МГТУ им. Н.Э. Баумана
Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В.

Методические указания к решению задач по курсу общей физики.

Раздел «Квантовые свойства атомов».

Москва, 2003.

В методических указаниях содержится краткий обзор основных понятий и соотношений квантовой теории атомов, необходимых для решения задач. Изложена методика решения типовых задач и приведены условия задач для самостоятельного решения. Представленный материал предполагает проработку раздела курса общей физики «Элементы квантовой механики».
Для студентов 2-го курса всех специальностей МГТУ им. Н.Э. Баумана.

1. КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ АТОМОВ.

К числу важных физических объектов относятся атомные системы. Наиболее простыми из таких систем являются водородоподобные атомы, т. е. атомы или ионы, в которых один единственный электрон движется в кулоновском поле ядра с зарядом $+Ze$, где e - элементарный электрический заряд, Z - атомный номер элемента. Для атома водорода Z=1, для однократно ионизированного атома гелия He^+ Z=2, для двукратно ионизированного атома лития Li^{++} Z=3.

В 1913 г. Н. Бор предложил теорию, которая позволила рассчитать полную энергию электрона в водородоподобных атомах. Одним из постулатов этой теории является тот, согласно которому электрон может двигаться вокруг ядра только по таким стационарным орбитам, для которых момент импульса электрона имеет определенные дискретные значения $L = n\hbar$, где n=1, 2, 3, … - номер стационарной орбиты, $\hbar$ - рационализированная постоянная Планка. Теория Бора не является законченной теорией атомных систем и не может описать всех их свойств, так как она не учитывает наличия у электрона волновых свойств.

Полностью описать свойства водородоподобных атомов смогла только квантовая механика. В этой теории для того, чтобы найти волновые функции, описывающие квантовые состояния электрона в водородоподобном атоме, необходимо решить стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{\mathrm{H}}\psi = E\psi \tag{1.1}$$

где $\hat{\mathrm{H}}$ - оператор полной энергии (гамильтониан), а E - полная энергия электрона.

Так как потенциальная энергия электрона, находящегося в электрическом поле ядра на расстоянии r от него,

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}, \tag{1.2}$$

то гамильтониан $\hat{\mathrm{H}}$ в рассматриваемой задаче

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + U(r),$$

где m_0 - масса электрона.

Уравнение Шредингера (1.1) может быть представлено в виде

$$\Delta\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]\psi = 0 \tag{1.3}$$

Уравнение (1.3) удобнее решать в сферической системе координат (r, θ, φ), центр которой совпадает с центром ядра атома. Будем считать ядро неподвижным. В такой системе координат волновая функция имеет вид ψ=ψ(r, θ, φ), а оператор Лапласа

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi} \tag{1.4}$$

содержит радиальную часть

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{1.5}$$

и угловую часть

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{1.6}$$

Волновая функция, являющаяся решением уравнения (1.3), зависит от трех квантовых чисел.

1. **Главное квантовое число *n*** принимает значения

$$n=1, 2, 3, \ldots$$

и определяет полную энергию электрона в заданном квантовом состоянии

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2} = -13{,}6\frac{Z^2}{n^2} \quad \text{эВ}. \tag{1.7}$$

В связанном состоянии электрон в атоме имеет дискретный энергетический спектр, лежащий в области отрицательных значений. На рис. 1 приведен энергетический спектр электрона в атоме водорода (Z=1). Положительные значения энергии на этом рисунке соответствуют свободному электрону, поэтому изображенный на рисунке переход 2 соответствует отрыву электрона от ядра, т. е. ионизации атома. Из (1.7) следует, что величина энергии ионизации атома водорода $E_i = |E_1|$ =13,6 эВ.

2. **Орбитальное (азимутальное) квантовое число *l*** в квантовых состояниях с заданным значением главного квантового числа n может иметь следующие значения:

$$l=0, 1, ..., (n - 1).$$

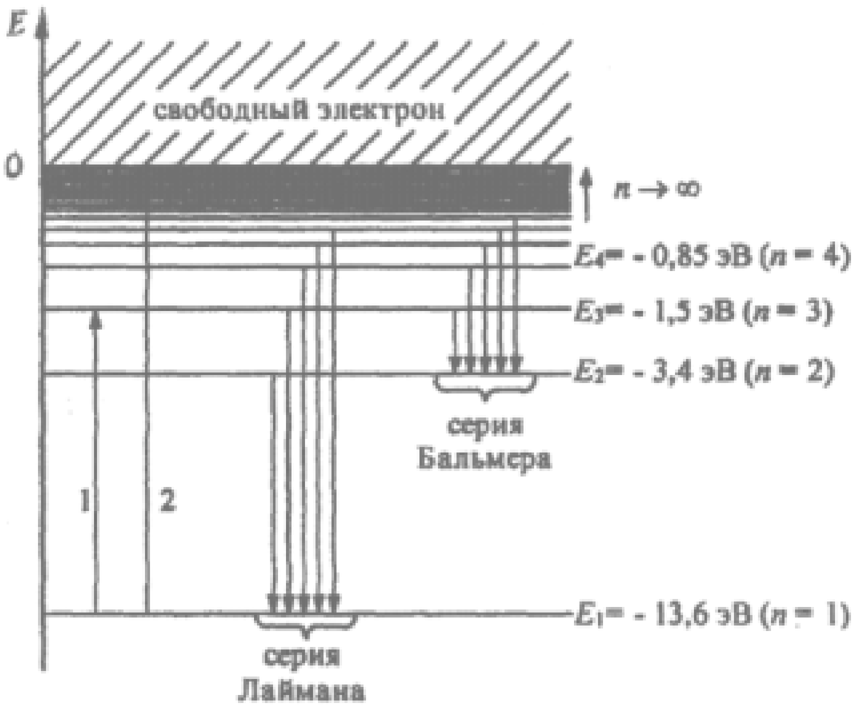

Рис. 1

Это квантовое число определяет орбитальный угловой момент импульса электрона

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \tag{1.8}$$

и соответствующий магнитный момент

$$p^{\text{М}} = \mu_{\text{Б}}\sqrt{l(l+1)}\,. \tag{1.9}$$

Здесь универсальная постоянная

$$\mu_Б = \frac{e\hbar}{2m_0} = 0{,}927\cdot 10^{-23} \quad \frac{\text{Дж}}{\text{Тл}}$$

служит единицей измерения магнитных моментов атомов и называется м а г н е т о н о м Б о р а.

