано, що дано кут між напрямом електронам і променя, тобто  $\beta$ , тоді розв'язок зовсім не тривіальний(((, але розв'язуватися буде так:

33I:  $\vec{p}_s = \vec{p}_s' + \vec{p}_e'$   
 $\vec{p}_s$  - фотона,  $\vec{p}_e'$  - електрона

33E:  $E_s = E_s' + E_e'$

(1)  $\Rightarrow h\nu = h\nu' + \frac{p_e'^2}{2m_e}$   
 де  $\nu = \frac{c}{\lambda}$ ,  $\nu' = \frac{c}{\lambda'}$ , ← енергія електрона



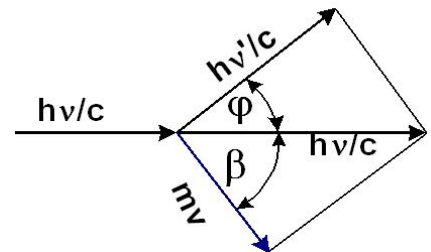
Знайми  $\lambda'$   
 Дано:  $\lambda, \beta =$

(2) 33I по осях: 0x:  $p_s = \frac{h}{\lambda} = p_e' \cos\beta + \frac{h}{\lambda'}$

(3) 0y:  $\frac{h}{\lambda'} \sin\varphi = p_e' \sin\beta$

Система з рівнянь (1) - (3),  
 (1)  $\Rightarrow$  знаходимо  $p_e' = \sqrt{2m_e \left( hc \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) \right)}$

(3)  $\Rightarrow$  кут  $\varphi \Rightarrow \sin\varphi = \frac{p_e' \sin\beta \cdot \lambda'}{h}$   
 Підставляємо в (2), де невідомим  $\lambda'$ , яке і треба знайти  
 Ко якщо підставити, то там буде згода:

$$\frac{h}{\lambda} = \cos\beta \sqrt{2m_e hc \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right)} + \frac{h}{\lambda'} \sqrt{1 - \frac{\sin^2\beta \lambda'}{h}} \sqrt{2m_e hc \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right)}$$


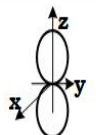
2. Дайте визначення атомної орбіталі. Доведіть, що  $P_x$  орбіталь має вигляд  $\sim \cos\theta$ .

Лекції Находкіна – РОЗДІЛ 8.4 (погано було вишко  $P_x$ , для інших так само)



Одноелектронні хвильові функції  $R_n(r)Y_m(\theta, \varphi)$  називаються **атомними орбіталами**. Для одноелектронного атома водню його атомні орбіталі збігаються з повними його хвильовими функціями. Однак, для багатоелектронних атомів хвильова функція більш складна. Принцип суперпозиції дозволяє за допомогою лінійної комбінації хвильових функцій атома водню, конструювати атомні орбіталі складних атомів.

// (Особливе значення має кутовий розподіл електронної густини, що визначається кутовою частиною хвильової функції  $Y_\ell^m \cos(\theta)$  або **кутовою частиною атомних орбіталей**. Вони визначають анізотропію розподілу електронної густини, що, як буде пізніше показано, виявляється корисним для описання хімічного зв'язку. Зокрема, анізотропія атомних орбіталей є причиною появи **направлених хімічних зв'язків**.) //

$l$	$m$	$Y_\ell^m(\theta, \varphi)$	$ Y_\ell^m ^2$		$L$	$L_z$	
p	1	0	$\sim \cos \theta$	$\frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta$		$\sqrt{2}\hbar$	0

Користуючись принципом суперпозиції, замість комплексних хвильових функцій сконструюємо їх лінійні комбінації, які є дійсними функціями:

$$Y_\ell^{m'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_\ell^m + Y_\ell^{-m}); \quad Y_\ell^{m''} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(Y_\ell^m - Y_\ell^{-m}) . \quad (*)$$

Підставимо в (\*) значення функцій  $Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \Theta_\ell^m(\theta)\Phi_m(\varphi) = C_\ell^m \cdot P_\ell^m(\cos \theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$

$$Y_\ell^{m'} = \frac{1}{\sqrt{2}} C_\ell^m P_\ell^m (\cos \theta) (e^{im\varphi} + e^{-im\varphi}) = \frac{2}{\sqrt{2}} C_\ell^m P_\ell^m (\cos \theta) \cos(|m| \varphi)$$

$$Y_\ell^{m''} = \frac{1}{i\sqrt{2}} C_\ell^m P_\ell^m (\cos \theta) (e^{im\varphi} - e^{-im\varphi}) = \frac{2}{\sqrt{2}} C_\ell^m P_\ell^m (\cos \theta) \sin(|m| \varphi)$$

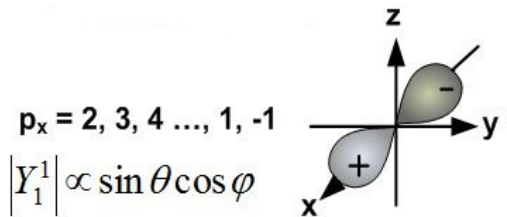
**p - стан;**  $Y_\ell^{\pm m} = Y_1^{\pm 1} \sim \sin \theta \cdot \exp\{\pm im\varphi\}$ ; лінійна комбінація дає одну з 3 функцій:

$$(Y_1^{+1})' = C \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi \rightarrow x/r \rightarrow \mathbf{p_x-орбіталь};$$

індекс вказує, що кутова залежність орбіталі збігається з кутовою залежністю у формулах перетворення декартових координат у сферичні:

$$x/r = \sin \theta \cos \varphi; \quad y/r = \sin \theta \sin \varphi; \quad z/r = \cos \theta.$$

схематично наведено просторовий розподіл атомної орбіталі



**3. Від чого залежить мультиплетність термів. Наведіть приклад.** розділ 8.4  
**Від квантового числа повного спіну S за формулою (2S+1).**

Кількість можливих станів - значень квантового числа J при даному значенні числа L визначає **мультиплетність термів (2S+1)**.

S	0	1/2	1	3/2	2
2S+1	1	2	3	4	5
Мультиплетність	Синглет	дублет	Триплет	квартет	Квінтет

//Оскільки  $s_i =$

$1/2$ , то із формули  $S = \sum_{i=1}^Z s_i; \sum_{i=1}^Z s_i - 1; \sum_{i=1}^Z s_i - 2; \dots; \sum_{i=1}^Z s_i - N \geq 0$ ; видно, що при  $Z$  непарних  $S$  напівціле число, тобто мультиплетність парна (дублети, квартети тощо), а при  $Z$  парних  $S$  ціле число, тобто мультиплетність непарна (синглети, триплети, квінтети, тощо). Ще приклади://

// (Мультиплетність – число можливих орієнтацій в просторі повного спіну атома або молекули.

$M = 2s + 1$ , де  $s$  – спінове квантове число. Для систем з непарним числом  $N$  електронів  $s = 1/2; 3/2; 5/2, \dots$  і  $M$  парне. Для них можливі дублетні, квартетні, сикстетні і т.д. квантові стани. Якщо  $N$  парне  $s = 0, 1, 2, \dots$  і  $M$  непарне – можливі синглетні, триплетні і тд. Так для систем з одним електроном (атом  $H$ , іон  $H_2^+$ ,  $S = 1/2$ ) отримуються лише дублетні стани; з двома електронами (атом  $He$ ) - синглетні стани ( $S = 0$ , спіни електронів антипаралельні) і триплетні стани ( $S = 1$ , спіни електронів електронів паралельні).

Мультиплетність визначає кратність виродження рівнів атома або молекули.  $2s + 1$  квантових станів, які відповідають рівню енергії із заданим  $s$ , відрізняються значеннями проекції повного спіна і характеризуються кв. числом  $M_s = S, S - 1, \dots, -S$ , яке визначає величину цієї проекції. Внаслідок спін-орбітальної взаємодії рівень енергії може розчепитися на  $2S + 1$  підрівнів.) //

**4. Які зміни в оберально-коливальному спектрі виникають при значних збудженнях, при яких не можна нехтувати ангармонізмом?** Розділ 19.3

При збільшенні рівня збудження спостерігаються відхилення від лінійних залежностей частот від квантових чисел для  $P$  - і  $R$  - гілок. Вони викликаються двома обставинами: відцентровою зміною моменту інерції молекул і ангармонізмом. Спочатку розглянемо вплив відцентрової зміни моменту інерції. Внаслідок цього впливу стала обертання  $V$  починає залежати від інтенсивності збудження й в різних коливних станах сталі  $V$  уже різні, тобто  $V \neq V^*$ , де  $V$  і  $V^*$  - сталі обертання в двох коливних станах, між якими відбувається перехід. Додаткове врахування **ангармонізму** ще більш ускладнює оберально-коливальні спектри молекул, саме:

1) змінюються частоти коливань:

$$\omega'_v (v=0) = \omega_v / 2 (1 - \xi/2), \omega_{\Delta v=1} = \omega_v (1 - 2\xi), \omega_{\Delta v=2} = 2\omega_v (1 - 3\xi), \omega_{\Delta v=3} = 3\omega_v (1 - 4\xi), \dots;$$

2) з'являються нові переходи, бо необхідно враховувати додаткові правила відбору  $\Delta v = \pm 1; \pm 2; \pm 3$ ;

3) з'являється нове правило відбору  $\Delta j = j' - j = 0$ , внаслідок чого з'являється нова  $Q$ -гілка спектру, для якої

$$\hbar \omega_{v,j,Q} (\Delta j = j' - j = 0) = \hbar \omega_v + (B^* - B)j + (B^* - B)j^2$$

$$j = 1, 2, 3, \dots$$

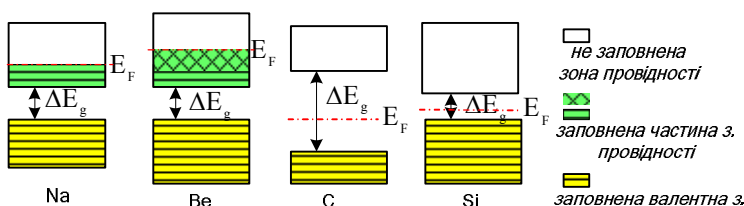
**5. Проаналізуйте особливості густини станів на дні зони провідності та біля стелі валентної зони.**

(Розділ 20.6 – густина станів)

Густиною станів називається кількість можливих фізично нееквівалентних енергетичних станів у малому інтервалі енергій  $\Delta E$  у одиниці об'єму, віднесеному до ширини інтервалу  $\Delta E$ :

$$g(E) = (1/V) \lim_{\Delta E \rightarrow 0} (\Delta \Gamma / \Delta E),$$

де  $\Delta \Gamma$  - кількість станів з енергіями в інтервалі від  $E$  до  $E + \Delta E$  з урахуванням виродження  $2s + 1$ , де  $s$  - спин частинки в одиницях  $\hbar$  (для електронів  $s = 1/2$ , тому  $2s + 1 = 2$ ).



$$\text{Формула для густини станів } g(E) = \frac{(2s + 1) 4\pi m}{h^3} p = \frac{4\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E} \quad (*)$$

У металах валентна зона не повністю заповнена електронами або вона перекривається з іншою не заповненою зоною її заповнення електронами має місце при нульовій температурі ( $T = 0$  K) до енергії, котра називається енергією або енергетичним рівнем Фермі ( $E_F$ ). У діелектриках між повністю заповненою валентною зоною й не заповненою зоною знаходиться заборонена зона ( $E_g$ ). Найближча до валентної зони не заповнена зона називається зоною провідності. Для металів густина станів у наближенні квазівільних електронів залежить від їхньої енергії за формулою (\*). Ці стани заповнюються електронами при  $T = 0$  K до енергії Фермі, при  $T \neq 0$  поблизу енергії Фермі розподіл електронів у зоні провідності зростає приблизно пропорційно  $E^{1/2}$ , як і для випадку вільних частинок, але на дні зони провідності при малих  $E$  спостерігаються відхилення.

## Білет 14

### 1. Як експериментально показати, що $h/e$ не залежить від швидкості електрона?

Для цього достатньо оцінити суцільний спектр випромінювання рентгенівських променів. Максимальна енергія квантів рентгенівських променів не може бути більшою за кінетичну енергію електронів  $eV$ , які їх генерують при гальмуванні,

$$h\nu_{max} = \frac{hc}{\lambda_{min}} = eV \quad (1)$$

Співвідношення (1) - це окремий випадок закону збереження енергії. З (1) легко отримати довжину хвилі короткохвильової границі неперервного рентгенівського спектра:

$$\lambda_{gr} = \lambda_{min} = \frac{c}{\nu_{max}} = ch/eV \quad (2)$$

Лінійна залежність граничної частоти суцільного спектра рентгенівських променів від напруги  $V$ , що прискорює електрони, підтверджує квантовий характер випромінювання. Вона також використовується для експериментального визначення сталої Планка  $h$ . Сталий нахил цієї експериментальної кривої свідчить про незалежність  $e/h$  від  $V$ , тобто від швидкості електронів.

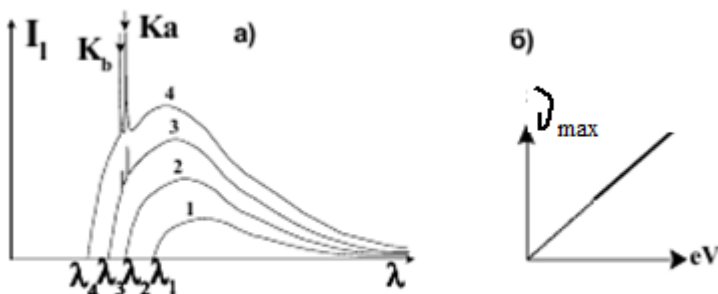


Рис.5.1. Суцільний спектр рентгенівських променів при різних напругах на антикатоді ( $V_1 < V_2 < V_3 < V_4$ ) (а) та залежність  $\nu_{max}$  від  $V$  (б)

### 2. Який фізичний зміст хвильової функції? Якщо ми маємо хвильову функцію електрона $\psi(r)$ , як можна знайти фізичні величини, що характеризують електрон?

Згідно гіпотези Луї де Бройля з частинкою, яка рухається у вільному просторі з постійною швидкістю  $v$ , зв'язана плоска хвиля з довжиною:  $\lambda = h/p$

$$\psi = \psi_0 \exp \{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})\}$$

хвильова функція є принципово комплексною, яка не спостерігається. Це означає, що фізичний зміст має лише квадрат хвильової функції, яка є густиною ймовірності знайти частинку в даній точці простору.

Хвильові функції дозволяють знаходити середні значення фізичних величин за формулою  $\langle f \rangle = \int \psi^* \hat{f} \psi dV$ , де  $\hat{f}$  - оператор фізичної величини. Для координат оператором служить координата, оператор імпульсу дорівнює  $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ .

**3. Знайдіть величину магнітного моменту атома в станах  $^1S$  та  $^1P$  та можливі його проєкції на вісь  $z$ .**

Терм	$^1S$		$^1P$
Квантові числа	$S=0; L=0; J=0$		$S=0; L=1; J=1$
же-фактор	$g=1$		$g=1$
ефективний магн. Момент	$\mu_{ef} = 0$		$\mu_{ef} = \sqrt{2}\mu_b$
проєкції на вісь $z$	$-\dots$		$\mu_z = \mu_b\{\pm 1\}$

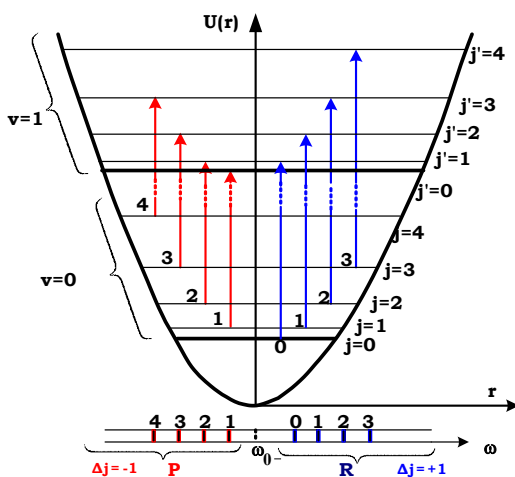
\*\*  $\mu_b$  - магнетон Бора

**4. Чи можна з вигляду обертально-коливальних спектрів установити, що збудження молекул настільки мале, що ангармонізмом можна знехтувати?**

Можна. Енергія коливального руху молекул більша за енергію їхнього обертання, тому одночасно з коливанням можуть збуджуються й обертальні стани молекул. Переходи між цими станами призводять до появи *коливально-обертальних спектрів молекул*.

У випадку малих збуджень, нехтуємо ангармонізмом – коливання і обертання незалежні, енергія – адитивна сума колив і оберт енергій:  $E_{v,j} = E_r + E_v = B_j(j+1) + (v + \frac{1}{2})\hbar\omega_v$ , де  $B = \frac{\hbar^2}{2J}$

Між цими термами можуть мати місце переходи дозволені такими *правилами відбору для вібронного й ротаційного квантових чисел*  $\Delta v = \pm 1$  (наближення гармонічного осцилятора) та  $\Delta j = \pm 1$ . При кімнатній температурі лише незначна кількість молекул знаходиться в збудженому стані й тому найбільш інтенсивними, здебільшого, будуть лінії, що виникають при переходах між станами із квантовими числами  $v=0$  і  $v=1$ . У спектрах поглинання спостерігаються дві гілки ліній: одна - при виконанні правила відбору  $\Delta j = -1$ , яка називається *P* - гілкою, і друга - при  $\Delta j = +1$ , яка називається *R* - гілкою.



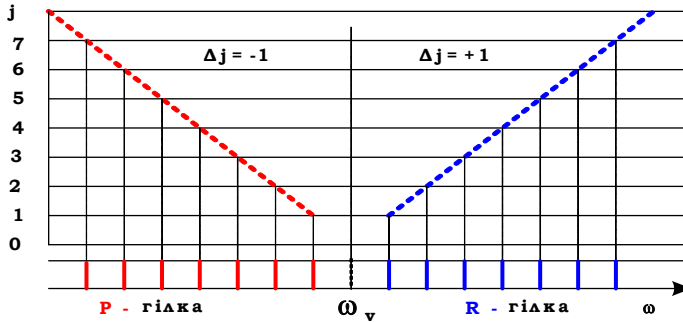
**P- і R- гілки коливально-обертального спектра двоатомної молекули.**

На рис зображені терми двоатомної молекули з обертальними квантовими числами  $j=0,1,2,3,4$  для двох коливальних станів нульового не збудженого з квантовим числом  $v=0$  і  $v=1$ , а також спектральні лінії спектра поглинання для *P* – і *R* - гілок.

