

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
Национальный минерально-сырьевой университет «Горный»

Кафедра общей и технической физики

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

*Методические указания к практическим занятиям
для студентов бакалавриата направления подготовки
11.03.04*

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГ
2016**

УДК 530 (073)

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА. Методические указания к практическим занятиям / Национальный минерально-сырьевой университет «Горный» /сост. Ю.И. Кузьмин, Н.С. Пшелко. СПб. 2016. —48 с.

Методические указания разработаны в соответствии с федеральными государственными образовательными стандартами высшего профессионального образования.

Методические указания к практическим занятиям по квантовой механике и статистической физике, включают в себя основные законы и формулы, примеры решения задач, а также задачи для самостоятельного решения по дисциплине «Квантовая механика и статистическая физика). Предназначены для студентов бакалавриата, обучающихся по направлению подготовки 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника» по профилю «Промышленная электроника» Национального минерально-сырьевого университета «Горный».

Табл. 4, Ил.11. Библ.: 7 назв.

Научный редактор: проф. Н.С. Пшелко.

© Национальный минерально-сырьевой университет «Горный», 2016 г.

ВВЕДЕНИЕ

Методические указания охватывают основные законы и формулы, примеры решения задач и задачи по следующим темам дисциплины “Квантовая механика и статистическая физика”: модель атома Бора, волны де Бройля, соотношение неопределенностей Гейзенберга, уравнение Шредингера, потенциальная яма и потенциальный барьер, строение атома, рентгеновские спектры атомов, спектры молекул, статистика квантовых частиц.

Приступая к самостоятельному решению задач по теме первого раздела “Модель атома Бора”, проработайте материал пособия [3], с. 15–27. Выпишите и разберите такие определения как: постулаты Бора, линейчатый спектр атома водорода, постоянная Ридберга, серии Лаймана, Бальмера, Пашена, магнитный момент атома, ларморова частота.

Решая задачи по теме “Волны де Бройля” (раздел 2), проработайте материал пособия [3], с. 6–11. Рассмотрите и усвойте понятия: корпускулярно-волновой дуализм, принцип дополнительности Бора, дифракция электронов.

Для решения задач по теме раздела 3 “Соотношение неопределенностей Гейзенберга” проработайте материал пособия [3], с. 12–15. Усвойте понятия неопределенности координаты, импульса, времени, энергии.

Задачи четвертого раздела относятся к теме “Введение в квантовую механику, уравнение Шредингера”. Проработайте материал пособия [3], с. 28–37. Вы должны изучить стационарное и нестационарное уравнение Шредингера для волновой функции, знать физический смысл квадрата модуля волновой функции, условие нормировки, принцип суперпозиции в квантовой механике.

Задачи пятого раздела относятся к теме “Потенциальная яма и потенциальный барьер”. Проработайте материал пособия [3], с. 37–109. Вам следует усвоить решения уравнения Шредингера для одномерной бесконечной потенциальной ямы и одномерного конечного потенциального барьера. Знать условие квантования энергии, уметь строить спектр разрешенных энергий и собственный волно-

вых функций. Иметь представление о коэффициенте отражения и коэффициенте прозрачности потенциального барьера.

Задачи шестого раздела посвящены теме “Строение атома”. Проработайте материал пособия [3], с.50–57. Следует обратить внимание на отличия кантово-механической модели атома водорода от модели Бора. Усвойте значения четырех квантовых чисел, а также вид радиальной волновой функции атома. Изучите условия квантования орбитального механического и магнитного моментов, а также спинового механического и магнитного моментов. Иметь представление о гиромагнитном отношении и множителе Ланде.

Задачи седьмого раздела посвящены теме “Рентгеновские спектры атомов”. Проработайте материал пособия [1], с.429–431. Иметь представление о сплошном и линейчатом спектрах рентгеновского излучения. Изучите механизм возникновения рентгеновских серий характеристического излучения, закон Мозли.

Задачи восьмого раздела посвящены теме “Спектры молекул”. Проработайте материал пособия [1], с.431–434. Иметь представление об электронных спектрах, колебательных и вращательных спектрах молекул. Изучите механизм комбинационного рассеяния света.

Задачи девятого раздела посвящены теме “Статистика квантовых частиц. Электроны в металле”. Проработайте материал пособия [1], с.441–445. Вам следует усвоить квантовые статистики Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна, знать отличие фермионов от бозонов. Иметь представление об энергии Ферми, параметре вырождения и температуре вырождения.

1.МОДЕЛЬ АТОМА БОРА

ОСНОВНЫЕ ЗАКОНЫ И ФОРМУЛЫ

1.В соответствии с постулатами Бора, электрон в атоме водорода может двигаться лишь по круговым орбитам, для которых его момент импульса удовлетворяет условию: $L = m_e v r = n\hbar$, где m_e — масса электрона; r — радиус орбиты; v – линейная скорость

движения электрона; $\hbar = h/2\pi = 1,0546 \cdot 10^{-34}$ Дж·с; $n = 1, 2, 3$ — целое число.

Радиус орбиты с номером n равен

$$r_1 = (4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2) / (m_e Z e^2),$$

где Ze — заряд ядра атома; e — заряд электрона. При этом энергия электрона зависит от n :

$$E_n = - (m_e e^4 Z^2) / [2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2].$$

2. При переходе электрона с орбиты n_1 на орбиту n_2 ($n_1 > n_2$) излучается фотон, частота которого определяется обобщенной формулой Бальмера

$$\nu_{n_2, n_1} = RZ^2 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right).$$

Здесь $R = (m_e e^4) / [4\pi(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3] = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ — постоянная Ридберга. Длина волны излученного фотона находится из аналогичного соотношения для волнового числа

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{RZ^2}{c} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) = R'Z^2 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right),$$

где $R = 1,09 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$. Экспериментально наблюдаемые спектральные серии определяются числами n_2 : $n_2 = 1$ — серия Лаймана, $n_2 = 2$ — Бальмера, $n_2 = 3$ — Пашена и т.д. Внутри серии линии отличаются числами n_1 .

Движущийся электрон на атомной орбите эквивалентен элементарному току, обладающему магнитным моментом p_m , пропорциональным орбитальному моменту импульса:

$$p_m = eL/2m_e.$$

При попадании атома во внешнее магнитное поле \mathbf{B} , электрон начинает прецессировать вокруг направления магнитного поля с частотой

$$\omega_L = eB/2m_e,$$

которая называется ларморовой частотой.

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Определите для атома водорода: а) радиус первой борвской орбиты, б) скорость движения электрона по этой орбите и в) частоту вращения электрона.

Решение. Кулоновская сила, действующая на электрон в атоме водорода, является центростремительной силой $m_e v^2/r = (Ze^2)/(4\pi\epsilon_0 r^2)$, а момент импульса электрона определяется постулатом Бора $m_e v r = n\hbar$. Решая совместно эти два уравнения для значения $Z = 1$ и $n = 1$, найдем радиус первой орбиты $r_1 = (4\pi\epsilon_0 \hbar^2)/(m_e e^2)$ и скорость электрона на ней $v_1 = \hbar/(m_e r_1)$. Частота вращения определяется из соотношения $f_1 = v_1/(2\pi r_1)$. Подставляя численные значения, получим $r_1 = 52,8$ пм $v_1 = 2,19 \cdot 10^6$ м/с и $f_1 = 6,6 \cdot 10^{15}$ Гц.

2. Определите энергию фотона, испускаемого при переходе электрона в атоме водорода с третьего энергетического уровня на второй.

Решение. В соответствии с формулой Бальмера, при переходе электрона с уровня n_1 на уровень n_2 испускается фотон частотой $\nu_{n_2, n_1} = R[1/(n_2^2) - 1/(n_1^2)]$. Энергия такого фотона равна $E = h\nu_{n_2, n_1}$. Подставляя $n_2 = 2$ и $n_1 = 3$, получаем $E = 1,89$ эВ.

3. Используя теорию Бора, определите орбитальный магнитный момент электрона, движущегося по третьей орбите атома водорода.

Решение. Магнитный орбитальный момент электрона, движущегося по круговой орбите с линейной скоростью

v (рис. 1.1), равен $p_m = I \cdot S$, где $S = \pi r^2$ — площадь поверхности орбиты электрона, $I = e/T$ — эквивалентный ток, создаваемый движением электрона. Здесь T — период обращения электрона по орбите, равный $T = 2\pi r/v$. Подставляя эти выражения, имеем $p_m = evr/2$. Используя постулат Бора $m_e v r = n\hbar$, получаем $p_m = en\hbar/2m_e$. Для $n = 3$ магнитный момент равен $p_m = 2,8 \cdot 10^{-23} \text{ А} \cdot \text{м}^2$.

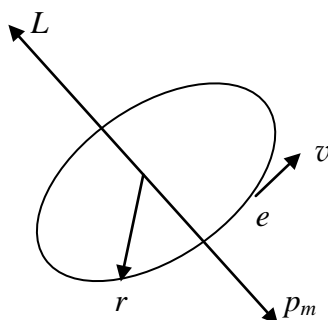


Рис. 1.1

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. На какой из боровских орбит (первой или второй) электрон в соответствии с законами классической электродинамики ($I \sim \omega^2$, где I — интенсивность излучаемого света, ω — угловая скорость движения по орбите) излучал бы сильнее? Во сколько раз?

2. Определите изменение орбитального механического момента электрона при переходе его из возбужденного состояния в основное с испусканием фотона длиной волны $1,02 \cdot 10^{-7} \text{ м}$.

3. Определите орбитальный магнитный момент электрона, движущегося по второй орбите атома водорода.

4. Вычислить частоту ларморовой прецессии электронных оболочек атомов: а) в магнитном поле Земли $B = 5 \cdot 10^{-5} \text{ Тл}$.

5. Определите изменение орбитального магнитного момента электрона при переходе его с третьей боровской орбиты на первую.

6. Найти для иона He^+ радиус и скорость электрона на первой боровской орбите.