3. **Магнитное квантовое число *m*** в квантовых состояниях с заданным значением орбитального квантового числа может принимать ($2l + 1$) различных значений:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l.$$

Магнитное квантовое число определяет проекции механического и магнитного моментов на выделенное внешним полем направление *z:*

$$L_z = m\hbar, \tag{1.10}$$

$$p_z^{М} = m\mu_Б. \tag{1.11}$$

Для обозначения квантовых состояний электрона в атоме используют спектроскопические символы (табл. 1).

Таблица 1

Квантовое число l	0	1	2	3	…
Символ состояния	*s*	*p*	*d*	*f*	…

Следующие квантовые числа обозначают буквами *g*, *h* и далее по латинскому алфавиту.

Перед спектроскопическим символом указывают значение главного квантового числа *n*. Поэтому электрон в квантовом состоянии с n=1 и l=0 обозначается символом 1*s*, а в состоянии с n=2 и l=1 - символом 2*p* и т. д.

Приведем выражения для нормированных волновых функций $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ в некоторых квантовых состояниях электрона в водородоподобных атомах (табл. 2). В качестве характерного размера выберем первый боровский радиус

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2} = 0{,}529\cdot 10^{-10} \quad \text{м},$$

а в качестве безразмерной радиальной координаты – величину $\rho = \frac{r}{a}Z$.

Таблица 2

n	*l*	*m*	ψ_{nlm}	Состояние
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} exp(-\rho)$	1*s*
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} (2-\rho)\cdot exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)$	2*s*
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho\cdot exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\cdot cos\theta$	2*p*
2	1	+1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho\cdot exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\cdot sin\theta\cdot exp(i\varphi)$	2*p*
2	1	-1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho\cdot exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\cdot sin\theta\cdot exp(-i\varphi)$	2*p*

Состояние с наименьшей полной энергией электрона (1*s* - состояние) называется основным состоянием атома, а все остальные - возбужденными состояниями. Переход 1 на рис. 1 соответствует возбуждению атома водорода.

Возбужденный атом самопроизвольно переходит в состояние с меньшей энергией, испуская при таком переходе квант энергии излучения. Поэтому, если переход осуществляется из состояния с главным квантовым числом n_1 в состояние с главным квантовым числом n_2, то

$$\hbar\omega_{12} = E_{n_1} - E_{n_2} \tag{1.12}$$

С учетом (1.7) отсюда находим частоту излучения при таком переходе

$$\omega_{12} = Z^2 R\left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right), \quad n_1 > n_2 , \tag{1.13}$$

где постоянная Ридберга

$$R = \frac{m_0 e^4}{32\pi^2\varepsilon_0\hbar^3} = 2,07\cdot 10^{16} \quad \text{c}^{-1} .$$

Согласно (1.13), оптический спектр излучения водородоподобного атома состоит из спектральных серий, каждая из которых задается номером n_2 нижнего энергетического уровня, на который происходят переходы. Спектральные серии имеют следующие названия: n_2=1 - серия Лаймана (ультрафиолетовое излучение); n_2=2 - серия Бальмера (видимый свет); n_2=3 - серия Пашена (инфракрасное излучение) и т. д. Для атома водорода (Z=1) на рис. 1 изображены переходы, соответствующие линиям излучения серий Лаймана и Бальмера.

В релятивистской квантовой механике (П. Дирак, 1928 г.) состояние электрона в атоме характеризуют уже заданием четырех квантовых чисел. Четвертое квантовое число принимает два значения: $m_s=\pm s$ и называется **спиновым квантовым числом**, причем для электрона спин s=1/2. Спин электрона характеризует собственные, т. е. не связанные с движением в атоме, механический L_S и магнитный p_S^M моменты электрона, которые определяются выражениями:

$$L_S = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar ; \tag{1.14}$$

$$p_S^M = 2\mu_Б\sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3}\mu_Б . \tag{1.15}$$

Проекции этих моментов на выделенное в пространстве направление:

$$L_{SZ} = m_S\hbar = \pm\frac{\hbar}{2}; \tag{1.16}$$

$$p_{SZ}^M = 2m_S\mu_Б = \pm\mu_Б \tag{1.17}$$

Следовательно, электрон в атоме обладает как орбитальным моментом импульса L, так и спиновым (собственным) моментом импульса L_S. Сумма этих двух моментов дает полный момент импульса электрона в атоме, величина которого определяется выражением

$$L_j = \hbar\sqrt{j\left(j+1\right)} . \tag{1.18}$$

Здесь j - квантовое число полного момента. Оно принимает значения в нашем случае $j=l+s$ и $j=|l-s|$,

$$j=l + 1/2 \text{ и } j=|l - 1/2|, \tag{1.19}$$

Примеры решения задач.

Задача 1.1. Определите для водородоподобного атома радиус n-й боровской орбиты, скорость электрона на ней v и его полную энергию E.

