

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
АГРАРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ИНЖЕНЕРНЫЙ ИНСТИТУТ

РЕПЕТИТОР ПО ФИЗИКЕ
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Учебное пособие

Новосибирск

2016

УДК 535.14(07)
ББК 22.314, Я 7
Р411

Кафедра теоретической и прикладной физики

Составители: канд. техн. наук, доц. *В. Я. Чечуев*;
д-р техн. наук, проф. *С. В. Викулов*

Рецензент д-р физ.-мат. наук, проф. *М. П. Синюков* (СГУВТ)

Репетитор по физике. Квантовая механика: учеб. пособие / Новосибир. гос. аграр. ун-т. Инженер. ин-т; сост.: В. Я. Чечуев, С. В. Викулов. – Новосибирск: ИЦ НГАУ «Золотой колос», 2016. – 62 с.

Учебное пособие содержит материал, изучаемый, согласно программе, в курсе общей физики.

Предназначено для студентов всех форм обучения и всех направлений подготовки, реализуемых в НГАУ.

Утверждено и рекомендовано к изданию методическим советом Инженерного института (протокол № 8 от 29 марта 2016 г.)

© Новосибирский государственный
аграрный университет, 2016

ВВЕДЕНИЕ

В учебном пособии рассмотрены четыре темы: «Гипотеза де Бройля. Принцип неопределённости», «Уравнение Шрёдингера. Туннельный эффект. Гармонический осциллятор», «Атом водорода. Принцип Паули», «Рентгеновские спектры. Молекулы и их спектры».

Материал тем организован следующим образом. Кратко изложена суть рассматриваемых в теме физических явлений, даны определения вводимых в теме физических величин и соотношения между ними. Приведены примеры решения типовых задач и 12 вариантов индивидуальных заданий.

Пособие может быть использовано на практических и контрольных занятиях, при выполнении домашних заданий, а также при самостоятельном изучении курса физики.

1. ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ. ПРИНЦИП НЕОПРЕДЕЛЁННОСТИ

1.1. Гипотеза де Бройля

В результате углубления представлений о природе света выяснилось, что в оптических явлениях обнаруживается своеобразный дуализм. Наряду с такими свойствами света, которые самым непосредственным образом свидетельствуют о его волновой природе (интерференция, дифракция) имеются и другие свойства, столь же непосредственно обнаруживающие его корпускулярную природу (фотоэффект, эффект Комптона).

В 1924 г. Луи де Бройль выдвинул смелую гипотезу, что дуализм не является особенностью одних только оптических явлений, а имеет универсальное значение. Допускается, что частицы вещества наряду с корпускулярными свойствами имеют также и волновые свойства. Де Бройль

перенёс на случай частиц вещества те же правила перехода от одной картины к другой, какие справедливы в случае света. Фотон обладает энергией

$$E = \hbar\omega = h\nu$$

и импульсом

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}.$$

По идее де Бройля, движение электрона или какой либо другой частицы связано с волновым процессом, длина волны которого равна

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{mv}, \quad (1.1)$$

$$\text{а частота } \omega = \frac{E}{\hbar} \text{ или } \nu = \frac{E}{h}, \quad (1.2)$$

где m – масса частицы; v – скорость частицы.

Вскоре гипотеза де Бройля была подтверждена экспериментально. В 1927 г. американские физики Дэвиссон и Джермер обнаружили, что пучок электронов, рассеивающийся от естественной дифракционной решётки – кристалла никеля, – даёт отчётливую дифракционную картину в соответствии с формулой (1.1). В дальнейшем формула де Бройля была подтверждена опытами П. С. Тартаковского, Г. Томсона и В. А. Фабриканта. Последний показал, что волновые свойства частиц не являются свойством их коллектива, а присущи каждой частице в отдельности.

Впоследствии дифракционные явления обнаружили также для нейтронов, протонов, атомных и молекулярных пучков. Это окончательно послужило доказательством наличия волновых свойств микрочастиц и привело к выводу, что перед нами универсальное явление, общее свойство материи. Но тогда волновые свойства должны быть присущи и макроскопическим телам. Почему же они не наблюдаются?

Дело в том, что макротелам соответствуют очень короткие волны де Бройля. Например, для частицы массой 1 г, движущейся со скоростью 1 м/с, длина волны де Бройля $\lambda = 6,62 \cdot 10^{-31}$ м. Такая длина волны лежит за пределами доступной наблюдению области (периодических структур с периодом $d \approx 10^{-31}$ м в природе не существует). Поэтому считается, что макроскопические тела проявляют только одну сторону своих свойств – корпускулярную – и не проявляют волновую.

1.2. Необычные свойства частиц

Всякий микрообъект (молекула, атом, электрон и т.д.) представляет собой образование особого рода, сочетающее в себе свойства и частицы, и волны. Микрообъект не способен воздействовать непосредственно на органы чувств – ни видеть, ни осязать его нельзя.

В доквантовой физике «понять» означало составить себе наглядный образ объекта или процесса. Квантовую физику нельзя понять в таком смысле слова. Сочетая в себе свойства частицы и волны, микротела не ведут себя ни как волны, ни как частицы. Отличие микрочастицы от волны заключается в том, что она всегда обнаруживается как неделимое целое. Никто никогда не наблюдал, например, половину электрона. В то же время волну можно разделить на части, например, направив волну на полупрозрачное зеркало, и воспринимать затем каждую часть в отдельности.

Отличие микрочастицы от привычной нам макрочастицы заключается в том, что она не обладает одновременно определёнными значениями координаты и импульса, вследствие чего понятие траектории применительно к микрочастице утрачивает смысл.

Своеобразие свойств микрочастиц отчётливее всего обнаруживается в следующем мысленном эксперименте.

Направим на преграду с двумя узкими щелями параллельный пучок моноэнергетических электронов. За преградой поставим фотопластинку Φ_n (рис. 1 а).

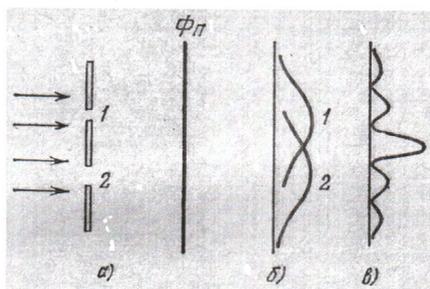


Рис. 1

Вначале закроем вторую щель и произведём экспонирование в течение времени τ . Почернение на обработанной фотопластинке будет характеризоваться кривой 1 (см. рис. 1 б). Вторую фотопластинку подвергаем экспозиции в течении того же времени τ , закрыв первую щель. Характер почернения передаётся в этом случае кривой 2. Наконец, откроем две щели и подвергнем экспонированию в течение времени τ третью пластинку. Картина почернения, получающаяся в последнем случае, изображена на рис. 1 в. Эта картина отнюдь не эквивалентна наложению двух первых картин. Она оказывается аналогичной картине, получающейся при интерференции двух когерентных световых волн. Характер картины свидетельствует о том, что на движение каждого электрона оказывают влияние оба отверстия. Такой вывод несовместим с представлениями о траекториях. Если бы электрон в каждый момент времени находился в определённой точке пространства и двигался по траектории, он проходил бы через определённое отверстие—первое или второе. Явление же дифракции доказывает, что в прохождении каждого электрона участвуют оба отверстия—и первое, и второе.

Не следует, однако, представлять дело так, что какая-то часть электрона проходит через одно отверстие, а другая часть – через второе. Мы уже отмечали, что электрон, как и другие микрочастицы, всегда обнаруживается как целое, с присущей ему массой, зарядом и другими характерными для него величинами. Таким образом, электрон, протон, атомное ядро представляют собой частицы с весьма своеобразными свойствами. Обычный шарик, даже очень малых размеров (микроскопическая частица), не может служить прообразом микрочастицы. С уменьшением размеров начинают проявляться качественно новые свойства, не обнаруживающиеся у микрочастиц.

В ряде случаев утверждение об отсутствии траекторий у микрочастиц, казалось бы, противоречит опытным фактам. Так, например, в камере Вильсона путь, по которому движется микрочастица, обнаруживается в виде узких следов (треков), образованных капельками тумана. Движение электронов в электронно-лучевой трубке превосходно рассчитывается по классическим законам. Это кажущееся противоречие объясняется тем, что при известных условиях понятие траектории оказывается применимым к микрочастицам, но только с некоторой степенью точности. Положение оказывается точно таким, как в оптике. Если размеры преград или отверстий велики по сравнению с длиной волны, распространение света происходит как бы вдоль определённых лучей (траекторий). При определённых условиях понятие траектории оказывается приблизительно применимым к движению микрочастиц, подобно тому как оказывается справедливым закон прямолинейного распространения света.

1.3. Принцип неопределённости

В классической механике состояние материальной точки (частицы) определяется заданием значений координат,

импульса, энергии и т.д. Перечисленные величины называются динамическими переменными. Строго говоря, микрообъекту не могут быть приписаны указанные динамические переменные. Однако информацию о микрочастицах мы получаем, наблюдая их взаимодействие с приборами, представляющими собой макроскопические тела. Поэтому результаты измерений поневоле выражаются в терминах, разработанных для характеристики макротел, т.е. через значения динамических переменных. В соответствии с этим измеренные значения динамических переменных приписываются микрочастицам.

Своеобразие свойств микрочастиц проявляется в том, что не для всех переменных получаются при измерениях определённые значения. Так, например, электрон не может иметь одновременно точных значений координаты x и компоненты импульса p_x . Неопределённости значений x и p_x удовлетворяют соотношению

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.3)$$

(\hbar – постоянная Планка). Соотношение, аналогичное (1.3), имеет место для y и p_y , для z и p_z , а также для ряда других пар величин, называемых канонически сопряженными.

Утверждение о том, что произведение неопределённостей значений двух сопряжённых переменных не может быть по порядку величины меньше постоянной Планка, называется *принципом неопределённости Гейзенберга*.

Энергия E и время t являются канонически сопряженными величинами. Поэтому для них также справедливо соотношение неопределённости:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1.4)$$

Соотношение неопределённости указывает, в какой мере можно пользоваться понятиями классической механики при-

нительно к микрочастицам. Оно является одним из фундаментальных положений квантовой механики. Однако соотношения неопределённости достаточно, чтобы получить ряд важных результатов. В частности, оно помогает объяснить тот факт, что электрон не падает на ядро атома, а также оценить размеры простейшего атома и минимальную возможную энергию электрона в таком атоме.

2. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА. ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

2.1. Уравнение Шредингера

В развитие идеи де Бройля о волновых свойствах вещества Э. Шредингер получил в 1926 г. уравнение, в котором сопоставил движению микрочастицы комплексную функцию координат и времени, которую он назвал волновой функцией. Будем обозначать её греческой буквой «пси» и называть пси-функцией.

Пси-функция характеризует состояние микрочастицы. Вид функции получается из решения уравнения Шредингера, которое выглядит следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi = i \hbar \frac{d\psi}{dt}. \quad (2.1)$$

Здесь m – масса частицы; i – мнимая единица; Δ – оператор Лапласа, результат действия которого на некоторую функцию представляет собой сумму вторых частных производных по координатам:

$$\Delta \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}. \quad (2.2)$$

Буквой U в уравнении (2.1) обозначена функция координат и времени, градиент которой, взятый с обратным знаком,

определяет силу, действующую на частицу. Уравнение Шредингера является основным уравнением нерелятивистской квантовой механики.

В случае, если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, уравнение Шредингера принимает вид

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0, \quad (2.3)$$

где E – полная энергия; U – потенциальная энергия.

Согласно Борну, квадрат модуля пси-функции определяет вероятность dP того, что частица будет обнаружена в пределах объёма dV :

$$dP = A|\psi|^2 dV = \psi\psi^* dV, \quad (2.4)$$

где A – коэффициент пропорциональности.

Для нормированной пси-функции

$$P = \int_V |\psi|^2 dV = \int_V \psi\psi^* dV = 1. \quad (2.5)$$

2.2. Частица в одномерной прямоугольной «потенциальной яме» с бесконечными стенками

Уравнение Шредингера позволяет найти пси-функцию данного состояния и, следовательно, определить вероятность нахождения частицы в различных точках пространства. Кроме того, из этого уравнения и условий, налагаемых на пси-функцию, непосредственно вытекают правила квантования энергии.