7. Определите длину волны, соответствующую переходу электрона в атоме водорода с шестой орбиты на вторую. К какой серии относится эта спектральная линия?

8. Вычислить частоту ларморовой прецессии электронных оболочек атомов в магнитном поле $B = 50$ Тл.

9. Каково расстояние между частицами системы в основном состоянии и соответствующая энергия связи, если ядром системы служит протон, а вместо электрона движется мезон, имеющий тот же заряд, что и электрон, но массу в 207 раз большую?

10. Какие линии содержит спектр поглощения атомарного водорода в диапазоне длин волн 94,5 до 130 нм?

2. ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ

Де Бройль сопоставил свободной частице, имеющей импульс p , монохроматическую волну с длиной волны

$$\lambda = h/p = 2\pi\hbar/p.$$

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Найти длину волны де Бройля пули массой 9 г, летящей со скоростью 100 м/с.

Решение. Длина волны де Бройля определяется по формуле $\lambda = h/p = h/mv$. Подставляя численные значения, получим $\lambda = 7,36 \cdot 10^{-32}$ м.

2. Кинетическая энергия протона в четыре раза меньше его энергии покоя. Вычислить длину волны де Бройля протона.

Решение. Длина волны де Бройля λ определяется по формуле $\lambda = h/p$, где p – импульс частицы. Так как по условию задачи $E_k = E_0/4$, то кинетическая энергия E_k протона сравнима с его энергией покоя E_0 . В этом случае импульс p и кинетическая энергия E_k связаны релятивистским уравнением $p = (1/c)\sqrt{E_k(E_k + 2E_0)}$, где c — скорость света в вакууме. Отсюда найдем $p = 3E_0/4c$. Учитывая это, получим длину волны $\lambda = 4hc/(3E_0) = 1,77 \cdot 10^{-15}$ м.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. При какой скорости электрона его длина волны де Бройля будет равна: а) 500 нм; б) 0,1 нм?
2. Какой кинетической энергией должен обладать электрон, чтобы длина волны де Бройля была равна его комптоновской длине волны?
3. Чему должна быть равна кинетическая энергия протона, чтобы длина волны де Бройля совпадала с его комптоновской длиной волны?
4. При каком значении скорости длина волны де Бройля частицы равна ее комптоновской длине волны?
5. Кинетическая энергия электрона в три раза меньше его энергии покоя. Чему равна длина волны де Бройля электрона?
6. Масса движущегося электрона в два раза больше его массы покоя. Вычислить длину волны де Бройля электрона.
7. Чему равна длина волны де Бройля протона, движущегося со скоростью $0,6c$ (c — скорость света в вакууме)?
8. Вычислить длину волны де Бройля электрона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов 511 кВ.
9. Вычислить длину волны де Бройля протона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов 120 кВ.
10. Чему равна длина волны де Бройля теплового нейтрона, обладающего энергией, равной средней энергии теплового движения при температуре 300 К?

3. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Соотношение неопределенностей для координаты x и проекции импульса p_x на ось x

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar,$$

где Δx и Δp_x — неопределенность координаты и проекции импульса частицы, $\hbar = h/2\pi$; h — постоянная Планка. Соотношение неопределенностей для энергии E и времени t имеет вид

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

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Масса движущегося электрона в три раза больше его массы покоя. Чему равна минимальная неопределенность координаты электрона?

Решение. Импульс электрона $p = mv$, где m — масса, v — скорость частицы. Поэтому неопределенность координаты электрона будет $\Delta x \geq \hbar / (m\Delta v_x)$. Неопределенность скорости Δv_x , как и сама скорость, не может превышать скорость света c в вакууме, то неопределенность координаты $\Delta x_{\min} = \hbar / mc$. Согласно условию $m = 3m_0$. Подставляя это значение эффективной массы, получим $\Delta x_{\min} = \hbar / 3m_0c = 1,28 \cdot 10^{-13}$ м.

2. Среднее время жизни возбужденных состояний атома составляет 10 нс. Вычислить естественную ширину спектральной линии ($\lambda = 0,7$ мкм), соответствующую переходу между возбужденными уровнями атома.

Решение. При переходе электрона из одного стационарного состояния в другое излучается (или поглощается) энергия, равная $hc/\lambda = E_n - E_k$, где E_n и E_k — энергии соответствующих состояний атома, λ — длина волны излучения. Отсюда следует, что неопределенность длины волны излучения $\Delta\lambda$ связана с неопределенностью уровней энергии ΔE_n и ΔE_k атома соотношением $hc\Delta\lambda/\lambda^2 = \Delta E_n + \Delta E_k$. Согласно соотношению неопределенностей Гейзенберга, $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$, где Δt — неопределенность момента времени перехода атома из одного стационарного состояния в другое. Поскольку Δt не превышает среднего времени жизни возбужденного состояния атома τ , то минимальная неопределенность энергии возбужденных уровней равна $\Delta E_{\min} = \hbar/\tau$. Минимальная неопределенность длины волны излучения (естественная ширина спектральной линии) равна $\Delta\lambda_{\min} = (\lambda^2/2\pi c)(1/\tau_n + 1/\tau_k)$. Если одно из состояний (k), между которыми совершается переход, является основным, то

$\Delta\lambda_{\min} = \lambda^2/(2\pi c\tau_n)$, так как для основного состояния $\tau_k = \infty$. Для возбужденных состояний с одинаковым временем жизни $\tau_n = \tau_k = \tau$ имеем $\Delta\lambda_{\min} = \lambda^2/(\pi c\tau)$. Подставляя числовые данные, получим $\Delta\lambda_{\min} = 5,2 \cdot 10^{-14}$ м.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. Среднее расстояние электрона от ядра в невозбужденном атоме водорода равно 52,9 пм. Вычислить минимальную неопределенность скорости электрона.

2. Используя соотношение неопределенностей, показать, что в ядре не могут находиться электроны. Линейные размеры ядра принять равными $5,8 \cdot 10^{-15}$ м.

3. Чему равна неопределенность координаты покоящегося электрона?

4. Вычислить неопределенность координаты покоящегося протона?

5. Кинетическая энергия протона равна его энергии покоя. Чему равна при этом минимальная неопределенность координаты протона?

6. Масса движущегося электрона в два раза больше его массы покоя. Вычислить минимальную неопределенность координаты электрона.

7. Чему равна минимальная неопределенность координаты фотона, соответствующего видимому излучению с длиной волны 0,55 мкм.

8. Среднее время жизни *эта-мезона* составляет $2,4 \cdot 10^{-19}$ с, а его энергия покоя равна 549 МэВ. Вычислить минимальную неопределенность массы частицы.

9. Среднее время жизни возбужденного состояния атома равно 12 нс. Вычислить минимальную неопределенность длины волны $\lambda = 0,12$ мкм излучения при переходе атома в основное состояние.

10. Естественная ширина спектральной линии $\lambda = 0,55$ мкм, соответствующей переходу атома в основное состояние, равна

0,01 пм. Определить среднее время жизни возбужденного состояния атома.

4. ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Поведение частицы в микромире описывается волновой функцией ψ , которая в общем случае является комплексной величиной. Квадрат модуля этой функции определяет вероятность того, что частица находится в бесконечно малом объеме dV вблизи рассматриваемой точки с координатами x, y, z :

$$dw = |\psi(x)|^2 dV = \psi^*(x)\psi(x)dV$$

где ψ^* – комплексно сопряженная величина. Вероятность найти частицу в конечном объеме V равна

$$W = \int dw = \int_V |\psi|^2 dV$$

Волновая функция однозначна, непрерывна, ограничена и на бесконечности стремится к нулю. Так как вероятность найти частицу во всем пространстве равна 1, то имеет место условие нормировки

$$\int_V |\psi|^2 dV = 1,$$

где интегрирование ведется по всему пространству.

Каждой физической величине q , характеризующей состояние частицы с волновой функцией ψ , ставится в соответствие оператор \hat{q} такой, что среднее значение $\langle q \rangle$ вычисляется по формуле

$$\langle q \rangle = \int_V \psi^* \hat{q} \psi dV.$$

Оператор координаты \hat{x} (и оператор любой функции, зависящей только от координат) совпадает с самой координатой x (функцией). Действие оператора импульса $\hat{p} = -i\hbar d/dx = -i\hbar\nabla$ (i — мнимая единица) сводится к дифференцированию. Действие оператора полной энергии

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U} = \frac{\hbar^2}{2m} \square^2 + U.$$

на волновую функцию дает энергию частицы E и т.д.

Волновая функция удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера — аналогу второго закона Ньютона

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Здесь m — масса частицы, U — функция координат и времени, градиент которой, взятый с обратным знаком, равен силе, действующей на частицу. Если U не зависит явно от времени, то она имеет смысл потенциальной энергии. В этом случае волновая функция может быть представлена в виде произведения двух множителей, один из которых зависит только от координат, а второй — от времени:

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z) \exp(-iEt/\hbar),$$

где E — полная энергия частицы. Нестационарное уравнение Шредингера при этом переходит в стационарное

$$\nabla^2 \varphi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \varphi = 0.$$

Решение уравнения Шредингера означает отыскание собственных функций ψ_i (i — нумерует собственные функции) оператора \hat{H} и их собственных значений E_i . Если движение частицы ограничено в пространстве, то решения уравнения существуют лишь при дискретных значениях энергии E . В случае отсутствия пространственных ограничений уравнение имеет решения, соответствующие любым значениям E .

Пусть $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_i, \dots, \psi_n$ есть набор собственных функций частицы. В каждом из этих состояний ψ_i физическая величина q имеет определенное значение q_i . Однако частица может находиться

и в состоянии, $\psi = \sum_{i=1}^n C_i \psi_i$, где C_i — не зависящие от координат

числа. Число слагаемых в сумме равно числу различных собственных функций. Величина q в этом состоянии не имеет определенного значения — при измерениях будет получаться одно из значений q_i .