Решение. В теории Бора электрон в атоме может двигаться только по определенным стационарным орбитам, для которых выполнено условие квантования момента импульса: $L = n\hbar$, где n=1,2, … - номер орбиты. Для круговых орбит $L=m_0\text{v}r\cdot$и условие вращения электрона по стационарной орбите можно записать в виде

$$\begin{cases} \dfrac{m_0\text{v}^2}{r} = \dfrac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}, \\ m_0\text{v}r = nh. \end{cases}$$

Решая эту систему уравнений, находим радиус n-й орбиты

$$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2}\cdot\frac{n^2}{Z} = \frac{a}{Z}\cdot n^2 .$$

Для скорости электрона на n-й орбите получаем значение

$$\mathrm{v}_n = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar n}.$$

Полная энергия электрона, движущегося по n-й стационарной орбите, равна сумме кинетической и потенциальной энергий:

$$E = E_K + U = \frac{m_0\mathrm{v}_n^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n}.$$

Подставляя сюда найденные значения r_n и v_n, находим полную энергию электрона в водородоподобном атоме

$$E = -\frac{m_0 e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2}.$$

Задача 1.2. Определите кратность вырождения энергетических уровней водородоподобного атома.

Решение. Кратностью вырождения энергетического уровня называется число возможных квантовых состояний с одинаковым значением полной энергии электрона, равным энергии этого уровня.

Полная энергия электрона в атоме определяется (см. 1.7) значением главного квантового числа n. В нерелятивистской квантовой механике Шредингера квантовое состояние электрона в атоме задается тремя квантовыми числами, причем для заданного значения n орбитальное квантовое число l может принимать n значений от 0 до n-1, а каждому значению соответствует ($2l$+1) значений магнитного квантового числа m.

Поэтому кратность вырождения энергетического уровня N в этой теории подсчитаем, найдя число возможных комбинаций чисел l и m для заданного значения квантового числа n. Следовательно, без учета спина электрона, кратность вырождения энергетического уровня

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

Для этой арифметической прогрессии, содержащей n слагаемых, значения первого и последнего членов прогрессии

$$a_1 = 1,\ a_n = 2n - 1.$$

Поэтому по формуле суммы арифметической прогрессии находим

$$N = S_n = \frac{(a_1 + a_n)n}{2} = \frac{(1 + 2n - 1)n}{2} = n^2 .$$

С учетом спина электрона и двух возможных значений спинового квантового числа $m_S = \pm 1/2$, кратность вырождения уровней удваивается. Поэтому окончательно, для кратности вырождения n -го энергетического уровня в водородоподобном атоме, получаем значение

$$N = 2n^2 .$$

Задача 1.3. Определите разность длин волн между головными линиями серий Бальмера $\lambda_Б$ и Лаймана $\lambda_Л$ в спектре излучения иона Li^{++} (Z=3).

Решение. Головной линией спектральной серии излучения водородоподобного атома называется спектральная линия, соответствующая переходу на уровень с главным квантовым числом n_2 с ближайшего энергетического уровня, т. е. с уровня, для которого $n_1 = n_2 + 1$. Так как для линий серии Лаймана n_2=1, а для линий серии Бальмера n_2=2, то для частот головных линий этих серий из (1.13) получаем следующие значения:

$$\omega_Л = Z^2 R\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right) = \frac{3}{4} Z^2 R;$$

$$\omega_Б = Z^2 R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2}\right) = \frac{5}{36} Z^2 R.$$

Длины волн излучений для этих линий

$$\lambda_Л = \frac{2\pi c}{\omega_Л} = \frac{8\pi c}{3Z^2 R}; \quad \lambda_Б = \frac{2\pi c}{\omega_Б} = \frac{72\pi c}{5Z^2 R}.$$

Отсюда находим искомую разность этих длин волн

$$\Delta\lambda = \lambda_Б - \lambda_Л = \frac{176}{15}\frac{\pi c}{Z^2 R}.$$

Подставляя числовые значения, находим $\Delta\lambda = 5{,}93\cdot 10^{-8}$ м = 59,3 нм.

Задача 1.4. Найдите наиболее вероятное расстояние $r_В$ электрона от ядра в водородоподобном атоме, находящемся в 1*s* - состоянии. Определите вероятность нахождения электрона в области $r \le r_В$.

Решение. В основном 1*s* - состоянии (n=1, l=0, m=0) волновая функция электрона в водородоподобном атоме

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} exp\left(-Z\frac{r}{a}\right)$$

не зависит от угловых координат.

Поэтому по смыслу волновой функции вероятность dP обнаружить электрон в тонком шаровом слое радиуса r и толщины dr в сферически симметричном квантовом состоянии

$$dP = \left|\psi_{100}\right|^2 dV.$$

Здесь $dV = 4\pi r^2 dr$ - объем рассматриваемого шарового слоя. Следовательно,

$$dP = \left|\psi_{100}\right|^2 4\pi r^2 dr = \omega(r) dr,$$

где радиальная плотность вероятности

$$\omega(r) = 4\left(\frac{Z}{a}\right)^3 r^2 exp\left(-2Z\frac{r}{a}\right).$$

Наиболее вероятным расстоянием электрона от ядра будет расстояние $r_В$, для которого радиальная плотность вероятности $\omega(r)$ будет максимальна.

