Тема 9

ЕЛЕМЕНТИ АТОМНОЇ ФІЗИКИ ТА КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Зміст

Елементи релятивістської механіки

Релятивістська маса:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-(V/c)^2}} \text{ чи } m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}},$$

де m_0 – маса спокою частинки; V – її швидкість; c – швидкість світла в вакуумі; β – швидкість частинки, яка виражена в долях від швидкості світла ($\beta = V/c$).

Взаємозв'язок маси та енергії релятивістської частинки:

$$E = mc^2 \text{ або } E = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{E_0}{\sqrt{1-\beta^2}},$$

де $E_0 = m_0c^2$ – енергія спокою частинки.

Повна енергія вільної частинки:

$$E = E_0 + T,$$

де T – кінетична енергія релятивістської частинки.

Кінетична енергія релятивістської частинки:

$$T = (m - m_0)c^2 \text{ або } T = E_0\left(\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1\right).$$

Імпульс релятивістської частинки:

$$p = \frac{m_0V}{\sqrt{1-(V/c)^2}} \text{ або } p = m_0c\frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}.$$

Зв'язок між повною енергією та імпульсом релятивістської частинки:

$$E^2 = E_0^2 + (pc)^2.$$

Хвильові властивості мікрочастинок. Хвилі де Бройля

Французький вчений де Бройль висунув гіпотезу (1924 р.) про універсальність корпускулярно–хвильового дуалізму, тобто твердження, що не тільки електромагнітне випромінювання являє собою хвильовий процес і потік частинок (квантів випромінювання, фотонів) одночасно, але й мікрочастинки аналогічно зв'язані з хвильовим процесом. Якщо частинка має енергію ε і імпульс P, то з нею пов'язується хвиля з частотою

$$\nu_Б = \frac{\varepsilon}{h}$$

та довжиною

$$\lambda_Б = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\mathrm{v}}, \text{ або } \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Ця **хвиля** називається **хвилею де Бройля.** Хвильова природа мікрочастинок виявлена експериментально (дифракція електронних та нейтронних пучків на кристалах). Хвильові властивості електронних пучків використовуються в роботі електронного мікроскопа. Довжина хвилі де Бройля для електронів значно менша довжини світлової хвилі, що обумовлює дуже велику роздільну здатність електронного мікроскопа, що дає можливість одержати інформацію про окремі атоми і молекули речовини, що неможливо отримати за допомогою оптичного мікроскопа.

Імпульс частинки та його зв'язок з кінетичною енергією T:

а) $p = m_0V$; $p = \sqrt{2mT}$;

б) $p = mV = \dfrac{m_0V}{\sqrt{1-(V/c)^2}}$; $p = \dfrac{1}{c}\sqrt{(2E_0+T)T}$,

де m_0 – маса спокою частинки; m – релятивістська маса; V – швидкість частинки; c – швидкість світла у вакуумі; E_0 – енергія спокою частинки ($E_0=m_0c^2$).

Співвідношення невизначеностей:

а) $\Delta p_x \Delta x \geq h$ для координати та імпульсу,

де Δp_x – невизначеність проекції імпульсу на вісь x; Δx – невизначеність координати;

б) $\Delta E \Delta t \geq h$ для енергії та часу,

де ΔE – невизначеність енергії; Δt – час життя квантової системи в даному енергетичному стані.

Одномірне рівняння Шредінгера для стаціонарних станів:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{h^2}(E - U)\psi(x) = 0,$$

де $\psi(x)$ – хвильова функція, яка описує стан частинки; m – маса частинки; E – повна енергія; $U(x)$ – потенціальна енергія частинки.

Густина ймовірності:

$$\frac{d\omega(x)}{dx} = |\psi(x)|^2,$$

де $\psi(x)$ – ймовірність того, що частинка може бути знайдена поблизу точки з координатою x на ділянці dx.

Ймовірність знаходження частинки в інтервалі від x_1 до x_2 :

$$\omega = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx .$$

Розв'язок рівняння Шредінгера для одномірної, нескінченно глибокої, прямокутної потенціальної ями:

а) $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$ – власні нормовані хвильові функції;

б) $E_n = \frac{\pi^2 h^2 n^2}{2ml^2}$ – власні значення енергії,

де n – квантове число (n=1,2,3...); l – ширина потенціальної ями.

При цьому в області $0 \leq x \leq l$; значення $U \to \infty$ та $\psi(x) = 0$.