*P* утворюється, тому що частина енергії витрачається на збудження обертальних рухів молекули, і її частоти менші

частоти власних коливань молекули. **R** - гілка утворюється, тому що частина енергії обертальних рухів молекули передається її коливному рухові, і її частоти більші частоти власних коливань молекули.

При збільшенні рівня збудження спостерігаються *відхилення від лінійних залежностей частот від квантових чисел для P - і R - гілок*. Вони викликаються двома обставинами: *відцентровою зміною моменту інерції молекул і ангармонізмом*.



**Рис.19.12.** Схема утворення гілок обертально-коливальних спектрів, коли  $B = B^*$ .

**5. Що таке дірка в кристалах? Де використовується це поняття? Чи має це поняття реальний фізичний зміст?**

Розгляд складної квантомеханічної багаточастинкової системи конденсованого стану речовини (зокрема, твердого тіла) можна спростити, якщо замість реальних частинок увести *квазічастинки* ("квазіелектрони", дірки, фонони, екситони, магнони, полярони, плазмони, тощо). *квазічастинка це елементарне збудження - колективне утворення, довго живучий комплекс, який відображає колективний рух елементарних частинок твердого тіла, й на відміну від реальних частинок слабо взаємодіє зі своїм оточенням*. Наприклад, електрон (або дірка) слабо взаємодіє зі своїм оточенням, яке описується самоузгодженим потенціалом.

Поняття використовується при розгляді Оже-ефекту(вакантне місце), при розгляді циклотронного резонансу.

## Білет 20

1. Від чого залежить прозорість потенціального бар'єра?
2. Які особливості має розв'язок рівняння Шредінгера для атома водню, які пов'язані із центральними кулонівськими силами?
3. Чи залежить напівширина спектральних ліній атомного спектра від температури газу?
4. Чи можуть впливати особливості коливально-обертальних спектрів оптично неактивних молекул на їхні електронні спектри? Що це за вплив?
5. Що таке функція Блоха? Де вона використовується?

**1. Від чого залежить прозорість потенціального бар'єра?**

Розглянемо на прикладі прямокутного потенціального бар'єра .

Вираз для прозорості бар'єра має вигляд  $D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m_0(U_0 - E)} \right\}$ . Електрони (або інші

частинки) можуть із певною ймовірністю ( $D \neq 0$ ) проникати крізь потенціальний бар'єр скінченної висоти  $U_0$ . Це явище, що не має класичного аналога, називається тунелюванням або тунельним ефектом. Експериментально тунельний ефект спостерігається для тонких потенціальних бар'єрів, коли  $k_2 a < 1$ . Прозорість явно залежить від ширини самого бар'єра.

Прозорість прямокутного потенціального бар'єра при різних значення його ширини  $\alpha$ .

$a$ [Å]	1	2	5	10
$D$	0,1	$8 \times 10^{-3}$	$5 \times 10^{-7}$	$1,4 \times 10^{-8}$

Саме для  $U_0 - E = 5eB$ , прозорість бар'єра має скінченні значення лише для  $\alpha$  сумірних з атомними розмірами. При більших  $\alpha$ , коли  $\alpha > \alpha_0$ , то його прозорість прямує до нуля  $D \rightarrow 0$ .

Формулу для прозорості бар'єра можна узагальнити для бар'єра довільної форми, якщо на відстанях сумірних із довжиною хвилі де Бройля суттєво не змінюється швидкість електронів. У цьому випадку бар'єр можна розбити на безліч прямокутних дуже тонких бар'єрів. Прозорість бар'єра товщиною  $\Delta x$  дорівнює  $D(x) = D_0 \exp\{-2/\hbar \sqrt{2m(U(x) - E)} \Delta x\}$ .

Повний коефіцієнт прозорості бар'єра дорівнює добуткові парціальних коефіцієнтів прозорості

$D = \prod_i D_i = D_0 \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \sum_i \sqrt{2m(U(x_i) - E)} \Delta x_i\right\}$ . При малих значеннях  $\Delta x_i$  сума в показнику експоненти

переходить в інтеграл. Тому в загальному вигляді  $D = D_0 \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_0(U(x) - E)} dx\right\}$ .

## 2. Які особливості має розв'язок рівняння Шредінгера для атома водню, які пов'язані із центральними кулонівськими силами?

Атом водню складається із протона і електрона. Їх заряди  $|e|$  майже точкові порівняно з розмірами атома, тому що  $r_{електр.}, r_{ядра} < r_{атома}$ . Між електронем і ядром діють кулонівські сили. Потенціал сил

їх точкових зарядів має вигляд  $U(r) = -e^2 Z / r$ . Будемо розглядати атом у системі координат, що зв'язана з центром атомного ядра. Ми можемо знехтувати впливом скінченної маси ядра на рух електронів, бо маса ядра значно більша маси електрона. Скінченну масу ядра згодом можна буде

врахувати, замінивши масу електрона  $m_0$  приведеною масою  $m' = \frac{m_0}{1 + m_0/M}$ . Рівняння Шредінгера

для стаціонарних станів атома водню  $\hat{H}\psi = E\psi$ , де  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$  - оператор Гамільтона:

$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + U(r)$ .  $\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta - \frac{Ze^2}{r}\right) \psi = E\psi$ . Розв'язок розділяємо на два рівняння одне з яких

залежить від  $r$ , а друге лише від  $\theta$  і  $\varphi$ .  $r^2 \frac{\Delta_r R}{R} + r^2 k^2(r) = \lambda$  (радіальна)  $\frac{\Delta_{\theta, \varphi} Y}{Y} = -\lambda$ , (кутова) де  $\lambda$  -

довільна стала розділення.

$\Delta_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0$ . Рівняння не залежить від  $U(r)$ , тому воно справедливе для будь-якого

випадку кулонівського поля центральних сил. З розв'язку для кутової частини визначаємо квантові числа  $m$  та  $l$ .

Рівняння радіальної частини хвильової функції електрона в атомі водню має вигляд:

$\Delta_r R(r) + k^2(r)R(r) - \frac{\lambda}{r^2} R(r) = 0$ , де  $\lambda = \ell(\ell + 1)$ ,  $k^2(r) = \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2 Z}{r}\right)$ , а  $\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr}\right)$ , у якому

частинні похідні від  $r$  замінені повними похідними, бо функція  $R(r)$  залежить від однієї змінної  $r$ . Тоді

$\Delta_r R + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2 Z}{r} - \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2m_0 r^2}\right) R = 0$ , де  $\hbar^2 \ell(\ell + 1) = L_{\theta, \varphi}^2$ .

Проаналізуємо вираз в дужках. Його можна розглядати як ефективний потенціал  $U'(r)$ , до складу якого, крім електростатичного потенціалу, входить ще й енергія кутового руху.

Для  $E > 0$  ефективний потенціал має форму потенціального бар'єра, тому енергетичний спектр власних значень  $E$  буде неперервним, як у вільного електрона.

Для  $E < 0$  ефективний потенціал має форму потенціальної ями, тому електрон в цій ямі матиме дискретний спектр власних енергій.

Розв'язок рівняння знаходять у вигляді спеціальних поліномів Лягера і матиме вигляд

$$R_{n,\ell} \left( \rho = \frac{r2Z}{a_0 n} \right) = C_{n,\ell} e^{-0,5\rho} \rho^\ell Q_{n+1}^{2\ell+1}(\rho), \quad \text{де} \quad Q_{n+1}^{2\ell+1}(\rho) = \frac{d^{(2\ell+1)}}{d\rho^{(2\ell+1)}} Q_{n+l}(\rho).$$

Важливою частиною розв'язку є значення власної енергії для електрона  $E = -\frac{e^2 Z^2}{2a_0 n^2}$ . Звідси ми визначимо головне кватове число  $n$ .

### 3. Чи залежить напівширина спектральних ліній атомного спектра від температури газу?

Напівширина  $\Delta\nu$  характеризує ступінь немонохроматичності спектральної лінії. На ширину спектральної лінії впливає :

- **радіаційне затухання** (передача енергії внаслідок взаємодії зарядженої частинки, наприклад, електрона з власним випромінюванням, поле якого створює силу Лоренца, що діє на осцилюючий електрон.). Енергетичні рівні стають квазістаціонарними, бо на них електрон перебуває скінчений час  $\tau$ , який називають часом життя електрона на цьому рівні. Зменшення часу життя супроводжується відповідним розширенням квазістаціонарного енергетичного рівня на величину  $\Delta E \geq \hbar/\tau$  й викличе відповідне збільшення інтервалу частот  $\Delta\omega \geq 2\pi/\tau$ , що випромінюються. Для класичного радіаційного затухання (гармонічний осцилятор з частотою  $\omega$  і коефіцієнтом затухання коливальних  $\gamma_0$ )  $\Delta\omega = \gamma_0 = \frac{2e^2\omega^2}{3m_0c^3}$  - природною шириною (напівшириною)

спектральної лінії в класичній електродинаміці (або природною шириною лінії класичного осцилятора із зарядом  $e$  і масою  $m_0$ ). Бачимо, що немає залежності від температури.

- **Квантове розширення енергетичних рівнів.** Квантовий формалізм включає затухання випромінювання так повно, як і класична теорія. Тут також немає залежності від температури:  $\Delta\omega = 2\pi A_{1,2} = 2\pi\gamma_0 f_{1,2}$ .

- **Вплив ефекту Доплера.** Якщо джерелом світла є атоми з ізотропним просторовим розподілом векторів швидкості  $\vec{v}$ , то ефект Доплера призводить до симетричного розширення спектральної лінії. Таке розширення називається **доплерівським розширенням спектральної лінії**. Для ефекту Доплера  $\Delta\nu_D = \frac{2}{\lambda_0} \sqrt{\frac{2\ln 2 RT}{M}}$ . Отже ефект Доплера значно розширює контур спектральної лінії. Є залежність від температури  $\sim\sqrt{T}$ .

- **Ударна ширина спектральної лінії.** Тут  $\Delta\nu_{1/2} = 4 \frac{p\sigma^2}{k_B T} \sqrt{\frac{RT}{\pi M}}$  - тобто також є залежність від температури  $\sim\sqrt{T}$ .

**Висновок:** бачимо, що для при деяких факторах, що впливають на розширення напівширини спектральної лінії є залежність від температури  $\sim\sqrt{T}$  - при впливі ефекту Доплера та при розрахунку ударної ширини спектральної лінії. Загальна ширина спектральної лінії рівна  $\Delta\nu = \Delta\nu_{rad} + \Delta\nu_D + \Delta\nu_{ud}$ .



#### 4. Чи можуть впливати особливості коливально-обертальних спектрів оптично неактивних молекул на їхні електронні спектри? Що це за вплив?

Так. Можуть.

Енергія коливального руху молекул більша за енергію їхнього обертання, тому одночасно з коливанням можуть збуджуються й обертальні стани молекул. Переходи між цими станами призводять до появи коливально-обертальних спектрів молекул. Розглянемо спочатку випадок малих збуджень, коли ангармонізмом і відцентровим спотворенням форми молекул можна знехтувати. У цьому випадку коливання й обертання молекул відбуваються незалежно одне від одного, і їхня енергія є адитивною сумою коливальної та обертальної енергій

$$E_{v,j} = E_r + E_v = Bj(j+1) + \left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_v, \quad (19.25) \text{ де } B = \frac{\hbar^2}{2J}. \text{ Між цими термами можуть мати}$$

місце переходи дозволені такими правилами відбору для вібронального й ротаційного квантових чисел  $\Delta v = \pm 1$  (наближення гармонічного осцилятора) та  $\Delta j = \pm 1$ . При кімнатній температурі лише незначна кількість молекул знаходиться в збудженому стані й тому найбільш інтенсивними, здебільшого, будуть лінії, що виникають при переходах між станами із квантовими числами  $v = 0$  і  $v = 1$ . У спектрах поглинання спостерігаються дві гілки ліній: одна - при виконанні правила відбору  $\Delta j = -1$ , яка називається P - гілкою, і друга - при  $\Delta j = +1$ , яка називається R - гілкою.

Електронні переходи мають значну енергію збудження ( $E_E > E_v > E_r$ ), що може змінювати електронну конфігурацію, внаслідок чого з'являється дипольний момент навіть у оптично не активної молекули. Криві залежностей молекулярної енергії від відстані між її атомами в основному й збудженому електронних станах можуть бути зміщені, що відповідає сильно стиснутому або розтягнутому станам збудженої молекули (рис.19.17 і 19.18). Молекула після такого електронного переходу негайно починає коливатись. Тому при електронних переходах навіть оптично неактивні молекули мають складні електронно-коливально-обертальні спектри. Спектр кожного електронного переходу супроводжується системою коливальних супутників, які у свою чергу супроводжується обертальними супутниками. При цьому в електронному спектрі з'являються P-, R- та Q- гілки коливально-обертального спектра, частоти яких у випадку нехтування ангармонізмом визначатимуться за формулами:  $\hbar\omega_P(\Delta j = j' - j = -1) = \hbar\omega_E + \hbar\omega_v - (B^* + B)j + (B^* - B)j^2$ ,  $j = 1, 2, 3, 4, \dots$   $\hbar\omega_R(\Delta j = j' - j = 1) = \hbar\omega_E + \hbar\omega_v + (B^* + B)(j+1) + (B^* - B)(j+1)^2$ ,  $j = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$

$$\hbar\omega_Q(\Delta j = j' - j = 0) = \hbar\omega_E + \hbar\omega_v + (B^* - B)j + (B^* - B)j^2, \quad j = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$$

де  $B^* = \hbar^2 / 2J^*$  і  $B = \hbar^2 / 2J$  сталі молекули в збудженому й не збудженому станах. Із цих формул видно, що в спектрі відсутня лінія із частотою  $\omega = \omega_E + \omega_v$ , але в ньому з'являється багато "червоних" (P-гілка) і "синіх" (R- та Q- гілки) ліній електронно-коливально-обертального молекулярного спектра. Звичайно, що при електронних збудженнях треба буде враховувати й ангармонізм, завдяки якому зміняться частоти коливального спектра (див. формули (19.24)) і з'являться обертона коливальних спектральних ліній, бо при значних збудженнях виникають нові правила відбору:  $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3$ . Ці обставини ще більше ускладнять вигляд електронно-коливально-обертального молекулярного спектра.

#### 5. Що таке функція Блоха? Де вона використовується?

$$\psi_{n,\kappa}(\vec{r}) = u_{n,\kappa}(\vec{r}) \cdot \exp\{i\vec{k} \cdot \vec{r}\} - \text{функція Блоха. (1)}$$



$$u_{n,\kappa}(\vec{r} + \vec{a}) = u_{n,\kappa}(\vec{r}) - \text{період.} \quad (2)$$

Функція (1) називається функцією Блоха, а  $u(\vec{r})$  - її амплітудою, модуль квадрата якої  $|u(\vec{r})^* \cdot u(\vec{r})|$  характеризує густину ймовірності знаходження електрона в точці кристала з радіус- вектором  $\vec{r}$ . Амплітуда функції Блоха описує квазічастинку - електрон, який належить усьому кристалу. Оскільки вона періодична (2), то її обчислюють у межах однієї елементарної комірки кристала. А для визначення хвильової функції всього кристала  $u(\vec{r})$  її потрібно помножити на фазовий множник  $C(\vec{a}) = \exp\{i\vec{k} \cdot \vec{r}\}$ . Функція Блоха нагадує хвильову функцію вільного електрона:

$$\psi(\vec{r}) = \exp\{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)\}, \text{ де } \vec{k} - \text{хвильовий вектор, що визначає імпульс } \vec{p} \text{ і енергію } E \text{ електрона}$$

відповідно:  $\vec{k}\hbar = \vec{p}$   
 $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$ . Тому вектор  $\vec{k}$  функції Блоха називається хвильовим вектором

квазічастинки-електрона в кристалі. Він визначає квазіімпульс електрона в кристалі. На відміну від імпульсу вільного електрона квазіімпульс електрона в кристалі визначається неоднозначно. Стани в кристалі виявляються тотожними у яких вектор  $\vec{k}$  (або  $\hbar\vec{k} = \vec{p}$ ) відрізняється на  $2\pi\vec{a} \times \vec{b}$ , де  $\vec{a} \cdot \vec{b}$  - ціле число.

Хвильовий вектор  $\vec{k}$  електрона в кристалі визначає фазу хвильової функції. Коли  $\vec{k}$  - дійсна величина, то функція Блоха (1) буде хвилею, що біжить (біжуча хвиля), модульованою з періодом, що збігається з періодом ґратки. Вона поширюється в кристалі без затухання. Отже, поки зберігається ідеальна періодичність, колективізований електрон не розсіюється й має нескінченну довжину вільного пробігу в кристалі. Розсіяння відбувається, коли електрон зіштовхується з дефектами ґратки, поверхнею кристала та фононами. Коли хвильовий вектор уявний ( $k = ik$ ), то хвильова функція необмежено затухає для одного з напрямків реального простору

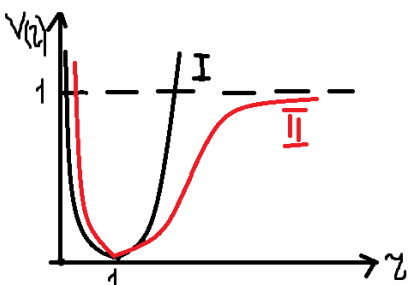
$\psi = u(\vec{r}) \cdot \exp\{-\vec{k} \cdot \vec{a}\}$ . Це означає, що квазічастинка – електрон, що має уявне значення хвильового числа  $k$ , не може розповсюджуватись у цьому напрямку кристала. Для уявних  $\vec{k}$  - це заборонені області енергій для руху колективізованих електронів. Таким чином, система енергетичних рівнів у кристалі розбивається на дозволені й заборонені зони енергетичних рівнів.

Застосування: функцію Блоха застосовують як хвильову функцію для електронів в металах та інших речовинах з періодичним потенціалом. Квазічастинки в кристалах, де має місце трансляційна симетрія зручно описувати ф-єю Блоха.