Приравняв производную $\omega(r)$ по r к нулю, получим, что при $r = r_В$

$$2r\cdot exp\left(-2Z\frac{r}{a}\right) - r^2\frac{2Z}{a} exp\left(-2Z\frac{r}{a}\right) = 2r\cdot exp\left(-2Z\frac{r}{a}\right)\left[1 - r\frac{Z}{a}\right] = 0.$$

Отсюда находим, что

$$r_В = \frac{Z}{a}.$$

Вероятность того, что электрон находится в шаровой области $r \le r_В$,

$$P(r \le r_В) = \int_0^{r_В}\left|\psi_{100}\right|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a}\right)^3 \int_0^{a/Z} e^{-2Z\frac{r}{a}} \cdot 4\pi r^2 dr =$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^{a/Z}\left(2Z\frac{r}{a}\right)^2 e^{-2Z\frac{r}{a}} \cdot d\left(2Z\frac{r}{a}\right) = \frac{1}{2}\int_0^2 x^2 e^{-x} dx.$$

Интегрируя по частям, получаем

$$P(r \le r_В) = \frac{1}{2}\left[e^{-x}\left(-x^2 - 2x - 2\right)\right]\Big|_0^2 = 1 - 5e^{-2} = 0{,}323.$$

Задача 1.5. Вычислите вероятность нахождения электрона в основном состоянии в атоме водорода вне границ классической области движения.

Решение. Полную энергию электрона в основном состоянии в атоме водорода найдем из (1.7) при Z=1 и n=1. Имеем

$$E = -\frac{m_0 e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}.$$

Так как по классическим представлениям полная энергия E движущейся частицы не может быть меньше ее потенциальной энергии U, то в границах классической области движения $E \geq U$. Потенциальная энергия электрона в поле ядра

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

Поэтому классическая теория допускает движение электрона, находящегося в основном состоянии, лишь в области пространства, для которой

$$-\frac{m_0 e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \geq -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

Отсюда находим границу шаровой области, в которой может двигаться электрон с точки зрения классической теории:

$$r_{КЛ} = \frac{8\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2} = 2a,$$

где a - первый боровский радиус.

Вероятность нахождения электрона вне классической области движения

$$\mathrm{P}\left(r \geq r_{\text{КЛ}}\right) = \int_{2a}^{\infty} \left|\psi_{100}\right|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = \int_{2a}^{\infty} \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}} \cdot 4\pi r^2 dr =$$

$$= \frac{1}{2}\int_{2a}^{\infty} \left(\frac{2r}{a}\right)^2 e^{-\frac{2r}{a}} \cdot d\left(\frac{2r}{a}\right) = \frac{1}{2}\int_{4}^{\infty} x^2 e^{-x} dx.$$

Интегрируя по частям, находим

$$\mathrm{P}\left(r \geq r_{\text{КЛ}}\right) = \frac{1}{2}\left[e^{-x}\left(-x^2 - 2x - 2\right)\right]\Big|_4^{\infty} = 13e^{-4} = 0{,}238.$$

Таким образом, искомая вероятность обнаружить электрон в основном состоянии атома водорода вне границ области, разрешенной для движения электрона в классической механике, оказалась равной 23,8 %.

Задача 1.6. Электрон в атоме водорода находится в квантовом состоянии, описываемой волновой функцией вида $\psi = A(1 + \alpha r)e^{\beta r}$, где A, α и β - некоторые постоянные. Определите значения постоянных A, α, β и полную энергию электрона E.

Решение. Уравнение Шредингера для атома водорода (1.3) можно записать в следующем виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi = E\psi.$$

Поскольку заданная в условии задачи волновая функция зависит только от радиальной координаты $\boldsymbol{r}$, то оператор Лапласа Δ содержит только радиальную часть (1.5), т. е.

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}.$$

Найдем первую и вторую производные волновой функции ψ по r:

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r}\left(Ae^{\beta r} + A\alpha re^{\beta r}\right) = A\left(\alpha + \beta\right)e^{\beta r} + A\alpha\beta re^{\beta r};$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} = A(\alpha+\beta)\beta e^{\beta r} + A\alpha\beta e^{\beta r} + A\alpha\beta^2 r e^{\beta r} = A(2\alpha+\beta)\beta e^{\beta r} + A\alpha\beta^2 r e^{\beta r}$$

Подставляя производные в уравнение Шредингера, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[A(2\alpha+\beta)\beta e^{\beta r} + A\alpha\beta^2 r e^{\beta r} + \frac{2A}{r}(\alpha+\beta)e^{\beta r} + \frac{2A}{r}\alpha\beta r e^{\beta r}\right] -$$

$$-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}A(1+\alpha r)e^{\beta r} = EA(1+\alpha r)e^{\beta r}.$$

Сокращая обе части равенства на $Ae^{\beta r}$ и собирая слагаемые с одинаковыми степенями r, приходим к соотношению

$$r^{-1}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}2(\alpha+\beta) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right] + r^0\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(4\alpha\beta+\beta^2\right) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\alpha - E\right] +$$

$$+r^{+1}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\alpha\beta^2 - \alpha E\right] = 0.$$

Для того чтобы левая часть этого равенства обращалась в нуль при любых значениях r, необходимо, чтобы коэффициенты при всех степенях r были равны нулю. Это приводит к следующей системе уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{\hbar^2}{2m_0}\beta^2 + E = 0; \\ \dfrac{\hbar^2}{2m_0}\left(4\alpha\beta+\beta^2\right) + \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\alpha + E = 0; \\ \dfrac{\hbar^2}{m_0}(\alpha+\beta) + \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = 0. \end{cases}$$

Из первого уравнения этой системы находим

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\beta^2.$$

Подставляя это значение во второе уравнение, получаем

$$\beta = -\frac{m_0 e^2}{8\pi\varepsilon_0\hbar^2} = -\frac{1}{2a}.$$

Теперь из третьего уравнения находим

$$\alpha = \beta = -\frac{m_0 e^2}{8\pi\varepsilon_0\hbar^2} = -\frac{1}{2a}.$$

Следовательно, постоянные α и β найдены, а полная энергия электрона

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\beta^2 = -\frac{m_0 e^4}{128\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}.$$