Найдём собственные значения энергии и соответствующие им собственные функции для частицы, находящейся в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме. Предположим, что частица может двигаться только вдоль оси x . Пусть движение ограничено непроницаемыми для частицы стенками: $x = 0$ и $x = l$. Потенциальная энергия U имеет в этом случае вид, показанный на рис. 2: она равна нулю при

$0 \leq x \leq l$ и обращается в бесконечность при $x < 0$ и $x > l$.

Возьмём уравнение Шредингера в виде (2.3). Поскольку пси-функция зависит только от координаты x , уравнение упрощается и записывается следующим образом:

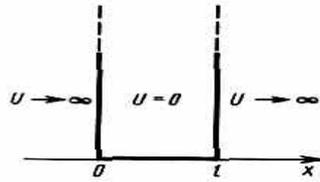


Рис. 2

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (2.6)$$

За пределы потенциальной ямы частица попасть не может. Соответственно и пси-функция на границах ямы и за её пределами

$$\psi(0) = \psi(l) = 0. \quad (2.7)$$

Решение уравнения (2.7) имеет вид

$$\psi(x) = A \cdot \sin(kx + \alpha). \quad (2.8)$$

Наложив на (2.8) условия (2.7), найдём собственные значения энергии частицы:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 \ell^2} \cdot n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (2.9)$$

Спектр энергии оказался дискретным.

Определив k и A и подставив их в (2.8), найдём вид собственных функций:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n}{l} x. \quad (2.10)$$

Графики собственных функций изображены на рис. 3 а. На рис. 3 б дана плотность вероятности обнаружения частицы на различных расстояниях от стенок ямы, равных $|\psi_n(x)|^2$.

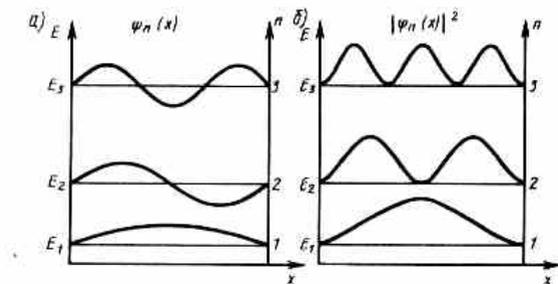


Рис. 3

Из графиков следует, что в состоянии с $n = 2$ частица не может быть обнаружена в середине ямы и вместе с тем одинаково часто бывает как в левой, так и в правой половине ямы. Такое поведение частицы, очевидно, несовместимо с представлениями о траекториях. Отметим, что согласно классическим представлениям все положения частицы в яме равновероятны.

Реальные потенциальные ямы, разумеется, не имеют бесконечно высоких стенок, и частицы, приобретя достаточную энергию, могут покинуть их. Например, электроны в металле находятся в своеобразной потенциальной яме, но если им передать достаточную энергию фотонов ультрафиолетового света, то электроны могут вылететь из металла, что и происходит в фотоэффекте.

2.3. Туннельный эффект

Рассмотрим сначала случай одномерного движения частицы вдоль оси x , когда потенциальная энергия U меняется скачком в одной точке $x = 0$. При $x < 0$ $U = 0$, а при $x > 0$ она равна постоянному значению U_0 (рис. 4).

График зависимости потенциальной энергии от координаты x имеет вид ступеньки высотой U_0 и называется потенциальной стенкой. Вдоль осей y и z потенциальная энергия не меняется. Классическая картина движения в этом поле тако-

ва: если полная энергия частицы $E < U_0$, то частица, движущаяся слева направо, достигнет потенциальной стенки (в точке A) и отразится от неё. Проникнуть в область $x > 0$ частица не может, так как при

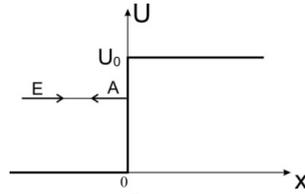


Рис. 4

этом её полная энергия $E = \frac{p^2}{2m_0} + U$ (которая в силу закона сохранения энергии остается неизменной) оказалась бы меньше потенциальной, так что импульс $p = \sqrt{2m_0(E - U_0)}$ стал бы чисто мнимым. Потенциальная стенка подобна абсолютно твёрдой стенке.

В квантовой механике нахождение частицы внутри области $E < U$ не приводит к бессмысленному выводу об отрицательной кинетической энергии. Кинетическая и потенциальная энергия, согласно соотношению неопределенностей, не имеют одновременно точных значений, так как кинетическая энергия зависит от импульса, а потенциальная — от координаты. Поэтому равенство $E = \frac{p^2}{2m_0} + U$ имеет в квантовой механике лишь тот смысл, что в любом состоянии средняя полная энергия равна сумме средней кинетической и средней потенциальной энергии.

Согласно квантовой механике, волновая функция частицы, движущейся к стенке с импульсом $p = \sqrt{2m_0 E}$, представляет собой в этой области плоскую волну де Бройля. При $x > 0$ полная энергия та же, что и при $x < 0$, но теперь в выражении для плоской волны вместо $p = \sqrt{2m_0 E}$ должна стоять величина $\sqrt{2m_0(E - U_0)} = i\sqrt{2m_0(U_0 - E)}$. Эту величину уже нельзя истолковать как импульс частицы. Зависимость волновой функции от времени при $x < 0$ и при $x > 0$ одна и та же, но зависимость от координат при $x > 0$ становится аperiодической:

$$\psi(x) \sim e^{-\left[\frac{\sqrt{2m_0(U_0 - E)}}{h}\right] \cdot x}. \quad (2.11)$$

Волновая функция при $x > 0$ экспоненциально убывает с ростом x (рис. 5).

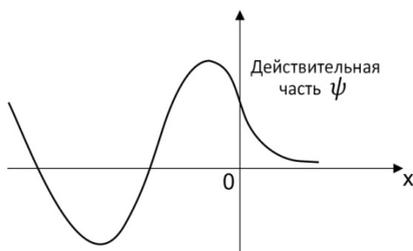


Рис. 5

В пространстве перед потенциальной стенкой наряду с падающей волной существует и отражённая волна. При этом волновые функции перед стенкой ($x < 0$) и внутри неё ($x > 0$) связаны друг с другом. В точке $x = 0$ значения волновых функций и значения их производных по координате должны совпадать вследствие непрерывности волновой функции и её первой производной. Согласно (2.11), имеется конечная вероятность обнаружить частицу в классически запрещенной области $x > 0$. Эта вероятность экспоненциально убывает с увеличением координаты x . Убывание происходит тем быстрее, чем значительнее потенциальная энергия U_0 превышает полную энергию частицы E . Вероятность обнаружить частицу на расстояниях, много больших длины волны де Бройля, мала.

Возможность проникновения частицы в классически запрещенную область дает ключ к пониманию многих процессов, существование которых, с точки зрения классической механики, необъяснимо.

Рассмотрим следующий случай. Допустим, имеется узкая область шириной d , внутри которой потенциальная энергия равна U_0 . Вне этой области потенциальная энергия равна нулю. Потенциальная кривая имеет вид барьера прямоугольной формы (рис. 6), называемого потенциальным барьером.

Частица с энергией $E < U_0$, движущаяся слева направо, согласно классической механике, не может преодолеть этот барьер и отражается от него. В квантовой механике экспоненциально убывающая волновая функция не успевает полностью затухнуть внутри барьера, и отлична от нуля в области за барьером. Это приводит к тому, что существует небольшая вероятность обнаружить частицу за барьером. Волновая функция при $x > d$ также представляет собой волну де Бройля той же частоты (т.к. энергия частицы остается прежней), но с гораздо меньшей амплитудой, чем перед барьером (рис. 7).

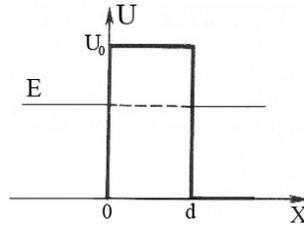


Рис. 6

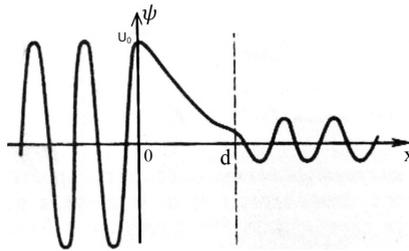


Рис. 7

Возникает интереснейшее явление – проникновение частиц сквозь потенциальный барьер, называемое **туннельным эффектом**.

Вероятность обнаружения частицы в точке x пропорциональна квадрату модуля волновой функции $|\psi|^2$. Поэтому отношение вероятности найти частицу за барьером в точке $x=d$ к вероятности обнаружения её перед барьером в точке $x=0$, согласно (2.11), равно:

$$D \approx \frac{|\psi(d)|^2}{|\psi(0)|^2} \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m_0(U_0 - E)}d}. \quad (2.12)$$

Это отношение – вероятность «просачивания» частицы сквозь барьер – называется *коэффициентом прозрачности потенциального барьера*.

Из выражения (2.12) следует, что чем меньше масса частицы, тем больше вероятность туннельного эффекта. Так, при высоте барьера 2 эВ и ширине 10^{-10} м вероятность прохождения сквозь барьер для электрона с энергией 1 эВ равна 0,78, а для протона с той же энергией – лишь $3,6 \cdot 10^{-19}$. Из выражения (2.12) также следует, что D зависит от ширины барьера d и от $(U_0 - E)$.

Для потенциального барьера произвольной формы (рис. 8)

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_0(U_0 - E)} dx}$$

где $U = U(x)$.

Туннельный эффект позволяет объяснить ряд явлений, необъяснимых с точки зрения классической механики. Так, он позволяет объяснить явление α -распада, при котором из радиоактивных ядер вылетают α -частицы (ядра атома гелия). Известно, что α -частица прочно удерживается внутри ядра ядерными силами. Вне ядра на α -частицу действуют электростатические силы отталкивания.

Потенциальная энергия взаимодействия α -частицы и тяжелого ядра в зависимости от расстояния до центра ядра

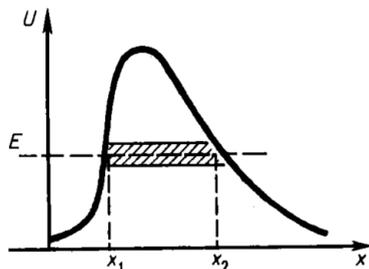


Рис. 8

имеет вид, изображенный на рис. 9. Пусть α -частица имеет энергию $E \approx 4$ МэВ, много меньшую высоты потенциального барьера $U \approx 25$ МэВ.

Несмотря на значительную высоту барьера, согласно (2.12), имеется отличная от

нуля вероятность прохождения α -частицы сквозь барьер. Исходя из такого подхода, теоретически выводится экспериментально полученное уравнение Гейгера-Нэттола, описывающее α -распад.

Прохождением частиц сквозь потенциальный барьер объясняются ионизация атомов в сильном электрическом поле,

вырывание электронов из металла под действием электрического поля (автоэлектронная эмиссия) и многие другие явления.

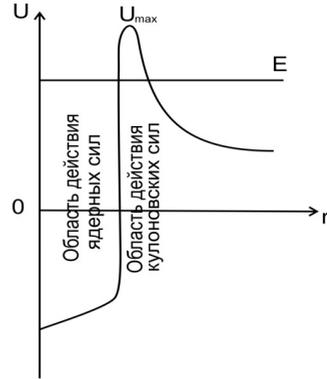


Рис. 9

2.4. Гармонический осциллятор

Гармоническим осциллятором называется система, в которой совершаются гармонические колебания с определенной собственной частотой ω_0 . Груз на пружине или маятник — примеры классических гармонических осцилляторов. Колебания в подобных системах вызываются квазиупругой силой $F_x = -kx$. В случае колебаний груза на пружине k — жесткость пружины, а x — смещение тела или частицы от положения равновесия. Собственная частота колебаний такого осциллятора $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$, где m — масса частицы. Потенциальная энергия гармонически колеблющейся частицы

$$U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (2.13)$$

Потенциальная яма в этом случае является параболической (сплошная кривая на рис. 10).