Теорія атома за Бором. Спектр атома водню. Природа спектральних ліній

1 Відомо, що спектри випромінювання газів – лінійчасті. Вимірювання частот спектральних ліній показало, що вони розміщуються групами (серіями) і підпорядковуються певним закономірностям; їх було встановлено емпірично. Самий простий спектр належить самому простому хімічному елементу – водню. Частота ν будь-якої лінії спектра водню описується формулою:

$$\nu = R\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right), \tag{1}$$

де $R = 3{,}29 \cdot 10^{15}\ c^{-1}$ – константа, що називається сталою Рідберга, а k та n – додатні цілі числа, причому $n>k$.

Група ліній, що відповідає k=1 і n = 2,3,4..., розміщується в ультрафіолетовій частині спектра – це серія Лаймана. Групу ліній, для якої k=2 і n = 3,4,5,.., названо серією Бальмера. Чотири її лінії знаходяться у видимій області спектра, інші – в ультрафіолетовій. При k=3,4,5,… отримуємо відповідно серії Пашена, Брекета, Пфундта і т.д.; вони знаходяться в інфрачервоній області.

2. Оскільки частоти ліній визначаються різницями енергій стаціонарних станів атома,

$$h\nu = W_n - W_k, \qquad W_n > W_k, \tag{2}$$

то знаючи лінійчатий спектр, можна визначити енергії стаціонарних станів. Для подальшого зручно, помноживши співвідношення (1) на h, представити його у вигляді, подібному до (2):

$$h\nu = \frac{W_Б}{k^2} - \frac{W_Б}{n^2}; \quad h\nu = \frac{W_Б}{n^2} - \left(-\frac{W_Б}{k^2}\right), \tag{2а}$$

де $W_Б = h \cdot R$ =13,55 еВ – константа, що називається борівською енергією.

Згідно з планетарною моделлю атома, запропонованою Резерфордом, електрон обертається навколо ядра атома водню по коловій орбіті. При цьому сила кулонівського притягання електрона та ядра $F_{кул}$. відіграє роль доцентрової сили, $F_{доц} = mV^2/r$ (тут r – радіус орбіти, V – швидкість електрона, що рухається по цій орбіті):

$$F_{кул.} = F_{доц}. \tag{3}$$

Кулонівська сила визначається виразом:

$$F_{кул.} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{r^2},$$

де ε_0 – електрична стала. Підставляючи у це співвідношення значення обох сил, одержуємо

$$\frac{mV^2}{2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{r}. \tag{4}$$

Повна енергія атома водню W складається з кінетичної енергії електрона $W_{кін} = mV^2/2$ і взаємної потенціальної енергії електрона та ядра,

$$W_{пот} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{r^2}; \qquad W = W_{кін} + W_{пот}.$$

Підставляючи в останню формулу значення кінетичної і потенціальної енергій, знаходимо, що повна енергія атома є від’ємною:

$$W = -\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4pe_0} \cdot \frac{1}{r^2}. \tag{5}$$

Тепер, порівнюючи ці співвідношення, знаходимо енергію стаціонарних станів атома:

$$W = W_n = -W_Б / n^2. \tag{6}$$

Число n у формулі (6) може приймати будь–які цілі значення від 1 до ∞, його називають головним квантовим числом, воно визначає номер стаціонарного стану. Як бачимо, зі збільшенням n енергія стаціонарного стану зростає (бо $W < 0$). Стан n=1 є основним, йому відповідає найменша енергія атома водню, W_1=-$W_Б$=13,55 еВ; усі інші стани – збуджені.

3. Співвідношення (5) отримано для будь-якої колової орбіти електрона. Згідно з цим співвідношенням енергія атома визначається радіусом орбіти електрона. Оскільки енергія атома може приймати тільки суворо визначені дискретні значення (див. формулу (6)), то звідси робимо висновок, що і електронні орбіти можуть бути не будь-якими, а тільки суворо визначеними – стаціонарним станам відповідають стаціонарні орбіти. Радіуси стаціонарних орбіт r=r_n знаходимо, прирівнюючи праві частини виразів (5) і (6):

$$r_n = r_Б \cdot n^2, \qquad \text{де} \qquad r_Б = \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 W_Б} = 0{,}53 \cdot 10^{-10}\ м, \tag{7}$$

$r_Б$ – константа, що називається борівським радіусом. Відповідно до (7) радіус стаціонарної орбіти пропорційний квадрату головного квантового числа (див. рис.9).

Із співвідношення r_n=$r_Б \cdot n^2$ випливає, що значення $n \to \infty$ відповідає нескінченно великій відстані електрона від ядра. Це означає, що атом водню іонізовано (електрон відірвано від атома). Разом з тим, відповідно до (5) при $n \to \infty$ прямує до нуля повна енергія W атома. Отже, для іонізації атома водню, що знаходиться в основному стані (тобто такому, що має енергію: W=W_1=-$W_Б$) йому необхідно надати енергію, що дорівнює $W_Б$. Таким чином, борівська енергія має зміст енергії іонізації атома водню.