Теперь волновая функция может быть записана в виде

$$\psi = A\left(1 - \frac{r}{2a}\right)e^{-\frac{r}{2a}}.$$

Коэффициент A найдем из условия нормировки волновой функции

$$\int_0^\infty |\psi(r)|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = 1.$$

Подставляя в это соотношение найденную волновую функцию, получим

$$4\pi A^2\int_0^\infty\left(1-\frac{r}{2a}\right)^2 e^{-\frac{r}{a}}r^2dr=1.$$

Вводя новую переменную интегрирования $x=r/a$, приводим это равенство к виду

$$4\pi A^2a^3\int_0^\infty\left(x^2-x^3+\frac{1}{4}x^4\right)e^{-x}dx=1.$$

Вычисляя по частям интегралы

$$I_1=\int_0^\infty x^2e^{-x}dx=2,\quad I_2=\int_0^\infty x^3e^{-x}dx=6,\quad I_3=\int_0^\infty x^4e^{-x}dx=24,$$

находим, что

$$8\pi A^2a^3=1.$$

Отсюда

$$A=\frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}}=\frac{1}{2\sqrt{2\pi a^3}}.$$

Итак, волновая функция электрона

$$\psi(r)=\frac{1}{2\sqrt{2\pi a^3}}\left(1-\frac{r}{2a}\right)e^{-\frac{r}{2a}}$$

точно соответствует волновой функции ψ_{200}, описывающей квантовое состояние 2s - электрона (см. табл. 2). Найденная полная энергия электрона также соответствует формуле (1.7) для n=2.

Задача 1.7. Для основного состояния электрона в атоме водорода определите средние значения следующих величин: а) расстояния электрона от ядра r, б) модуля силы взаимодействия электрона и ядра; в) потенциальной энергии взаимодействия электрона с ядром.

Решение. В соответствии с основными положениями квантовой механики среднее значение физической величины f, которой соответствует квантово-механический оператор $\hat{\Phi}$, определятся соотношением

$$<f>=\int_{\mathbb{R}^N}\psi^*\hat{\Phi}\psi dV.$$

1. Так как оператор радиальной координаты $\hat{r}=r$ есть оператор умножения на эту координату, а в основном состоянии электрона в атоме водорода волновая функция

$$\psi=\psi^*=\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}},$$

то

$$<r>=\int_0^\infty\psi_{100}\left(\hat{r}\psi_{100}\right)4\pi r^2dr=\frac{4}{a^3}\int_0^\infty r^3e^{-\frac{2r}{a}}dr=$$

$$=\frac{a}{4}\int_0^\infty\left(\frac{2r}{a}\right)^3e^{-\frac{2r}{a}}d\left(\frac{2r}{a}\right)=\frac{a}{4}\int_0^\infty x^3e^{-x}dx=\frac{a}{4}\cdot 6=\frac{3}{2}a.$$

2. Кулоновская сила взаимодействия электрона с ядром

$$F_K(r)=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0r^2}$$

зависит только от радиальной координаты. Поэтому оператор этой физической величины $\hat{F}_K=F_K(r)$ есть оператор умножения на функцию $F_K(r)$. Следовательно, среднее значение кулоновской силы взаимодействия

$$< F_K >=\int_0^\infty \psi_{100}\left(\hat{F}_K\psi_{100}\right)4\pi r^2 dr=\frac{1}{\pi a^3}\int_0^\infty \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}e^{-\frac{2r}{a}}\cdot 4\pi r^2 dr=$$
$$=\frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0 a^2}\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}}d\left(\frac{2r}{a}\right)=\frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0 a^2}\int_0^\infty e^{-x}dx=\frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0 a^2}.$$

Можно отметить, что с такой силой электрон взаимодействует с ядром, находясь от него на расстоянии $r=\frac{a}{\sqrt{2}}$.

3. Поскольку оператор потенциальной энергии $\hat{U}=U(r)$ есть оператор умножения на функцию

$$U(r)=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

то среднее значение потенциальной энергии взаимодействия электрона с ядром в рассматриваемом квантовом состоянии равно

$$< U >=\int_0^\infty \psi_{100}\left(\hat{U}\psi_{100}\right)4\pi r^2 dr=-\frac{1}{\pi a^3}\int_0^\infty \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}e^{-\frac{2r}{a}}\cdot 4\pi r^2 dr=$$
$$=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a}\int_0^\infty\left(\frac{2r}{a}\right)e^{-\frac{2r}{a}}d\left(\frac{2r}{a}\right)=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a}\int_0^\infty xe^{-x}dx.$$

Отсюда

$$< U >=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a}=-\frac{m_0 e^4}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}.$$

Задача 1.8. Определите среднее значение кинетической энергии $<E_K>$ и среднюю квадратическую скорость v_{KB}, электрона, находящегося в основном состоянии в атоме водорода.
Решение. Оператор кинетической энергии в квантовой механике имеет вид

$$\hat{E}_K=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta.$$

Учитывая, что атом находится в основном состоянии (n=1, l=0) и $\psi=\psi_{100}$, где

$$\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}},$$

запишем формулу для расчета среднего значения кинетической энергии электрона в виде

$$< E_K >=\int_0^\infty \psi_{100}\left(\hat{E}_K\psi_{100}\right)4\pi r^2 dr.$$

Определим действие оператора $\hat{E}_K$ на волновую функцию ψ_{100}:

$$\hat{E}_K\psi_{100}=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi_{100}=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi_{100}=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2\psi_{100}}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial\psi_{100}}{\partial r}\right).$$