Вероятность получить результат q_i равна $|C_i|^2$, сумма всех таких

вероятностей равна единице: $\sum_{i=1}^n |C_i|^2 = 1$. Зная вероятности

различных значений величины q , можно найти среднее значение

этой величины в состоянии: $\langle q \rangle = \sum_{i=1}^n |C_i|^2 q_i$. Это есть выражение

принципа суперпозиции в квантовой механике.

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Записать уравнение Шредингера для гармонического осциллятора.

Решение. Гармоническим осциллятором называют частицу, совершающую одномерное движение под действием квазиупругой силы $F = -kx$. Потенциальная энергия такой частицы равна (рис.4.1) $U = kx^2/2$. Собственная частота классического гармонического осциллятора равна $\omega = \sqrt{k/m}$, где m — масса частицы. Выразив k через m и ω , получим $U = m\omega^2 x^2/2$. В одномерном случае $\nabla^2 \psi = d^2 \psi / dx^2$. Поэтому уравнение Шредингера для осциллятора имеет вид

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

Можно показать, что собственные значения этого уравнения суть $E_n = \hbar\omega_{\text{кол}}(n+1/2)$, где $\omega_{\text{кол}}$ — собственная частота колебаний. Энергия при $n = 0$ называется энергией нулевых колебаний. Как видно на рис.4.1, спектр собственных энергий эквидистантный, т.е. расстояния между соседними уровнями не зависят от n . Волновая функция основного состояния

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp(-\alpha x^2/2),$$

где $\alpha = m\omega/\hbar$. Она также приведена на рис.4.1. Как видно, в отличие от свободного случая, существует конечная вероятность обнаружения частицы за пределами дозированной области, показанной пунктиром на рис.4.1.

2. Волновая функция основного состояния атома водорода имеет вид $\psi = A \exp(-r/a)$, где a — константа (радиус Бора). Найти: а) значение константы A ; б) плотность вероятности нахождения электрона на расстоянии r от ядра; в) наиболее вероятное расстояние $r_{\text{вер}}$ электрона от ядра; г) среднее расстояние $\langle r \rangle$ электрона от ядра; д) вероятность того, что электрон находится на расстоянии от ядра, превышающем ηa (η — константа).

Решение.

а) Значение константы A найдем из условия нормировки

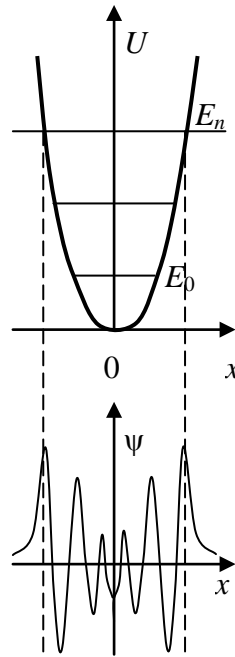


Рис. 4.1

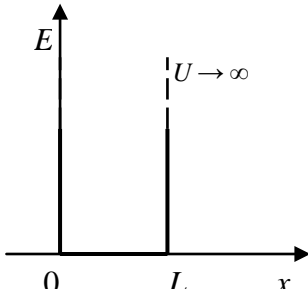


Рис. 4.2

$$\int_V |\psi|^2 dV = 1.$$

Отметим, что волновая функция сферически симметрична, т.е. не зависит от углов. Поэтому элементарный объем равен $dV = 4\pi r^2 dr$. Подставляя выражения для объема и волновой функции в условие нормировки, получим

$$\int_0^\infty A^2 e^{-2r/a} 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a} dr = 1.$$

Интеграл равен

$$\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a} dr = \frac{2!}{(2/a)^3} = \frac{a^3}{4}.$$

Тогда $4\pi A^2 \frac{a^3}{4} = 1$. Отсюда $A = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$.

б) Вероятность найти электрон на расстоянии от r до $r + dr$ от ядра $dW = |\psi|^2 dV = 4\pi A^2 r^2 e^{-2r/a} dr$. Плотность вероятности нахождения электрона на расстоянии r от ядра

$$w = \frac{dW}{dr} = 4\pi A^2 r^2 e^{-2r/a} = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a}.$$

в) Наиболее вероятное расстояние электрона от ядра соответствует максимуму функции $w(r)$: $\frac{dw}{dr} = 0$. Беря производную, получим

$$\frac{8r_{\text{вер}}}{a^3} e^{-2r_{\text{вер}}/a} \left(1 - \frac{r_{\text{вер}}}{a}\right) = 0.$$

Отсюда $r_{\text{вер}} = a$.

г) Среднее расстояние электрона от ядра равно $\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r |\psi|^2 dV$.

Подставим выражения для объема и волновой функции

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a} 4\pi r^2 dr = \frac{4}{a^3} \int_0^{\infty} r^3 e^{-2r/a} dr.$$

Используя интегрирование по частям

$$\int x^n e^{bx} dx = (1/b)x^n e^{bx} - (n/b) \int x^{n-1} e^{bx} dx,$$

получим для среднего расстояния электрона от ядра $\langle r \rangle = 3a/2$.

д) Используем полученное значение константы A для нахождения вероятности того, что электрон расположен от ядра на расстоянии большем, чем ηa :

$$W = \int dW = \int_{\eta a}^{\infty} \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a} dr = \frac{4}{a^3} \int_{\eta a}^{\infty} r^2 e^{-2r/a} dr.$$

Беря интеграл, получим $W = e^{-2\eta} (1 + 2\eta + 2\eta^2)$.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. Записать уравнение Шредингера для свободной частицы.
2. Записать уравнение Шредингера для электрона в атоме водорода.
3. Волновая функция, описывающая некоторую частицу, может быть представлена как произведение координатной функции ψ и временного множителя, т.е. имеет вид $\Psi(x, t) = \psi(x) \exp(-iEt/\hbar)$. Покажите, что плотность вероятности нахождения частицы определяется только координатной ψ -функцией.

Для волновой функции основного состояния водородного атома, имеющей вид $\psi = A \exp(-r/a)$, где a — боровский радиус:

4. Найти среднее значение потенциальной энергии электрона.
5. Найти среднее значение модуля кулоновской силы, действующей на электрон.
6. Найти средний электростатический потенциал, создаваемый электроном в центре атома водорода.
7. Вычислить вероятность того, что электрон в этом состоянии находится от ядра на расстоянии превышающем: а) $2a$; б) $5a$ и в) $10a$.
8. Вычислить вероятность того, что электрон в этом состоянии находится от ядра на расстоянии $a < r < 2a$.
9. Найти наиболее вероятное расстояние частицы от центра.
10. Найти среднее расстояние частицы от центра.

5. ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЯМА И ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР.

Решение уравнения Шредингера для частицы в прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме (рис.5.1) шириной L дает для энергии лишь дискретные значения

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2},$$

где число n нумерует возможные значения энергии, $n = 1, 2, 3$ — целое число. При этом волновая функция

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$$

Расстояние между уровнями с номерами n и $n + 1$ зависит от n

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar^2 \pi^2 (2n + 1) / 2mL^2$$

Рассмотрим движение частицы с энергией E в поле потенциального барьера бесконечной ширины (рис.5.2) и высоты U_0 . Если $E < U_0$, то в стационарном режиме вся энергия падающей волны отражается, однако под ступенькой ($x > 0$) волновая функция не равна нулю, а экспоненциально затухает с ростом координаты x . Это соответствует наличию *коэффициента преломления*

$$n = \lambda_1/\lambda_2 = k_2/k_1,$$

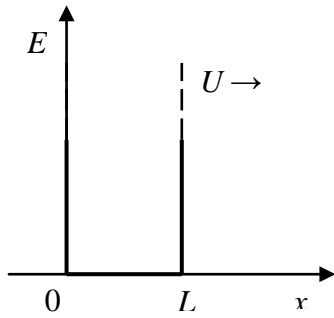


Рис.5.1

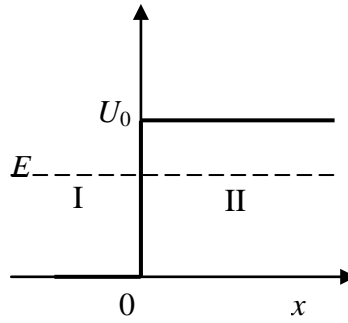


Рис.5.2

где $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ и $k_2^2 = 2m(E - U_0)/\hbar^2$ — волновые числа, соответствующие движению частицы в областях I и II.

Если $U_0 < E$, то частица частично отражается, а частично проходит через барьер. Поэтому можно ввести *коэффициент отражения R* и *коэффициент прохождения D*.

Коэффициент отражения барьера

$$R = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 .$$

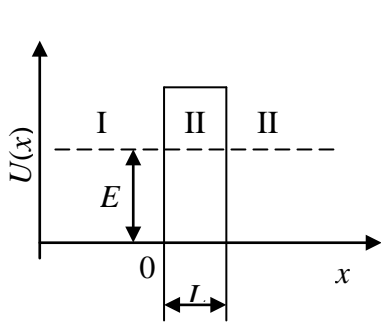


Рис.5.3

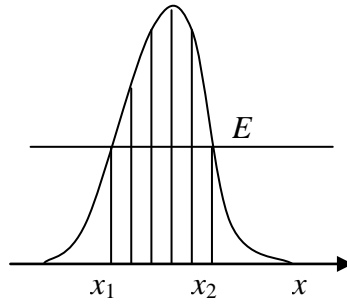


Рис.5.4

Коэффициент пропускания барьера D равен отношению доли прошедшей волны к падающей:

$$D = 4k_1k_2 / (k_1 + k_2)^2 .$$

Для коэффициентов отражения и прохождения выполняется соотношение $R + D = 1$. В классическом случае для $E > U_0$ всегда $D = 1$ и $R = 0$.

Если кантовая частица массой m , двигаясь в области I с энергией E , встречает на своем пути потенциальный барьер (рис.5.3) шириной L и высотой U_0 , то она может отразиться и остаться в области I. Однако существует конечная вероятность того, что она окажется в области III, даже если $E < U_0$. Этот эффект называется *туннельным эффектом*. В области II происходит затухание волновой функции.