В рассматриваемом нами одномерном случае $\Delta\psi = \frac{d^2\psi}{dx^2}$. С учетом этого и соотношения (2.13) уравнение

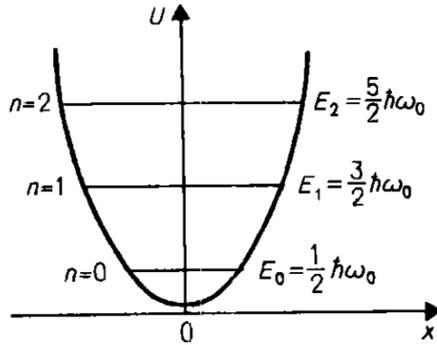


Рис. 10

Шредингера (2.3), описывающее поведение гармонического осциллятора в квантовой механике, выглядит следующим образом:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \cdot \psi = 0. \quad (2.14)$$

Движение частицы в параболической яме во многом напоминает ее движение в прямоугольной яме с бесконечными стенками. Энергия также принимает дискретные значения и по-прежнему каждому значению энергии E_n соответствует стоячая волна ψ_n . Но теперь возможные значения энергии будут иными: волновые функции не имеют синусоидальной формы и не обращаются в нуль на границах ямы. Роль граничных условий выполняет требование, чтобы волновая функция достаточно быстро стремилась к нулю на бесконечности ($\psi \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$).

В теории дифференциальных уравнений доказывается, что уравнение (2.14) имеет конечные, однозначные и непрерывные решения при значениях параметра E , равных

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2). \quad (2.15)$$

На рис. 10 дана схема энергетических уровней гармонического осциллятора. Для наглядности уровни вписаны

в кривую потенциальной энергии. Как видно из рис. 10, эти уровни являются эквидистантными, т.е. отстоящими друг от друга на одинаковое расстояние. Наименьшее возможное значение энергии равно

$$E_0 = \frac{1}{2} \cdot \hbar \omega . \quad (2.16)$$

Это значение называется *нулевой энергией*.

Существование нулевой энергии подтверждается экспериментами по изучению рассеяния света при низких температурах. Оказывается, что интенсивность рассеянного света по мере понижения температуры стремится не к нулю, а к некоторому конечному значению, указывающему на то, что при абсолютном нуле колебания атомов в кристаллической решетке не прекращаются.

Из-за малости \hbar^2 минимальная энергия макроскопических осцилляторов, таких как груз на пружинке или маятник, пренебрежимо мала. При частотах колебаний в десятки герц эта энергия составляет около 10^{-32} Дж и обнаружить её практически невозможно. На столь же малые значения отличаются друг от друга соседние уровни энергии классического осциллятора. Поэтому его энергию можно считать непрерывной.

Как показано в квантовой механике, для гармонического осциллятора возможны лишь переходы между соседними уровнями, т.е. квантовое число n в формуле (2.15) может изменяться лишь на единицу:

$$\Delta n = \pm 1. \quad (2.17)$$

Из (2.17) вытекает, что энергия гармонического осциллятора может изменяться только порциями $\hbar \omega$. Этот результат совпадает с тем чужеродным для классической физики предположением, которое пришлось сделать Планку, чтобы вычислить испускательную способность абсолютно черного тела.

3. АТОМ ВОДОРОДА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. ПРИНЦИП ПАУЛИ

3.1. Атом водорода. Спин электрона

Атом водорода. Рассмотрим систему, состоящую из неподвижного ядра с зарядом Ze (Z – целое число) и движущегося вокруг него электрона. При $Z > 1$ такая система называется водородоподобным ионом; при $Z = 1$ она представляет собой атом водорода.

Потенциальная энергия электрона равна

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

где r – расстояние электрона от ядра. Следовательно, уравнение Шредингера имеет вид

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\psi = 0, \quad (3.1)$$

где m – масса электрона.

Это уравнение имеет требуемые (т.е. однозначные, конечные и непрерывные) решения в двух случаях: 1) при любых положительных энергиях E ; 2) при дискретных отрицательных значениях энергии, равных

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3\dots). \quad (3.2)$$

Случай $E > 0$ соответствует электрону, пролетающему вблизи ядра и удаляющемуся снова на бесконечность. Случай $E < 0$ соответствует электрону, связанному с ядром. Такой же результат для энергии водородного атома получается и в теории Бора. Однако в квантовой механике этот результат получается как следствие основных положений данной теории.

Собственные функции уравнения (3.1) содержат три целочисленных параметра – n , ℓ и m :

$$\psi = \psi_{n\ell m}(r, \vartheta, \varphi). \quad (3.3)$$

Параметр n , называемый главным квантовым числом, совпадает с номером уровня энергии. Параметры ℓ и m представляют собой азимутальное и магнитное квантовые числа, определяющие по формулам

$$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}; \quad (3.4)$$

$$L_z = m\hbar \quad (3.5)$$

модуль момента импульса и проекцию момента импульса на некоторое направление z .

Решения, удовлетворяющие стандартным условиям, получаются лишь для значений ℓ , не превышающих $n-1$. Следовательно, при данном n квантовое число ℓ может принимать n различных значений:

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

При данном ℓ квантовое число m может принимать $2\ell+1$ различных значений:

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

Согласно (3.2), энергия электрона зависит только от главного квантового числа n . Следовательно, каждому собственному значению энергии (кроме E_1) соответствует несколько собственных функций $\psi_{n,\ell,m}$, отличающихся значениями квантовых чисел ℓ и m . Это означает, что атом водорода может иметь одно и то же значение энергии, находясь в нескольких различных состояниях. Состояния с одинаковой энергией называются **вырожденными**, а число различных состояний с каким-либо значением энергии называется **кратностью вырождения** соответствующего энергетического уровня. Нетрудно показать, что кратность вырождения энергетических уровней атома водорода равна n^2 .

Принято электрон, находящийся в состоянии с $\ell = 0$,

называть s -электроном (а соответствующее состояние— s -состоянием), с $\ell = 1$ — p -электроном, с $\ell = 2$ — d -электроном, с $\ell = 3$ — f -электроном, затем идут g , h и так далее уже по алфавиту. Значение главного квантового числа указывают перед условным обозначением квантового числа ℓ . Таким образом, электрон в состоянии с $n = 4$ и $\ell = 2$ обозначают символом $4d$ и так далее. Одна из возможных схем уровней атома водорода показана на рис. 11.

Как известно, испускание и поглощение света происходит при переходах электрона с одного уровня на другой. Для азимутального квантового числа ℓ имеется правило отбора

$$\Delta\ell = \pm 1. \quad (3.6)$$

Это правило обусловлено тем, что фотон обладает собственным моментом импульса (спином), равным \hbar . При испускании фотон уносит из атома этот момент, а при поглощении привносит, так что правило (3.6) есть просто следствие закона сохранения момента импульса.

На рис. 11 показаны переходы, разрешённые правилом (3.6). Пользуясь условными обозначениями состояний электрона, переходы, приводящие к возникновению серии Лаймана, можно записать в виде

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

Серии Бальмера соответствуют переходы

$$ns \rightarrow 2p \text{ и } nd \rightarrow 2p \quad (n = 3, 4, \dots).$$

На рис. 11 приведены также серии Брэкета и Пашена.

Состояние $1s$ является основным состоянием атома водорода. В этом состоянии атом обладает минимальной энергией. По мере роста главного квантового числа n уровни энергии (см. рис. 11) становятся всё гуще и гуще. Следовательно, присущая квантовой механике дискретность уровней уменьшается, и характер поведения частицы приближается к классическому.

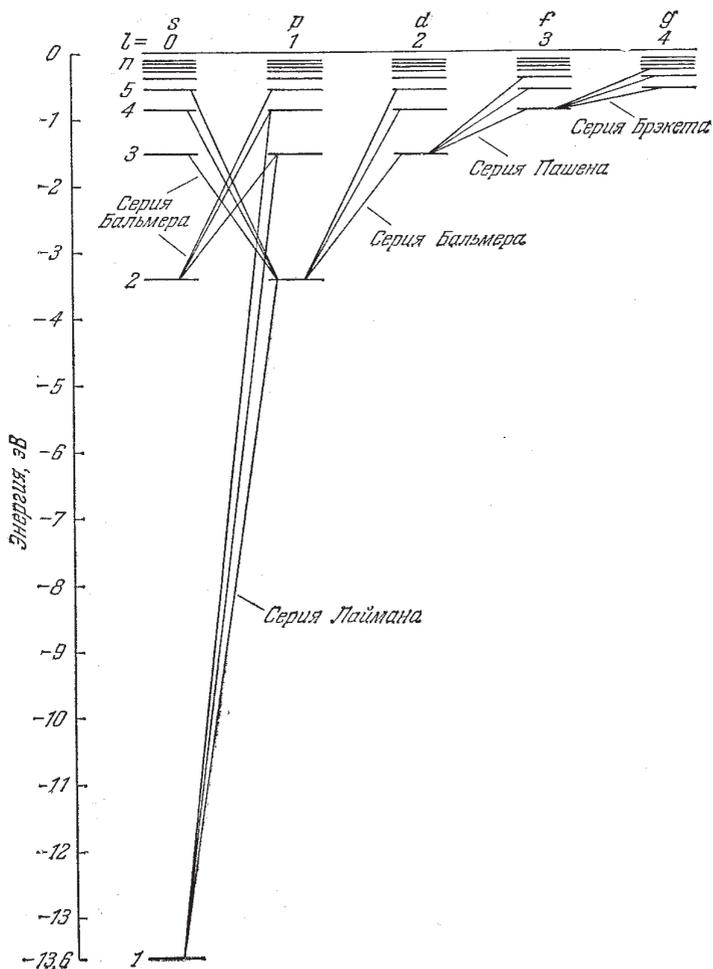


Рис. 11

На рис. 12 приведены графики плотности вероятности для атома водорода в состояниях: 1) $n = 1, \ell = 0$; 2) $n = 2, \ell = 1$ и 3) $n = 3, \ell = 2$. Длинными вертикальными чёрточками отмечены на графиках радиусы соответствующих боровских орбит. Из рисунка видно, что эти радиусы совпадают с наиболее вероятными расстояниями электрона от ядра. Из рисунка же следу-

ет, что электрон не находится на каком-то точно определённом расстоянии от ядра. Не существует и электронных «орбит»; вместо этого имеется «размытое» электронное распределение, и можно указать лишь вероятность того, что электрон находится на данном расстоянии от ядра.

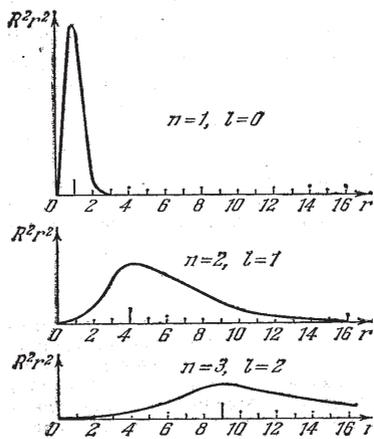


Рис. 12

Спин электрона. В 1921 г. О. Штерном и В. Герлахом были поставлены опыты, цель которых состояла в измерении магнитных моментов \vec{p}_m атомов различных химических элементов, в том числе атомов первой группы.

Особенность атомов первой группы состоит в том, что у них орбитальные механические (и магнитные) моменты всех электронов, кроме валентного, взаимно компенсируют друг друга, а значит, магнитный момент атома равен магнитному моменту одного электрона.

Идея опытов Штерна и Герлаха заключалась в измерении силы, действующей на атом в неоднородном магнитном поле. В этом поле на атом действует сила

$$\vec{F} = p_{mz} \cdot \frac{d\vec{B}}{dz}, \quad (3.7)$$

где \vec{B} – индукция магнитного поля, направленного вдоль оси z .

Результаты опытов обнаружили ошибочность классического предположения о том, что магнитный момент \vec{p}_m и механический момент импульса \vec{l} атома произвольно ориентируются относительно направления внешнего поля, и подтвердили наличие пространственного квантования.