Вычислив первую и вторую производные ψ_{100} по r,

$$\frac{\partial\psi_{100}}{\partial r}=-\frac{1}{\sqrt{\pi a^5}}e^{-\frac{r}{a}};$$
$$\frac{\partial^2\psi_{100}}{\partial r^2}=-\frac{1}{\sqrt{\pi a^7}}e^{-\frac{r}{a}},$$

находим, что

$$\hat{E}_K \psi_{100} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{\sqrt{\pi a^5}}\left(\frac{1}{a}-\frac{2}{r}\right)e^{-\frac{r}{a}}.$$

Поэтому

$$< E_K >= \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\frac{1}{\sqrt{\pi a^5}}\left(\frac{1}{a}-\frac{2}{r}\right)e^{-\frac{r}{a}} \cdot 4\pi r^2 dr =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_0 a^2}\left[\frac{1}{2}\int_0^\infty \left(\frac{2r}{a}\right)^2 e^{-\frac{2r}{a}} d\left(\frac{2r}{a}\right) - 2\int_0^\infty \left(\frac{2r}{a}\right) e^{-\frac{2r}{a}} d\left(\frac{2r}{a}\right)\right] =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m_0 a^2}\left[2\int_0^\infty x e^{-x} dx - \frac{1}{2}\int_0^\infty x^2 e^{-x} dx\right] = \frac{\hbar^2}{2m_0 a^2}.$$

Таким образом, средняя кинетическая энергия электрона в $1s$-состоянии равна

$$< E_K >= \frac{\hbar^2}{2m_0 a^2} = \frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2}.$$

Важно отметить, что с учетом найденного в задаче 1.7 среднего значения потенциальной энергии $<U>$ электрона в этом же квантовом состоянии можно доказать, что сумма средних значений кинетической и потенциальной энергий равна полной энергии электрона в основном состоянии. Действительно,

$$< E_K > + < U >= \frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} - \frac{m_0 e^4}{16\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} = -\frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} = E_1.$$

Средняя квадратическая скорость электрона

$$\mathrm{v}_{KB} = \sqrt{< \mathrm{v}^2 >} = \sqrt{\frac{2 < E_K >}{m_0}} = \frac{\hbar}{m_0 a} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar} = 2{,}2 \cdot 10^6 \quad \text{м/с}.$$

Выполненный расчет показывает, что скорость 1s-электрона в атоме водорода составляет около 1 % от скорости света в вакууме.

Задача 1.9. Определите средний электростатический потенциал, который создает $1s$-электрон в центре атома водорода.

Решение. Объемная плотность электрического заряда в электронном «облаке», окружающем ядро атома водорода,

$$\rho_Э(r) = -e|\psi|^2,$$

где ψ - волновая функция электрона. Для $1s$-электрона

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$

и

$$\rho_Э(r) = -\frac{e}{\pi a^3} exp\left(-\frac{2r}{a}\right).$$

Пространственное распределение заряда в данном случае обладает сферической симметрией. Поэтому потенциал $d\varphi$, который создается в центре атома тонким сферическим слоем электронного облака радиуса r и толщины dr, определяется соотношением

$$d\varphi = \frac{\rho_Э(r) 4\pi r^2 dr}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{er}{\pi\varepsilon_0 a^3} exp\left(-\frac{2r}{a}\right).$$

Интегрируя это выражение по всем значениям r от 0 до ∞, находим искомый потенциал в центре атома:

$$\varphi = -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0 a}\int_0^\infty \left(\frac{2r}{a}\right) exp\left(-\frac{2r}{a}\right) d\left(\frac{2r}{a}\right) = -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0 a}\int_0^\infty x\, e^{-x}\, dx\,.$$

Так как

$$\int_0^\infty x\, e^{-x}\, dx = \int_0^\infty e^{-x}\, dx = 1,$$

то

$$\varphi = -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0 a}.$$

Подстановка численных значений констант дает φ=-27,2 В.

Задача 1.10. Покоящийся атом водорода испустил фотон, соответствующий головной линии серии Лаймана. Какую скорость приобрел атом? На сколько процентов энергия испущенного фотона отличается от энергии соответствующего перехода в атоме?

Решение. Головная линия серии Лаймана соответствует переходу между первым возбужденным и основным состояниями атома водорода. Энергия такого перехода

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \hbar R\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right) = \frac{3}{4}\hbar R.$$

Если энергия излученного фотона равна ε, а его импульс $p = \frac{\varepsilon}{c}$, то законы сохранения энергии и импульса в системе «атом - фотон» запишутся в виде

$$\begin{cases} \Delta E = \varepsilon + \dfrac{m_a u^2}{2}; \\ \dfrac{\varepsilon}{c} = m_a u. \end{cases}$$

Здесь m_a - масса атома водорода, а u - скорость «отдачи» атома за счет испускания фотона. Решая записанную систему уравнений, получаем квадратное уравнение относительно искомой скорости u:

$$u^2 + 2cu - 2\frac{\Delta E}{m_a} = 0.$$

Решая это уравнение, находим скорость атома

$$u = -c + c\left(1 + 2\frac{\Delta E}{m_a c^2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Расчет показывает, что $2\frac{\Delta E}{m_a c^2} << 1.$ Поэтому

$$\left(1 + 2\frac{\Delta E}{m_a c^2}\right)^{\frac{1}{2}} \approx 1 + \frac{1}{2}\cdot\frac{2\Delta E}{m_a c^2} = 1 + \frac{\Delta E}{m_a c^2},$$