## Білет 25

### 1. Як впливає ангармонізм на коливальний спектр молекул?

Ангармонізм - особливість ангармонічного осцилятора. У випадку малих збуджень (в наближенні гармонічного осцилятора) коливальний спектр складається з однієї лінії із частотою  $\omega = \omega_v$ . При більших рівнях збудження (більших  $r$ ) крива (II) потенціальної енергії  $U(r)$  починає все більше і більше відрізнятись від параболи (I), притаманній гармонічному осцилятору. У першому наближенні ангармонізм ураховується тим, що замість параболи для функції  $U(r)$  використовується функція Морзе:



$U(r) = D(1 - e^{-a(r-r_0)})^2$ , де  $a$  - стала, характерна для даної молекули,  $D$  - енергія її дисоціації. Енергія стаціонарних станів з урахування ангармонізму:

$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_v - \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar\omega_v \xi$ , де  $\xi$ - стала ангармонізму, яка за порядком величини дорівнює  $\xi=0,01$ . Ангармонізм змінює вигляд коливального спектра молекул:

1. частоту нульових коливань при  $v=0$ , то  $\omega_v'(v=0) = \frac{\omega_v}{2} \left(1 - \frac{\xi}{2}\right)$ , де  $\omega_v = \sqrt{\frac{k}{m'}}$ ;
2. частоту основного стану ( $v=0 \rightarrow v'=1$ ), то  $\omega_v' = \omega_v(1 - 2\xi)$ ;
3. з'являються нові правила відбору:  $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ , що призводить до появи обертонів з частотами:  $\omega_v'(\Delta v=+1) = \omega_v(1 - 2\xi)$ ,  $\omega_v'(\Delta v=+2) = 2\omega_v(1 - 3\xi)$ , і т.д.

Дослідження коливальних спектрів дає можливість знайти такі параметри молекул: частоту власних коливань  $\omega_v$ , яка дозволяє визначити або приведену масу, або коефіцієнт квазіпружної сили; сталу ангармонізму  $\xi$ ; деталі будови складних молекул. Коливальні спектри зустрічаються у тих молекулах, що мають дипольний момент, тобто оптично активних молекул.

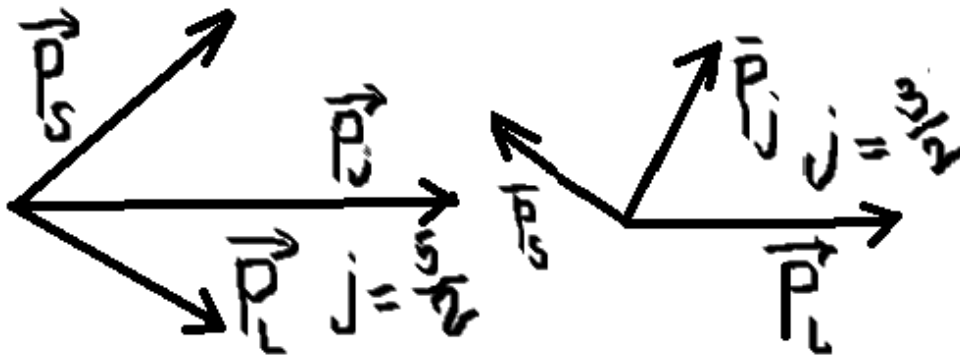
## 2. За допомогою принципу невизначеності оцінити розмір атома водню.

За допомогою співвідношення невизначеності  $\Delta x \Delta p_x > h$  знайдемо імпульс  $p \sim \Delta p$ , тому  $p^2 \approx \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \langle \Delta x^2 \rangle$ . Підставимо  $p^2$  у формулу для повної енергії атому водню  $E = E_k + V = \frac{p^2}{2m_0} - \frac{e^2}{\Delta x}$  і знайдемо мінімальне значення  $E$ :  $\frac{\partial E}{\partial (\Delta x)} = 0 = -\frac{\hbar^2}{4m_0(\Delta x)^2} + \frac{e^2}{\Delta x}$ , звідки  $\Delta x_m = \frac{\hbar^2}{4m_0 e^2} \approx \frac{10^{-27} 10^{-27}}{4 \cdot 25 \cdot 10^{-20}} = 10^{-9}$  см.

## 3. Побудувати векторні діаграми складання спінового та орбітального моментів, що знаходяться на d-орбіталі.

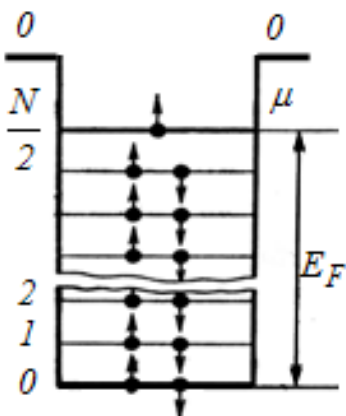
Оскільки d-орбіталь, то  $L=2$ ,  $S=\frac{1}{2}$ , а  $j=\frac{3}{2}$  і  $\frac{5}{2}$ , бо  $|L-S| \leq j \leq L+S$ ;

Орбітальний момент:  $|\vec{P}_L| = \hbar\sqrt{L(L+1)} = h\sqrt{6}$ , а спіновий момент:  $|\vec{P}_S| = \hbar\sqrt{S(S+1)} = h\sqrt{\frac{3}{4}}$ . А повний механічний момент:  $|\vec{P}_j| = \hbar\sqrt{j(j+1)} = h\sqrt{35/4}$ ,  $h\sqrt{15/4}$ . Тобто діаграми:



## 4. Причина появи

### енергії Фермі в металі.



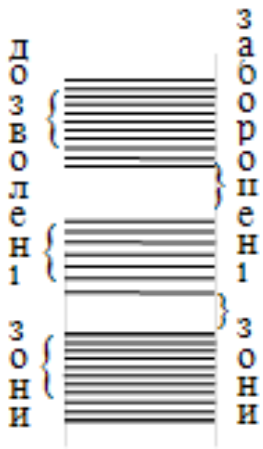
Метал для вільних електронів є своєрідною потенціальною ямою, вихід з якої вимагає затрати роботи з подолання сил зв'язку, що утримують електрони в металі. Горизонтальними лініями показані енергетичні рівні, які можуть займати електрони. Розподіл електронів на різних енергетичних рівнях здійснюється за принципом Паулі, згідно з яким на одному рівні не може бути двох однакових (з однаковим набором чотирьох квантових чисел) електронів, вони повинні відрізнитися якоюсь характеристикою, наприклад, напрямком спіну. Отже, за квантовою теорією, електрони в металі не можуть розміщуватися на найнижчому енергетичному рівні навіть при температурі  $T = 0\text{K}$ . Принцип Паулі вимушує електрони підніматися вгору по "енергетичній драбині". Якщо електронний газ містить  $N$  електронів, то останнім зайнятим виявиться рівень  $N/2$ . Найвищий енергетичний рівень, зайнятий електронами, називається рівнем Фермі для виродженого електронного газу. Рівень

Фермі буде тим вищим, чим більша густина електронного газу. Роботу виходу електрона з металу треба відраховувати не від дна потенціальної ями, як це робилось в класичній теорії, а від рівня

Фермі. Рівень Фермі відповідає максимальній кінетичній енергії  $E_F$ , яку може мати електрон в металі при абсолютному нулі. Її називають енергією Фермі.

### 5. У чому полягає поява виникнення енергетичних зон у кристалах.

Розглянемо Рівняння Шредінгера:  $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}) = E$ , де  $U(\vec{r})$ - потенціальна енергія одного електрона не лише в періодичному полі ядер ґратки, але і в усередненому періодичному полі всіх інших електронів. По-перше, повна енергія електрона, точніше, його кінетична енергія значно більша за його потенціальну енергію. Тобто, електрон є майже вільний, силове поле ґратки чинить на нього лише незначну збурюючу дію (метод слабого зв'язку). В результаті розв. рівняння Шр. виявляється, що спектр можливих значень енергій валентних електронів розпадається на ряд дозволених і заборонених зон, які чергуються. В межах дозволених зон енергія змінюється квазінеперервно (енергії, що належать забороненим зонам, не можуть реалізуватися). У другому наближенні, навпаки, вважається, що електрон сильно зв'язаний зі своїм атомом (ядром) і не може вільно переміщатися по ґратці (метод сильного зв'язку). Відмінність між кристалом й атомом полягає: в той час як в ізолюваному атомі даний енергетичний рівень  $E_a(n,l)$  є єдиним, в кристалі, що складається з  $N$  атомів, він повторюється  $N$  разів. Кожний рівень ізолюваного атома в кристалі  $N$ -кратно вироджений. У міру зближення ізолюваних атомів і утворення з них ґратки кожний атом



потрапляє у поле своїх сусідів, яке зростає (така взаємодія приводить до зняття виродження). Тому кожний енерг. рівень, не вироджений в ізолюваному атомі, розщеплюється на  $N$  близько розміщених один від одного підрівнів, що утворюють енергетичну зону. На кожному підрівні згідно з принципом Паулі може знаходитись не більше двох електронів з антипаралельними спінами. Найбільший вплив поле ґратки чинить на зовнішні валентні електрони атомів. Тому стани цих електронів у кристалі відчувають найбільші зміни, а енергетичні зони, які утворені з енергетичних рівнів цих електронів, виявляються найбільш широкими. Внутрішні ж електрони, які сильно зв'язані з ядром, відчувають лише незначні збурення від інших атомів, внаслідок чого їх енергетичні рівні в кристалі залишаються практично такими ж вузькими, як і в ізолюваних атомах. На рис. утворення енергетичних зон в кристалі із дискретних атомних рівнів. Зони дозволених енергій розділені областями заборонених енергій – забороненими зонами. Із збільшенням енергій електрона в атомі ширина дозволених зон збільшується, ширина заборонених – зменшується. Дозволені енергетичні зони в твердому тілі можуть бути різним чином заповнені електронами. У граничних випадках вони можуть бути цілком заповнені або цілком вільні. Електрони в твердих тілах можуть переходити з однієї дозволеної зони в іншу. Для переходу електрона з нижньої зони в сусідню верхню зону необхідно затратити енергію, що дорівнює ширині забороненої зони, яка розміщена між ними.

## Білет 28

### 1. Як у дослідах Резерфорда з розсіювання альфа частинок було визначено вплив багатократного пружного розсіювання.

Вплив багатократного розсіювання аналізувався за допомогою імовірнісного аналізу. Як виявилось, імовірність такого розсіювання на великі кути надзвичайно мала. Тому було враховано тільки однократне розсіювання на великі кути.

Для статистично незалежних актів пружного розсіювання застосовним є нормальний розподіл Гаусса.

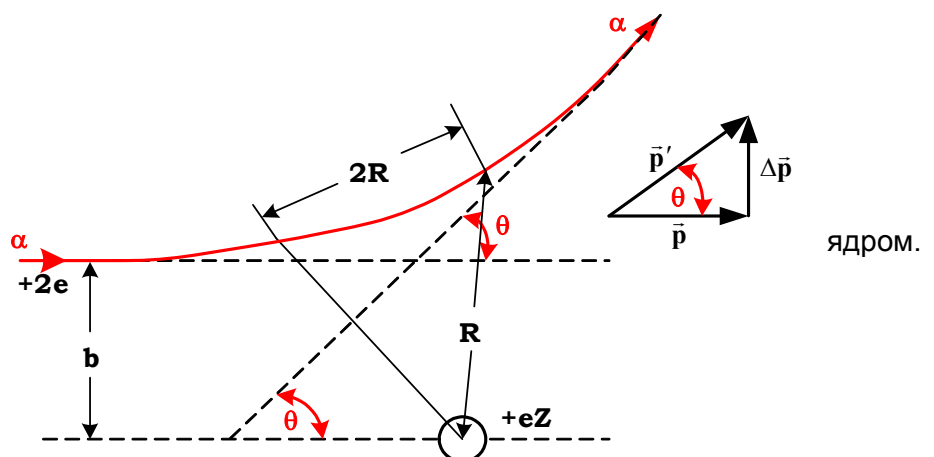
$$\omega\left(\geq \frac{\pi}{2}\right) = \exp\left\{-\left(\frac{0.5\pi}{\langle\theta\rangle}\right)^2\right\}$$

$\langle\theta\rangle$  - середній кут розсіювання.

$$\text{Також } \frac{\Delta p}{p} = \text{tg}\theta \cong \theta$$

$$\Delta p = F\Delta t = \frac{2e^2Z}{R^2}\Delta t$$

$\Delta t$  - час взаємодії  $\alpha$  - част. з



$\Delta t = \frac{2R}{\theta_\alpha} \Rightarrow \theta = \frac{\Delta p}{p} = \frac{2e^2 Z}{R^2} \frac{2R}{\theta_\alpha M_\alpha \theta_\alpha} = \frac{2e^2 Z}{RE_\alpha}$ . Чисельне значення  $\theta$  для частинок з  $E_\alpha = 10$  MeB,  $Z_{Au} = 79$  і  $R \sim 10^{-8}$  см  $\Rightarrow \theta = 3 \cdot 10^{-4}$  радіана = 0.02 градуса.

Якщо товщина фольги така, що в ній відбувається  $N$  незалежних зіткнень, то середній кут розсіювання  $\langle \theta \rangle$  дорівнює

$$\langle \theta \rangle = \sqrt{N}\theta \quad (3.7)$$

При  $N = 10^4$  середній кут розсіювання  $\langle \theta \rangle = (10^4)^{1/2} \times 0,02^\circ = 2^\circ$ . У цьому разі ймовірність розсіювання на кут, більший за  $\pi/2$ , визначена за формулою (3.2), буде дорівнювати:

$$w(\pi/2) = \exp\left\{-\left(0.5\pi/\langle \theta \rangle\right)^2\right\} = \exp\left\{-\left(90/2\right)^2\right\} = 10^{-875}.$$

Ця ймовірність занадто мала для того, щоб за короткий час проведення експерименту багатократно пружне розсіювання дало значний внесок у розсіювання  $\alpha$ -частинок на великий кут. Таким чином, основний внесок у дослідах Резерфорда в пружне розсіювання  $\alpha$ -частинок на великі кути дає однократно пружне розсіювання.

## 2. Який фізичний зміст правил відбору квантових чисел.

Правила відбору  $n - \forall, \Delta l = \pm 1, \Delta m_l = 0, \pm 1, \Delta s = 0, \Delta m_s = 0, \Delta j = 0, \pm 1 \left(0 \xrightarrow{hi} 0\right)$ ,

$\Delta m_j = 0, \pm 1, \Delta F = 0, \pm 1 \left(0 \xrightarrow{hi} 0\right), \Delta m_F = 0, \pm 1$ . Вони базуються на дипольних переходах.

У перехідному стані від стаціонарного стану із квантовим числом  $n$  до іншого з квантовим числом  $k$  виникає змішаний стан, який є суперпозицією цих двох станів  $n$  і  $k$  із хвильовою функцією  $\psi_t$

$$\psi_t = C_n \psi_{t,n} + C_k \psi_{t,k}, \quad (8.78)$$

де  $|C_n^* C_n|$  та  $|C_k^* C_k|$  - імовірності системи знаходитись в  $n$  або  $k$  станах. Умова нормування дає

$$C_n^* C_n + C_k^* C_k = 1. \quad (8.79)$$

Обчислимо тепер середнє значення  $\langle x \rangle$  для змішаного стану

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} (C_n^* \psi_{t,n}^* + C_k^* \psi_{t,k}^*) x (C_n \psi_{t,n} + C_k \psi_{t,k}) dx = \\ &= C_n^2 \int \psi_n^* x \psi_n dx + C_k^2 \int \psi_k^* x \psi_k dx + \\ &+ C_k^* C_n \int \psi_k^* x \psi_n e^{i\frac{t}{\hbar}(E_k - E_n)} dx + C_n^* C_k \int \psi_n^* x \psi_k e^{-i\frac{t}{\hbar}(E_k - E_n)} dx \end{aligned} \quad (8.80)$$

В окремому випадку зв'язаної системи із двома станами цю задачу можна спростити, бо для такої системи

$$\psi_n^* \psi_k = \psi_k^* \psi_n \quad \text{і} \quad C_n^* C_k = C_k^* C_n$$

і формула (8.74) набуває вигляду

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= C_n^2 \langle x \rangle_n + C_k^2 \langle x \rangle_k + C_n^* C_k \langle x \rangle_{n,k} (e^{i\omega_{kn}t} + e^{-i\omega_{kn}t}) = \\ &= C_n^2 \langle x \rangle_n + C_k^2 \langle x \rangle_k + 2C_n^* C_k \langle x \rangle_{nk} \cos(\omega_{kn}t), \end{aligned}$$

$$\text{де} \quad \omega_{kn} = \frac{1}{\hbar} (E_k - E_n)$$

$$\langle x \rangle_{kn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^* x \psi_n dx. \quad (8.81)$$

Вираз (8.81) називається *матричним елементом переходу електрона з одного стану із квантовим числом  $n$  до іншого стану з квантовим числом  $k$* . Якщо під час цього переходу матричний елемент  $\langle x \rangle_{kn}$  не дорівнює нулеві ( $\langle x \rangle_{\kappa,n} \neq 0$ ), то й дипольний момент

$e < x >_{\kappa, n} \neq 0$ . Це означає, що при такому переході диполь випромінює електромагнітні хвилі із частотою, яка визначається за правилом частот Бора  $\hbar\omega = E_{\kappa} - E_n$ .

Таким чином, *матричний елемент визначає дозволені й заборонені переходи, тобто правила відбору*:

$x_{kn} = 0$  *заборонені переходи*;

$x_{kn} \neq 0$  *дозволені переходи*. (8.82)

Визначимо для прикладу правило відбору для магнітного числа  $m$  для дипольних переходів (при умові  $kr = ka = 2\pi a / \lambda < 1$ ) у випадку хвильових функцій електрона в атомі водню, для якого

$$\Psi_{n,m} = R_n(r)\Theta^m(\theta)\Phi_m(\varphi). \quad (8.83)$$

Знайдемо середнє значення  $x = r \sin \theta \cos \varphi$

$$\langle x \rangle = \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} R_n^* R_n \Theta_\ell^* \Theta_\ell^m \cdot r \sin \theta \cos \varphi \cdot \Phi_m^* \Phi_m \cdot r^2 \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (8.84)$$

Інтеграли в (8.78) можна записати як добуток трьох інтегралів по  $r$ ,  $\theta$  і  $\varphi$ , тому що функції  $R(r)$ ,  $\Theta(\theta)$  і  $\Phi(\varphi)$  залежать лише від своєї змінної  $r$ ,  $\theta$  або  $\varphi$ . За умовою, що  $\langle x \rangle \neq 0$ , знаходимо дозволений перехід. Це означає, що всі три інтеграли в (8.84) повинні не дорівнювати нулеві. Обмежимося розглядом інтеграла за змінною  $\varphi$ .

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \Phi_m^* \cos \varphi \Phi_m d\varphi &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} \cos \varphi d\varphi = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) d\varphi = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} [e^{i(m-m'+1)\varphi} + e^{i(m-m'-1)\varphi}] d\varphi \neq 0 \end{aligned} \quad (8.85)$$

Умова (8.85) виконується лише, коли

$\Delta m = \pm 1$ . Аналогічно можна отримати й інші правила відбору.

### 3. Що таке обмінне виродження?

Елементарні частинки мають однакові властивості, коли в них однакова маса, заряд, спіні, енергія тощо. Згідно з принципом тотожності, якщо їх поміняти місцями, то нічого не зміниться.