Если бы момент импульса \vec{l} атома (и его магнитный момент \vec{p}_m) мог принимать произвольные ориентации в магнитном поле, то можно было бы ожидать непрерывного распределения попаданий атомов на пластинку с большей плотностью попаданий в середине пластинки и меньшей плотностью к её краям. Опыты, проведённые с серебром и атомами других элементов периодической системы, привели к совершенно другим результатам.

Схема первых опытов Штерна и Герлаха изображена на рис. 13. В трубке, где был создан вакуум порядка 10^{-5} мм. рт. ст., помещался источник пучка атомов – нагреваемый до высокой температуры серебряный шарик K . Атомы серебра вылетали с его поверхности со средней тепловой скоростью порядка 100 м/с, соответствующей температуре испарения серебра. Из этих атомов при помощи щелевых диафрагм D вырезался узкий пучок, проходящий через сильное неоднородное магнитное поле, направленное перпендикулярно пучку. Основная трудность опыта состояла в том, чтобы достигнуть такой большой неоднородности магнитного поля, которая сказывалась бы на расстояниях порядка размеров атома. Необходимая неоднородность поля была получена в результате применения электромагнита SN с полюсными наконечниками специальной формы. Приёмником атомов серебра была фотопластинка A .

На рис. 14 показана фотография результата опыта с литием. Атомы в атомном пучке находились в основном состоянии. Из рисунка видно, что на фотопластинке получились две резкие полосы – все атомы отклонялись в магнитном

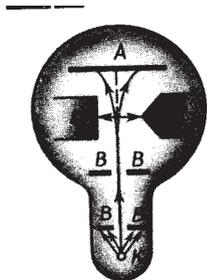


Рис. 13

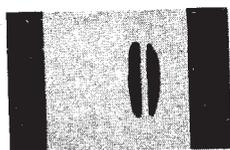


Рис. 14

поле двойко, что соответствовало лишь двум возможным ориентациям магнитного момента атома во внешнем поле. Напомним, что у лития моменты импульса и магнитные моменты атомов совпадают с моментами валентного электрона. Если подставить

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \quad (3.8)$$

$$p_m = -\frac{e}{2m} L, \quad (3.9)$$

то связь величин p_m и ℓ можно записать в виде

$$p_m = \frac{e}{2m} L = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \frac{e\hbar}{2m} = \mu_B \sqrt{\ell(\ell + 1)}, \quad (3.10)$$

где $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274 \cdot 10^{-24}$ Дж/Тл – магнетон Бора (единица измерения магнитных моментов в атомной физике).

Важной особенностью атомов первой группы, а значит и лития, является то, что валентный электрон в основном состоянии атома находится в s -состоянии, а в s -состоянии $\ell = 0$. Следовательно, согласно (3.8), равен нулю момент импульса электрона и связанный с ним (3.10) магнитный момент. В связи с этим возникает серьёзный вопрос: пространственное квантование *какого* момента импульса обнаружилось в этих опытах и проекция *какого* магнитного момента равна одному магнетону Бора?

Наряду с данной трудностью в то время существовали

и другие. Так, исследование спектров щелочных металлов при помощи приборов с большой разрешающей силой показало, что каждая линия этих спектров является двойной (дублет). Например, характерная для натрия жёлтая линия $3p \rightarrow 3s$ состоит из двух линий с длинами волн 5890 и 5896 Å. Структура спектра, отражающая расщепление линий на компоненты, называется *тонкой структурой*. Сложные линии, состоящие из нескольких компонент, получили название мультиплетов. Тонкая структура обнаруживается, кроме щелочных металлов, также и у других элементов.

Расщепление спектральных линий, очевидно, обусловлено расщеплением энергетических уровней. Для объяснения расщепления уровней и вышеуказанных трудностей Гаудсмит и Уленбек выдвинули в 1925 г. гипотезу о том, что электрон обладает собственным моментом импульса L_s , не связанным с движением электрона в пространстве. Этот собственный момент был назван *спином*. Спин следует считать внутренним свойством, присущим электрону, подобно тому, как ему присущи заряд и масса.

Предположение о спине электрона было подтверждено большим количеством опытных фактов и должно считаться совершенно доказанным. Оказалось также, что наличие спина и все его свойства автоматически вытекают из установленного Дираком уравнения квантовой механики, удовлетворяющего требованиям теории относительности. Таким образом, выяснилось, что спин электрона является свойством одновременно квантовым и релятивистским. Спином обладают также протоны, нейтроны, фотоны и другие элементарные частицы (кроме мезонов).

Величина собственного момента импульса электрона определяется так называемым *спиновым квантовым числом* s , равным $\frac{1}{2}$:

$$L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \hbar\sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{3}. \quad (3.11)$$

Принято говорить, что собственный механический момент (спин) электрона равен половине (подразумевается: в единицах \hbar), а собственный магнитный момент равен одному магнетону Бора.

В связи с существованием спина электрона естественно возникает вопрос о том, что и у водородного атома уровни с $\ell > 0$ должны быть двойными, а спектральные линии – дублетными. Тонкая структура водородного спектра действительно была обнаружена экспериментально.

3.2. Принцип Паули. Распределение электронов по энергетическим уровням атома

В связи с введением спина состояние каждого электрона в атоме характеризуется четырьмя квантовыми числами:

- главным n ($n = 1, 2, 3, \dots$),
- азимутальным ℓ ($\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$),
- магнитным m ($m = -\ell, \dots, -1, 0, +1, \dots, +\ell$),
- спиновым m_s ($m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$).

Энергия состояния (исключая водород) зависит в основном от чисел n и ℓ . Кроме того, имеется слабая зависимость энергии от чисел m и m_s . Энергия состояния сильнее возрастает с увеличением числа n , чем с увеличением ℓ . Поэтому, как правило, состояние с бóльшим n обладает, независимо от значения ℓ , большей энергией.

В нормальном (невозбуждённом) состоянии атома электроны должны располагаться на самых низких доступных для них энергетических уровнях. Поэтому, казалось бы, в любом атоме в нормальном состоянии все электроны должны находиться в состоянии $1s$ ($n = 1, \ell = 0$). Однако опыт показывает, что это не так.

Объяснение наблюдаемых типов спектров дал принцип Паули. Он справедлив не только для электронов, но и для других частиц с полуцелым спином. В своей простейшей формулировке **принцип Паули** гласит: *в одном и том же атоме (или в какой-либо квантовой системе) не может быть двух электронов, обладающих одинаковой совокупностью четырёх квантовых чисел: n, ℓ, m, m_s .*

Иными словами, в одном и том же состоянии не могут находиться одновременно два электрона.

Ранее было показано, что данному n соответствует n^2 состояний, отличающихся значениями ℓ и m . Квантовое число m_s может принимать два значения: $\pm \frac{1}{2}$. Поэтому в состояниях с данным значением n могут находиться в атоме не более $2n^2$ электронов:

- $n = 1$ могут иметь 2 электрона,
- $n = 2$ могут иметь 8 электронов,
- $n = 3$ могут иметь 18 электронов,
- $n = 4$ могут иметь 32 электрона,
- $n = 5$ могут иметь 50 электронов.

Совокупность электронов, имеющих одинаковые значения квантового числа n , образует оболочку. Оболочки подразделяются на подоболочки, отличающиеся значением квантового числа ℓ . В соответствии с значением n оболочкам дают следующие обозначения:

Значение n	1	2	3	4	5	6
Обозначение оболочки	K	L	M	N	O	P

Для полностью заполненной подоболочки характерно равенство нулю суммарного орбитального и суммарного спинового моментов. Следовательно, момент импульса такой подоболочки равен нулю. Таким образом, при определении L и s атома заполненные подоболочки можно не принимать во внимание.

Принцип Паули даёт объяснение периодической повторяемости свойств атомов в *периодической системе элементов Менделеева*.

4. РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ. МОЛЕКУЛЫ И ИХ СПЕКТРЫ

4.1. Рентгеновские спектры

В исследованиях строения электронных оболочек сложных атомов, при изучении строения молекул и особенно кристаллических решёток твёрдых тел большую роль сыграло излучение, открытое в 1895 г. Рентгеном и названное в его честь рентгеновским. Рентгеновское излучение представляет собой весьма короткие электромагнитные волны в диапазоне от $0,01 \text{ \AA}$ до 800 \AA .

Самым распространённым источником рентгеновского излучения является рентгеновская трубка. Она состоит из вакуумированного стеклянного или металлического корпуса, в котором на определённом расстоянии друг от друга находятся катод и анод, включённые в цепь высокого напряжения. Катод служит источником электронов, анод (антикатод) – источником рентгеновского излучения. Между катодом и анодом создаётся электрическое поле, разгоняющее электроны до энергий $10^4 - 10^5 \text{ эВ}$.

Исследования спектрального состава рентгеновского излучения показывают, что его спектр имеет сложную структуру (рис. 15). Спектр представляет собой наложение сплошного спектра, ограниченного со стороны коротких длин волн некоторой границей λ_{\min} , и линейчатого спектра – совокупности отдельных линий, появляющихся на фоне сплошного спектра.

Исследование свойств этого излучения показало, что оно испускается бомбардирующими анод электронами в ре-

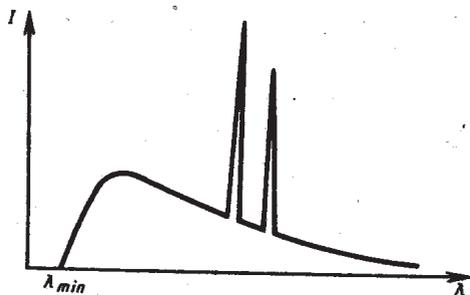


Рис. 15

зультате их торможения при взаимодействии с атомами мишени. Поэтому сплошной рентгеновский спектр называют **тормозным**.

Из опытов следует, что чем больше кинетическая энергия электронов, вызывающих тормозное рентгеновское излучение, тем меньше λ_{\min} . Это обстоятельство, а также наличие самой границы объясняется квантовой теорией. Очевидно, что предельная энергия кванта соответствует такому случаю торможения, при котором вся кинетическая энергия электрона переходит в энергию кванта, т. е.

$$E_{\max} = h\nu_{\max} = eU,$$

где U —разность потенциалов, за счёт которой электрону сообщается энергия E_{\max} ; ν_{\max} —частота, соответствующая границе сплошного спектра. Отсюда граничная длина волны

$$\lambda_{\min} = \frac{c}{\nu_{\max}} = \frac{ch}{eU} = \frac{ch}{E_{\max}}. \quad (4.1)$$

При достаточно большой энергии бомбардирующих анод электронов на фоне сплошного спектра появляются отдельные резкие линии (см. рис. 15)—линейчатый спектр, определяемый материалом анода и называемый **характеристическим рентгеновским спектром**.

Характерная особенность этих спектров состоит в том, что атомы каждого химического элемента, независимо от того, находятся ли они в свободном состоянии или входят

в состав химического соединения, обладают определённым, присущим только данному элементу характеристическим рентгеновским спектром. По сравнению с оптическими спектрами характеристические рентгеновские спектры однотипны и состоят из нескольких серий, обозначаемых K , L , M , N и O . Рассмотрим механизм их происхождения (рис. 16).

Предположим, что под влиянием внешнего электрона или высокоэнергетического фотона вырывается один из двух электронов K -оболочки атома. Тогда на его место может перейти электрон с более удалённых от ядра оболочек L , M , N , ... Такие переходы сопровождаются испусканием рентгеновских квантов и возникновением спектральных линий K -серии: K_α ($L \rightarrow K$), K_β ($M \rightarrow K$) и т.д. Самой длинноволновой линией K -серии является линия K_α . Частоты линий возрастают в ряду $K_\alpha \rightarrow K_\beta \rightarrow K_\gamma$, поскольку энергия, высвобождаемая при переходе электрона на K -оболочку с более удалённых оболочек, увеличивается. Наоборот интенсивности линий в ряду $K_\alpha \rightarrow K_\beta \rightarrow K_\gamma$ убывают, так как вероятность переходов электронов с L -оболочки на K -обо-

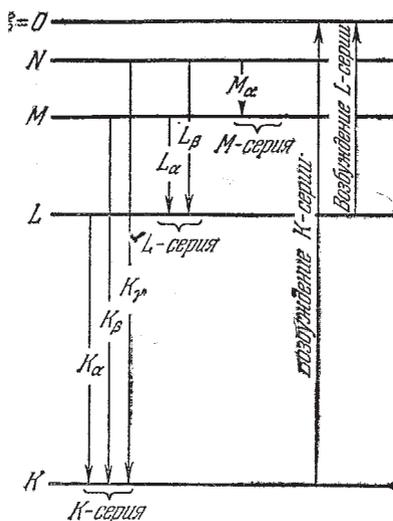


Рис. 16

лочку больше, чем с более удалённых оболочек M и N . K -серия обязательно сопровождается другими сериями.