а скорость атома

$$u = \frac{\Delta E}{m_a c} = \frac{3\hbar R}{4 m_a c}.$$

Подставляя значения физических констант, находим

$$u = \frac{3\cdot 1{,}05\cdot 10^{-34}\cdot 2{,}07\cdot 10^{16}}{4\cdot 1{,}67\cdot 10^{-27}\cdot 3\cdot 10^{8}} = 3{,}25 \quad \text{м/с}\,.$$

Относительное отличие энергии испущенного фотона ε от энергии перехода ΔE определяется выражением

$$\frac{\Delta E-\varepsilon}{\Delta E}=\frac{\frac{m_a u^2}{2}}{\frac{3}{4}\hbar R}=\frac{2}{3}\frac{m_a u^2}{\hbar R}.$$

Подставляя сюда найденное значение скорости атома u, получаем

$$\frac{\Delta E-\varepsilon}{\Delta E}=\frac{3}{8}\frac{\hbar R}{m_a c^2}.$$

С учетом численных значений входящих в это выражение величин находим

$$\frac{\Delta E-\varepsilon}{\Delta E}=0,55\cdot 10^{-8}=5\cdot 10^{-7}\%.$$

2. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

В сложном многоэлектронном атоме каждый из N электронов обладает орбитальным и спиновым моментами импульса и соответствующими магнитными моментами, которые взаимодействуют друг с другом. При этом сложение моментов отдельных электронов в результирующий момент атома для наиболее часто встречающейся у легких атомов связи Рассел - Саундерса (LS - тип связи) осуществляется по схеме.

1. Все орбитальные механические моменты отдельных электронов складываются в результирующий орбитальный момент, величина которого

$$\mathscr{L}_L=\hbar\sqrt{L(L+1)} \tag{2.1}$$

определяется квантовым числом L суммарного орбитального момента атома. Число L всегда являются целым числом либо нулем.

2. Спиновые моменты импульса всех электронов многоэлектронного атома складываются в суммарный спиновой момент

$$\mathscr{L}_S=\hbar\sqrt{S(S+1)}. \tag{2.2}$$

При этом в атомах с четным числом электронов квантовое число S принимает все целые значения от N·1/2 (когда спины всех электронов «параллельны») до нуля, если спины электронов попарно компенсируют друг друга. При нечетном N квантовое число S может принимать все полуцелые значения от N·1/2 до 1/2.

3. Результирующий момент импульса многоэлектронного атома $\mathscr{L}_J$ есть результат квантово-механического сложения моментов $\mathscr{L}_L$ и $\mathscr{L}_S$. Его значение определяется по формуле

$$\mathscr{L}_J=\hbar\sqrt{J(J+1)}. \tag{2.3}$$

Здесь квантовое число J результирующего момента атома может иметь одно из следующих значений:

J=L + S, L + S -1, ... , |L - S|.

Квантовое число J будет целым у атомов с четным числом электронов (S - целое) и полуцелым у атомов с нечетным числом электронов (S - полуцелое).

Проекция результирующего момента импульса атома на выделенное направление z определяется следующей формулой пространственного квантования:

$$\mathscr{L}_{Jz}=m_J\hbar. \tag{2.4}$$

Здесь квантовое число m_J принимает значения m_J=- J, (- J + 1), ... , (J - 1), J.

Для обозначения квантовых чисел многоэлектронного атома в определенном квантовом состоянии используется условное обозначение «терма» атома в виде

$$^{2S+1}L_J$$

где под L подразумевается одна из букв табл. 3.

Таблица 3

L	0	1	2	3	4	…
Символ состояния	S	P	D	F	G	…

Символ «терма» содержит в себе сведения о значении трех квантовых чисел L, S и J. Например, для терма $^4D_{1/2}$ значения этих чисел L=2, S=3/2 и J=1/2, а для терма $^5F_2$ соответственно L=3, S=2 и J=2. Отметим, что число æ=2S + 1 называют мультиплетностью состояния.

Квантово-механический расчет в случае LS-связи приводит к следующей формуле для суммарного магнитного момента многоэлектронного атома:

$$\mu_J = g\mu_Б\sqrt{J(J+1)}. \tag{2.5}$$

Здесь $\mu_Б = \frac{e\hbar}{2m_0}$ - магнетон Бора, а множитель

$$g = 1 + \frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L-1)}{2J(J+1)} \tag{2.6}$$

называется множителем, или фактором, Ланде. Из (2.6) следует, что множитель Ланде может иметь значения, меньшие единицы, и даже быть равным нулю (например, в состоянии, когда L=3, S=2, а J=l). Это означает, что суммарный магнитный момент многоэлектронного атома может быть равен нулю, даже если суммарный механический момент атома отличен от нуля. При расчетах магнитных моментов атомов полезно помнить, что g=1, если результирующий спин S=0 (J=L), и g=2, если L=0 (J=S). Проекция суммарного магнитного момента атома на выделенное направление z, в частности на направление внешнего магнитного поля, определяется формулой

$$\mu_{Jz} = g\mu_Б m_J, \quad m_J = -J, (-J+1), ..., (J-1), J. \tag{2.7}$$

Поэтому при помещении атома в магнитное поле с индукцией B атом приобретает дополнительную энергию

$$\Delta E_J = g\mu_Б B m_J = \Delta E m_J \tag{2.8}$$

и происходит расщепление его энергетических уровней на 2J + 1 подуровней, равноотстоящих друг от друга на расстоянии ΔE. Это приводит к расщеплению спектральных линий при помещении излучающего атома в магнитное поле. Такое расщепление спектральных линий в магнитном поле было обнаружено в 1896 г. голландским физиком П. Зееманом и получило название эффекта Зеемана.