Проте можна показати, що в системі двох електронів має місце обмінне виродження. Дійсно рівняння Шредінгера для двох тотожних не взаємодіючих частинок має такий вигляд:

$$(\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2})\Psi_{12}(r_1, r_2) + (2m_0 / \hbar^2)(E - U_1^0 - U_2^0)\Psi_{12}(r_1, r_2) = 0,$$

а його розв'язки:

$$E = E_1 + E_2; \quad \Psi_{12}(r_1, r_2) = \Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2); \quad \Psi_{21} = \Psi_1(r_2)\Psi_2(r_1) \quad (12.19)$$

Із формул (12.19) бачимо, що існує два різних стани  $\Psi_{12}$  і  $\Psi_{21}$  з однаковою енергією  $E$ , тобто має місце обмінне виродження, котре суперечить принципу тотожності однакових частинок.

Отже, треба знайти такі розв'язки рівняння Шредінгера, котрі не суперечать принципу тотожності однакових частинок. Такі розв'язки мають вигляд:

$$\begin{aligned} \Psi_C &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{12} + \Psi_{21}) \\ \Psi_A &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{12} - \Psi_{21}) \end{aligned} \quad (12.23)$$

де кожна із складових хвильових функцій  $\Psi_{12} = \Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)$  і  $\Psi_{21} = \Psi_1(r_2)\Psi_2(r_1)$  обмінно вироджена.

Вольфганг Паулі в 1924 встановив, що стани частинок з напівцілим спіном ( $s = 1/2, 3/2, \dots$ ) описуються антисиметричними хвильовими функціями  $\Psi_A$ , а частинок з цілим спіном ( $s = 0, 1, 2, \dots$ ) -

симетричними хвильовими функціями  $\psi_c$ . Це твердження називається принципом Паулі або принципом виключення. Його можна сформулювати і інакше, а саме: в системі частинок з напівцілим спіном - ферміонів не може бути двох частинок, що знаходяться в одному і тому ж стані.

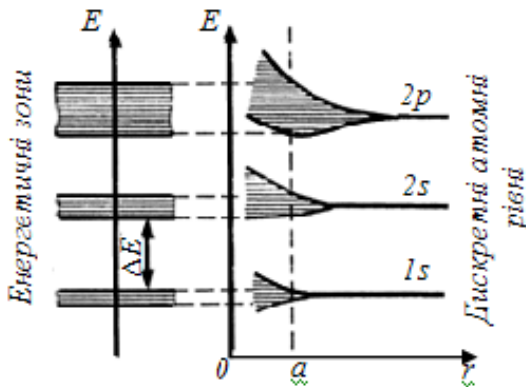
В атомі стан електронів визначається 4-ма квантовими числами  $n, l, m_l$  і  $m_s$  або  $n, l, j$  і  $m_j$ . В кожному із таких станів згідно принципу Паулі може знаходитись лише один електрон.

#### 4. У чому причина дублетності рентгенівських термів?

Це зв'язано з тим, що з одного й того ж шару під впливом фотонів можу вибиватися електрони з різними  $l$ , утворюючи іонізовані атоми. Рівень, з якого вибито електрон, буде визначати рентгенівський терм. Оскільки енергії електронів на одному шарі дуже близькі, то й терми відповідні будуть близько розташовані. Це призводить до появи тонкої структури рентгенівських спектрів. Можливість різних значень  $l$  і приводить до появи мультиплетності рентгенівських термів.

#### 5. Як і чому властивості парамагнітних тіл залежать від температури?

Парамагнетизм – властивість речовин слабо намагнічуватися в напрямі дії зовнішнього поля (напрямі силових ліній цього поля). Атоми або молекули парамагнетиків мають результуючий магнітний момент, який розглядається як магнітний диполь. При відсутності зовнішнього магнітного поля диполі орієнтуються хаотично і тіло не виявляє ознак намагніченості. При внесенні парамагнетика у магнітне поле магнітні диполі повертаються, орієнтуючись своїм магнітним моментом уздовж зовнішнього поля. Цьому заважає тепловий рух молекул. Кінцевий сумарний магнітний момент одиниці об'єму парамагнетика залежить від величини зовнішнього магнітного поля і від температури. Отже, зі збільшенням температури зростає хаотичність руху диполів і зменшується сумарний магнітний момент парамагнетиків.



$I = \chi H$ ,  $\chi \sim \frac{1}{T}$  – магнітна сприйнятливність,  $I$  – намагніченість:  $B = H + 4\pi I$ .

### Білет 29

1. Коли спостерігається когерентне розсіювання рентгенівських променів? (п.5.1.4 + п.5.1.5)
2. У чому причина спін-орбітальної взаємодії? Приклад її впливу. (п.9.4 + п.9.10)
3. Чи залежить діамагнітна сприйнятливність сукупності атомів від температури й атомного номера?(п. 17.6.Б)
4. Яка причина появи ковалентного зв'язку? (п. 18.9)
5. Як зв'язані концентрація й рівень Фермі в металах? (п. 20.9+ Інтернет)

1) У його дослідах вивчалось розсіювання жорстких (з великими енергіями квантів) рентгенівських променів тілами, що складались з атомів легких елементів графіт, парафін тощо. Прилад для досліджень традиційно, як і в інших дослідах із розсіювання частинок, складався із трьох частин: джерела рентгенівських променів, що розсіюються, камери розсіювання та системи для збору, аналізу й детектування розсіяних променів.

Розсіювання рентгенівських променів на атомах, що входять до складу кристалічних ґраток, *когерентне* й тому при розсіянні на кристалах ми спостерігаємо дифракцію й інтерференцію, а при

розсіянні на вільних електронах, які рухаються незалежно один від одного розсіяння буде некогерентним.

**Когерентне розсіювання рентгенівських хвиль спостерігається, коли вторинні хвилі, що генеруються коливаючимися електронами речовини, яка розсіює, будуть когерентними, тобто мають ту ж частоту й не дуже широкий розкид фаз.** Це має місце при розсіюванні рентгенівських променів зв'язаними електронами, коли первинна рентгенівська хвиля збуджує узгоджені коливання зв'язаних електронів. Вторинні рентгенівські хвилі, які випромінюються електронами, збудженими первинною хвилею, інтерферують із падаючою рентгенівською хвилею й між собою. У наслідок інтерференції відбувається просторовий перерозподіл інтенсивності хвиль у вигляді лауеграм або дебаєграм. Дійсно, при розсіянні рентгенівських хвиль кристалами спостерігаються дифракційні картини, що свідчить про когерентний характер їх розсіювання.

**2) Дослідним шляхом було встановлено, що спектральні лінії атомних спектрів лужних металів мають складну тонку структуру. Кожна лінія головної і різкої серій – дублети, бо складається із двох близьких ліній, а лінії дифузної й фундаментальної серій - триплети. Наявність тонкої структури свідчить, що енергія електронів залежить не тільки від квантових чисел  $n$  і  $\ell$ . Для пояснення тонкої структури спектральних ліній (їх мультиплетності) існуюча модель атома була доповнена гіпотезою про спін електрона – власний момент кількості руху, для якого:**

$|L_S| = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ , де  $s = 1/2$ ;  $L_{S,z} = m_s\hbar$ , де  $m_s = \pm 1/2$  і  $|\mu_s/L_S| = g_s(e/2m_0c)$ , де  $g_s = 2$ . Внаслідок взаємодії спіна ( $L_S$ ) з орбітальним моментом ( $L_\ell$ ), він орієнтується паралельно або антипаралельно орбітальному моменту, що враховується магнітним квантовим числом  $m_s = \pm 1/2$  або значенням квантового числа  $j = \ell + m_s$ , яке визначає сумарний кутовий момент електрона  $\vec{L}_j = \vec{L}_\ell + \vec{L}_s$ , де  $|L_j| = \hbar\sqrt{j(j+1)}$ ,  $j = \ell + 1/2, \ell - 1/2$ ,  $L_{j,z} = m_j\hbar$ , де  $m_j = j, j-1, \dots, -j$ .

Внаслідок спін-орбітальної взаємодії, залежної від орієнтації спіну, енергія стаціонарного стану збільшується або зменшується на  $\Delta E(n, \ell, j, Z)$ . Терм розщеплюється підтерми.

Величина розщеплення визначається квадратом сталої тонкої структури ( $\alpha^2$ ), де  $\alpha = e^2/\hbar c \cong 1/137$ .

Рівняння Шредінгера не придатне для пояснення тонкої структури термів і спектральних ліній, бо воно нерелятивістське. Для врахування впливу спіна потрібно було знайти нове рівняння – рівняння Дірака, інваріантне до перетворень Лоренца. Воно блискуче пояснило тонку структуру термів атома водню за абсолютною величиною.

**3) Діамагнітні властивості атомів спостерігаються, коли  $J=0$ , тобто коли  $\mu_J=0$ . Для пояснення діамагнетизму атомів скористаємось теоремою Лармора. Згідно теореми Лармора електрон у зовнішньому магнітному полі здійснює прецесію навколо напрямку вектора напруженості магнітного**

поля  $\mathcal{B} \neq 0$  з частотою прецесії Лармора  $\omega_L = \frac{e\mathcal{B}}{2m_0c}$ . Прецесія  $Z$  електронів атома еквівалентна

густині електричного струму  $j$ :  $j = -eZ \frac{1}{\tau} = -eZ \frac{\omega_L}{2\pi} = -\frac{e^2 Z \mathcal{B}}{4\pi m_0 c}$ . Цей струм наводить магнітний

момент:  $\mu_n = j \frac{\pi \langle r^2 \rangle}{c} = -\frac{e^2 Z \mathcal{B} \pi \langle r^2 \rangle}{4\pi m_0 c^2} = -\frac{e^2 Z \langle r^2 \rangle}{4m_0 c^2} \mathcal{B}$ , де  $\langle r^2 \rangle$  - середній квадрат радіуса контуру

зі струмом. Середня відстань найбільшої ймовірності знайти електрон в атомі  $\langle r^2 \rangle$  дорівнює



$$\langle \rho^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle = 3 \langle x^2 \rangle \quad \text{і} \quad \langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle = 2 \langle x^2 \rangle, \quad \text{тоді} \quad \langle r^2 \rangle = 2/3 \langle x^2 \rangle.$$

Підставивши  $\langle r^2 \rangle$  в формулу, отримаємо  $\chi = \frac{\mu_n N}{B} = -\frac{e^2 Z \langle \rho^2 \rangle N}{6 m_0 c^2}$ . Вираз дає значення  $\chi$ , яке НЕ

ЗАЛЕЖИТЬ від температури, але ЗАЛЕЖИТЬ від атомного номера.

*Діамагнетизм притаманний усім атомам, проте його чітко вдається спостерігати лише тоді, коли можна знехтувати парамагнетизмом цих атомів.*

**4)** Ковалентний зв'язок не має класичного аналога. Це квантове явище, яке виникає внаслідок обмінної взаємодії. Вона є проявом специфіки квантових законів руху систем однакових частинок і виникає внаслідок кулонівської взаємодії між електронами і ядрами. Вона зв'язана з кореляцією руху електронів, що виникає через симетризацію хвильових функцій відповідно до принципу Паулі. Ковалентний зв'язок з'являється, тому що стани двох тотожних частинок описуються не хвильовими функціями окремих частинок, а їхніми симетричними й антисиметричними комбінаціями.

Обмінна енергія має такі властивості: 1 - збільшується при збільшенні перекриття хвильових функцій взаємодіючих частинок, 2 - позитивна для симетричних спінових функцій і негативна для антисиметричних, 3 - насичується, бо існує граничне число попарних електронних зв'язків при утворенні молекул з атомів, 4 - виявляє направленість.

Отже, обмінна енергія і є причиною ковалентних зв'язків.

**5)** Концентрація електронів  $n$  залежить від енергії Фермі так:  $n = \frac{N}{V} = \frac{8\pi(2m^*)^{3/2}}{3\hbar^3} E_F^{3/2}$ .

Тут  $m^*$  - ефективна маса квазічастинки,  $E_F$  - енергія Фермі.

*Ефективна маса - це параметр, який враховує особливості руху квазічастинки - електрона в кристалі. Вона може суттєво відрізнятись від маси вільного електрона. Вона навіть може змінювати свій знак і бути від'ємною.*

Рівень (енергія) Фермі — це значення енергії найвищого заповненого рівня електронів твердотільної системи в основному стані. При нульовій температурі положення рівня Фермі збігається із значенням хімічного потенціалу системи електронів у твердому тілі. При відмінній від нуля температурі значення хімічного потенціалу відмінне від положення рівня Фермі.

## Білет 31

1. Як визначити поляризацію рентгенівських променів?
2. В атомі Rb електрон знаходиться в основному стані  $^2S_{1/2}$ , а ядро має спінове квантове число  $I = 1/2$ . Скільки рівнів надтонкої структури має основний електронний стан?
3. Чому ядерний магнітний резонанс спостерігається при значно менших частотах, ніж електронний спіновий резонанс?
4. Чи залежить стала  $a$  в законі Мозелі від рентгенівської серії?
5. Яка причина температурної залежності магнітної сприйнятливості парамагнітних та феромагнітних речовин?

**1.** Розсіяна електромагнітна хвиля після проходження розсіюючої речовини створює електричне поле з напруженістю ...

$E_y = \frac{e(\frac{E_0}{m_0})}{c^2 r} \sin\varphi = \frac{E}{r} \left( \frac{e^2}{m_0 c^2} \right) \sin\varphi = \frac{E_0}{r} r_e \sin\varphi$   $E_z = \frac{E_0}{r} r_e$ , де  $r_e$  - класичний радіус електрона. При малих кутах розсіювання класична теорія розходиться з експериментом, бо треба враховувати інтерференцію хвиль, розсіяних сусідніми електронами. Потік рентгенівських променів (для кожної складової електричного поля) знайдемо інтегруванням вектора Умова-Пойнтінга



$$I_{y,z} = \frac{c}{4\pi} [\vec{E} \cdot \vec{B}] = \frac{eE_{y,z}^2}{4\pi}$$

Коливання  $E_y$  і  $E_z$  некогерентні, тому повний потік буде  $I = I_y + I_z$

Після інтегрування  $I = \frac{8}{3} I_0 n \sigma_e$ . Звідси бачимо, що розсіювання рентгенівських променів відрізняється від розсіювання світла тим, що ефективний переріз  $\sigma_e = \pi r_e^2$  не залежить від довжини хвилі, а в розсіянні світла обернено пропорційний 4-й степені довжини хвилі. Ця відмінність виникає через велику різницю довжин хвиль, що розсіюються. Довжини рентгенівських хвиль  $\lambda < r_{атома}$ , а світлових -  $\lambda > r_{атома}$ . Рентгенівські хвилі розсіюються на вільних електронах некогерентно, бо рух вільних електронів незалежний, і тому розсіяння на них також незалежне. При некогерентному розсіянні хвилі поляризується.

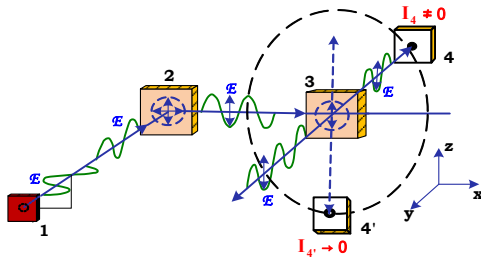


Рис.5.10. Схема визначення поляризації рентгенівських променів по розсіюванню: 1 – джерело променів, 2 – 1-й розсіювач, 3 – 2-й розсіювач, 4 і 4' – два положення детектора розсіяних рентгенівських променів.

Це було безпосередньо доведено дослідями Баркла. Пучок рентгенівських променів розсіювався на пластинці парафіну або вуглеця. Розсіяне світло під кутом  $90^\circ$  попадало на другу паралельно першій пластинку з того ж самого матеріалу і знову розсіювалося. Розсіяне рентгенівське випромінювання реєструвалось за допомогою детекторів (іонізаційних камер) в різних напрямках. Було експериментально доведено, що в напрямку перпендикулярному до падаючого променя на другу пластинку інтенсивність розсіяних променів була рівна нулеві (4), в той же час в інших напрямках  $I \neq 0$ . На основі цих дослідів Барклі довів, що рентгенівські хвилі поперечні, оскільки для них характерна поляризація. Пояснення поляризації при розсіянні рентгенівських хвиль також не потребує нових ідей, бо воно природно пояснюється за допомогою електродинаміки взаємодії електромагнітних хвиль із речовиною. Згідно електродинаміки, розсіювання можна розглядати як випромінювання вторинних електромагнітних хвиль електронами, що коливаються під дією електричного поля первинної електромагнітної хвилі. Електрон під час свого коливного руху випромінює поляризовані хвилі, електричний вектор яких знаходиться в площині коливання електрона, тому у двох положеннях детектора 4 і 4' інтенсивність розсіяних електромагнітних хвиль буде різною і залежить від поляризації падаючого розсіяного світла на другу пластину.

2.

$j = 1/2$ ;  $l = 1/2$ ;  $F = j + l, j + l - 1, \dots, |j - l| \Rightarrow F = 1, 0$ . Рівень розщепиться на 2.

3.

Магнітний момент  $\vec{\mu}_I = g_J \vec{L}_I$  ядерного спіну  $\vec{L}_I$  взаємодіє з магнітним полем  $\vec{B}$ . Енергія цієї взаємодії залежить від проекції ядерного спіну на вісь паралельну до напрямку поля  $\vec{B}$ , тобто від магнітного числа ядерного спіну  $m_I$ :  $\Delta E_J = -g_J \mu_p B m_I$ . тут  $g_J$  і  $\mu_p$  - ядерний фактор спектроскопічного розщеплення (ядерний множник Ланде) і магнітний момент (магнетон) протону відповідно. Поперечне до напрямку сталого магнітного поля змінне магнітне поле стимулює переходи між

розщепленими рівнями у відповідності з правилом відбору  $\Delta m_I = \mp 1$ . Тому у поперечному осцилюючому магнітному полі виникає резонансне поглинання електромагнітної енергії при умові:

$$\hbar\omega_{\text{ЯМР}} = E\left(m_I = -\frac{1}{2}\right) - E\left(m_I = \frac{1}{2}\right) = g_p \mu_p B$$

Оскільки маса протону значно більша маси електрона, то ядерний магнетон протону значно менший магнетона Бора ( $\mu_p \gg \mu_B$ ). Це означає, що резонансна частота ЯМР значно менша частоти ЕПР:

$$\omega_{\text{ЯМР}} = g_p \frac{e}{2m_p c} B; f_{\text{ЯМР}} = \frac{\omega_{\text{ЯМР}}}{2\pi} = 4,26 * 10^3 * B \text{ [с}^{-1}\text{]}$$

4. Експериментально встановлена така властивість :

Спектральні лінії однієї й тієї серії зсуваються в бік менших  $\lambda$  зі зростанням  $Z$ , згідно закону Мозелі

$\sqrt{v^*} = \sqrt{\frac{1}{\lambda}} = C_i(Z - a_i)$ , де  $C_i$  та  $a_i$ - стала екранування атомного ядра. Для K- серії, наприклад,  $a_i = 1$ , а для L-серії  $a_i > 1$ ;

При переході електронів з периферичних оболонок на вакансію глибинної, вони рухаються в кулонівському полі екранованого ядра з  $Z_{\text{еф}} = Z - a$ . Цей перехід майже еквівалентний переходу в одно електронному атомі з  $Z_{\text{еф}} = Z - a_i$ , для якого використовується узагальнена формула Бальмера

$$v^* = RZ_{\text{еф}}^2 \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

І тому виконується Закон Мозелі  $\sqrt{v^*} = \sqrt{R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)} (Z - a)$  Величина  $a$  називається сталою екранування. Вона слабо залежить від номера  $Z$  в межах однієї серії. Величина  $a$  збільшується для спектральних серій зі збільшенням головного квантового числа  $n$ . Більш точні вимірювання показали, що закон Мозелі наближений, бо спостерігаються відхилення від лінійної залежності  $\sqrt{v^*} \sim Z$ , але для K і L серій відхилення від лінійності незначні.