Вероятность прохождения частицы через барьер – коэффициент прозрачности потенциального барьера D равен

$$D = D_0 \exp \left[- \frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right] ,$$

где m и E – масса и энергия частицы, падающей на барьер; U_0 – высота барьера; L – ширина барьера; коэффициент D_0 определяется природой барьера и обычно слабо отличается от единицы $D_0 \approx 1$.

Если барьер имеет произвольную форму (рис.5.4), то его можно разбить на ряд прямоугольных барьеров. Суммарное действие таких барьеров приводит к формуле

$$D = D_0 \exp \left[- (2/\hbar) \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U - E)} dx \right].$$

Пределы интегрирования определяются из условия $U(x) = E$.

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Электрон находится в потенциальной яме, шириной L . Найти вероятность того, что электрон, находящийся в возбужденном состоянии ($n = 2$), будет обнаружен в средней трети ямы.

Решение. Вероятность найти частицу в интервале $x_1 < x < x_2$ есть $W = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx$, где $\psi_n(x)$ — нормированная собственная волновая функция. Для прямоугольной ямы $\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(\pi n x/L)$.

Учитывая, что $n = 2$, получим $W = (2/L) \int_{x_1}^{x_2} \sin^2(2\pi x/L) dx$. По условию $x_1 = L/3$ и $x_2 = 2L/3$. Проведем замену $\sin^2(2\pi x/L) = [1 - \cos(4\pi x/L)]/2$ и разобьем интеграл на два

$$\begin{aligned} W &= \frac{2}{L} \int_{L/3}^{2L/3} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx = \frac{1}{L} \left\{ \int_{L/3}^{2L/3} dx - \int_{L/3}^{2L/3} \cos\left(\frac{4\pi x}{L}\right) dx \right\} = \\ &= \frac{1}{3} - \frac{1}{4\pi} \left(\sin \frac{8\pi}{3} - \sin \frac{4\pi}{3} \right). \end{aligned}$$

Вычисляя, получим $W = 0,195$.

2. 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.

Решение. Волновая функция ψ , описывающая состояние частицы в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шири-

ной L , имеет вид $\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(\pi n x/L)$, где n — номер энергетического уровня ($n = 1, 2, \dots$); x — координата частицы в яме ($0 \leq x \leq L$). Согласно физическому смыслу волновой функции, плотность вероятности w обнаружения частицы в точке с координатой x , равна $w = |\psi|^2$. Если частица находится на втором энергетическом уровне ($n = 2$), то $w_2 = (2/L) \sin^2(2\pi x/L)$. Следуя принципу соответствия Бора, выражение для классической плотности вероятности получается при $n \rightarrow \infty$: $w_\infty = 1/L$. Приравнявая, получим $\sin^2(2\pi x/L) = 1/2$. Решая это уравнение, найдем, что $x = (k \pm 1/4)L/2$, где k принимает значения $0, \pm 1, \pm 2, \dots$. В пределах ямы таких точек четыре $x = (L/8; 3L/8; 5L/8; 7L/8)$.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. Альфа-частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме. Чему равна ширина ямы, если минимальная энергия частицы составляет 6 МэВ.
2. Электрон находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной 0,1 нм. Вычислить длину волны излучения при переходе электрона со второго на первый энергетический уровень.
3. Протон находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной 0,01 пм. Вычислить длину волны излучения при переходе протона с третьего на второй энергетический уровень.
4. Атом водорода находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной 0,1 м. Вычислить разность энергий соседних уровней, соответствующих средней энергии теплового движения атома при температуре 300 К.
5. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L в основном состоянии. В каких точках ямы плотность вероятности обнаружения частицы совпадает с классической плотностью вероятности?
6. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L в основном состоянии. Чему равно отношение плотности вероятности обнаружения частицы в центре ямы к классической плотности вероятности?

7. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L в первом возбужденном состоянии. В каких точках ямы плотность вероятности обнаружения частицы максимальна, а в каких минимальна?

8. Определите среднее значение импульса в основном состоянии электрона в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

9. Определите среднее значение квадрата импульса в основном состоянии электрона в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

10. Частица находится в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме шириной L на втором энергетическом уровне. Определить вероятность обнаружения частицы в пределах от 0 до $L/3$.

6. СТРОЕНИЕ АТОМА

Решая уравнение Шредингера для электрона в кулоновской яме ядра, показывает, что электрон в атоме может иметь следующие энергии:

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2},$$

где m_e — масса электрона, Z — атомный номер, $n = 1, 2, 3, \dots$ — главное квантовое число. Наиболее вероятное расстояние электрона в состоянии n от ядра:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e Z e^2} n^2.$$

При $n = 1$ и $Z = 1$ это расстояние совпадает с радиусом первой боровской орбиты.

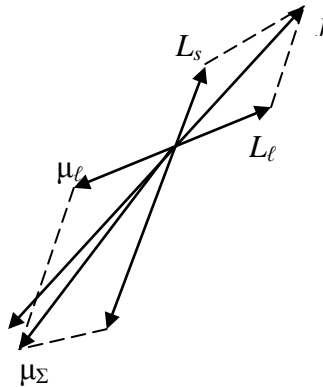


Рис. 6.1

Модуль момента импульса электрона в атоме может принимать значения

$$|\mathbf{L}_\ell| = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}.$$

Число $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$ называется *орбитальным квантовым числом*. Проекция момента импульса на любую ось (например, z) тоже может принимать лишь определенные значения

$$L_{\ell z} = m_\ell \hbar,$$

где $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$ и называется *магнитным квантовым числом*. Магнитное квантовое число определяет также проекцию магнитного момента, создаваемого движением электрона вокруг ядра:

$$\mu_{\ell z} = -\mu_B m_\ell.$$

Модуль магнитного момента электрона

$$|\boldsymbol{\mu}_\ell| = \mu_B \sqrt{\ell(\ell+1)},$$

где $\mu_B = e\hbar/2m_e = 0,927 \cdot 10^{-23}$ Дж/Тл — магнетон Бора. Отношение модулей орбитальных магнитного и механического моментов называется *гиромагнитным отношением*

$$|\boldsymbol{\mu}_\ell|/|\mathbf{L}_\ell| = \mu_{\ell z}/L_{\ell z} = \mu_B/\hbar = e/(2m_e).$$

Электрон обладает также собственным механическим моментом импульса, равным

$$|\mathbf{L}_s| = \hbar\sqrt{s(s+1)},$$

где $s = 1/2$ — спиновое квантовое число. Соответствующий ему магнитный момент также квантован

$$|\boldsymbol{\mu}_s| = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)}.$$

Проекции спинового момента импульса и магнитного момента на направление z внешнего магнитного поля равны

$$L_{sz} = \hbar m_s \text{ и } \mu_{sz} = 2\mu_B m_s,$$

где m_s — спиновое квантовое число, может принимать значения $\pm 1/2$.

Гиромагнитное отношение для спиновых магнитного и механического моментов оказывается в два раза больше, чем для орбитальных моментов

$$|\boldsymbol{\mu}_s|/|\mathbf{L}_s| = \mu_{sz}/L_{sz} = 2\mu_B/\hbar = e/m_e.$$

Орбитальный L_ℓ и спиновый L_s моменты импульса электрона складываются и дают полный момент импульса электрона \mathbf{j} (рис.6.1). Он квантуется так же

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

где $j = |\ell \pm s| = |\ell \pm 1/2|$ — внутреннее квантовое число. Проекция полного момента на направление внешнего магнитного поля

$$j_z = \hbar m_j,$$

где m_j может принимать $2j + 1$ значение от $-j$ до j . Для описания состояния электрона в атоме используют четыре квантовых числа: n , ℓ , m_ℓ и m_s . или n , ℓ , j , m_j . Обычно для орбитального квантового числа используют буквенные обозначения:

ℓ	0	1	2	3	4
Обозначение	s	p	d	f	g

При втором способе описания термов используют следующие обозначения: состояния с $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ обозначаются соответственно s, p, d, f, \dots . Справа внизу указывается значение квантового числа j , а слева наверху величина $2s + 1$ — мультиплетность терма. Например, 3p_0 означает, что $\ell = 1, s = 1, j = 0$.

Из-за разных гиромагнитных отношений для спинового и орбитального моментов суммарный магнитный момент оказывается непараллельным суммарному механическому моменту. Поэтому вво-

дится специальный коэффициент g_L – фактор Ланде, который есть не что иное, как коэффициент пропорциональности между \mathbf{j} и $\boldsymbol{\mu}_j$:

$$\boldsymbol{\mu}_j = -g_L \mu_B \mathbf{j},$$

$$g_L = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)}.$$

Чтобы описать структуру сложного атома, надо знать состояния всех его электронов. В легких и средних атомах орбитальные моменты отдельных электронов складываются в суммарный орбитальный момент

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_{\ell_1} + \mathbf{L}_{\ell_2} + \mathbf{L}_{\ell_3} + \dots = \sum_i \mathbf{L}_{\ell_i},$$

а спиновые – в суммарный спиновый момент:

$$\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{L}_{s_i}$$

и полный момент

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}.$$

В тяжелых атомах полный момент равен сумме полных моментов отдельных электронов

$$\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{j}_i,$$

где $\mathbf{j}_i = \mathbf{L}_{\ell_i} + \mathbf{L}_{s_i}$.

Магнитный момент атома

$$|\boldsymbol{\mu}_J| = g_L \sqrt{J(J+1)} \mu_B.$$

Состояния атомов обозначаются так же, как это делается для отдельных электронов, но большими буквами. Например, 3P_0 означает, что $L = 1$, $S = 1$, $J = 0$.

Порядок заполнения энергетических уровней в атоме определяется эмпирическими правилами Клечковского. Первое правило Клечковского: сначала будут заполняться уровни с наименьшей суммой квантовых чисел $n + \ell$. Второе правило Клечковского: если два уровня имеют одинаковую сумму квантовых чисел $n + \ell$, то первым будет заполняться уровень с меньшим n .