Г. Мозли в 1913 г. установил **закон**, связывающий частоты линий рентгеновского спектра с атомным номером Z испускающего их элемента. Обычно этот закон выражают формулой

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = R (Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (4.2)$$

где ν , λ – частота и длина волны, соответствующие данной линии характеристического рентгеновского излучения; c – скорость света; $R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ – постоянная Ридберга; σ – постоянная экранирования; $m = 1, 2, 3, \dots$ – целые числа, определяющие рентгеновскую серию; $n = m + 1$ – целые числа, определяющие отдельную линию соответствующей серии.

Смысл константы σ легко понять: электроны, совершающие переходы при испускании рентгеновского излучения, находятся под воздействием ядра, притяжение которого несколько ослаблено действием остальных окружающих его электронов. Это так называемое экранирующее действие, находящее своё выражение в необходимости вычесть из Z некоторую величину σ .

В краткой форме **закон Мозли** формулируют и так: *корень квадратный из частоты является линейной функцией атомного номера Z .*

$$\sqrt{\nu} = c(Z - \sigma),$$

где c – константа.

Закон Мозли позволяет по измеряемой длине волны рентгеновских линий точно установить атомный номер данного элемента. Он сыграл большую роль при размещении элементов в периодической системе.

4.2. Молекулы и их спектры

Молекулой называется наименьшая частица однородного вещества, обладающая его основными химическими

свойствами. Молекулы состоят из одинаковых или различных атомов, соединённых между собой межатомными химическими связями.

Молекула является квантовой системой: она описывается уравнением Шредингера, учитывающим движение электронов в молекуле, колебания атомов молекулы, вращение молекулы.

Соответственно энергия изолированной молекулы может быть представлена суммой

$$E = E_{\text{эл}} + E_{\text{кол}} + E_{\text{вращ}}, \quad (4.3)$$

где $E_{\text{эл}}$ – энергия движения электронов относительно ядер; $E_{\text{кол}}$ – энергия колебания ядер; $E_{\text{вращ}}$ – энергия вращения ядер.

Из теории и эксперимента

$$E_{\text{эл}} \approx 1 \div 10 \text{ эВ}; E_{\text{кол}} \approx 10^{-2} \div 10^{-1} \text{ эВ}; E_{\text{вращ}} \approx 10^{-5} \div 10^{-3} \text{ эВ}.$$

Отсюда $E_{\text{эл}} \gg E_{\text{кол}} \gg E_{\text{вращ}}$.

Каждая из входящих в выражение (4.3) энергий квантуется и определяется квантовыми числами. При переходе из одного энергетического состояния в другое поглощается или испускается энергия $\Delta E = h\nu$. При таких переходах одновременно изменяются энергия движения электронов, энергия колебаний и вращения. Из теории и эксперимента следует, что расстояния между вращательными уровнями энергии $\Delta E_{\text{вращ}}$ гораздо меньше расстояний между колебательными уровнями энергии $\Delta E_{\text{кол}}$, которые, в свою очередь, меньше расстояний между электронными уровнями $\Delta E_{\text{эл}}$. Структура энергетических уровней молекул определяет их спектры.

Молекулярные спектры при наблюдении в прибор средней разрешающей силы представляются состоящими из полос. В соответствии с этим спектры молекул носят название полосатых. В зависимости от того, изменение каких видов энергии (электронной, колебательной или вращательной) обуславливает испускание молекулой фотона, различают три вида полос: 1) вращательные; 2) колебательно-вращательные и 3) электронно-колебательные.

Мы ограничимся рассмотрением вращательных и колебательно-вращательных спектров двухатомных молекул.

Начнём с вращательных спектров. Энергия молекулы, имеющей момент инерции J и вращающейся с угловой скоростью ω , равна

$$E_{\text{вращ}} = \frac{J\omega^2}{2} = \frac{J^2\omega^2}{2J} = \frac{L^2}{2J},$$

где $L = J\omega$ – момент импульса молекулы.

Как известно, момент импульса может принимать лишь дискретные значения:

$$L = \sqrt{j(j+1)}\hbar,$$

где $j = 0, 1, 2, 3, \dots$ – квантовое число момента импульса.

Следовательно, вращательная энергия молекулы может иметь только квантованные значения:

$$E_{\text{вращ}} = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2J}, \quad (4.4)$$

где J – момент инерции молекулы относительно оси, проходящей через её центр инерции.

Для вращательного квантового числа имеется правило отбора:

$$\Delta j = \pm 1. \quad (4.5)$$

Поэтому частоты линий, испускаемых при переходах между вращательными уровнями, могут иметь значения:

$$\omega = \frac{\Delta E_{\text{вращ}}}{\hbar} = B[(j+1)(j+2) - j(j+1)] = 2B(j+1) = \omega(j+1),$$

где
$$B = \frac{\hbar}{2J}. \quad (4.6)$$

На рис. 17 *a* показана схема возникновения вращательной полосы. Вращательный спектр состоит из ряда равноотстоящих линий, расположенных в очень далёкой инфракрасной области. Измерив расстояние между линиями $\Delta\omega = \omega_1$, можно определить константу (4.6) и найти момент инерции молекулы. Затем, зная массы ядер, можно вычислить равновесное расстояние между ними R_0 в двухатомной молекуле.

Например, для молекулы HCl $J = 2,71 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2$, что соответствует $R_0 = 1,29 \text{ \AA}$.

Теперь рассмотрим колебательно-вращательные полосы. Можно полагать, что ядра колеблются как квантовый гармонический осциллятор. Его энергия определяется выражением

$$E_{\text{кол}} = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (\nu = 0, 1, 2, \dots), \quad (4.7)$$

где ν – колебательное квантовое число; ω – классическая частота осциллятора. Для колебательного квантового числа имеется правило отбора

$$\Delta \nu = \pm 1. \quad (4.8)$$

Кривая потенциальной энергии молекулы (см. рис. 17 б) совпадает с параболой только при малых колебаниях. Аногармоничность (отклонения от гармоничности), наступающая при увеличении интенсивности колебаний, приводит к тому, что с увеличением квантового числа ν уровни сгущаются, имея своим пределом энергию E_0 диссоциированной молекулы. Однако при небольших значениях ν можно с достаточной степенью точности считать, что колебательная энергия молекулы определяется формулой (4.7).

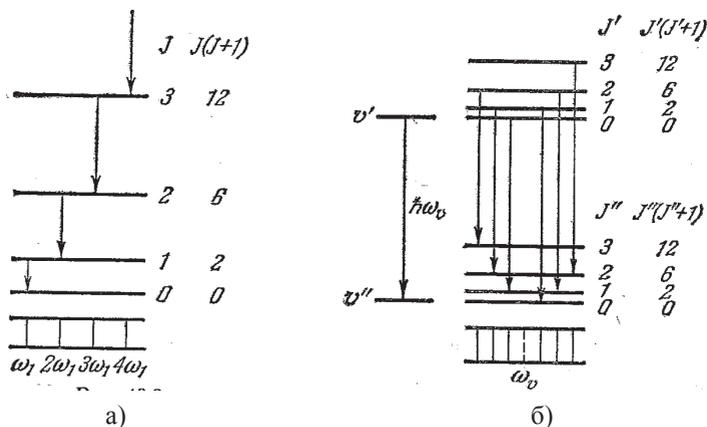


Рис. 17

При излучении фотонов колебательно-вращательной полосы изменяются также колебательная и вращательная энергии молекулы. С учётом этого энергия излучаемого фотона будет равна

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= \Delta E_{\text{кол}} + \Delta E_{\text{вращ}} = \left(\nu' + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \\ &- \left(\nu'' + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \frac{\hbar^2 j' (j' + 1)}{2J} - \frac{\hbar^2 j'' (j'' + 1)}{2J} \end{aligned}$$

Поскольку $\Delta E_{\text{кол}} \gg \Delta E_{\text{вращ}}$, испускание фотона может наблюдаться не только при $j' > j''$, но и при $j' < j''$. В случае $j' > j''$ частоты фотонов определяются формулой

$$\begin{aligned} \omega &= \omega_0 + B[(j+1)(j+2) - j(j+1)] = \\ &= \omega_0 + 2B(j+1) = \omega_0 + 2Bk \quad (k = 1, 2, 3, \dots) \end{aligned}$$

Если $j' < j''$, формула для частоты фотонов имеет вид $\omega = \omega_0 + B[(j-1)j - j(j+1)] = \omega_0 - 2Bk \quad (k = 1, 2, 3, \dots)$.

Оба случая можно описать одной формулой:

$$\omega = \omega_0 \pm 2Bk = \omega_0 \pm \omega_1 k \quad (k = 1, 2, 3, \dots). \quad (4.9)$$

Совокупность линий с частотами, определяемыми этой формулой, называется колебательно-вращательной полосой. Область, в которой располагаются колебательно-вращательные полосы, простирается от 8000 до 50000 Å.

В полном соответствии с теорией вращательные и колебательно-вращательные спектры наблюдаются только для несимметричных двухатомных молекул.

Комбинационное рассеяние света. В 1928 г. группой учёных было открыто явление, заключающееся в том, что в спектре рассеяния, возникающем при прохождении света через газы, жидкости или прозрачные кристаллические тела, помимо несмещённой линии, содержатся новые линии, частоты которых ω представляют собой комбинацию

частоты падающего света ω_0 и частот ω_i колебательных или вращательных переходов рассеивающих молекул:

$$\omega = \omega_0 \pm \omega_i. \quad (4.10)$$

Это явление получило название *комбинационного рассеяния света*, а новые линии стали называть спутниками. Каждому «красному» спутнику (т.е. спутнику, смещённому в сторону больших длин волн) с частотой $\omega_0 - \omega_i$ соответствует «фиолетовый» спутник с частотой $\omega_0 + \omega_i$. При обычных температурах интенсивность фиолетовых спутников значительно меньше, чем красных. С повышением температуры интенсивность фиолетовых спутников быстро растёт.

Комбинационное рассеяние света легко объясняется в квантовой теории. Согласно её представлениям, процесс рассеяния света можно рассматривать как неупругое соударение фотонов с молекулами. При соударении фотон может отдать молекуле или получить от неё только такие количества энергии, которые равны разностям двух её энергетических уровней. Если при столкновении с фотоном молекула переходит в состояние с большей энергией, то энергия фотона после рассеяния станет равной $\hbar\omega_0 - \Delta E$, где ΔE – энергия, переданная фотоном молекуле. Соответственно частота фотона уменьшится и возникнет красный спутник. Если перед столкновением с фотоном молекула находилась в возбуждённом состоянии (с бóльшей энергией), то она может при столкновении с фотоном перейти в состояние с меньшей энергией, отдав избыток энергии ΔE фотону. В результате энергия фотона станет равной $\hbar\omega_0 + \Delta E$ и возникает фиолетовый спутник.

Рассеяние фотона $\hbar\omega_0$ может сопровождаться переходами молекулы между различными вращательными или колебательными уровнями. В итоге возникает ряд симметрично расположенных спутников.

При обычных температурах число молекул, находящихся в основном состоянии, намного превосходит число молекул, находящихся в возбуждённых состояниях. Поэтому столкновения, сопровождающиеся уменьшением энергии молекулы, происходят гораздо реже, чем переходы, сопровождающиеся увеличением энергии. Этим объясняется малая интенсивность фиолетовых спутников по сравнению с красными. При повышении температуры число возбуждённых молекул быстро растёт, что приводит к увеличению интенсивности фиолетовых спутников.

5. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

Задача 1. Чему равна длина волны де Бройля для электрона с энергией 10 эВ?