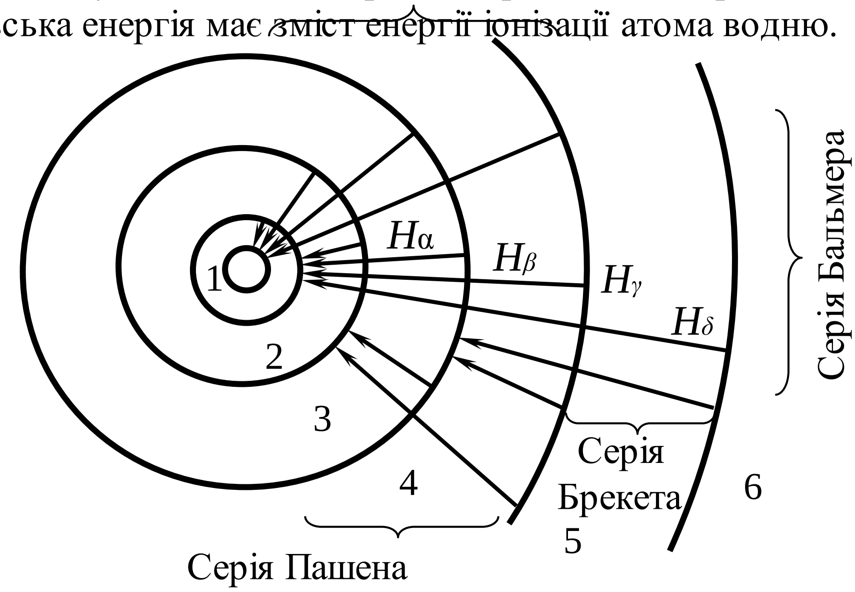

Рис. 9

4.Електрон, що обертається по коловій орбіті, характеризується моментом імпульсу L, який дорівнює mVr (див. рис.10); із співвідношень (4) та (7) випливає, що момент імпульсу електрона, який рухається по n-й стаціонарній орбіті, mV_nr_n (тут V_n – швидкість електрона при русі по n-й орбіті), пропорційний n:

$$mV_nr_n = n\hbar\ , \tag{8}$$

де $\hbar = h/2\pi$ =1,054·10^{-34} Дж·с (константу $\hbar$ як і h, називають сталою Планка).

Таким чином, **стаціонарними є такі орбіти, для яких момент імпульсу електрона є кратним величині** $\hbar$. Це твердження отримало назву **правила квантування орбіт.** Його вперше сформулював Бор (1913 р.).

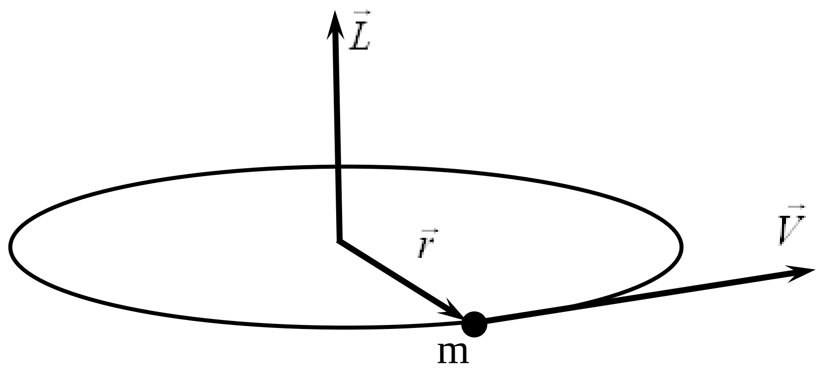

Рис. 10

5. Перехід атома водню з одного стаціонарного стану n (з енергією $W_n = -W_Б/n^2$) до іншого $k<n$ (з меншою енергією $W_k = -W_Б/k^2$) означає перехід електрона із стаціонарної орбіти номер n на орбіту номер k, яка ближче розташована до ядра. Рис.10 ілюструє борівську інтерпретацію водневих ліній. Ультрафіолетова серія Лаймана (*k*=1), серія Бальмера у видимій області спектра (*k*=2), інфрачервона серія Пашена (*k*=3) і ще більш зсунута в інфрачервону область серія Брекета (*k*=4) показані стрілками відповідних електронних переходів.

Для градуювання спектроскопа використовують чотири видимі лінії серії Бальмера, що отримали назви H_α (червона, $л$ = 656,3 нм), H_β (зелена, $л$ =486,7нм), H_γ (синя, $л$ -434,0 нм) і H_δ (фіолетова, $л$ =410,2 нм).