Электроны подчиняются *принципу Паули*: каждый энергетический уровень может быть заселен не более чем двумя электронами с противоположными спинами. Энергии некоторых состояний могут совпадать, т.е. может иметь место вырождение. В этом случае электроны заселяют состояния таким образом, чтобы спин S атома был максимален и, при этом по возможности максимальным было значение L — *правило Гунда*.

При попадании атома во внешнее магнитное поле \mathbf{B} с полем взаимодействуют как орбитальный, так и спиновый магнитные моменты электронов. Кроме того, эти моменты взаимодействуют между собой (спин-орбитальное взаимодействие). В случае слабого поля взаимодействие магнитных моментов с внешним полем меньше, чем спин-орбитальное взаимодействие, и атом приобретает дополнительную энергию

$$\Delta E = -(\boldsymbol{\mu}\mathbf{B}) = g_L \mu_B m_J B,$$

которая зависит от квантового числа m_J , т.е. снимается вырождение по m_J .

В сильном магнитном поле спин-орбитальным взаимодействием можно пренебречь, связь между L и S разрывается, и они проецируются на направление поля независимо друг от друга. В этом случае

$$\Delta E = \mu_B B (m_L + 2m_S).$$

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Определите максимальное число электронов, находящихся в состояниях, описываемых данным главным квантовым числом n .

Решение. Каждому квантовому числу n соответствует n различных значений орбитального квантового числа ℓ : $\ell = 0, 1, 2, \dots$,

$(n - 1)$. В свою очередь каждому значению ℓ соответствуют $2\ell + 1$ значения магнитного квантового числа: $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$. На каждом уровне m_ℓ могут быть 2 электрона со спиновыми квантовыми числами $m_s = \pm 1/2$. Полное количество электронов на оболочке равно

$$N = \sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell + 1) = 2n^2 .$$

2. Электрон в атоме находится в d -состоянии. Определите: а) орбитальный момент импульса электрона; б) максимальное значение проекции момента импульса на направление внешнего магнитного поля.

Решение. Электрон в d -состоянии описывается орбитальным квантовым числом $\ell = 2$. Модуль орбитального момента при этом равен $|L_\ell| = \hbar\sqrt{\ell(\ell + 1)} = \hbar\sqrt{6}$. Проекция момента импульса на направление внешнего магнитного поля может принимать значения $L_{\ell_z} = \hbar m_\ell$, соответствующие различным величинам магнитного квантового числа m_ℓ : $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2$. Максимальная проекция орбитального момента соответствует максимальному значению $m_\ell = 2$: $L_{\ell_z} = 2\hbar$.

3. Найти максимально возможный полный механический момент и соответствующее спектральное обозначение терма атома натрия, валентный электрон которого имеет главное квантовое число $n = 4$.

Решение. Атом натрия имеет один электрон на внешней оболочке и спин этого электрона равен $1/2$. Поэтому мультиплетность равна $2S + 1 = 2$. Механический момент будет максимальным, если максимальным будет и орбитальное квантовое число. Данному $n = 4$ соответствует максимальное значение $L = 3$. Внутреннее квантовое число $J = L + S = 3 + 1/2 = 7/2$. Максимально возможный механический момент будет равен $|J| = \hbar\sqrt{J(J + 1)} = \hbar\sqrt{7 \cdot 9 / (2 \cdot 2)} = \hbar\sqrt{63}/2$.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. Заполненной электронной оболочке соответствует главное квантовое число $n = 3$. Определите число электронов на этой оболочке, которые имеют одинаковые квантовые числа: а) $m_s = -1/2$; б) $m_\ell = 0$; в) $m_\ell = -1, m_s = 1/2$.

2. Заполненной электронной оболочке соответствует главное квантовое число $n = 4$. Определите число электронов на этой оболочке, которые имеют одинаковые квантовые числа: а) $m_\ell = -3$; б) $m_s = 1/2, m_\ell = 2$; в) $m_s = -1/2, m_\ell = 1$.

3. Сколько электронов в атоме могут иметь одинаковые квантовые числа: а) n, ℓ, m_ℓ, m_s ; б) n, ℓ, m_ℓ .

4. Валентный электрон атома Na находится в состоянии с $n = 3$, имея при этом максимально возможный полный механический момент. Каков его магнитный момент в этом состоянии?

5. Определите во сколько раз орбитальный момент импульса L_ℓ электрона, находящегося в f -состоянии, больше, чем для электрона в p -состоянии.

6. $1s$ электрон атома водорода, поглотив фотон с энергией $E = 12,1$ эВ, перешел в возбужденное состояние с максимально возможным орбитальным квантовым числом. Определите изменение момента импульса ΔL_ℓ орбитального движения электрона.

7. Определите суммарное максимальное число s -, p -, d -, f - и g -электронов, которые могут находиться на N - и O -оболочках атома.

8. Найти кратность вырождения 2p , 3d и 4f состояний с максимально возможными полными механическими моментами.

9. Написать электронную формулу элемента №79 и объяснить порядок заполнения уровней.

оболочка содержит: а) три d -электронов, б) семь d -электронов.

7. РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ АТОМОВ

Экспериментально строение атомов изучают, исследуя спектры испускания и поглощения атомами электромагнитного излу-

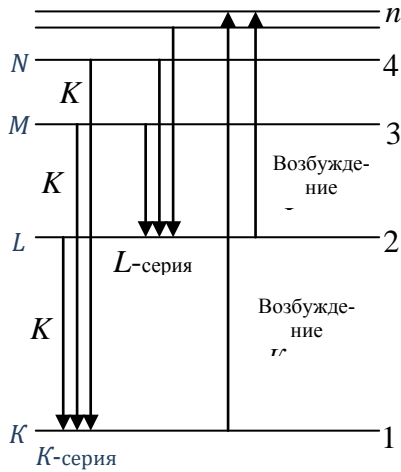


Рис.7.1

чения. Переходам валентных электронов соответствует оптический диапазон излучения, а при переходах электронов на внутренних оболочках возникает характеристическое рентгеновское излучение.

Схема переходов приведена на рис.7.1. Частоты и длины волн соответствующего излучения можно определить, используя закон Мозли:

$$\nu = R(Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right),$$

$$\frac{1}{\lambda} = R'(Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right),$$

где Z – порядковый номер элемента в системе Менделеева, R и R' – постоянные Ридберга для частот и волнового числа ($R=3,29 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ и $R'=1,10 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$), n_1 – главное квантовое число уровня, с которого уходит электрон, n_2 – главное квантовое число уровня, на который переходит электрон. Величина σ учитывает экранировку внутренними электронами кулоновского взаимодействия ядра и рассматриваемого электрона и называется *постоянной экранирования*.

При переходах атома из одного состояния в другое с поглощением или испусканием электромагнитного излучения допустимы такие переходы при которых выполняются следующие соотношения, называемые *правилами отбора*:

$$\Delta j = 0, \pm 1; \Delta m_j = 0, \pm 1; \Delta \ell = \pm 1; \Delta m_\ell = 0, \pm 1; \Delta m_s = 0$$

$$\Delta J = \pm 1, 0, \text{ при } J_{\text{нач}} \neq 0 \text{ и } J_{\text{кон}} \neq 0$$

$$\Delta J = \pm 1 \text{ при } J_{\text{нач}} = 0 \text{ или } J_{\text{кон}} = 0, \Delta m_j = \pm 1, 0$$

$$\Delta S = 0 \quad \Delta m_s = 0$$

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

$$\Delta L = \pm 1 \text{ при } L_{\text{нач}} = 0 \text{ или } L_{\text{кон}} = 0, \Delta m_L = \pm 1, 0.$$

В магнитном поле с индукцией B вследствие снятия вырождения уровни расщепляются. Величина расщепления соответствующих спектральных линий в слабом поле равна

$$\Delta\omega = (m_{j1}g_{L1} - m_{j2}g_{L2})\mu_B B / \hbar,$$

где m_{L1} , g_{L1} и m_{L2} , g_{L2} – квантовые числа и факторы Ланде соответствующих энергетических уровней. При излучении вдоль магнитного поля зеемановские компоненты, обусловленные переходами $m_{j1} \rightarrow m_{j2}$, отсутствуют.

При наличии большого количества атомов и при $T \neq 0$ в каждый момент времени часть атомов будет находиться в возбужденных состояниях. Доля атомов, имеющих в термодинамическом равновесии энергию E , при температуре T определяется распределением Больцмана

$$N = (g/g_0)\exp[-(E - E_0)/kT],$$

где g и g_0 — кратности вырождения возбужденного и основного состояний, E_0 — энергия основного состояния.

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Длина волны линии L_α вольфрама равна 0,148 нм. Найти постоянную экранирования.

Решение. Используем закон Мозли с учетом того, что $Z = 74$ – порядковый номер вольфрама, $n_1 = 3$ для L_α -линии, $n_2 = 2$ – номер уровня, на который переходит электрон, для L -серии. Отсюда находим $\sigma = 7,4$.

2. Определить энергию фотона K_α -линии рентгеновского спектра, излучаемого вольфрамом при бомбардировке его быстрыми электронами.

Решение. K_α -линия возникает при переходе электрона с L -слоя на K -слой. Частота этой линии определяется по закону Мозли. В нашем случае $n_1 = 2$, $n_2 = 1$ и $\sigma = 1$. Для вольфрама $Z = 74$. Отсюда энергия фотона равна $E_{K_\alpha} = h\nu = 54,4$ кэВ.

3. Найти зеемановское расщепление спектральной линии ${}^2D_{3/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$. Указать число компонент в расщепленной линии.