Решение

Длина волны де Бройля определяется по формуле

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (1)$$

При столь низкой энергии электрона можно без заметной ошибки пользоваться формулами классической механики. Тогда кинетическая энергия электрона

$$E_k = \frac{p^2}{2m}, \quad (2)$$

откуда импульс электрона

$$p = \sqrt{2mE_k}. \quad (3)$$

Подставляя (3) в (1), получим:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 3,86 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 3,86 \text{ \AA}$$

Задача 2. Электронный пучок ускоряется в электронно-лучевой трубке разностью потенциалов $U = 0,5$ кВ. Принимая, что неопределённость импульса равна 0,1% от его

числового значения, определить неопределенность координаты электрона. Является ли в данных условиях электрон квантовой или классической частицей?

Решение

Согласно соотношению неопределенностей:

$$\Delta x \cdot \Delta P_x \geq \hbar / 2, \quad (1)$$

где Δx – неопределённость координаты электрона; $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж · с – постоянная Планка.

$$E_k = |e^-|U = 500 = 0,5 \text{ кэВ} \ll 0,511 \text{ МэВ} \quad (m_0 = 0,511 \text{ МэВ}),$$

т.е. электрон в данных условиях является нерелятивистской частицей. Поэтому импульс электрона

$$p = \sqrt{2mE_k} = \sqrt{2m|e^-|U} = 1,24 \cdot 10^{-23} \text{ кг} \cdot \text{м/с},$$

Согласно условию,

$$\Delta p = 0,001 \cdot p_x = 1,24 \cdot 10^{-23} \cdot 10^{-3} = 1,24 \cdot 10^{-26} \text{ кг} \cdot \text{м/с}, \quad \text{т.е.}$$

$\Delta p_x \ll p_x$, и электрон при данных условиях является классической частицей. Из (1) следует:

$$\Delta x = \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = 26,7 \text{ нм}.$$

Задача 3. Частица массой m с энергией E налетает на прямоугольный бесконечный барьер с энергией $U > E$ (рис. 18). Найти эффективную глубину проникновения частицы под барьер, т.е. в область $x > 0$ ($x_{\text{эфф}}$ – расстояние от границы барьера до точки, где плотность вероятности местонахождения частицы уменьшится в e раз).

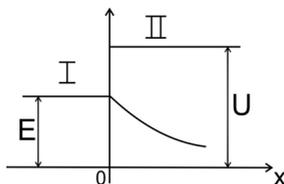


Рис. 18

Решение

Из условия задачи
$$\frac{|\psi_2|_0|^2}{|\psi_2|_{x_{\text{эфф}}}|^2} = e. \quad (1)$$

Найдём вид ψ^2 . Уравнение Шрёдингера для области II запишется в виде:

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

Обозначим $\frac{2m}{\hbar^2}(E - U) = k_2$. Во второй области k_2 – мнимое, т.е. $k_2 = ik$, где $k = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E)$. С учётом этого решение уравнения (1) можно записать в виде: $\psi_2 = B_2 e^{-ik_2 x} = B_2 e^{-kx}$. Подставляя это значение в (1), получим: $\frac{B_2^2}{B_2^2 e^{-2k_2 x x_{\text{эфф}}}} = e$, откуда $x_{\text{эфф}} = \frac{1}{2k} = \frac{1}{\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}}$, т.е. чем больше масса, тем меньше глубина проникновения. Пусть имеем электрон $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг. Рассчитаем $x_{\text{эфф}}$, когда $U - E = 1$ эВ. Сделаем то же самое для протона $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$ кг:

$$x_{\text{эфф}} = \frac{1}{\frac{2}{1,05 \cdot 10^{-34}} \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 10^{-10} \text{ м} = 1 \text{ \AA};$$

$$x_{\text{эфф}} = \frac{1}{\frac{2}{1,05 \cdot 10^{-34}} \sqrt{2 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 10^{-12} \text{ м} = 10^{-2} \text{ \AA}.$$

Из расчёта следует:

1. Поскольку размер атома порядка 1 \AA , то электрон может туннелировать из атома, а протон – практически нет.

2. Размер ядра $10^{-14} - 10^{-15}$ м, поэтому протон может туннелировать из ядра.

Задача 4. Функция $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{\pi x}{\ell}$ описывает основное состояние частицы в бесконечно глубоком потенциальном ящике шириной ℓ . Вычислить вероятность нахождения частицы в малом интервале $\Delta\ell = 0,01\ell$ в двух случаях

(рис. 19):

1. Вблизи стенки ($0 \leq x \leq \Delta\ell$).
2. В средней части ящика ($\frac{\ell}{2} - \frac{\Delta\ell}{2} \leq x \leq \frac{\ell}{2} + \frac{\Delta\ell}{2}$).

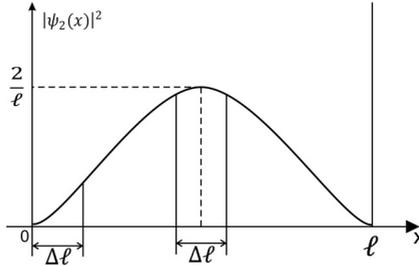


Рис. 19

Решение

По определению $dp = |\psi(x)|^2 dx$. Имеем:
 $p = \frac{2}{\ell} \int_0^{0,01\ell} \sin \frac{2\pi}{\ell} x dx$. В данном случае $\sin \frac{2\pi}{\ell} x \approx \left(\frac{\pi}{\ell} x\right)^2$. Тогда
 $p = \frac{2}{\ell} \int_0^{0,01\ell} \left(\frac{\pi}{\ell} x\right)^2 dx = \frac{2\pi^2}{\ell^3} \int_0^{0,01\ell} x^3 = \frac{2}{3} \pi^2 \cdot 10^{-6} = 6,6 \cdot 10^{-6}$.

Диапазон $\Delta\ell$ лежит вблизи \max , поэтому можно полагать $|\psi(x)|^2 = \text{const}$, тогда:

$$p = \left| \psi \left(\frac{\ell}{2} \right) \right|^2 \Delta\ell = \frac{2}{\ell} \left(\sin \frac{\pi}{\ell} \cdot \frac{\ell}{2} \right)^2 \Delta\ell = \frac{2}{\ell} \cdot 1 \cdot 0,01\ell = 0,02.$$

Задача 5. Атом испустил фотон с длиной волны $\lambda = 5500 \text{ \AA}$. Продолжительность излучения 10^{-8} с . Определить наименьшую погрешность, с которой может быть измерена длина волны излучения.

Решение

Энергия фотона $E = \hbar\omega = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}$. Возьмем производную по λ

$$dE = -2\pi\hbar c \frac{d\lambda}{\lambda^2} \quad \text{или} \quad \Delta E = -\frac{2\pi\hbar c \Delta\lambda}{\lambda^2},$$

откуда:

$$\Delta\lambda = \frac{(\Delta E)\lambda^2}{2\pi\hbar c}. \quad (1)$$

Соотношение неопределенностей Гейзенберга для энергии и времени:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \text{ откуда } \Delta E = \frac{\hbar}{2\Delta t}. \quad (2)$$

Подставляя (2) в (1), получим:

$$\Delta\lambda = \frac{\hbar}{2\Delta t} \cdot \frac{\lambda^2}{2\pi\hbar c} = \frac{\lambda^2}{4\Delta t\pi c} = \frac{5,5^2 \cdot 10^{-14}}{4 \cdot 10^{-8} \cdot 3,14 \cdot 3 \cdot 10^8} = 10^{-14} \text{ м.}$$

Задача 6. Электрон находится в одномерном бесконечно глубоком прямоугольном потенциальном ящике шириной ℓ . Вычислить вероятность того, что электрон, находясь в возбужденном состоянии ($n = 2$), будет находиться в средней трети ящика (рис. 20).

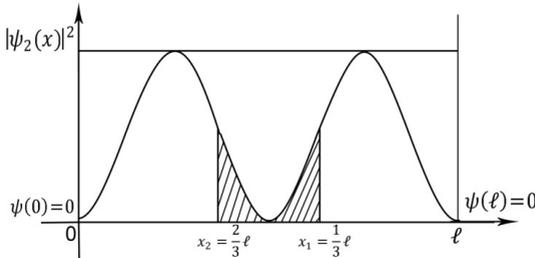


Рис. 20

Решение

По определению вероятность P обнаружить частицу в интервале $x_1 < x < x_2$ определяется равенством

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx, \quad (1)$$

где $\psi_n(x)$ – нормированная собственная ψ -функция, отвечающая данному состоянию.

В нашем случае $n = 2$, тогда:

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{2\pi}{l} x. \quad (2)$$

Поставив (2) в (1), получим:

$$P = \frac{2}{l} \int_{x_1}^{x_2} \sin^2 \frac{2\pi}{l} x dx; \quad (3)$$

$$x_1 = \frac{1}{3}l, \quad x_2 = \frac{2}{3}l.$$

Заменяя в (3) $2 \sin^2 \frac{2\pi}{l} \cdot x = 1 - \cos \frac{4\pi}{l} \cdot x$, возьмем интеграл:

$$P = \frac{1}{l} \left(\int_{l/3}^{2l/3} dx - \int_{l/3}^{2l/3} \cos \frac{4\pi}{l} x dx \right) = \frac{1}{l} \left(\frac{l}{3} - \frac{l}{4\pi} \sin \frac{4\pi}{l} x \Big|_{l/3}^{2l/3} \right) = \quad (4)$$

$$= \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi} \left(\sin \frac{8}{3}\pi - \sin \frac{4}{3}\pi \right) = \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi} \cdot 2 \cdot \sin \frac{\pi}{3} = 0,195.$$

Задача 7. Граничная длина волны K -серии характеристического рентгеновского излучения некоторого элемента равна 0,1284 нм. Определить этот элемент.

Решение

По закону Мозли:

$$\frac{c}{\lambda} = R (Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

Фотон с граничной длиной волны в K -серии излучается при переходе с уровня $n = \infty$ на уровень $m = 1$. Постоянная экранирования в этом случае $\sigma = 1$. Тогда

$$(Z - \sigma)^2 = \frac{c}{\lambda R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)} = \frac{c}{\lambda R};$$

$$Z = \sqrt{\frac{c}{\lambda R}} + \sigma = \sqrt{\frac{3 \cdot 10^8}{0,1284 \cdot 10^{-9} \cdot 3,29 \cdot 10^{15}}} + 1 = 26,6 + 1 \approx 27.$$

Этим элементом является *кобальт*.

Задача 8. Определить минимальную длину волны тормозного рентгеновского излучения, если к рентгеновской трубке приложены напряжения 30 кВ, 75 кВ.

Решение

Коротковолновая граница сплошного рентгеновского спектра определяется по формуле $\lambda = \frac{hc}{eU}$. Тогда

$$\lambda_1 = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 3 \cdot 10^4} = 4,1 \cdot 10^{-11} \text{ м};$$

$$\lambda_2 = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 7,5 \cdot 10^4} = 1,66 \cdot 10^{-11} \text{ м}.$$

Задача 9. При каком наименьшем напряжении на рентгеновской трубке с железным антикатодом ($Z = 26$) появляются линии K -серии?

Решение

K -линии появляются при переходе электрона со второго энергетического уровня на первый. Найдём длину волны этой линии по формуле Мозли:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= R'(Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\kappa^2} \right); \\ \lambda &= \frac{1}{R'(Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\kappa^2} \right)} = \\ &= \frac{1}{1,097 \cdot 10^{-7} (26 - 1)^2 \left(1 - \frac{1}{4} \right)} = 1,94 \cdot 10^{-10} \text{ м}. \end{aligned}$$

Линия с таким значением λ может появиться, если энергия бомбардирующего электрона $E = eU$ будет не меньше энергии кванта $E = \frac{hc}{\lambda}$. Приравняв эти выражения, получим:

$$eU = \frac{hc}{\lambda}, \text{ откуда } U = \frac{hc}{e\lambda};$$

$$U = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 1,94 \cdot 10^{-10}} = 6408 \text{ В.}$$

Задача 10. В эксперименте измерены энергии перехода между тремя последовательными уровнями энергии вращательной полосы двухатомной молекулы (рис. 21). Найти квантовые числа j этих уровней и момент инерции J молекулы.