5. Атоми, у яких  $J \neq 0$ , мають не нульовий магнітний момент  $|\mu_0| \neq 0$ . Вони називаються парамагнітними. Їх магнітний момент рівний:

$|\mu| = g_J \mu_B \sqrt{J(J+1)}$ , де  $\mu_B = \frac{eh}{2m_0c}$  - магнетон Бора. Сукупність парамагнітних атомів орієнтується у магнітному полі  $\vec{B} \neq 0$ . При цьому має місце вираження в енергії

$$\Delta E = -(\vec{\mu}_\Sigma \vec{B}), \Delta E = -(\vec{\mu}_\Sigma \vec{B})$$

де  $\vec{\mu}_\Sigma$  - магнітний момент одиниці об'єму речовини. В речовині внаслідок наявності  $\vec{\mu}_\Sigma \neq 0$  виникає внутрішнє магнітне поле  $\vec{B}_i \neq 0$ . Повне поле буде сумою поля, що створюється струмами (поле у вакуумі  $\vec{B}_0$ ), та внутрішнього поля  $\vec{B}_i$ :

$$B = B_0 + B_i = \mu^* B_0$$

$\mu^*$  - магнітна проникність сукупності атомів, яка дорівнює  $\frac{B}{B_0}$ , або

$$\mu^* = 1 + \frac{B_i}{B_0} = 1 + 4\pi\chi, \quad \text{де } \chi - \text{магнітна сприйнятливність сукупності атомів}$$

$\chi = \frac{1}{4\pi} \frac{B_i}{B_0} = \frac{\mu_\Sigma}{B_0}$ . Для визначення  $\chi$  сукупності атомів потрібно обчислити  $\chi_\Sigma$ . У зовнішньому магнітному полі  $\vec{B}_0 \neq 0$   $\mu_{Jz}$  має  $2J + 1$  значень, відповідно до різних значень магнітного квантового числа  $m_J$ , бо  $\mu_{Jz} = g_J m_J \mu_B$ . Зовнішнє магнітне поле орієнтує, а тепловий рух дезорієнтує атомні магнітні

моменти. Внаслідок боротьби цих двох тенденцій встановлюється рівноважний середній магнітний момент одиниці об'єму  $\mu_\Sigma$

$\mu_\Sigma = N\langle\mu_{Jz}\rangle$ , де  $\langle\mu_{Jz}\rangle$ - середнє значення проекцій магнітних моментів сукупності атомів у магнітному полі, що визначає намагніченість речовини. Знайдемо середнє значення  $\mu_{Jz}$

$$\langle\mu_{Jz}\rangle = \frac{\sum_{m_J=-J}^{m_J=J} (g_J m_J \mu_0) e^{\left\{\frac{g_J m_J \mu_B B}{k_B T}\right\}}}{\sum_{m_J=-J}^{m_J=J} e^{\left\{\frac{g_J m_J \mu_B B}{k_B T}\right\}}}$$

або  $\langle\mu_{Jz}\rangle = g_J \mu_0 B(a)$  де  $a = \left(\frac{g_J \mu_B B}{k_B T}\right)$ ,  $B(a)$  - функція Бріллюена

Знайдемо тепер  $\mu_\Sigma$  і  $\chi$ :  $\mu_\Sigma = Ng_J \mu_0 B(a)$ ;  $\chi = \frac{\mu_\Sigma}{B} = \frac{Ng_J \mu_0 B(a)}{B}$

$$\chi = \begin{cases} \frac{Ng_J \mu_B}{B}, & a \rightarrow \infty \\ \frac{Ng_J \mu_B}{B} (J+1) \frac{a}{3} = \frac{J+1}{3} N \frac{g^2_J \mu_B^2}{k_B T}, & a \rightarrow 0 \end{cases}$$

Таким чином, за допомогою квантово-механічної моделі атома ми отримали криву намагнічування парамагнітної сукупності атомів і відомий закон Кюрі-Вейса  $\chi \sim T^{-1}$  для залежності  $\chi(T)$ .

## Білет 36

1. Яке значення для атомної фізики мають результати дослідів Франка й Герца?
2. Чому у дослідях Лемба і Різерфорда використовувались вимушені переходи?
3. Яка причина появи надтонкої структури електронного спінового резонансу?
4. Чим визначається тонка структура спектрів убирання рентгенівських променів?
5. Як потрібно обробити власний напівпровідник щоб він мав діркову провідність?

1. Яке значення для атомної фізики мають результати дослідів Франка й Герца?

Дослід Франка-Герца показав, що спектр енергії атомів не є неперервним, а є набір дискретних енергетичних рівнів. Це був важливий результат, бо:

Дослідження випромінювання абсолютно чорного тіла та збуджених атомів показало, що вони випромінюють світло окремими квантами. Вивчення законів фотоефекту показало, що світло поглинається окремими квантами. Виникло питання, чи завжди атоми поглинають окремі кванти енергії, тобто чи існують у ньому дискретні рівні енергії, чи в атомі переважають неперервні рівні енергії. Саме дослід Ф-Г дав відповідь на нього

2. Чому у дослідях Лемба і Різерфорда використовувались вимушені переходи?

У цих дослідях перевірялося виродження рівнів

$$2^2 S_{\frac{1}{2}} i \quad 2^2 P_{\frac{1}{2}}$$

Для цього атом спершу переводився з основного стану в  $2^2S_{1/2}$  електронним променем. Оскільки дипольний перехід з  $2^2S_{1/2}$  в основний стан заборонений,  $2^2S_{1/2}$  - метастабільний рівень. Щоб перевести такий атом в основний стан необхідно спершу здійснити перехід на  $2^2P_{1/2}$ . Якщо ці 2 рівні не вироджені, то вони є дуже близькими за енергіями – це означає що ймовірність оптичного переходу між ними, яка пропорційна кубу частоти випроміненого фотона дуже мала. Водночас відомо, що ймовірності вимушених переходів значно більші від ймовірностей спонтанних переходів. Тому при опромінюванні атомів водню електромагнітними хвилями з  $h\nu = E(2^2S_{1/2}) - E(2^2P_{1/2})$  суттєво зростає ймовірність вимушених переходів між цими енергетичними рівнями, що у свою чергу викликає спонтанний перехід на рівень  $1^2S_{1/2}$ , і утворюється не збуджений атом водню

### 3. Яка причина появи надтонкої структури електронного спінового резонансу?

Атомні ядра також мають магнітні моменти, які взаємодіють з орбітальним моментом і зовнішнім магнітним полем. Зовнішнє магнітне поле  $\mathcal{B}$  взаємодіє як з електронним, так і ядерним магнітними моментами, що повинно призводити до відповідного розщеплення термів. Енергія взаємодії полів  $\mathcal{B} \geq 10^3$  Е, які використовуються у дослідженнях ЕПР, з магнітними моментами електрона і ядра більші за енергію їх взаємної взаємодії. Внаслідок цього слід розглядати зееманівське розщеплення термів, на яке додатково буде накладатись енергія взаємодії магнітного моменту ядра  $\mu_{\text{Я}}$  з полем  $\mathcal{B} (\Delta E_{\text{Я}} = -(\vec{\mu}_{\text{Я}} \vec{\mathcal{B}}))$ , тобто якщо наприклад терм  $^2S_{1/2}$  атому водню, внаслідок зееманівського розщеплення буде 2 рівні, кожен з яких розщепиться ще на 2 внаслідок взаємодії ядерного магн моменту(спіну протона) з маг. полем – разом 4 рівні.

### 4. Чим визначається тонка структура спектрів убирання рентгенівських променів?

Спін-орбітальною взаємодією.

### 5. Як потрібно обробити власний напівпровідник щоб він мав діркову провідність?

*Акцепторні домішки* створюють акцепторні локальні центри у нижній половині забороненої зони, що знаходиться ближче до стелі валентної зони (рис.20.17). На відміну від донорних домішок вони здатні приєднувати до себе від'ємно заряджені електрони із валентної зони, утворюючи від'ємно заряджені іони й дірки у валентній зоні. Прикладом акцепторних домішок у кристалі Si є домішки атомів бору, який заміщує атоми кристалу Si

## Білет 37

**1.Для чого в сучасному різновиді постановки дослідів Франка і Герца використовується спектральні прилади сфокусовані за напрямками.**

В циліндричному конденсаторі має місце *фокусування за напрямками*. Воно полягає в тому, що електрони, котрі влітають до циліндричного конденсатора під кутами  $\alpha$  до оптичної осі, при куті розкриття конденсатора  $\theta = \frac{\pi}{\sqrt{2}} = 127^{\circ}17'$  знову збираються в точку.

Думаю воно потрібне, щоб збільшити струм на детекторі електронів при прикладенні потенціалів іонізації на обкладинках конденсатора, тобто для легшого виявлення цих потенціалів.

**2. У чому полягає причина виникнення надтонкої структури спектральних ліній?**

Надтонка структура обумовлена врахуванням електромагнітної взаємодії електрона з ядром.

Використання спектрографів з надзвичайно великою роздільною здатністю ( $\Delta\lambda/\lambda \leq \alpha^2 \sim 10^{-5}$ ) виявило не тільки тонку, але й *надтонку структуру* спектральних ліній атомних спектрів лужних

металів, а згодом і атомів водню. Природа цієї надтонкої структури пояснюється взаємодією сумарного моменту кількості руху електрона  $L_j$  з ядерним спіном  $L_I$ .

Спіну протона відповідає магнітний момент протона, що дорівнює

$$\mu_p = g_p \frac{e\hbar}{2m_p c}, \quad (9.34)$$

де  $m_p = 1836,15 \cdot m_0$  - маса протона. Спін протона може мати дві проекції на вісь  $z$ :  $\mu_{pz} = \pm 1/2 |\mu_p|$   
 $L_{pz} = \pm 1/2 \hbar$ .

Ядерний спін повинен векторно складатися з сумарним моментом кількості руху електрона в атомі, і сумарний момент визначає терм. Застосуємо цю ідею до розгляду надтонкої структури термів атома натрію, у якого ядерний спін дорівнює  $3/2$  ( $I = 3/2$ ). Абсолютна величина ядерного спіну визначається за формулою

$$|L_I| = \hbar \sqrt{I(I+1)} = \hbar \sqrt{\frac{3}{2} \left( \frac{3}{2} + 1 \right)} = \hbar \sqrt{\frac{15}{4}}$$

Ядерний спін  $L_I$  повинен взаємодіяти з сумарним спін-орбітальним моментом електрона  $L_j$ , утворюючи при цьому повний момент  $L_F$

$$\vec{L}_F = \vec{L}_j + \vec{L}_I \quad L_{zF} = \hbar m_F$$

Нове квантове число  $F$ , що характеризує модуль повного моменту кількості руху  $|L_F|$ , визначається нерівністю

$$|j - I| \leq F \leq j + I. \quad (9.38)$$

Правило відбору для квантового числа  $F$  подібне до правил відбору магнітного квантового числа

$$\Delta F = 0; \pm 1.$$

### 3. Що таке множник Ланде? Для яких станів він дорівнює 1?

Множник Ланде (гіромагнітний множник,  $g$ -фактор) — множник у формулі для розщеплювання рівнів енергії в магнітному полі, що визначає масштаб розщеплювання у відносних одиницях.

Вперше цей множник ввів німецький фізик А. Ланде в 1921 році при дослідженні спектру випускання атомів, поміщених в магнітне поле. Роботи Ланде були продовженням робіт П. Зеємана, тому експеримент Ланде називають аномальним ефектом Зеємана. При цьому Зеєман рахував  $L=J$ ,  $S=0$ , а тому  $g=1$ , і ніякої потреби в множниках не виникало.

Множник Ланде визначає відносну величину магнітомеханічного відношення.

$$\frac{\mu_J}{L_J} = g \frac{e}{2m_0 c}$$

Якщо  $S=0$   $g=1$

Кожному вектору відповідає магнітний момент  $M$ , рівний  $\frac{\vec{M}}{\vec{L}} = -g \frac{e}{2m_0 c}$ . (16.16)

У даному випадку гіромагнітний фактор для орбітального моменту  $g_l = 1$ , а для спіну  $g_s = 2$ . Різні величини гіромагнітних факторів для орбітального моменту й спіну призводять до того, що вектор сумарного магнітного моменту  $M_j$  не збігається за напрямком зі сумарним моментом кількості руху  $L_j$ , тобто сумарний магнітний момент здійснює прецесію навколо сумарного моменту кількості руху

$L_j$ . Знайдемо енергію взаємодії сумарного магнітного моменту в зовнішньому магнітному полі  $\vec{B}$

$$\Delta E = -(\vec{M}\vec{B}) = -M\mathcal{B}\cos\alpha = -M_z\mathcal{B} = -g_j m_j \mu_B \mathcal{B}, \quad (16.17)$$

де  $m_j$  - магнітне квантове число, а  $g_j$  - множник Ланде (або  $g$  - фактор магнітного розщеплення), який визначає енергетичний масштаб розщеплення рівнів у магнітному полі  $\mathcal{B}$ , кратний  $\mu_B \mathcal{B}$ .

Розкладемо вектор  $\vec{M}_j$  на паралельну і перпендикулярну складові

$$\vec{M}_j = \vec{M}_{j\parallel} + \vec{M}_{j\perp}. \quad (16.18)$$

Нас будуть цікавити середні за час періоду прецесії значення паралельної та перпендикулярної складових вектора сумарного магнітного моменту, вони визначають середню енергію взаємодії  $\langle E \rangle_\tau$  за час періоду прецесії  $\tau$ . Середнє за час періоду прецесії значення перпендикулярної складової вектора  $\vec{M}_{j\perp}$  рівне нулеві  $\langle M_{j\perp} \rangle = 0$ , а  $\langle M_{j\parallel} \rangle \neq 0$ . Тому

$$\langle E \rangle_\tau = -\langle (\vec{M}\vec{B}) \rangle_\tau = -\langle (M_{j\parallel}\vec{B}) + (M_{j\perp}\vec{B}) \rangle_\tau = -\langle M_{j\parallel}\vec{B} \rangle. \text{ Знайдемо } \vec{M}_{j\parallel} \quad M_{j\parallel} = M_\ell \cos(\ell\hat{j}) + \mu_s \cos(s\hat{j})$$

$$(16.19) \quad M_{j\parallel} = -g_\ell \frac{e}{2m_0c} L_\ell \cos(\ell\hat{j}) - g_s \frac{e}{2m_0c} L_s \cos(s\hat{j}). \quad (16.20)$$

Використовуючи рис.16.1, визначимо косинуси в (16.19)

$$\left. \begin{aligned} \cos(\ell\hat{j}) &= \frac{L_\ell^2 + L_j^2 - L_s^2}{2L_j L_\ell} \\ \cos(s\hat{j}) &= \frac{L_s^2 + L_j^2 - L_\ell^2}{2L_j L_s} \end{aligned} \right\} \quad (16.21) \text{ і підставимо їх у формулу (16.20) для паралельної складової сумарного магнітного моменту.}$$

$$M_{j\parallel} = -\frac{e}{2m_0c} \left\{ L_\ell \frac{L_\ell^2 + L_j^2 - L_s^2}{2L_j L_\ell} + 2L_s \frac{L_s^2 + L_j^2 - L_\ell^2}{2L_j L_s} \right\} = -\frac{e}{2m_0c} L_j g_j, \quad (16.22)$$

де  $g_j$  - множник Ланде

$$g_j = 1 + \frac{L_j^2 + L_s^2 - L_\ell^2}{2L_j^2}. \quad (16.23)$$

Тоді  $M_{j\parallel z}$  - його проекція на вісь  $z$  має такий вигляд

$$M_{j\parallel z} = -\frac{e}{2m_0c} L_j g_j = -\frac{e\hbar}{2m_0c} m_j g_j = -g_j m_j \mu_B, \quad (16.24) \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c} \text{ магнетон Бора.}$$

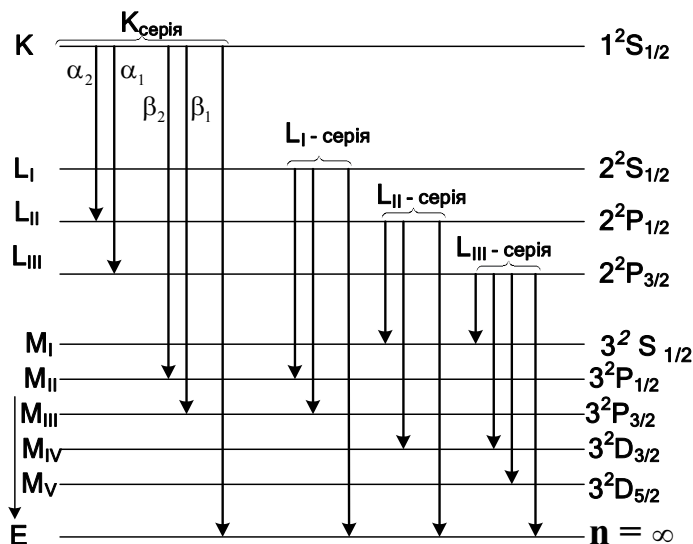
#### 4. чи можуть рентгенівські спектри мати тонку структуру складнішу ніж дублетну, приклади?

Так, можуть.