Решение. Состояние ${}^2D_{3/2}$ означает, что $J = 3/2$, $L = 2$, $S = 1/2$.
Фактор Ланде

$$g_{J1} = 1 + \frac{(3/2) \cdot (5/2) + (1/2) \cdot (3/2) - 2 \cdot 3}{2 \cdot (3/2) \cdot (5/2)} = \frac{4}{5}.$$

Дополнительная энергия этого состояния в магнитном поле $\Delta E_1 = \frac{4}{5} \frac{e\hbar B}{2m_e} m_{J1}$. Аналогично для состояния ${}^2P_{1/2}$: $J = 1/2$, $L = 1$, $S = 1/2$;

$$g_{J2} = 1 + \frac{(3/4) + (3/4) - 2}{(3/2)} = \frac{2}{3}, \quad \Delta E_2 = \frac{2}{3} \frac{e\hbar B}{2m_e} m_{J2}.$$

Возможны переходы с изменением квантового числа m_J на 0, 1 и -1. Рассматривая эти варианты, получим, что возможны расщепления частот $\Delta\omega = \left\{ \pm \frac{13}{15}, \pm \frac{11}{15}, \pm \frac{1}{15} \right\} \frac{eB}{2m_e}$.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. Установить, какие из ниже перечисленных переходов запрещены правилами отбора: а) ${}^2D_{3/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$, б) ${}^3P_1 \rightarrow {}^2S_{1/2}$, в) ${}^3F_3 \rightarrow {}^3P_2$, г) ${}^4F_{1/2} \rightarrow {}^4D_{5/2}$.

2. Установить, какие из ниже перечисленных переходов запрещены правилами отбора: а) ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$, б) ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}$, в) ${}^2D_{5/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$, г) ${}^2F_{7/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}$.

3. Какую наименьшую разность потенциалов нужно приложить к рентгеновской трубке с вольфрамовым анодом, чтобы в спектре характеристического рентгеновского излучения были все линии K -серии?

4. Вычислить с помощью закона Мозли разность энергий связи K - и L -электронов ванадия.

5. Сколько элементов содержится в ряду между теми, у которых длины волн K_{α} -линии равны 250 и 179 пм?

6. У какого легкого элемента в спектре поглощения разность частот K - и L -краев поглощения рентгеновских лучей составляет $\Delta\omega = 6,85 \cdot 10^{18} \text{ с}^{-1}$?

7. У некоторого легкого атома длины волн K_{α} - и K_{β} -линий равны соответственно 275 и 251 пм. Что это за атом?

8. Электрон переходит в атоме молибдена с M -слоя на L -слой. Определить длину волны и энергию рентгеновского излучения. Постоянная $\sigma = 5,6$.

9. Электрон переходит в атоме циркония с M -слоя на K -слой. Определить длину волны и энергию рентгеновского излучения. Постоянная $\sigma = 1$.

10. Длина волны, соответствующей K_{α} -линии рентгеновского излучения, $\lambda = 7,5 \cdot 10^{-2} \text{ нм}$. Определить элемент, из которого сделан антикатод. Постоянная $\sigma = 1$.

8. СПЕКТРЫ МОЛЕКУЛ

При сближении двух атомов между ними начинают действовать как силы отталкивания, так и силы притяжения. Силы отталкивания более короткодействующие, т.е. быстрее изменяются с изменением расстояния между атомами, чем силы притяжения. Это приводит к тому, что на некотором расстоянии r_0 обе силы уравновешивают друг друга, а потенциальная энергия U принимает наименьшее значение $U_{\min} = -D$ (рис.8.1, кривая 1). Такая ситуация соответствует образованию молекулы с энергией связи D и возмож-

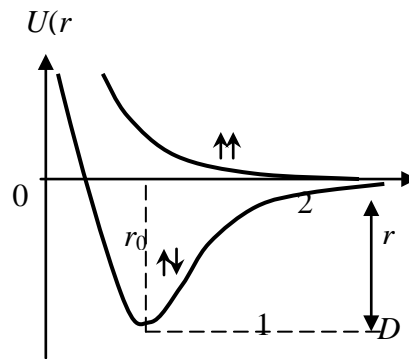


Рис. 8.1

на только при антипараллельных спинах. При параллельных спинах (рис.8.1, кривая 2) потенциальная энергия всюду положительна, показывая отсутствие выигрыша в энергии при образовании молекулы.

В пренебрежении энергией поступательного движения центра инерции молекулы и энергией ядер атомов в молекуле, энергия молекулы складывается из трех составляющих: а) энергии движения электронов в атомах молекулы, б) энергии колебательного движения ядер атомов, составляющих молекулу, в) энергии вращательного движения молекулы, как целого, вокруг некоторой оси.

Колебания двухатомной молекулы можно представить как гармонический осциллятор. Колебательная энергия двухатомной молекулы равна

$$E_n = \hbar\omega_{\text{кол}}(n + 1/2).$$

где n — колебательное квантовое число, принимающее значения $0, 1, 2, \dots$, $\omega_{\text{кол}}$ — собственная частота колебаний молекулы. При переходах между колебательными уровнями выполняются правила отбора $\Delta n = \pm 1$. Энергия нулевых колебаний

$$E_0 = \hbar\omega_{\text{кол}}/2.$$

Жесткость молекулы

$$k = \frac{\alpha^2 mc^2}{\hbar^2} m^2 c^2 \alpha^2 = \left(\frac{\alpha^2 mc^2}{\hbar} \sqrt{m} \right)^2,$$

где m — масса электрона; $\alpha = 1/137$ — постоянная тонкой структуры; $\hbar = h/2\pi$, h — постоянная Планка; c — скорость света в вакууме.

Частота собственных колебаний

$$\omega_{\text{кол}} = \sqrt{k/\mu} = \frac{\alpha^2 mc^2}{\hbar} \sqrt{m/\mu},$$

где μ — приведенная масса молекулы AB : $1/\mu = 1/\mu_A + 1/\mu_B$, μ_A и μ_B — масса атомов A и B соответственно.

Если молекул много, то количество молекул, имеющих колебательную энергию E_i , определяется распределением Больцмана:

$$N_i = N_0 \exp(-E_i/kT).$$

С увеличением амплитуды колебаний проявляется отклонение колебаний от гармоничности. Энергия колебаний ангармонического осциллятора

$$E_v = \hbar\omega[(v + 1/2) - \gamma(v + 1/2)^2],$$

где v — колебательное квантовое число ($v = 0, 1, 2, \dots$); γ — коэффициент ангармоничности. Правил отбора для v нет. Ангармонизм может привести к разрушению (диссоциации) молекулы. Максимальное колебательное квантовое число

$$v_{\max} = 1/(2\gamma) - 1.$$

Энергия вращательного движения квантована

$$E_J = J(J + 1)\hbar^2/2I,$$

где I — момент инерции молекулы; J — вращательное квантовое число, принимающее значения $0, 1, 2, \dots$. Расстояние между вращательными уровнями растет по мере увеличения квантового числа J :

$$\Delta E = E_J - E_{J-1} = (\hbar^2/2I)[J(J + 1) - J(J - 1)] = 2J\hbar^2/2I.$$

Величина

$$B = \hbar^2/2I.$$

называется вращательной постоянной. Вращательные уровни вырождены, т.е. несколько уровней имеют одинаковые энергии. Степень вырождения равна

$$g = 2J + 1.$$

Момент инерции молекулы

$$I \approx \mu r_0^2,$$

где r_0 — расстояние между атомами молекулы, μ — приведенная масса молекулы.

Характерную частоту вращательного движения можно оценить как

$$\omega_{\text{вр}} = \frac{\hbar^2}{2I} \approx \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \approx \frac{\hbar}{2\mu} \frac{m^2 c^2 \alpha^2}{\hbar^2}.$$

Соотношение между характерными частотами (энергиями) электронов в атомах, образующих молекулу, колебаний атомов друг относительно друга и вращательной энергии молекулы

$$\omega_{\text{эл}} : \omega_{\text{кол}} : \omega_{\text{вр}} = 1 : \sqrt{m/\mu} : m/\mu.$$

Фотон с частотой ω_0 , попадая на атом, может испытать неупругое рассеяние – комбинационное рассеяние света. Если фотон отдает молекуле часть своей энергии (стоксова линия, красный спутник), то частота рассеянного света уменьшается

$$\omega_1 = \omega_0 - \Delta\omega.$$

Если фотон отбирает энергию от молекулы (антистоксова линия, фиолетовый спутник), то частота рассеянного света увеличивается

$$\omega_2 = \omega_0 + \Delta\omega.$$

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. В основном колебательном состоянии молекулы СО собственная частота колебаний $\omega_{\text{кол}} = 4,09 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$, а равновесное расстояние между ядрами $r_0 = 0,112 \text{ нм}$. Найти: а) число вращательных уровней, заключенных между основным и первым возбужденным колебательными уровнями; б) отношение энергии $\Delta E_{\text{кол}}$, необходимой для перевода молекулы на первый возбужденный колебательный уровень, к энергии $\Delta E_{\text{вр}}$, необходимой для перевода молекулы на первый возбужденный вращательный уровень.

Решение. Колебательный спектр является эквидистантным, т.е. расстояние между энергетическими уровнями одинаково и

равно $\Delta E_{\text{кол}} = \hbar\omega_{\text{кол}}$. Подставляя численные значения, получим $\Delta E_{\text{кол}} = 0,27$ эВ. Расстояние между вращательными уровнями растет по мере увеличения квантового числа J : $\Delta E_{\text{вр}} = E_J - E_{J-1} = \hbar^2 J/I$. Найдем момент инерции молекулы CO. Для этого определим приведенную массу молекулы: $1/\mu = 1/A(C) + 1/A(O)$, где A – атомный вес. Отсюда $\mu = (A(C)A(O))/(A(C) + A(O))$. Момент инерции молекулы $I = r_0^2 A(C)A(O)/(A(C) + A(O))$. Характерная энергия вращательного движения для молекулы CO равна $\hbar^2/I = 0,48 \cdot 10^{-3}$ эВ. Расстояние между вращательными энергетическими уровнями

$$\Delta E_{\text{вр}} = J \hbar^2/I = J \hbar^2 [A(C) + A(O)] / A(C)A(O)r_0^2.$$

а) Чтобы найти число вращательных уровней, заключенных между основным и первым возбужденным колебательными уровнями сложим энергетические зазоры вращательного спектра от уровня с квантовым числом $J = 1$ до уровня с квантовым числом x и приравняем сумму энергетическому зазору колебательного спектра: $\hbar^2(1 + 2 + 3 + \dots + x)/I = \Delta E_{\text{кол}}$. Решая это уравнение относительно x и подставляя численные значения, получим $x = 32$

б) Отношение энергии $\Delta E_{\text{кол}}$, необходимой для перевода молекулы на первый возбужденный колебательный уровень, к энергии $\Delta E_{\text{вр}}$, необходимой для перевода молекулы на вращательный уровень с $J = 1$ равно $\Delta E_{\text{кол}}/\Delta E_{\text{вр}} = 0,27/(0,48 \cdot 10^{-3}) = 553$.