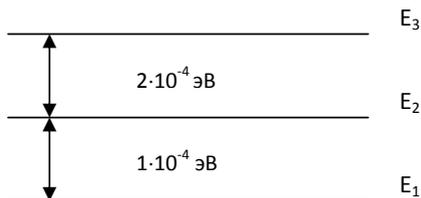


Рис. 21

Решение

Вращательные энергии молекул определим по формуле $E_r = \frac{\hbar^2}{2J} j(j+1)$. Для каждого из трёх уровней запишем:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2J} j(j+1);$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2J} (j+1)(j+2); \quad (1)$$

$$E_3 = \frac{\hbar^2}{2J} (j+2)(j+3).$$

Из (1) найдём разность энергий между двумя уровнями:

$$\Delta E_{12} = E_2 - E_1 = \frac{\hbar^2}{2J} (J+1) = 10^{-4} \text{ эВ};$$

$$\Delta E_{23} = E_3 - E_2 = \frac{\hbar^2}{2J} (J+2) = 2 \cdot 10^{-4} \text{ эВ.} \quad (2)$$

Отношение $\frac{\Delta E_{23}}{\Delta E_{12}} = \frac{J+2}{J+1} = \frac{2 \cdot 10^{-4}}{1 \cdot 10^{-4}} = 2$.

Следовательно, $J = 0$, и указанным трём уровням соответствуют $J = 0, J = 1, J = 2$.

Момент инерции определим из (2):

$$I = \frac{\hbar^2 (J + 1)}{\Delta E_{12}} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2 \cdot 1}{1 \cdot 10^{-4} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 7 \cdot 10^{-46} \text{ кг} \cdot \text{м}^2.$$

Задача 11. Определить для молекулы HCl вращательные квантовые числа для соседних уровней, разность энергий которых $\Delta E = 5,21 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$, а межъядерное расстояние $d = 127,5 \text{ нм}$.

Решение

Вращательные энергии молекул могут принимать только дискретные значения, равные

$$E_r = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2J}, \quad (1)$$

где j – вращательное квантовое число ($j = 0, 1, 2, \dots$); J – момент инерции молекулы относительно оси, проходящей через центр инерции.

Используя (1), найдём разность энергий между двумя уровнями $(j+1)$ и j :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 (J+2)(j+1)}{2I} - \frac{\hbar^2 J(j+1)}{2I} = \frac{\hbar^2 (J+1)}{2I}. \quad (2)$$

Момент инерции молекулы HCl равен

$$I = m_{\text{прив}} \cdot d^2, \quad (3)$$

где $m_{\text{прив}}$ – приведённая масса, равная

$$m_{\text{прив}} = \frac{m_{\text{H}} \cdot m_{\text{Cl}}}{m_{\text{H}} + m_{\text{Cl}}} = \frac{35,5 \cdot m_{\text{H}}^2}{36,5 \cdot m_{\text{H}}} = \frac{35,5}{36,5} m_{\text{H}}. \quad (4)$$

$$m_{\text{H}} = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$$

Из формул (2), (3) и (4) получим:

$$(J + 1) = \frac{\Delta E \cdot 35,5 m_H \cdot d^2}{\hbar^2 \cdot 36,5} =$$

$$= \frac{5,21 \cdot 10^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 35,5 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot (127,5 \cdot 10^{-12})^2}{(1,05 \cdot 10^{-34})^2 \cdot 36,5} = 2$$

Таким образом, $J + 1 = 2$, а $J = 1$.

Задача 12. Электрон в атоме находится в d -состоянии. Определить: 1) момент импульса электрона; 2) максимальное значение проекции момента импульса электрона на направление внешнего магнитного поля.

Решение

d -состояние электрона характеризуется орбитальным квантовым числом $\ell = 2$, а момент импульса электрона

$$\alpha = \hbar \sqrt{\ell(\ell + 1)}, \quad (1)$$

где $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж · с – постоянная Планка.

Проекция момента импульса на направление внешнего магнитного поля

$$\alpha_z = \hbar m, \quad (2)$$

где $m = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell$ – магнитное квантовое число. Выражение (2) максимально при $m = m_{\max} = 2$.

Подставляя числа в (1) и (2), получим:

$$\alpha = 2,45\hbar; \quad \alpha_{z_{\max}} = 2\hbar.$$

6. ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

Вариант 1

1. Электрон прошёл ускоряющую разность потенциалов U . Найти длину волны де Бройля для случаев $U = 51$ В; $U = 510$ кВ.

2. Кинетическая энергия электрона в атоме водорода порядка 10 эВ. Используя соотношение неопределённостей, оценить минимальные линейные размеры атома.
3. Положение свободного электрона определено оптическим методом с точностью до 10^{-4} см. Чему равна неопределённость в определении его скорости?
4. Вычислить дебройлевские длины волн электрона, протона и атома урана, если известно, что их кинетические энергии одинаковы и равны 100 эВ.
5. Вычислить с помощью закона Мозли:
 - а) длину волны линии K_α для алюминия и кобальта;
 - б) разность энергий связи K - и L - электронов ванадия.
6. Определить напряжение на рентгеновской трубке с никелевым антикатодом, если разность длин волн между K_α - линией и коротковолновой границей сплошного спектра $8,4 \cdot 10^{-11}$ м.
7. Электрон находится в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (рис. 2). Ширина ямы 1 нм. Определить наименьшую разность энергетических уровней электрона.
8. Найти граничную длину волны K -серии рентгеновского излучения от платинового катода.

Вариант 2

1. При каком наименьшем напряжении на рентгеновской трубке с железным антикатодом появляются линии K -серии?
2. Определить минимальную длину волны тормозного рентгеновского излучения, если к рентгеновской трубке приложены напряжения 30 кВ, 75 кВ.
3. Вычислить для молекулы HF число вращательных уровней, расположенных между нулевым и первым возбуждёнными колебательными уровнями. Собственная частота колебаний этой молекулы равна $7,79 \cdot 10^{14}$ рад/с, расстояние между ядрами $0,917 \cdot 10^{-8}$ см.

4. Найти собственную частоту колебаний и коэффициент квазиупругой силы молекулы S_2 , если известно, что в колебательном спектре комбинационного рассеяния света длины волн красного и фиолетового спутников, ближайших к несмещенной линии, равны 346,6 нм и 330 нм.
5. Частица массы m движется в одномерной потенциальном поле $U = kx^2 / 2$ (гармонический осциллятор). Оценить с помощью соотношения неопределённостей минимально возможную энергию частицы в таком поле.
6. Какую энергию необходимо дополнительно сообщить электрону, чтобы его дебройлевская длина волны уменьшилась от 0,1 до 0,05 нм.
7. Оценить с помощью соотношения неопределённостей минимальную кинетическую энергию электрона, движущегося в области, размер которой $\ell \approx 0,1$ нм.
8. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной ℓ на втором энергетическом уровне. В каких точках ямы плотность вероятности обнаружения частицы совпадает с классической плотностью вероятности?

Вариант 3

1. Определить длину волны де Бройля электрона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов 700 кВ.
2. Электрон в одномерной прямоугольной «потенциальной яме» шириной $\ell = 200$ пм с бесконечно высокими стенками находится в возбуждённом состоянии ($n = 4$). Определить: 1) минимальную энергию электрона; 2) вероятность P обнаружения электрона в первой части «ямы».
3. Протон движется в однородном магнитном поле с индукцией $B = 15$ мТл по окружности радиусом $R = 1,4$ м. Определить длину волны де Бройля для протона.
4. Определить отношение неопределённостей скорости

электрона, если его координата установлена с точностью 10^{-5} м, и пылинки массой 10^{-12} кг, если её координата установлена с такой же точностью.

5. Объяснить физический смысл соотношения неопределённости для энергии E и времени t : $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar / 2$.
6. Записать уравнение Шредингера для стационарных состояний свободной частицы, движущейся вдоль оси x , определить собственные энергии. Что можно сказать об энергетическом спектре свободной частицы?
7. Электрон с энергией $E = 5$ эВ движется в положительном направлении оси x , встречая на своём пути прямоугольный потенциальный барьер высотой $U = 10$ эВ и шириной $\ell = 0,1$ нм. Определить коэффициент прозрачности D потенциального барьера.
8. Определить длину волны коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра, если скорость v электронов, бомбардирующих анод рентгеновской трубки, составляет $0,8 c$.

Вариант 4

1. В атоме вольфрама электрон перешёл с M -оболочки на L -оболочку. Принимая постоянную экранирования $\sigma = 5,63$, определить энергию испущенного фотона.
2. Определить в периодической системе элементов порядковый номер элемента, у которого в основном состоянии заполнены K -, L -, M - оболочки, а также $4s$ -подоболочка.
3. Определить наименьшую длину волны рентгеновского излучения, рентгеновская трубка работает при напряжении $U = 150$ кВ.
4. Прямоугольный потенциальный барьер имеет ширину $\ell = 0,1$ нм. Определить в электронвольтах разность энергий $U - E$, при которой вероятность прохождения электрона сквозь барьер составит $0,5$.
5. Частица в одномерной прямоугольной «потенциальной

- яме» шириной ℓ с бесконечно высокими стенками находится в возбуждённом состоянии ($n = 2$). Определить вероятность обнаружения частицы в области $3/8 \ell < x < 5/8 \ell$.
6. Выведите связь между длиной круговой электронной орбиты и длиной волны де Бройля.
 7. Определить длину волны де Бройля для нейтрона, движущегося со средней квадратичной скоростью при $T = 280$ К.
 8. Электронный пучок ускоряется в электроннолучевой трубке разностью потенциалов $U = 0,5$ кВ. Принимая, что неопределённость импульса равна 0,1% от его числового значения, определить неопределённость координаты электрона. Является ли в данных условиях электрон квантовой или классической частицей?

Вариант 5

1. К электродам рентгеновской трубки приложена разность потенциалов 60 кВ. Наименьшая длина волны рентгеновских лучей, получаемых от этой трубки, равна 19,4 пм. Найти постоянную Планка.
2. При переходе электрона в атоме с L -слоя на K -слой испускаются рентгеновские лучи с длиной волны 78,8 пм. Какой это атом?
3. Определить при какой температуре дискретность электрона, находящегося в одномерной потенциальной яме шириной $2 \cdot 10^{-9}$ м, становится сравнимой с энергией теплового движения.
4. Частица в потенциальной яме шириной ℓ находится в возбуждённом состоянии. Определить вероятность нахождения частицы в интервале $0 < x < \ell/2$ на третьем энергетическом уровне.
5. Среднее время жизни атома в возбуждённом состоянии

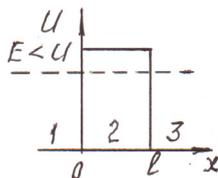
равно 12 нс. Вычислить минимальную неопределённость длины волны $\lambda = 12$ мкм излучения при переходе атома в основное состояние.

6. Сравнить длины волн электрона и протона, прошедших ускоряющую разность потенциалов $U = 1000$ В.
7. При каком значении кинетической энергии дебройлевская длина волны электрона равна его комптоновской длине волны?
8. Записать символически основное состояние атома хлора.

Вариант 6

1. Кинетическая энергия протона в четыре раза меньше его энергии покоя. Вычислить дебройлевскую длину волны протона.
2. Определить кинетическую энергию протона и электрона, для которых длина волны де Бройля равна 0,06 нм.
3. Электронный пучок формируется электронной пушкой при разности потенциалов $U = 200$ В. Определить, можно ли одновременно измерить траекторию электрона с точностью до 100 пм и его скорость с точностью до 10%.
4. Объяснить, почему волновая функция должна быть конечной, однозначной и непрерывной.
5. Электрон движется в атоме водорода по первой боровской орбите. Принимая, что допускаемая неопределённость скорости составляет 10% от её числового значения, определить неопределённость координаты электрона. Применимо ли в данном случае для электрона понятие траектории?
6. Учитывая принцип Паули, найти максимальное число электронов, находящихся в состояниях, определяемых главным квантовым числом.
7. Электронная конфигурация некоторого элемента $1s^2 2s^2 2p^6 3d^{10} 4s$. Определить, что это за элемент.
8. Частица с энергией E движется в положительном направ-

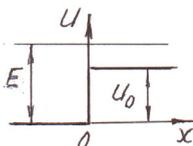
лении оси x и встречает на своём пути прямоугольный потенциальный барьер высотой U и конечной шириной ℓ , причём $E < U$. Может ли частица проникнуть в область 3? Результат обосновать.