Для рентгеновських спектральних серій необхідно використати правила відбору при дипольних переходах

$$\Delta L = \pm 1. \quad \Delta J = 0; \pm 1.$$

Ми бачимо, що, хоча через спін-орбітальну та електростатичну взаємодії мультиплетність рентгенівських термів подібна до мультиплетності квазіодноелектронного атома, але спектральні рентгенівські лінії внаслідок правил відбору мають більш складну мультиплетність: K-серії дублетні, L-серія складається з 7 компонент і розбивається на окремі підсерії.  $L_I$  і  $L_{II}$  - підсерії дублетні, а лінії  $L_{III}$  - підсерії триплетні.



### 5. Чому електропровідність металу і напівпровідника по різному залежить від температури?

Під дією електричного поля  $E$  в металі протікає електричний струм. У його утворенні беруть участь електрони провідності. Вони прискорюються електричним полем і переходять на вакантні місця, звільнюючи при цьому свої попередні місця для нових вакансій, які заповнюються іншими електронами й так далі. В ідеальному кристалі з абсолютною періодичною ґраткою при нульовій абсолютній температурі ( $T = 0$  K) електрони не розсіюються, тобто вони мають нескінченну довжину вільного пробігу. Їхня функція Блоха буде біжучою хвилею, модульованою з періодом, що збігається з періодом кристалічної ґратки. Вона розповсюджується в кристалі без затухання. Досліди показали, що в бездомішкових кристалах металів при  $T \rightarrow 0$  K опір прямує до нуля.

У реальних кристалах електричне поле прискорює електрони лише протягом середнього часу їхнього життя між двома послідовними актами розсіяння ( $\tau$ ). Концентрація електронів у металах слабо залежить від температури, і тому температурна залежність електропровідності визначається, головним чином, температурної зміною рухливості. Рухливість залежить від процесів розсіяння електронів, які змінюються зі зміною температури. Напівпровідники отримали свою назву завдяки тому, що вони займають проміжне положення між металами (провідниками) і діелектриками (ізоляторами), які практично при  $T \rightarrow 0$  не проводять струму. Чисті вільні від домішкових енергетичних рівнів напівпровідники називаються власними на відміну від домішкових. У власних напівпровідниках між заповненою валентною і не заповненою електронами зоною провідності знаходиться заборонена зона шириною  $E_g$ . При  $T = 0$  K зона провідності вільна від електронів, тому напівпровідник при цій температурі поводить себе як діелектрик. При підвищенні температури частина електронів валентної зони збуджується й переходить до зони провідності. У зоні провідності утворюються квазічастинки - електрони з ефективною масою  $m_e$ , які беруть участь у формуванні електронної частини електропровідності ( $\sigma_e$ ). У валентній зоні при збудженні електронів утворюються квазічастинки - дірки з ефективною масою  $m_p$ , які відповідають за діркову частину електропровідності ( $\sigma_p$ ). Повна електропровідність напівпровідника ( $\sigma$ ) є сумою її електронної та діркової частин:

$$\sigma = \sigma_e + \sigma_p = en_e \mu_e + en_p \mu_p, \quad (20.47)$$

де  $n_e$  та  $n_p$  - концентрації електронів та дірок, а  $\mu_e$  та  $\mu_p$  - їхні рухливості відповідно.

Рухливості електронів та дірок залежать від процесів їхнього розсіяння фононами, іншими електронами, іонізованими домішками, дефектами ґратки, та поверхнею твердого тіла. Вони залежать від природи кристала, його зонної структури, дисперсійна залежність якої враховується ефективними масами квазічастинок домішкового складу, концентрації дефектів та температури, які визначають час релаксації квазічастинок - носіїв заряду ( $\tau_{e,p}$ ):



## Білет 40

1) Схема дослідів з розсіювання частинок. Чому в досліді Рамзауера використовуються атоми із різними радіусами ядер? (Рис.2.11 – ст.35 (п. 2.10), Рис.3.1 – ст. 45 (п.3.1), Рис.5.3. – ст. 89 (п. 5.1.4), на цих сторінках можна знайти пояснення до малюнків.

2) Чому розщеплення термів в лужних металах більше ніж розщеплення в атомі водню(Находкін п9.8)

3) Метод збурень при розвязку рівняння Шредінгера. Наведіть приклади. (норм., в Находкіну ст.291 (п. 12.2)

4) Чому не можуть існувати елементи із  $Z > 103$  (норм., чітко та лаконічно, без коментарів)

5) Що таке функція Блоха, де вона застосовується (стор. 521-522 (п. 20.2), нормально

1)

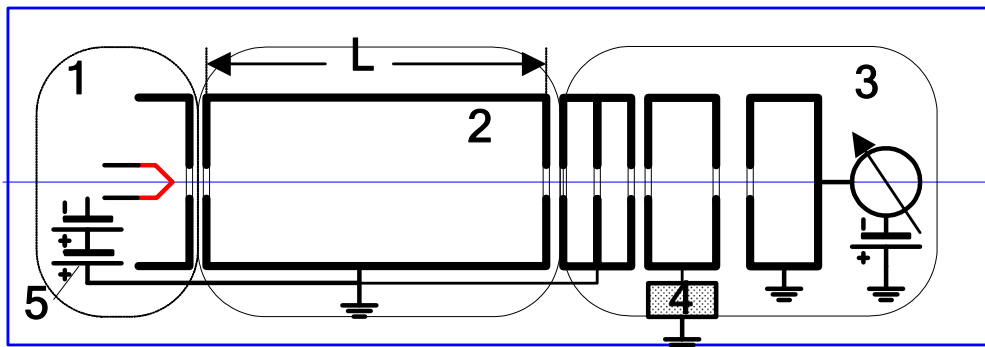


Рис.2.11. Схема вимірювань розсіювання електронів атомами газів: 1 - джерело електронів, 2 - камера зіткнень, у якій можна змінювати тиск газів, що досліджуються, 3 - аналізатор із детектором, 4 - система живлення й керування аналізатором, 5 - джерело прискорення електронів, що розсіюються.

Схема дослідів Резерфорда:

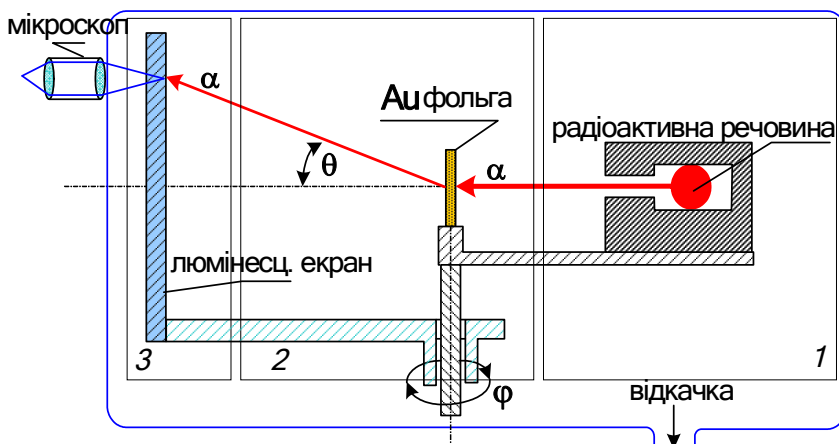


Рис.3.1. Схема приладу для дослідження пружного розсіювання  $\alpha$ -частинок атомами речовини в тонких шарах. Мікроскоп може пересуватись, що дозволяє спостерігати розсіяні  $\alpha$ -частинки під різними кутами  $\theta$ .

Схема комптонівського розсіювання:

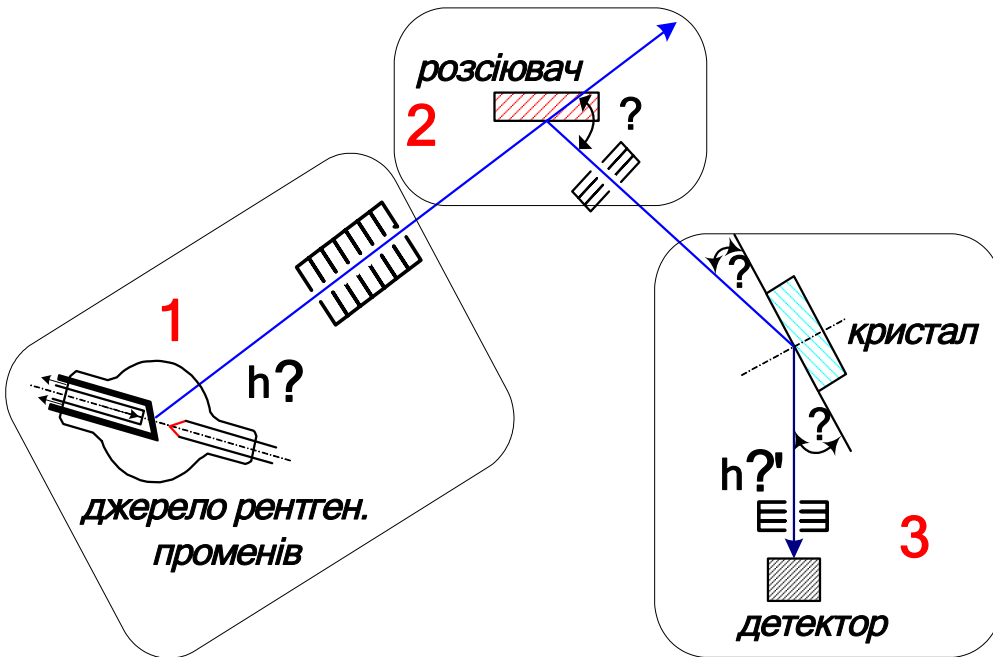


Рис.5.3. Схема апаратури для спостереження ефекту Комптона: **1** - джерело рентгенівських променів, **2** - розсіювач і діафрагми, що виділяють розсіяні промені під кутом  $\varphi$ , **3** - система для спектрального аналізу й детектування розсіяних рентгенівських променів.

2) для найпростішого атома водню з урахуванням спіно-орбітальної взаємодії величина енергії розщеплення термів є прямо пропорційним квадрату сталої тонкої структури і квадрату атомного номера  $Z$ , та значенню  $E_n$

$$\Delta E \sim E_n Z^2 \alpha^2 \quad (9.32), \text{ або точніше}$$

$$\Delta E_{n,j} = E_{n,j(\alpha=0)} \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) = \frac{e^2 \alpha^2 Z^4}{2a_0 n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \quad (9.33)$$

де  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$  - стала тонкої структури, а  $E_{n,j(\alpha=0)} = \frac{e^2 Z^2}{2a_0 n^2}$  - енергія стаціонарного стану без

врахування спіно-орбітальної взаємодії. З формули (9.33) видно, що величина спіно-орбітального розщеплення залежить лише від двох квантових чисел  $n$  і  $j$  і не залежить для атома водню від орбітального квантового числа  $\ell$ . Тому у атома водню зберігається виродження за орбітальним квантовим числом  $\ell$ . При переході від атома водню до атомів лужних металів з одним валентним електроном виродження за числом  $\ell$  знімається, а величина розщеплення збільшується в  $Z^2$  разів. Тому тонка структура спектрів, причиною виникнення якої є спіно-орбітальна взаємодія, значно легше спостерігається в атомних спектрах лужних металів, ніж у атомному спектрі водню.

3) Повний розв'язок рівняння  $(\hat{H}_0 + U')\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  (12.2) досить складний, тому використаємо **метод збурення**, коли  $|U'| < |U_0|$ . Будемо шукати розв'язок рівняння (12.2) у вигляді

$$\begin{aligned} U &= U_0 + \varepsilon U' \\ \psi_n &= \psi_n^0 + \varepsilon \psi_n', \\ E_n &= E_n^0 + \varepsilon E_n' \end{aligned} \quad (12.5)$$

де  $\varepsilon$  - будь-яке мале число  $1 \gg \varepsilon \gg 0$ , а  $V' = e^2/r_{12}$ . Підставимо (12.5) в (12.2)

$$\widehat{H}^0 \psi_n^0 + \varepsilon \widehat{H}^0 \psi_n' + \varepsilon U' \psi_n^0 + \varepsilon^2 U' \psi_n' = E_n^0 \psi_n^0 + \varepsilon E_n^0 \psi_n' + \varepsilon E_n' \psi_n^0 + \varepsilon^2 E' \psi_n' \quad (12.6)$$

Згадавши, що  $\psi_n^0$  та  $E_n^0 = E_{n1}^0 + E_{n2}^0$  є розв'язком рівняння Шредінгера для не збуреного випадку, а також знехтувавши членами другого порядку малості ( $\varepsilon^2 \gg \varepsilon$ ), можна спростити рівняння (12.6)

$$\widehat{H}_0 \psi_n' + U' \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n' + E_n' \psi_n^0. \quad (12.7)$$

Помножимо обидві частини (12.7) на  $\psi_n^{0*}$  і проінтегруємо по всьому об'єму

$$\int \psi_n^{0*} \widehat{H}_0 \psi_n' dv + \int \psi_n^{0*} U' \psi_n^0 dv = \int \psi_n^{0*} E_n^0 \psi_n' dv + \int \psi_n^{0*} E_n' \psi_n^0 dv. \quad (12.8)$$

Для розв'язку рівняння (12.8) використаємо самоспряженість оператора Гамільтона:

$$\int \psi_n^{0*} \widehat{H}_0 \psi_n^0 dv = \int \psi_n^0 (\widehat{H}_0 \psi_n^0)^* dv. \quad (12.9)$$

Після підстановки (12.9) у (12.8) і згадавши, що  $\widehat{H}^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0$ , остаточно отримаємо

$$E_n' = \int \psi_n^{0*} U' \psi_n^0 dv \quad (12.10)$$

$$\text{та} \quad \mathbf{E}_n = \mathbf{E}_n^0 + \mathbf{E}_n'. \quad (12.11)$$

Таким чином, **поправку до енергії стаціонарного стану знаходять як середнє від потенціалу збурення  $U' = e^2/r_{12}$ .**

Для того щоб знайти хвильові функції, необхідно шукати розв'язок при наявності збурення у вигляді степеневого ряду

$$\psi_n' = \sum_k a_k \psi_k^0 \quad (12.12)$$

Для цього підставляємо (12.12) в формулу (12.7) і скориставшись співвідношенням

$$\widehat{H}_0 \sum_k a_k \psi_k^0 = \sum_k a_k \widehat{H}_0 \psi_k^0 = \sum_k a_k E_k^0 \psi_k^0 \quad (12.13)$$

остаточно отримаємо

$$\sum_k a_k (E_k^0 - E_n^0) \psi_k^0 = (E_n' - U') \psi_n^0. \quad (12.13^*)$$

Із (12.13\*) легко визначити коефіцієнти ряду  $a_k$

$$a_k = - \frac{\int \psi_k^{0*} U' \psi_n^0 dv}{E_k^0 - E_n^0} \quad (12.14)$$

4) Після 105 елементів стійких елементів у природі не існує. *Неможливість стабільного існування важких елементів пояснюється тим, що сили кулонівського відштовхування протонів в атомному ядрі не можуть бути зрівноважені ядерними силами притягіння і ядро стає нестійким.* Перевага сил кулонівського відштовхування протонів у ядрі над силами між нуклонами ядра обумовлюється дальнодіючим характером кулонівських сил.

$$5) \quad \psi_{n,\kappa}(\vec{r}) = u_{n,\kappa}(\vec{r}) \cdot \exp\{i\vec{k} \cdot \vec{r}\}. \quad (20.3)$$

Функція (20.3) називається **функцією Блоха**, а  $u(\vec{r})$  - її амплітудою, модуль квадрата якої  $|u(\vec{r})^* \cdot u(\vec{r})|$  характеризує густину ймовірності знаходження електрона в точці кристала з координатами  $\vec{r}$ . Таким чином, амплітуда функції Блоха описує квазічастинку - електрон, який належить усьому кристалу. Оскільки вона періодична, то її обчислюють у межах однієї елементарної комірки кристалу. А для визначення хвильової функції всього кристала  $u(\vec{r})$  її потрібно помножити на фазовий множник  $C(\vec{a}) = \exp\{i\vec{k} \cdot \vec{r}\}$ . Функція Блоха нагадує хвильову функцію вільного електрона:

$$\psi(\vec{r}) = \exp\{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)\}, \quad (20.12)$$

де  $\vec{k}$  - хвильовий вектор, що визначає імпульс  $\vec{p}$  і енергію  $E$  електрона відповідно:

$$\begin{aligned} \vec{k}\hbar &= \vec{p} \\ E &= p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m \end{aligned} \quad (20.13)$$

Тому вектор  $\vec{k}$  функції Блоха називається **хвильовим вектором квазічастинки-електрона в кристалі**. Він визначає **квазіімпульс електрона в кристалі**. На відміну від імпульсу вільного електрона квазіімпульс електрона в кристалі визначається неоднозначно. Стани в кристалі виявляються тотожними, у яких вектор  $\vec{k}$  (або  $\hbar\vec{k} = \vec{p}$ ) відрізняється на  $2\pi\vec{a} \cdot \vec{b}$ , де  $\vec{a} \cdot \vec{b}$  - ціле число

Хвильовий вектор  $\vec{k}$  (або квазіімпульс  $\hbar\vec{k} = \vec{p}$ ) електрона в кристалі визначає фазу хвильової функції. Коли  $\vec{k}$  - дійсна величина, то функція Блоха буде хвилею, що біжить (біжуча хвиля), модульованою з періодом, що збігається з періодом ґратки. Вона розповсюджується в кристалі без затухання. Густина ймовірності  $|\psi|^2$ , щоб знайти електрон, має однакову величину в кожній комірці кристала. Отже, *поки зберігається ідеальна періодичність, колективізований електрон не розсіюється й має нескінченну довжину вільного пробігу в кристалі*. Розсіяння відбувається, коли електрон зіштовхується з дефектами ґратки, поверхнею кристала та фононами. Коли хвильовий вектор уявний ( $k = ik$ ), то хвильова функція необмежено затухає для одного з напрямків реального простору

$$\psi = u(\vec{r}) \cdot \exp\{-\vec{k} \cdot \vec{a}\}. \quad (20.14)$$

Це означає, що квазічастинка – електрон, що має уявне значення хвильового числа  $k$ , не може розповсюджуватись у цьому напрямку кристала. Для уявних  $k$  - це заборонені області енергій для руху колективізованих електронів. Таким чином, *система енергетичних рівнів у кристалі розбивається на дозволені й заборонені зони енергетичних рівнів*.