2. Собственная угловая частота колебаний молекулы HCl равна $5,63 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$, коэффициент ангармоничности $\gamma = 0,0201$. Определить максимальную колебательную энергию E_{max} и энергию диссоциации E_d .

Решение. Максимальную колебательную энергию найдем, если используем максимальное колебательное квантовое число $\nu_{\text{max}} = 1/(2\gamma) - 1$:

$$E_{\text{max}} = \hbar\omega \left[(1/2\gamma - 1 + 1/2) - \gamma(1/2\gamma - 1 + 1/2)^2 \right].$$

Пренебрегая $\gamma/4$ по сравнению с $1/(4\gamma)$, получим

$$E_{\text{max}} = \hbar\omega/4\gamma = 7,38 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 4,61 \text{ эВ}.$$

Энергия диссоциации есть энергия, которую необходимо затратить, чтобы отделить атомы в молекуле друг от друга и удалить их без сообщения кинетической энергии на расстояние, на котором взаимодействие атомов пренебрежимо мало. Эта энергия соответствует переходу с нулевого колебательного уровня на самый высокий, соответствующий ν_{\max} . Тогда

$$E_d = E_{\max} - E_0 = \hbar\omega/4\gamma - \hbar\omega/2 = (1 - 2\gamma)\hbar\omega/4\gamma = E_{\max}(1 - 2\gamma).$$

Подставляя численные значения, получим $E_d = 4,43$ эВ.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. Газ, состоящий из молекул CN, находится в термодинамическом равновесии при температуре $T = 400$ К. Собственная частота колебаний молекулы CN $\omega_{\text{кол}} = 3,90 \cdot 10^{14}$ с⁻¹. Определить отношение числа N_{i+1} молекул, находящихся на $(i + 1)$ -м колебательном уровне, к числу N_i молекул, находящихся на i -м колебательном уровне.

2. Расстояние между ядрами молекулы HCl $r_0 = 0,127$ нм. Найти угловую скорость вращения ω_r молекулы, находящейся на первом возбужденном вращательном уровне.

3. Расстояние между линиями вращательной полосы молекулы CN $\Delta\omega = 7,19 \cdot 10^{11}$ с⁻¹. Определить равновесное расстояние r_0 между атомами.

4. Первый потенциал возбуждения электронной оболочки молекулы CO равен 6,0. В основном электронном состоянии молекулы собственная частота колебаний $\omega_{\text{кол}} = 4,09 \cdot 10^{14}$ с⁻¹. Найти число колебательных уровней, заключенных между основным и первым возбужденным электронными уровнями.

5. Первый потенциал возбуждения электронной оболочки молекулы CO равен 6,0. В основном электронном состоянии молекулы собственная частота колебаний $\omega_{\text{кол}} = 4,09 \cdot 10^{14}$ с⁻¹. Найти отношение энергии $\Delta E_{\text{эл}}$, необходимой для перевода молекулы на первый возбужденный электронный уровень, к энергии $\Delta E_{\text{кол}}$, необходимой для перевода молекулы на первый возбужденный колебательный уровень.

6. Найти отношение энергий, которые необходимо затратить для возбуждения двухатомной молекулы H_2 на первый колебательный и первый вращательный уровни. Расстояние между ядрами молекулы $r_0 = 0,741 \cdot 10^{-10}$ м.

7. Вычислить отношение энергий, которые необходимо затратить, для возбуждения молекулы йода I_2 на первый колебательный и первый вращательный уровни. Межъядерное расстояние $r_0 = 2,7 \cdot 10^{-10}$ м, а длина волны, соответствующая частоте собственных колебаний $\lambda = 215$ см.

8. Найти отношение энергий, которые необходимо затратить для возбуждения двухатомной молекулы HI на первый колебательный и первый вращательный уровни. Расстояние между ядрами молекулы $r_0 = 1,604 \cdot 10^{-10}$ м.

9. Определить для молекулы HCl вращательные квантовые числа двух соседних уровней, разность энергий которых равна $7,86 \cdot 10^{-3}$ эВ. Расстояние между ядрами молекулы $r_0 = 1,275 \cdot 10^{-10}$ м.

10. При комбинационном рассеянии линии ртути с длиной волны 365 нм молекулами кислорода наблюдается спутник с длиной волны 387 нм. Определить частоту собственных колебаний молекулы кислорода.

9. СТАТИСТИКА КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ. ЭЛЕКТРОНЫ В МЕТАЛЛЕ

Квантовые частицы в зависимости от спина s делятся на *бозоны* (целый спин, $s = 1, 2, \dots$, фотоны, фононы) и *фермионы* (полуцелый спин, $s = 1/2, 3/2, \dots$, электроны). Для бозонов справедлив закон распределения Бозе-Эйнштейна: вероятность заполнения уровня с энергией E равна

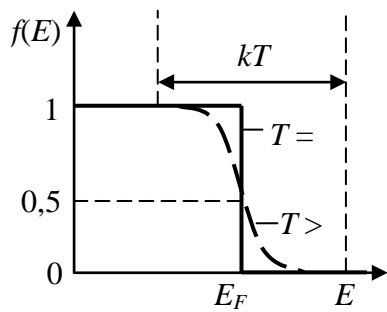


Рис.9.1

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E - E_F)/kT] - 1},$$

где k – постоянная Больцмана; T – термодинамическая температура; E_F – уровень Ферми, это энергетический уровень, вероятность заполнения которого равна 0,5.

Для фермионов справедлив закон распределения Ферми-Дирака:

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E - E_F)/kT] + 1}$$

При $T = 0$ К функция Ферми обладает следующими свойствами: $f(E) = 1$, если $E < E_F$ и $f(E) = 0$, если $E > E_F$. (рис.9.1). Если $\exp((E - E_F)/kT) \gg 1$, то единицей в знаменателе можно пренебречь, и оба распределения переходят в

$$f(E) = A \exp(-E/kT).$$

Это так называемое распределение Максвелла-Больцмана. Температура, ниже которой квантовые эффекты становятся существенными, называется *температурой вырождения* T_v . Типичным представителем фермионов является совокупность электронов проводимости в металле. Энергия Ферми не зависит от объема металла, а определяется только концентрацией свободных электронов. При $T = 0$ К положение уровня Ферми в металле

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_n} (3\pi^2 n)^{2/3},$$

где m_n – масса электрона в металле ("эффективная" масса), n – концентрация электронов.

Интервал между соседними уровнями энергии свободных электронов в металле

$$\delta E = \frac{(2\pi\hbar)^3}{4\pi V(2m_n)^{3/2}\sqrt{E}}.$$

Распределение свободных электронов по энергиям в металле определяется не только вероятностью заполнения уровней $f(E)$, но и числом состояний, приходящихся на единичный интервал энергии в единице объема (плотностью состояний) $N(E)$:

$$dn(E) = N(E)f(E)dE. \quad (9.1)$$

где dn – число электронов, приходящихся на энергетический интервал от E до $E + dE$,

$$N(E) = 4\pi\left(2m_n/\hbar^2\right)^{3/2}\sqrt{E}. \quad (9.2)$$

При $T \neq 0$ К

$$dn(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_n}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{\sqrt{E} dE}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}.$$

Вблизи $T = 0$ К:

$$dn(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_n}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E} dE.$$

Общую концентрацию электронов в металле можно найти путем интегрирования по всем заполненным состояниям:

$$n = \int_0^{E_F} N(E)f(E)dE = \frac{8\pi}{3}\left(\frac{2m_n}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2}. \quad (9.3)$$

Электронный газ в металлах является вырожденным, т.е. подчиняется статистике Ферми-Дирака, вплоть до температур

$\sim 10^4$ К. Вследствие этого в процессе электропроводности могут принимать участие не все свободные электроны, а только небольшая их часть, имеющая энергию, близкую к энергии Ферми. Ускоряясь электрическим полем на длине свободного пробега, эти электроны приобретают добавочную скорость направленного движения:

$$v_F = \tau_F eE/m_n = eE\lambda/(m_n u_F),$$

где τ_F – время свободного пробега λ – длина свободного пробега; u_F – тепловая скорость быстрых электронов, обладающих энергией, близкой к E_F . С учетом этого удельная электрическая проводимость металла:

$$\gamma = \frac{e^2 n \lambda}{m_n u_F} = \frac{e^2 n^{2/3} \lambda}{h} \left(\frac{8\pi}{3} \right)^{1/3}.$$

В большинстве случаев можно считать, что эффективная масса электронов в металле равна массе свободного электрона $m_n = m_e$.

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Считая, что квантовые свойства "свободных" электронов проводимости в металле становятся существенными в том случае, когда их длина волны де Бройля становится сравнимой с постоянной решетки a , получить оценку температуры вырождения электронного газа в кристалле с концентрацией атомов n .

Решение. Длина волны де Бройля определяется выражением $\lambda = 2\pi\hbar/p$. Учитывая тепловую энергию kT и связь импульса с энергией $p = \sqrt{2m_e E} = \sqrt{2m_e kT}$, получим $\lambda = 2\pi\hbar/\sqrt{2m_e kT}$. Считая $\lambda \sim a$, имеем $T_b = 2\pi^2 \hbar^2 / (m_e k a^2)$. Учитывая, что постоянная кристаллической решетки a и концентрация n электронов в простом металле связаны соотношением $a \sim (V/N)^{1/3} \sim n^{-1/3}$, окончательно имеем $T_b \sim 2\pi^2 \hbar^2 n^{2/3} / (m_e k)$.