Вариант 7

1. Найти собственную частоту колебаний и коэффициент квазиупругой силы молекулы S_2 , если известно, что в колебательном спектре комбинационного рассеяния света длины волн красного и фиолетового спутников, ближайших к несмещенной линии, равны 346,6 нм и 330 нм.
2. У какого металла в спектре поглощения разность частот K - и L - краёв поглощения рентгеновских лучей составляет $\Delta\omega = 6,85 \cdot 10^{18}$ рад/с?

3. Частица с массой m и энергией E движутся в потенциальном поле $U(x)$, показанном на рисунке, в положительном направлении оси x . Найти:



- а) коэффициент отражения этого барьера для случая $E > U_0$;
 - б) эффективную глубину проникновения частиц под барьер, т.е. в область $x > 0$, если $E < U_0$ ($x_{эф}$ – расстояние от границы барьера до точки, где плотность вероятности местонахождения частицы уменьшается в e раз).
4. Среднее время жизни π^0 – мезона равно $1,9 \cdot 10^{-16}$ с. Какова должна быть энергетическая разрешающая способность прибора, с помощью которого можно зарегистрировать π^0 – мезон?
 5. Электрон находится в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, ширина которой $1,4 \cdot 10^{-9}$ м. Определить энергию, излучаемую при переходе электрона с третьего энергетического уровня на второй.

6. Две частицы, электрон и протон, с одинаковой энергией $E = 5 \text{ эВ}$, движутся в положительном направлении оси x , встречая на своём пути прямоугольный потенциальный барьер высотой 10 эВ и шириной $\ell = 1 \text{ пм}$. Определить отношение вероятностей прохождения частицей этого барьера.
7. Определить длину волны де Бройля для протона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов 1000 В .
8. Применяя соотношение неопределённостей, показать, что для движущейся частицы, неопределённость координаты которой равна длине волны де Бройля, неопределённость скорости равна по порядку величины самой скорости частицы.

Вариант 8

1. Используя соотношение неопределённостей в форме $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar / 2$, оценить минимально возможную полную энергию электрона в атоме водорода. Принять неопределённость координаты равной радиусу атома.
2. Объяснить, почему физический смысл имеет не сама ψ - функция, а квадрат её модуля $|\psi|^2$.
3. Протон с энергией $E = 5 \text{ эВ}$ движется в положительном направлении оси x , встечая на своём пути прямоугольный потенциальный барьер высотой $U = 10 \text{ эВ}$ и шириной $\ell = 0,1 \text{ нм}$. Определить вероятность прохождения протоном этого барьера.
4. Объяснить физический смысл существования энергии нулевых колебаний для квантового осциллятора.
5. Определить длину волны де Бройля для электрона, находящегося в атоме на третьей боровской орбите.
6. Кинетическая энергия электрона равна $0,6 \text{ МэВ}$. Определить длину волны де Бройля.
7. Атом испустил фотон с длиной волны $0,55 \text{ мкм}$. Продолжительность излучения 10 нс . Определить наимень-

шую погрешность, с которой может быть измерена длина волны излучения.

8. Определить, при какой ширине одномерной потенциальной ямы дискретность энергии электрона становится сравнимой с энергией теплового движения при температуре 300 К.

Вариант 9

1. Сравнить длины волн электрона и протона, прошедших ускоряющую разность потенциалов $U = 1000$ В.
2. Вычислить длину волны де Бройля электрона, движущегося со скоростью $0,75c$ (c – скорость света в вакууме).
3. Среднее время жизни возбуждённых состояний атома составляет 10 нс. Вычислить собственную ширину спектральной линии ($\lambda = 0,7$ мкм), соответствующую переходу между возбуждёнными уровнями атома.
4. Определить ширину одномерной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками, если при переходе электрона с третьего энергетического уровня на второй излучается энергия 1 эВ.
5. Определить, во сколько раз орбитальный момент импульса L -электрона, находящегося в f -состоянии, больше, чем для электрона в p -состоянии.
6. Пользуясь периодической системой элементов, записать символически электронную конфигурацию следующих атомов в основном состоянии: 1) неона; 2) аргона; 3) криптона.
7. Частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной ℓ с бесконечно высокими стенками. Вывести выражение для собственных значений энергии.
8. Определить длину волны коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра, если при увеличении напряжения на рентгеновской трубке в 2 раза она изменилась на 50 пм.

Вариант 10

1. Показать, что интервалы частот между соседними спектральными линиями чисто вращательного спектра двухатомной молекулы имеют одинаковую величину. Найти момент инерции и расстояние между ядрами молекулы CN , если интервалы между соседними линиями чисто вращательного спектра этих молекул $\Delta\omega = 5,47 \cdot 10^{12}$ рад/с.
2. При увеличении напряжения на рентгеновской трубке от $U_1 = 10$ кВ до $U_2 = 20$ кВ интервал длин волн между K_α -линией и коротковолновой границей увеличился в 3 раза. Определить порядковый номер элемента антикатаода этой трубки.
3. Частица находится в основном состоянии в прямоугольной потенциальной яме шириной ℓ с абсолютно непроницаемыми стенками ($0 < x < \ell$). Найти вероятность местонахождения этой частицы в области $\ell/3 < x < 2\ell/3$.
4. Оценить с помощью соотношения неопределённостей минимально возможную энергию электрона в атоме водорода и соответствующее расстояние его от ядра.
5. Оценить наименьшие ошибки, с которыми можно определить скорость электрона, протона и шарика массой 1 мг, если координаты частиц и центра шарика установлены с неопределённостью 1 мкм.
6. Записать квантовые числа, определяющие валентный электрон атома натрия в основном состоянии.
7. Определить импульс и энергию: 1) рентгеновского фотона; 2) электрона, если длина волны того и другого равна 10^{-10} м.
8. Пользуясь Периодической системой элементов, записать символически электронную конфигурацию атома меди в основном состоянии.

Вариант 11

1. Электронная конфигурация некоторого элемента $1s^2 2s^2 2p^6 3d^{10} 4s$. Определить, что это за элемент.
2. Электрон прошёл ускоряющую разность потенциалов U . Найти длину волны де Бройля для случаев: $U = 51 \text{ В}$; $U = 510 \text{ В}$.
3. Протон обладает кинетической энергией, равной энергии покоя. Во сколько раз изменится длина волны де Бройля протона, если его кинетическая энергия увеличится в 2 раза?
4. Кинетическая энергия электрона в атоме водорода порядка 10 эВ . Используя соотношение неопределённостей, оценить минимальные линейные размеры атома.
5. Определить ширину одномерной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками, если при переходе электрона с третьего энергетического уровня на второй излучается энергия 1 эВ .
6. Найти граничную длину волны волны K -серии рентгеновского излучения от платинового антикатаода.
7. Какую наименьшую разность потенциалов нужно приложить к рентгеновской трубке с вольфрамовым антикатодом, чтобы в спектре излучения были все линии K -серии?
8. Частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной ℓ с бесконечно высокими стенками. Записать уравнение Шредингера в пределах ямы $0 \leq x \leq \ell$ и решить его.

Вариант 12

1. Определить длину волны де Бройля электрона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов 900 кВ .
2. Заряженная частица, ускоренная разностью потенциалов $U = 500 \text{ В}$ имеет длину волны де Бройля $\lambda = 1,282 \text{ пм}$. Принимая заряд этой частицы равным заряду электрона,

определить её массу.

3. Принимая, что электрон находится внутри атома диаметром 0,3 нм, определить (в электронвольтах) неопределённость энергии этого электрона.
4. Объяснить физический смысл соотношения неопределённости для энергии E и времени t : $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar / 2$.
5. Волновая функция, описывающая состояние частицы в одномерном прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, имеет вид $\psi(x) = A \sin kx$. Определить: 1) вид собственной функции $\psi_n(x)$; 2) коэффициент A , исходя из условий нормировки вероятностей.
6. Частица с энергией $E = 50$ эВ, двигаясь в положительном направлении оси x , встречает на своём пути бесконечно широкий прямоугольный потенциальный барьер высотой 20 эВ. Определить вероятность отражения электрона от этого барьера.
7. При каком наименьшем напряжении на рентгеновской трубке с железным антикатодом появляются линии K -серии?
8. Показать, что для частицы, неопределённость местоположения которой $\Delta x = \frac{\lambda}{2\pi}$, где λ – дебройлевская длина волны, неопределённость её скорости равна по порядку величины самой скорости частицы.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Арцимович Л. А.* Что каждый физик должен знать о плазме. – М.: Атомиздат, 1976. – 112 с.
2. *Вайнберг С.* Первые три минуты. Современный взгляд на происхождение Вселенной: пер. с англ./под ред. Я. Б. Зельдовича. – М.: Энергоиздат, 1991. – 208 с.
3. *Гарднер М.* Этот правый, левый мир: пер. с англ. – Изд. 2-е. – М.: Мир, 1967. – 268 с.
4. *Детлаф А. А.*, Курс физики / А. А. Детлаф, Б. М. Яворский. – М.: Высш. шк., 1989. – 607 с.
5. *Дирак П. А. М.* Пути физики: пер. с англ. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 88 с.
6. *Мухин К. Н.* Экспериментальная ядерная физика: в 2 т. Изд. 4-е. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – Т. 1. – 616 с.; Т. 2. – 376 с.
7. *Орир Дж.* Физика: пер. с англ. – М.: Мир, 1981. – Т. 1, 2. – 622 с.
8. *Окунь А. Б.* Физика элементарных частиц. – М.: Наука, 1984. – 224 с.
9. *Савельев И. В.* Курс общей физики. – М.: Наука, 1982. Т. 3. – 224 с.
10. *Трофимова Т. И.* Курс физики. – М.: Высш. шк., 2003. – 542 с.
11. *Фейнман Р.* Фейнмановские лекции по физике: пер. с англ./Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс – М.: Мир, 1965. – Вып. 1. – 268 с.; вып. 2. – 168 с.; вып. 3. – 238 с.; вып. 4. – 261 с.
12. *Фраунфельдер Г.* Субатомная физика: пер. с англ. / Г. Фраунфельдер, Э. Хэнли. – М.: Мир, 1979. – 736 с.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	3
1. ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ. ПРИНЦИП НЕОПРЕДЕЛЁННОСТИ.....	3
1.1. Гипотеза де Бройля.....	3
1.2. Необычные свойства частиц.....	5
1.3. Принцип неопределённости.....	7
2. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА. ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР.....	9
2.1. Уравнение Шредингера.....	9
2.2. Частица в одномерной прямоугольной «потенциальной яме» с бесконечными стенками.....	10
2.3. Туннельный эффект.....	12
2.4. Гармонический осциллятор.....	17
3. АТОМ ВОДОРОДА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. ПРИНЦИП ПАУЛИ.....	20
3.1. Атом водорода. Спин электрона.....	20
3.2. Принцип Паули. Распределение электронов по энергетическим уровням атома.....	28
4. РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ. МОЛЕКУЛЫ И ИХ СПЕКТРЫ.....	30
4.1. Рентгеновские спектры.....	30
4.2. Молекулы и их спектры.....	33
5. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ.....	39
6. ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ.....	48
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	60

Составители:
Чечуев Владимир Яковлевич
Викулов Станислав Викторович

**РЕПЕТИТОР ПО ФИЗИКЕ.
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА**

Учебное пособие

Редактор *Т. К. Коробкова*
Компьютерная верстка *Е. А. Орлова*

Подписано в печать ___ сентября 2016 г. Формат $60 \times 84 \frac{1}{16}$.
Объем 3,0 уч.-изд. л., 3,9 усл. печ. л. Тираж 100 экз.
Изд. № 34. Заказ № 1644.

Отпечатано в Издательском центре НГАУ «Золотой колос»
630039, Новосибирск, ул. Добролюбова, 160, каб. 106.
Тел. (383) 267–09–10. E-mail: 2134539@mail.ru