## Білет 45

**1) Скільки обертів зробить електрон в атомі водню в стані 2p до переходу в стан 1s якщо час життя у збудженому стані  $10^{-8}$  с?**

В стані 2p  $n = 2$   $l = 1$ . тоді радіус орбіти буде  $r_2 = n^2 \cdot a_0 \cdot \frac{1}{Z} = 4 \cdot a_0 = \frac{4 \cdot h^2}{e^2 \cdot m_0}$

Запишемо момент кількості руху:  $r_n \cdot m_0 \cdot v = h \cdot \sqrt{l \cdot (l-1)} = \sqrt{2}h \Rightarrow v = \frac{\sqrt{2} \cdot e^2}{4 \cdot h}$

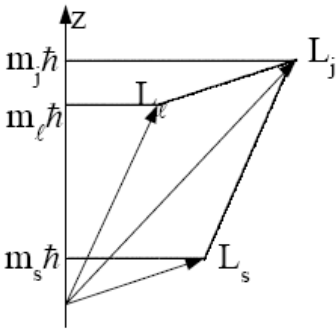
Період обертання:  $T = \frac{2 \cdot \pi \cdot r_2}{v} = \frac{2 \cdot \pi \cdot \frac{h^2}{e^2 \cdot m_0} \cdot n^2}{\frac{\sqrt{2} \cdot e^2}{4 \cdot h}} = \frac{32 \cdot \pi \cdot h^3}{\sqrt{2} \cdot e^4 \cdot m_0}$

Кількість обертів:  $n = \frac{\tau}{T} = \frac{\tau \cdot \sqrt{2} \cdot e^4 \cdot m_0}{32 \cdot \pi \cdot h^3} = 3 \cdot 10^{-16} c$

## 2) Як складаються вектори моментів кількості руху в квантовій механіці

Якщо в атомі крім орбітального моменту є ще спіні, то між їхніми магнітними моментами виникає взаємодія. Сумарний момент кількості руху і сумарний магнітний момент є їх векторною сумою

$$\vec{L}_J = \vec{L}_L + \vec{L}_S$$



Проте кожний з векторів цієї суми повинен за абсолютною величиною визначатись квантовими числами  $l, s, j$ :

$$|L_L| = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

$$|L_S| = \hbar \sqrt{s(s+1)}$$

$$|L_J| = \hbar \sqrt{j(j+1)}$$

Проекції моментів кількості руху, як і раніше, визначаються магнітними квантовими числами  $m_l, m_s, m_j$  за формулами.

$$L_{Lz} = m_l \hbar$$

$$L_{Sz} = m_s \hbar$$

$$L_{Jz} = m_j \hbar$$

$$m_l = 0; \pm 1; \pm 2; \dots; \pm l$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$m_j = j; j-1; j-2; \dots, -(j-1); -j$$

Максимальне значення квантового числа  $j$  тах отримаємо тоді, коли вектори  $m_l$  та  $m_s$  паралельні. В цьому випадку

$$j_{\max} = m_{\ell\max} + m_{s\max} = \ell + s$$

Коли ці вектори антипаралельні, то маємо  $j_{\min} = |m_{\ell\max} - m_{s\max}| = |\ell - s|$

Таким чином, квантове число  $j$  повинно знаходитись в межах нерівності

$$|\ell - s| \leq j \leq \ell + s$$

### 3) Побудувати систему термів атома (Na Z=11) з урахуванням того що його ядерний спіні I=3/2.

Ядерний спіні повинен векторно складатися із сумарним моментом кількості руху електрона в атомі і саме сумарний момент визначає терм. Застосуємо цю ідею до розгляду надтонкої структури термів атома натрію, у якого ядерний спіні рівний 3/2 (I = 3/2). Абсолютна величина ядерного спіні визначається за формулою

$$|L_I| = \hbar \sqrt{I(I+1)} = \hbar \sqrt{\frac{3}{2} \left( \frac{3}{2} + 1 \right)} = \hbar \sqrt{\frac{15}{4}}$$

Ядерний спіні LI повинен взаємодіяти із сумарним спіні-орбітальним моментом

електрона  $L_j$ , утворюючи при цьому повний момент  $L_F$  
$$\vec{L}_F = \vec{L}_j + \vec{L}_I$$

Користуючись цією нерівністю, розглянемо терми  $3^2S_{1/2}$ ;  $3^2P_{1/2}$ ;  $3^2P_{3/2}$ , переходи між якими утворюють дублет D1 і D2.

$$3^2 S_{\frac{1}{2}}; j = \frac{1}{2}; I = \frac{3}{2}; F = \frac{1}{2} + \frac{3}{2}; \frac{1}{2} + \frac{3}{2} - 1 = 2; 1$$

$$3^2 P_{\frac{1}{2}}; j = \frac{1}{2}; I = \frac{3}{2}; F = 2; 1$$

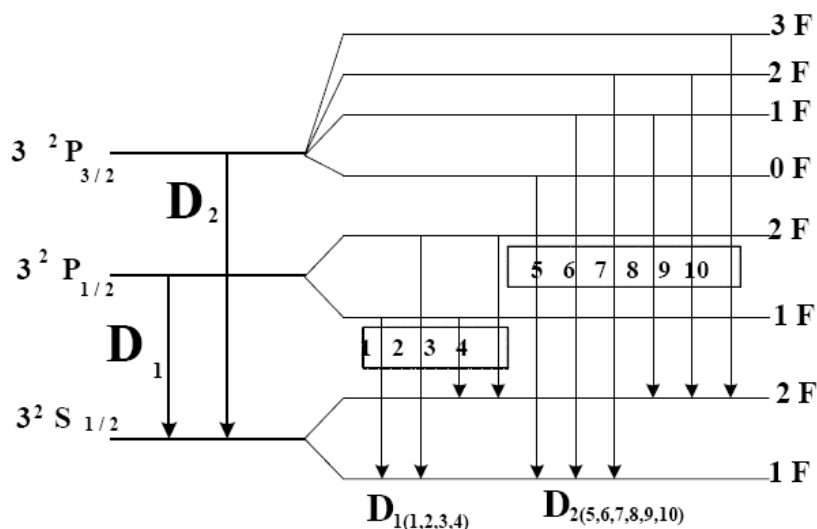
$$3^2 P_{\frac{3}{2}}; j = \frac{3}{2}; I = \frac{3}{2}; F = 3; 2; 1; 0$$

Таким чином, терм  $3^2S_{1/2}$  розщеплюється на два підтерми із квантовими числами  $F = 2$  і

$1$ ; терм  $3^2P_{1/2}$  - на два підтерми з  $F = 2$  і  $1$ ; терм  $3^2P_{3/2}$  - на 4 підтерми із квантовими

числами  $F = 3; 2; 1; 0$ . Ця система термів зображена на схематичній діаграмі. Правило відбору для квантового числа  $F$  подібне до правил відбору магнітного

квантового числа:  $\Delta F = 0; \pm 1$



Застосування цього правила відбору до переходів між термами атома натрію, як це показано на рисунку, дає 10 окремих ліній. Перша лінія дублета D1 розпадається на 4 окремих лінії, а друга лінія дублета D2 на 6 окремих ліній.

### 3) Чим визначається кількість елементів у періодах системи Менделєєва: 2, 8, 18, 32, 6, 10, 14.

**В першому періоді** міститься 2 елементи, тому що заповнюється K-шар із

$n=1$ , в якому є лише  $2n^2 = 2$  стани.

**У другому періоді** заповнюється L-шар із  $n=2$ , в якому може бути лише  $2n^2 =$

$2 \cdot 2^2 = 8$  станів. Тому другий період містить 8 елементів.

**Третій період** починається з лужного металу натрію, в якому 11-й електрон починає

заповнювати 3-й період, тобто M-шар із головним квантовим числом  $n=3$ . На M-

шарі може бути розміщено 18 електронів, тому що найбільша кількість можливих

станів цього шару є  $2n^2 = 2 \cdot 3^2 = 18$ . Проте цей період включає лише 8 елементів. До цього часу ми нехтували енергією орбітального руху електронів, проте вона починає грати важливу роль при збільшенні заряду ядра, тому що при збільшенні  $Z$  можливі стани з більшими орбітальними квантовими числами  $l$ . Тому із зростанням  $Z$  треба додатково

враховувати "відцентрову енергію електронів" 
$$\frac{L^2}{2m_0r^2} = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m_0r^2}$$

Кулонівська та "відцентрова" енергії мають різні знаки (дивись радіальну частину рівняння Шредінгера) тому внесок "відцентрової" енергії може порушити плавне зменшення енергії електронів із збільшенням  $Z$ . Ця обставина є причиною, що після заповнення оболонки  $3p$  в атомі аргону  $Z=18$  наступний 19-й електрон в атомі калію починає заповнювати оболонку  $4s$ , а не  $3d$  оболонку.

**Четвертий період.** Дев'ятнадцятий електрон починає заповнювати N-шар із квантовим числом  $n=4$ . N-шар має 4 оболонки  $4s, 4p, 4d, 4f$ , на яких може



розміститись 32 електрона. Проте залишилась ще незаповнена 3d - оболонка, на якій може розміститись ще 10 електронів. Тому 4-й період починається із заповнення 4s - оболонки (це K (Z=19) та Ca (Z=20)), а потім після заповнення 4s - оболонки починає заповнюватись незаповнена 3d -оболонка (елементи від Se (Z=21) до Zn (Z=30) і, нарешті, після заповнення 3d -оболонки починає заповнюватись 4p оболонка (елементи від Ga (Z=31) до Kr (Z=36)). Період закінчується утворенням симетричної замкнутої структури електронних оболонок інертного газу криптону. На цьому закінчується 4-й період, хоча є ще незаповнені 4d і 4f оболонки.

З 37-го елемента починається **П'ятий період** періодичної системи елементів. 37 елемент утворюється при заповненні O-шару із квантовим числом  $n=5$ . Цей шар має 4 оболонки 5s, 5p, 5d, 5f, на яких можна розмістити 50 електронів. Спочатку в 5-й періоді 3d -оболонка починає заповнюватись 5s -оболонка, утворюючи лужний елемент Rb(Z=37) і лужноземельний елемент Sr(Z=38), потім, як і в попередньому 4-му періоді, після заповнення 5s -оболонки починає заповнюватись 10 станів незаповненої 4d оболонки (елементи I(Z=39), Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag до Cd (Z=48), а потім після заповнення 4d оболонки заповнюється оболонка 5p, утворюючи елементи In, Sn, Sb, Te, I, Xe (Z=54). П'ятий період закінчується 54 елементом ксеноном. Усього п'ятий період має, як і попередній 4-й період, 18 елементів.

Після ксенону починається **6-й період**. Він починається з 55 елементу лужного металу цезію. В цезії починає заповнюватись P- шар із квантовим числом  $n = 6$ . Потім іде лужноземельний елемент Ba (Z=56), в якому заповнюється оболонка 6s<sup>2</sup>. Після цього починає, так як і в 5-му періоді заповнюватись незаповнена 4d оболонка, на якій може бути 10 електронів. Проте, починаючи з Z=58 енергетично вигідніше займати незаповнену 4f оболонку, на якій може розміститись 14 електронів. Таким чином утворюється група елементів, що отримали назву лантанідів. Лише після заповнення 4f оболонки продовжує заповнюватись оболонка 5d, після заповнення якої, починаючи з Z=81 (талій), заповнюється 6p - оболонка. З 87 елементу починає заповнюватись R-шар із квантовим числом  $n=7$ .

**Починається 7-й період** системи елементів. Спочатку заповнюються стани 7s<sup>1</sup> і 7s<sup>2</sup>. При цьому утворюються елементи лужний метал францій і лужноземельний метал радій. При Z=89 починає заповнюватись 6d<sup>1</sup> оболонка, а починаючи з торію (Z=90), йде заповнення 5f оболонки й утворюється група із 14 елементів, що отримала назву **актинідів ( Z=90 - 103)**. Ця група елементів аналогічна за своїми властивостями групі елементів, в якій заповнюються 4f оболонка і які називаються **лантанідами**. Після 105 елемента стійких елементів у природі не існує. Неможливість стабільного існування важких елементів пояснюється тим, що сили кулонівського відштовхування протонів в атомному ядрі не можуть бути врівноважені ядерними силами притягання і ядро стає нестійким.

### 5) За яких умов тверде тіло матиме діамагнітні властивості?

Парамагнітні атоми намагнічуються паралельно зовнішньому полю, їх магнітний момент.

$$|\mu| = g_J \mu_0 \sqrt{J(J+1)}$$

Тому коли  $J \neq 0$  атом є парамагнітним.

Діамагнетики намагнічуються проти зовнішнього поля через прецесію їх атомів (теорема Лармора). Діамагнітні властивості атомів чітко спостерігаються, коли  $J = 0$ , тобто коли  $\mu = 0$ . Діамагнетизм притаманний усім атомам, проте його легко вдається спостерігати

лише тоді, коли парамагнетизм цих атомів прямує до нуля.

## Білет 46

### 1. Як експериментально оцінити розмір електрона?

//5.1.5. Некогерентне розсіяння квантів на електронах

### 2. При яких кінетичних енергіях протонів можна досліджувати частинки розміром $10^{-13}$ см?

//

### 3. Намалюйте схему енергетичних термів атома водню з урахуванням ядерного спіну, якщо $I=1/2$ .

// 10.1-10.2 – тонка –надтонка структура..

### 4. Чому періодична система елементів закінчується $Z=103$ ?

//14.2. Періодична система елементів – все гуд.

### 5. Приклади застосування електронного парамагнітного резонансу.

//16.6.1. Електронний парамагнітний резонанс (ЕПР)

### 1. Як експериментально оцінити розмір електрона?

*P.S.* Теоретично класичний радіус електрона можна оцінити, порівнявши його електростатичну енергію до повної енергії:  $e^2 / r_e = m_0 c^2$ . Із цього співвідношення легко отримати, що

$$r_e = \frac{e^2}{m_0 c^2} = \frac{4,8 \times 10^{-10}}{9,1095 \times 10^{-28} \times 9 \times 10^{20}} = 2,8 \times 10^{-13} \text{ см.}$$

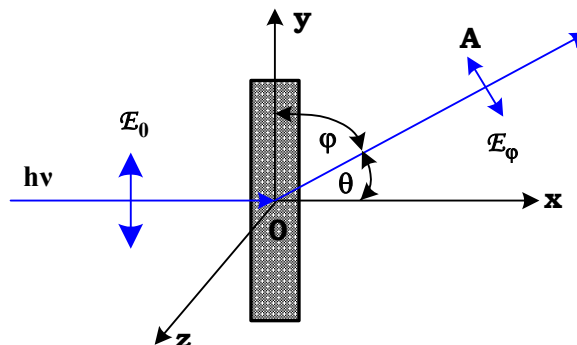
**Некогерентне розсіяння електронів** дозволяє визначити їх радіус експериментально. Для цього достатньо використання ідей класичної електродинаміки. Дійсно, нехай електромагнітна хвиля рентгенівського діапазону довжин хвиль падає, як це показано на рис.5.9, на речовину, що розсіює. Розсіяна електромагнітна хвиля (рентгенівських променів) у точці А створює електричне поле з напруженістю

$$E_y = \frac{e \left( \frac{e E_0}{m_0} \right)}{c^2 r} \sin \varphi = \frac{E}{r} \left( \frac{e^2}{m_0 c^2} \right) \sin \varphi = \frac{E_0}{r} r_e \sin \varphi,$$

$$E_z = \frac{E_0}{r} r_e.$$

(5.11)

Тут  $r_e = e^2 / m_0 c^2$  - класичний радіус електрона.



**Рис.5.9. Схема розсіяння рентгенівських променів.**

Класична теорія не когерентного розсіювання розходиться з експериментом при малих кутах розсіяння, коли  $\theta < 30^\circ$ , бо необхідно враховувати інтерференцію хвиль, що розсіюються сусідніми електронами атомів. Потік рентгенівських променів, що створюється кожною складовою електричного поля, знайдемо інтегруванням вектора Умова-Пойнтинга

$$I_{y,z} = \frac{c}{4\pi} [\vec{E} \cdot \vec{B}] = \frac{cE_{y,z}^2}{4\pi}$$

Оскільки коливання  $E_y$  і  $E_z$  не когерентні, то повний потік  $I = I_x + I_y$  є сумою потоків  $I_x$  і  $I_y$ :

$$I = \int_0^\pi I(E_y) 2\pi r^2 \sin\theta d\theta + \int_0^\pi I(E_z) 2\pi r^2 \sin\theta d\theta \quad (5.12)$$

Підставимо в (5.12) вирази для  $I(E_y)$ ,  $I(E_z)$

$$\left. \begin{aligned} I(E_y) &= \frac{c}{4\pi} \frac{E_y^2 r_e^2}{r^2} \sin^2\varphi \\ I(E_z) &= \frac{c}{4\pi} \frac{E_z^2 r_e^2}{r^2} \end{aligned} \right\} \quad (5.13)$$

Після інтегрування

$$I = \frac{8}{3} n I_0 \pi r_e^2 = \frac{8}{3} I_0 n \sigma_e, \quad (5.14)$$

де  $I_0/2 = I_y = I_z = cE_{y,z}^2/4\pi$ ,  $\sigma_e$  - ефективний переріз розсіювання рентгенівських променів електроном, а  $n$  - концентрація електронів, котрі розсіюють рентгенівські промені.

Аналізуючи формулу (5.14), можна дійти висновку, що розсіювання рентгенівських променів відрізняється від розсіювання світла тим, що *ефективний переріз розсіювання  $\sigma_e = \pi r_e^2$  не залежить від довжини хвилі  $\lambda$ , тоді як розсіяння світла по закону Релея обернено 4-й степені довжини хвилі ( $\sigma_{\text{світла}} \sim \lambda^{-4}$ )*. Ця відмінність виникає через велику різницю в довжинах хвиль, що розсіюються. Довжини рентгенівських хвиль  $\lambda < r_{\text{атома}}$ , а світлових -  $\lambda > r_{\text{атома}}$ . Рентгенівські хвилі розсіюються на вільних електронах не когерентно, бо рух вільних електронів незалежний, і тому розсіяння на них також незалежне.

Отже, за виключенням ефекту Комптона, *розсіяння рентгенівських променів можна розглядати за допомогою класичної електродинаміки*. Він дозволяє з дослідів розсіяння рентгенівських променів електронами визначити ефективний переріз розсіяння електрона  $\sigma_e$  й зв'язаний із ним радіус електрона  $r_e = (\sigma_e/\pi)^{1/2} = e^2/m_0c^2$ , який збігається із класичним радіусом електрона.