2. Найти среднюю энергию свободных электронов в металле при $T \approx 0$ К.

Решение. При $T \approx 0$ К уровень Ферми характеризует максимальную энергию электронов в металле. Распределение электронов по энергиям дается выражением (9.1). В соответствии с распределением Ферми-Дирака (рис.9.1) при $E < E_F$ функция $f(E) = 1$, а при $E > E_F$ функция $f(E) = 0$. Для определения средней энергии электронов необходимо суммарную энергию всех электронов, находящихся в единице объема, разделить на их концентрацию n :

$$\langle E \rangle = \frac{1}{n} \int_0^{E_F} E dn(E) = \frac{1}{n} \int_0^{E_F} EN(E) f(E) dE = \frac{1}{n} \int_0^{E_F} EN(E) dE.$$

Учитывая, (9.2) и (9.3), имеем

$$\langle E \rangle = \frac{3}{8\pi} \left(\frac{\hbar^2}{2m_n} \right)^{3/2} \frac{1}{E_F^{3/2}} \int_0^{E_F} E 4\pi \left(\frac{2m_n}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} dE = \frac{3}{2E_F^{3/2}} \int_0^{E_F} E \sqrt{E} dE = \frac{3E_F}{5}$$

3. Рассчитать положение уровня Ферми и среднее энергетическое расстояние между разрешенными энергетическими уровнями зоны проводимости в 1 см^3 серебра при температуре вблизи абсолютного нуля, полагая, что число свободных электронов равно количеству атомов серебра. Плотность серебра $\rho = 10,49 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.

Решение. Концентрация свободных электронов равна концентрации атомов $n = \frac{N_A m}{AV} = \frac{N_{AD}}{A}$, где N_A — число Авогадро; A —

атомная (или молекулярная) масса; m — масса образца; V — объем образца; ρ — плотность материала. Отсюда энергия Ферми

$$E_F = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{3N_{AD}}{\pi A} \right)^{2/3}.$$

Подставляя численные значения величин, получаем $E_F = 8,8 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 5,5 \text{ эВ}$. Среднее энергетическое расстояние между разрешенными уровнями $\delta E = E_F / N$, где N — число уровней, заполненных электронами. Концентрация электронов связана с энергией Ферми выражением (9.10) $n = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_n}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{3/2}$. Все

уровни, лежащие ниже уровня Ферми, практически полностью за-

полнены электронами, причем согласно принципу Паули на каждом уровне находятся два электрона. Отсюда следует, что

$$\delta E = \frac{E_F}{nV/2} = \frac{3E_F}{V4\pi\left(\frac{2m_n}{h^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2}} = \frac{3h^3}{4\pi V(2m_n)^{3/2} \sqrt{E_F}} = 0,188 \cdot 10^{-21} \text{ эВ.}$$

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. Атомарный газообразный водород находится в равновесном состоянии при $T = 6 \cdot 10^3$ К. Пользуясь распределением Больцмана, найти отношение числа атомов, находящихся в состоянии с $n = 2$, к их числу в основном состоянии ($n = 1$). Учесть, что кратность вырождения состояния с квантовым числом n составляет $g_n = 2n^2$.

2. Атомарный газообразный водород находится в равновесном состоянии при $T = 6 \cdot 10^3$ К. Пользуясь распределением Больцмана, найти отношение числа атомов, находящихся в состоянии $n = 3$, к их числу в состоянии $n = 2$. Учесть, что кратность вырождения состояния с квантовым числом n составляет $g_n = 2n^2$.

3. Так называемая "холодная плазма" характеризуется температурой $T = 10^4$ К и концентрацией частиц $n = 10^{18} \text{ м}^{-3}$. Оценить температуру вырождения протонной составляющей водородной плазмы. Классической или квантовой статистикой описывается состояние частиц в этой плазме?

4. Какому условию должна удовлетворять концентрация n заряженных частиц в плазме, для того чтобы последняя могла считаться идеальным газом? Удовлетворяет ли условию идеальности так называемая "горячая плазма"?

5. Оценить температуру вырождения электронного газа в меди.

6. Оценить температуру вырождения для газа электронов с $n = 10^{18} \text{ м}^{-3}$.

7. Определить вероятность заполнения электронами энергетического уровня в металле, расположенного на $10kT$ выше уровня Ферми.

8. Определить как и во сколько раз изменится вероятность заполнения электронами в металле энергетического уровня, распо-

ложенного на 0,1 эВ выше уровня Ферми, если температуру металла повысить от 300 до 1000 К.

9. Определить температуру, при которой вероятность нахождения электрона с энергией $E = 0,5$ эВ выше уровня Ферми в металле равна 1 %.

10. Вычислить минимальную длину волны де Бройля для свободных электронов в медном проводнике, где энергия Ферми составляет 7 эВ.

11. Энергия Ферми в кристалле серебра составляет 5,5 эВ. Найти максимальную и среднюю скорости электронов проводимости при $T \approx 0$ К. При расчете принять эффективную массу электронов равной массе свободного электрона.

12. Найти максимальную и среднюю скорости теплового движения свободных электронов в металле при $T \approx 0$ К, если концентрация электронов равна $8,5 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

Основной:

1. Трофимова Т.И. Курс физики / Т.И. Трофимова. — М.: Высшая школа, 2007.

2. Детлаф А.А. Курс физики: учеб. пособие / А.А. Детлаф, Б.М. Яворский. — М.: Высшая школа, 2006.

3. Пщелко Н.С. Физические основы полупроводниковой электроники, учеб. пособие / Н. С. Пщелко, А. С. Мустафаев, К. Л. Левин — [Электронный ресурс], контрольный номер RU/IS/BASE/463508393 — СПб: Нац. минер.-сырьевой ун-т «Горный», 2013 — 254 с.

4. Чуркин Ю.В. Физика твердого тела / Ю.В. Чуркин, С.В. Субботин. — СПб.: Изд.-во СЗТУ, 2008.

Дополнительный:

4. Савельев И.В. Курс физики. Т.3, М.: Лань, 2008.

5. Парфенова И.И. Квантовая механика, физика твердого тела и элементы атомной физики. / Парфенова И.И., Егоров С.В., Мустафаев А.С. и др. Сборник задач для студентов технических специальностей, СПб.: СПГИ (ТУ), 2010. — 112 с.

6. Томаев В.В. Общая физика. Физика твердого тела. Зонная теория твердых тел. Контактные и магнитные явления в твердых телах: метод. указания к лабораторным работам / В.В. Томаев, Т.В. Стоянова, К.Л. Левин. СПб.: 2012.

7. Шерстюк А.И. Физика твердого тела / А. И. Шерстюк. — СПб.: Изд.-во СЗТУ, 2003. — 151 с.

ПРИЛОЖЕНИЯ

1. НЕКОТОРЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ПОСТОЯННЫЕ (ОКРУГЛЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ)

Физическая постоянная	Обозначение	Значение
Постоянная Авогадро	N_A	$6,02 \cdot 10^{23}$ моль ⁻¹
Универсальная газовая постоянная	R	8,31 Дж/К·моль
Постоянная Больцмана	k	$1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К
Элементарный заряд	e	$1,6 \cdot 10^{19}$ Кл
Скорость света в вакууме	c	$3,0 \cdot 10^8$ м/с
Электрическая постоянная	ϵ_0	$8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м
Магнитная постоянная	μ_0	$4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м
Постоянная Планка	h \hbar	$6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с $1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с
Масса электрона	m	$9,1 \cdot 10^{-31}$ кг

2. МНОЖИТЕЛИ И ПРИСТАВКИ ДЛЯ ОБРАЗОВАНИЯ ДЕСЯТИЧНЫХ КРАТНЫХ И ДОЛЬНЫХ ЕДИНИЦ И ИХ НАИМЕНОВАНИЙ

Приставка		
Наименование	Обозначение	Множитель
экса	Э	10^{18}
пэта	П	10^{15}
тера	Т	10^{12}
гига	Г	10^9
мега	М	10^6
кило	к	10^3
гекто	г	10^2
Дека	да	10^1
Деци	д	10^{-1}
Санتي	с	10^{-2}
Милли	м	10^{-3}
Микро	мк	10^{-6}
Нано	н	10^{-9}
Пико	п	10^{-12}

Приставка		
Наименование	Обозначение	Множитель
Фемто	ф	10^{-15}
Атто	а	10^{-18}

3. ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НЕКОТОРЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ (температура комнатная)

Тип полупроводника	Ширина запрещенной зоны	Удельное сопротивление	Подвижность	
	E_g		Электроны	Дырки
	эВ	Ом·с	$m^2/V\cdot c$	
Собственный германий	0,66	0,5	0,39	0,19
Собственный кремний	1,1	$6,2 \cdot 10^2$	0,15	0,05
Арсенид галлия	1,43		0,85	0,042

4. ГРЕЧЕСКИЙ АЛФАВИТ

Обозначения букв	Названия букв
A, α	альфа
B, β	бета
Γ, γ	гамма
Δ, δ	дельта
E, ε	эпсилон
Z, ζ	дзета
H, η	эта
Θ, θ	тхэта
I, ι	йота
K, κ	каппа
Λ, λ	ламбда
M, μ	мю
N, ν	ню
Ξ, ξ	кси
O, ο	омикрон

Обозначения букв	Названия букв
Π, π	пи
Ρ, ρ	ро
Σ, σ	сигма
Τ, τ	тау
Υ, υ	ипсилон
Φ, φ	фи
Χ, χ	хи
Ψ, ψ	пси
Ω, ω	омега

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
1. Модель атома Бора	4
2. Волны де Бройля	8
3. Соотношение неопределенностей Гейзенберга	9
4. Введение в квантовую механику. Уравнение Шредингера	12
5. Потенциальная яма и потенциальный барьер.	18
6. Строение атома	23
7. Рентгеновские спектры атомов.	29
8. Спектры молекул.	33
9. Статистика квантовых частиц. Электроны в металле.	39
Библиографический список	45
Приложения	46