## **2. При яких кінетичних енергіях протонів можна досліджувати частинки розміром $10^{-13}$ см?**

Для того, щоб можна було б знехтувати хвилевими властивостями протона, довжина хвилі де Бройля протонів повинна бути меншою розмірів досліджуваних частинок, тоді можна розглядати майже класичний випадок пружного розсіювання. При таких значеннях енергії протон буде релятивістським тому:

$$\lambda \ll a, \quad p \gg \frac{h}{a}, \quad E_k = \sqrt{mc^2 + (pc)^2} - mc^2 \gg 618 \text{ MeV}$$

## **3. Намалюйте схему енергетичних термів атома водню з урахуванням ядерного спіну, якщо $I=1/2$ .**

Надтонка структура виникає за рахунок *спін-ядерної взаємодії*.

$$\vec{L}_F = \vec{L}_j + \vec{L}_I$$

Абсолютна величина сумарного моменту  $|L_F|$  визначатиметься новим квантовим числом  $F$

$$|j - I| \leq F \leq j + I \quad \Leftrightarrow \quad |j - 1/2| \leq F \leq j + 1/2$$

У таблиці 10.2 наведено приклад значень квантового числа  $F$  для трьох станів атома водню  $^2S_{1/2}$ ,  $^2P_{1/2}$ ,  $^2P_{3/2}$ . Кожному значенню квантового числа  $F$  повинен відповідати свій енергетичний рівень. Для знаходження ліній використані такі правила відбору

$$\Delta F = 0 ; \pm 1, \quad \text{крім } 0 \rightarrow 0.$$

Вони дозволяють отримати 7 окремих ліній, з яких складається дублет головної лінії серії Лаймана атомного спектру водню. Крім 7-ми складових оптичного діапазону (УФ) спектру, у радіодіапазоні в спектрах вбирання атомарного водню знаходять ще одну 8-му лінію з довжиною хвилі  $\lambda_8 = 20,8 \text{ см}$ .

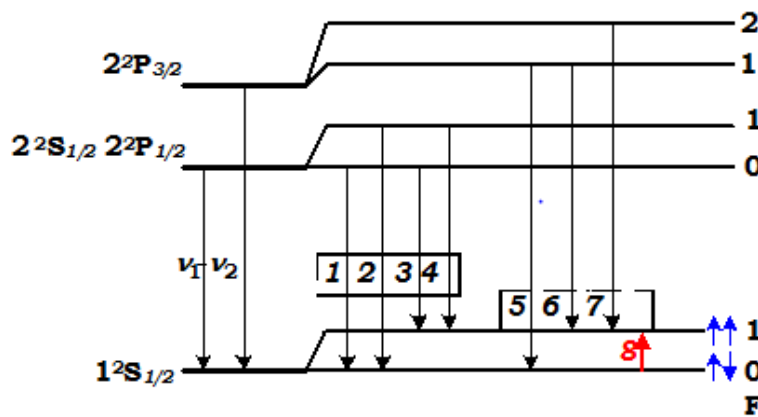


Рис. 10.2. Схема рівнів з  $n = 1, 2$  атома водню з урахуванням спин-орбітальної та спин-ядерної взаємодій.

#### 4. Чому періодична система елементів закінчується $Z=103$ ?

З  $Z = 89$  починає заповнюватися  $6d^1$  оболонка (Ac), а з торію ( $Z = 90$ ), іде заповнення  $5f$  оболонки, і утворюється група з 14 елементів, що отримала назву *актинідів* ( $Z = 90 - 103$ ). Після 105 елемента стійких елементів у природі не існує. Неможливість стабільного існування важких елементів пояснюється тим, що сили кулонівського відштовхування протонів в атомному ядрі не можуть бути врівноважені ядерними силами притягання і ядро стає нестійким. Перевага сил кулонівського відштовхування протонів у ядрі над силами між нуклонами ядра обумовлюється дальнодіючим характером кулонівських сил.

**P.S.** В 1994р. в Центрі дослідження важких іонів в Дармштадті (Германія) були штучно синтезовані хімічні елементи з  $Z = 111$  та 112. Перший елемент отримав назву рентгеній, другий –копернікій. Елемент з  $Z = 112$  офіційно признаний Міжнародним інститутом теоретичної та прикладної хімії і напевно буде введений в періодичну таблицю Менделєєва. Синтез елементів з  $Z$  більше 112 активно розробляється і досліджується в провідних спеціалізованих центрах Росії (Об'єднаний інститут ядерних досліджень, Дубна), Германії (Центр дослідження важких іонів, Дармштадт), США (Національна лабораторія Лоренс Лівермор, Каліфорнія).

## 5. Приклади застосування електронного парамагнітного резонансу.

**Definition:** Явище ЕПР (ЕСР) це вибіркоче (резонансне) поглинання електромагнітних хвиль радіодіапазону ( $10^9$ - $10^{10}$  Гц) парамагнетиками, обумовлене наявністю спінів у електронів. (детальніше див. лекції).

Метод ЕПР широко застосовується в хімії, біології для дослідження структури молекул та речовини. Наведемо два приклади:

### **Метод спінового зонду:**

Спіновим зондом служить речовина, яка має добре відому лінію ЕПР (наприклад, нітроксильний радикал ( $> \dot{N} - O$ ), що має один неспарений електрон на аміноксильній групі). Якщо цю речовину помістити у середовище (наприклад, гліцерин), то можна дослідити за лініям ЕПР як змінюється в'язкість гліцерину з температурою. Цей метод широко використовується для дослідження біологічних структур.

### **Метод спінової мітки:**

З молекулою досліджуваної речовини зв'язують радикал з добре відомою структурою і спектром ЕПР. Вводячи мітки у різні частини молекули, можна вивчати природу та орієнтацію хімічних зв'язків за зміною положення та форми ліній ЕПР спінової мітки.

Таким чином метод ЕПР дозволяє отримувати такі результати:

- (1) резонансну частоту  $\omega_{рез.}$  або резонансну напруженість магнітного поля  $\mathcal{B}_{рез.}$ , які дають змогу визначити величину гіромагнітного фактора  $g$ , бо згідно (16.36)  $\omega_{рез.}/\omega_L = g_j m_j$ ;
- (2) площу під контуром резонансної лінії поглинання, що дозволяє визначити кількість парамагнітних центрів, здатних поглинати електромагнітні хвилі ( $n > 10^{13} \text{ см}^{-3}$ );
- (3) напівширину резонансної лінії поглинання, яка визначає середній час життя в збудженому стані або коефіцієнт дисипації енергії.

### **ЕПР застосовують для досліджень:**

- парамагнітних домішок;
- імплантованих іонів;
- розірваних ковалентних зв'язків;
- вільних радикалів у хімічних сполуках;
- визначення точних значень гіромагнітного фактора  $g_j$ .

Отже, з ЕПР зв'язаний прогрес у таких областях науки, як фізика магнітних явищ, фізика твердого тіла і, зокрема, фізика напівпровідників, квантова радіофізика, фізика рідин, неорганічна хімія, біологія, медицина. Серед його застосував – квантові парамагнітні підсилювачі, за допомогою яких здійснюється ще й далекий космічний зв'язок.

## Білет 50

### 1. Чи можна за допомогою моделі атомі Бора пояснити його магнітні властивості?

Рисою еліптичних орбіт є  $n$  - кратне виродження стаціонарних станів. Воно полягає в тому, що при заданому які відрізняються одна від другої значенням орбітального квантового  $n_\phi$  або величиною малої півосі еліптичної орбіти.

**Виродження можна зняти за допомогою зовнішніх полів**, наприклад, магнітного поля, яке буде діяти на магнітні моменти, що створюються електронними струмами під час руху електронів по замкненим орбітам. Кожний замкнений контур зі струмом (або замкнена орбіта) має магнітний момент

$$\mu = \frac{1}{c} \oint i ds = -\frac{1}{c} \oint \frac{e}{\tau} ds = -\frac{e}{c\tau} \oint ds = -\frac{e}{c\tau} \oint \frac{r^2}{2} d\phi \quad (4.19)$$

Запишемо вираз для  $L_\phi$

$$L_\phi = m_0 r^2 \frac{d\phi}{dt}, \quad (4.20)$$

знайдемо з нього  $d\phi = \frac{L_\phi}{m_0 r^2} dt$  і підставимо до формули (4.19) для

$$\mu = -\frac{e}{2m_0 c} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau L_\phi dt = -\frac{e}{2m_0 c} L_\phi. \quad (4.21)$$

Вираз дає надзвичайно важливе гіромагнітне співвідношення між магнітним і механічним моментами

$$\frac{\mu_\phi}{L_\phi} = -\frac{e}{2m_0 c}. \quad (4.21^*)$$

Знак мінус у (4.21\*) вказує на те, що магнітний момент електрона направлений протилежно напрямку його орбітального моменту.

Енергія системи у магнітному полі буде дорівнювати:

$$\Delta E = -(\mu \mathcal{H}) = -\mu \mathcal{H} \cdot \cos \alpha \quad (4.24)$$

Підставимо в цю формулу вираз для  $\mu$  із (4.21), тоді

$$\Delta E = \frac{e}{2m_0 c} L_\phi \mathcal{H} \cos \alpha = \frac{e}{2m_0 c} n_\phi \hbar \mathcal{H} \frac{n_\psi}{n_\phi} = m \mu_0 \mathcal{H}. \quad (4.25)^4$$

Таким чином, кожному значенню кута  $\alpha$  або квантового числа  $n_\psi$  відповідає певне значення енергії в магнітному полі  $\Delta E$ , і тому повна енергія електронів в даному стаціонарному стані  $E_n = E_n^0 - \Delta E$  тепер залежить від двох квантових чисел: головного -  $n$  і магнітного -  $n_\psi = m$ . Число  $m$  називають **магнітним**, бо воно визначає проекцію магнітного моменту на напрямок, що

збігається з напрямком напруженості магнітного поля  $\frac{e}{2m_0c}L_\varphi \cos\alpha = m\mu_0$ , і визначає енергію

електрона в атомі, яку він набуває в магнітному полі (формула (4.25)). В формулі (4.25) вираз

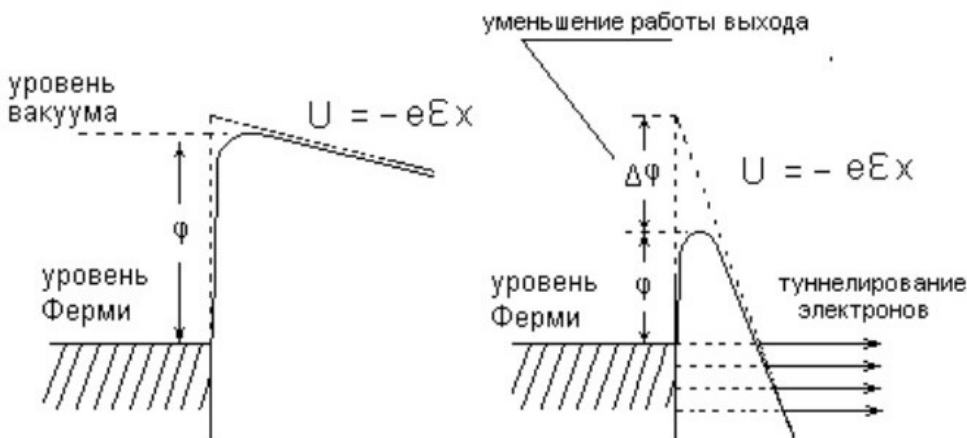
$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_0c}$  - називається **магнетон Бора**. Чисельно він дорівнює  $0.927 \cdot 4 \cdot 10^{-20}$  ерг/Гс.

**Магнітне квантове число  $m = n_\psi$**  набуває такі значення  $m = n_\varphi, n_\varphi-1, n_\varphi-2, \dots, -n_\varphi$ , тобто має  $2n_\varphi+1$  значень. // Это то что в старых шпорах(ну вообще в лекциях), тут то что объясняет теория Бора- она объясняет нормальный эффект Зееманна. Все остальное: аномальный эффект Зееманна, опыты Штерна-Герлаха, Эйнштейна-деГааза, эффект Барнетта она не объясняет. То есть эффекты связанные с наличием спина, аномальным гиромагнитным отношением, со спин-орбитальным взаимодействием она не объясняет.

## 2. Який фізичний механізм відповідає за автоелектронну емісію?

Автоелектронна емісія (холодна емісія) — випромінювання електронів з катода під дією зовнішнього електричного поля. При автоелектронній емісії електрони проникають крізь потенційний бар'єр, який існує на поверхні катода. Згідно з квантово-механічними уявленнями, електрони, енергія яких менша за висоту потенціального бар'єру, мають певну імовірність проникнути крізь бар'єр. Ця імовірність залежить від ширини бар'єру і збільшується із збільшенням напруженості зовнішнього електричного поля на поверхні катода, бо це поле зумовлює зменшення ширини бар'єру і полегшує проникнення електронів крізь нього.

Автоелектронну емісію називають холодною, оскільки вона відбувається при будь-якій температурі і сила струму не залежить від неї. Автоелектронну емісію може спричинити електричний пробій високого вакууму. На автоелектронній емісії ґрунтується робота електронних проєкторів і вакуумних випрямлячів струму з холодним катодом, вона застосовується для розрядки елементів флеш-пам'яті.



## 3. У чому полягає перехід від нормального до j-j зв'язку?

**Нормальним** називається зв'язок, коли енергії взаємодії орбітальних ( $E_{l-l}$ ) і спінових моментів ( $E_{s-s}$ ) кількості руху, в основі яких лежить електростатична квантова взаємодія, більші за енергію спин-орбітальної взаємодії ( $E_{l-s}$ ), магнітна взаємодія якої згідно (9.31) пропорційна квадрату сталої тонкої структури,

$$|E_{l-l}| \text{ та } |E_{s-s}| > |E_{l-s}|. \quad (11.1)$$

**J-J зв'язком** називається випадок, коли енергії орбітальної ( $E_{\ell-\ell}$ ) та спин-спінової ( $E_{s-s}$ ) взаємодій менші за енергію спин-орбітальної взаємодії ( $E_{\ell-s}$ )

$$|E_{\ell-\ell}| \text{ та } |E_{s-s}| < |E_{\ell-s}|. \quad (11.2)$$

Жодна із розглянутих моделей *не дає точного уявлення про справжній стан*, тому що завжди існує внутрішня конкуренція між різними типами взаємодій. Навіть в одному атомі різні електрони взаємодіють за різними схемами. Але для легких атомів, у яких незначна спин-орбітальна взаємодія, нормальна (Рассел-Саундерса) модель дозволяє описувати поведінку валентних електронів. У важких атомів, здебільшого, переважає j-j зв'язок, бо у них суттєво збільшується спин-орбітальна взаємодія. Взагалі векторна модель відіграє допоміжну роль **мнемонічного правила**.

в моделі J-J зв'язку між кутовими моментами спочатку знаходять сумарний вектор спінового та орбітального моментів для кожного електрона атома:

$$\vec{L}_{jk} = \vec{L}_{sk} + \vec{L}_{lk}, \quad \vec{L}_j = \sum_{k=1}^Z \vec{L}_{jk}$$

**4. Яку кількість елементів могли б утворити атоми, що мають електрони із квантовим числом  $n=5$ ?**

При даному  $n$  може бути  $2n^2$  станів із різними квантовими числами  $\ell$ , бо

$$\sum_{\ell=0}^{\ell=n-1} 2(2\ell + 1) = \frac{2[1 + 2(n-1) + 1]}{2} n = 2n^2 = 50$$

Електронний стан із головним квантовим числом  $n$  називається **шаром**.

З 37-го елемента починається **5-й період** періодичної системи елементів. 37 елемент утворюється при заповненні O-шару із квантовим числом  $n=5$ . Цей шар має 4 оболонки 5s, 5p, 5d, 5f, на яких можна розмістити 50 електронів.

Спочатку в 5-тому періоді починає заповнюватись 5s - оболонка, утворюючи лужний Rb ( $Z=37$ ) і лужноземельний Sr ( $Z=38$ ) елементи. Потім, як і в попередньому 4-му періоді, починає заповнювати 10 станів незаповненої 4d оболонки, утворюючи підгрупу перехідних d-металів із 10-ти елементів (I ( $Z=39$ ), Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag до Cd ( $Z=48$ )), й лише після цього забудовується 5p оболонка, утворюючи елементи In, Sn, Sb, Te, I, Xe ( $Z=54$ ). П'ятий період закінчується 54 елементом ксеноном. Усього п'ятий період має 18 елементів.

## 5. Причини виникнення спонтанної намагнічуваності в твердих тілах?

Є клас твердих тіл - **ферромагнетиків**, які мають значний спонтанний магнітний момент у відсутності магнітного поля.

*Ферромагнетизм притаманний лише конденсованому стану речовини.* Сукупність вільних атомів ферромагнетиків не мають ферромагнітних властивостей. Їхні атомні магнітні моменти майже не відрізняються від магнітних моментів інших атомів. Значні спонтанні магнітні моменти одиниці об'єму конденсованих фаз ферромагнетиків свідчать, що в них існують внутрішні взаємодії, внаслідок чого виникають внутрішні поля, які спричиняють появу спонтанних магнітних моментів.

*Наявність незаповнених d оболонки і позитивного обмінного інтеграла є умовами появи ферромагнітних властивостей твердих тіл.*



**Рис. 20.23.** Різновиди впорядкування спінів: 1 - ферромагнетик; 2 - антиферромагнетик; 3 - феримагнетик.



Крім феромагнетиків існують ще два різновиди магнетиків: *антиферомагнетики* і *феримагнетики* (рис.20.23). В антиферомагнетиках утворюються дві просторові підґратки з протилежно орієнтованими спінами. Такі кристали будуються з молекул  $Mn$ ,  $MnF_2$ ,  $FeF_2$ ,  $FeO$ ,  $Cr_2O_3$ , тощо. При  $T=0$  дві спінові підґратки компенсують одна одну, і намагніченість стає рівною нулю. При підвищенні температури у цих кристалах з'являється спонтанна намагніченість, бо порушується взаємна компенсація двох підґраток з протилежними спінами. Найбільші зміни намагніченості відбуваються в околі температури  $T_N$ , яка називається температурою Нееля. При  $T > T_N$  енергія теплового руху стає більшою за обмінну енергію і антиферомагнетик переходить до парамагнітного стану. У цьому стані він має типову температурну залежність Кюрі – Вейса

Феромагнетики навіть за відсутності зовнішнього магнітного поля спонтанно розбиваються *домени* - окремі області намагнічені до насичення внаслідок паралельної орієнтації спінів під дією обмінних сил. Поява доменів це вторинний ефект, зв'язаним з переходом кристала до стану з меншою вільною енергією.

Домени з'являються внаслідок того, що при поділі кристала на два домени з протилежно орієнтованими векторами спонтанної намагніченості відбувається зменшення магнітної енергії кристала, бо частина магнітного потоку, що виходить із одного домену, замикається на інший домен.

## Оглавление

Білет 1 .....	1
Білет 3 .....	7
Білет 4 .....	10
Білет 5 .....	14
Білет 6 .....	17
Білет 7 .....	22
Білет 9 .....	24
Білет 14 .....	27
Білет 20 .....	29
Білет 25 .....	33
Білет 28 .....	35
Білет 29 .....	38
Білет 31 .....	40
Білет 36 .....	43
Білет 37 .....	44
Білет 40 .....	48
Білет 45 .....	51
Білет 46 .....	56
Білет 50 .....	60