Наиболее простой случай расщепления спектральных линии в относительно слабом магнитном поле соответствует переходам между уровнями с S=0. Для таких уровней J=L и g=1. Поэтому формула (2.8) принимает вид

$$\Delta E_J = \mu_Б B m_J, \quad m_J = 0, \pm 1, ..., \pm L.$$

Для магнитного квантового числа m_J имеется правило отбора, согласно которому возможны только такие переходы, для которых Δm_J=0, ±1, т. е. число m_J остается неизменным, либо изменяется на единицу. Поэтому, если в отсутствии магнитного поля переход приводит к появлению спектральной линии на частоте ω_0, то при включении магнитного поля кроме линии с частотой ω_0 появляются еще две симметрично расположенные линии с частотами ω_0-$\Delta\omega_0$ и ω_0+$\Delta\omega_0$, где величина

$$\Delta\omega_0 = \frac{\mu_Б B}{\hbar} = \frac{eB}{2m_0} \tag{2.9}$$

называется нормальным смещением частоты. Такой случай расщепления спектральной линии в магнитном поле на три линии, две из которых отстоят от несмещенной линии на величину нормального смещения $\Delta\omega_0$, называют простым (нормальным) эффектом Зеемана.

В общем случае сложного (аномального) эффекта Зеемана величина смещения $\Delta\omega$ зависит от фактора Ланде g и структура расщепления спектральных линий усложняется.

Примеры решения задач

Задача 2.1. Вычислите полные механический и магнитный моменты атома, находящегося в состоянии $^2D_{3/2}$.

Решение. Расшифровав терм квантового состояния, находим значения квантовых чисел: L=2, S=1/2, J=3/2.

Полный механический момент атома можно определить по формуле (2.3), подставив в нее значение квантового числа J. Для J=3/2 получим

$$\mathscr{L}_J = \hbar\sqrt{J(J+1)} = \frac{\sqrt{15}}{2}\hbar = 2{,}03\cdot 10^{-34} \quad \frac{\text{кг}\cdot\text{м}^2}{\text{с}}.$$

Чтобы определить магнитный момент атома, найдем значение фактора Ланде

$$g = 1 + \frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L-1)}{2J(J+1)} = \frac{4}{5}.$$

Теперь по формуле (2.5) находим полный магнитный момент атома

$$\mu_J = g\mu_Б\sqrt{J(J+1)} = 2\sqrt{\frac{3}{5}}\cdot 0{,}927\cdot 10^{-23} = 1{,}44\cdot 10^{-23} \quad \frac{\text{Дж}}{\text{Тл}}.$$

Задача 2.2. Найдите максимальное значение проекции механического момента на направление внешнего магнитного поля для атома, находящегося в состоянии с L=2 и S=3/2, если известно, что магнитный момент атома равен нулю.

Решение. В квантовом состоянии с L=2 и S=3/2 квантовое число J не может быть равным нулю. Поэтому из формулы (8.5) следует, что магнитный момент атома равен нулю при равенстве нулю фактора Ланде g. С учетом формулы (2.6) находим, что если ввести обозначение x=J(J + 1), то условие g=0 приводит к соотношению 3x=L (L + 1) - S (S + 1). Для L=2 и S=3/2 отсюда находим, что x=3/4. Следовательно, в рассматриваемом состоянии атома квантовое число J=1/2.
Из формулы пространственного квантования (2.4) следует, что максимальное значение проекции момента импульса атома на выделенное направление соответствует максимальному значению квантового числа m_J, которое равно +J. Поэтому по формуле (2.4) находим

$$\mathscr{L}_{Jz}^{max} = m_J^{max}\hbar = J\hbar.$$

Для J=1/2 получаем $\mathscr{L}_{Jz}^{max} = \frac{1}{2}\hbar = 0{,}53\cdot 10^{-34} \quad \frac{\text{кг}\cdot\text{м}^2}{\text{с}}$.

Задача 2.3. Наблюдается простой эффект Зеемана в магнитном поле с индукцией B=0,2 Тл. Какова должна быть минимальная длина дифракционной решетки, чтобы с ее помощью можно было разрешить все расщепленные спектральные линии?

Решение. В случае простого (нормального) эффекта Зеемана при помещении излучающего атома в магнитное поле с индукцией B кроме основной спектральной линии на частоте ω_0 появляются две дополнительные линии, отстоящие от основной на величину нормального смещения $\Delta\omega_0$. По формуле (2.9) величина нормального смещения

$$\Delta\omega_0 = \frac{eB}{2m_0}.$$

Используя связь частоты и длины волны излучения $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$, можно пересчитать нормальное смещение спектральных линий на шкалу длин волн по формуле

$$\Delta\omega_0 = \frac{2\pi c}{\lambda_0^2}\Delta\lambda_0.$$

Следовательно, при наложении магнитного поля кроме основной спектральной линии с длиной волны λ_0 появятся линии, соответствующие длинам волн λ_0-$\Delta\lambda_0$ и λ_0+ $\Delta\lambda_0$ и отстоящие от основной линии излучения на величину

$$\Delta\lambda_0 = \frac{eB}{4\pi m_0 c}\lambda_0^2.$$

Чтобы разрешить, т. е. увидеть раздельно такие спектральные линии после пропускания света через дифракционную решетку, необходимо, чтобы эта решетка имела разрешающую силу

$$R = \frac{\lambda_0}{\Delta\lambda_0} = \frac{4\pi m_0 c}{eB\lambda_0}.$$

С другой стороны, из теории дифракционной решетки известно, что ее разрешающая сила в спектре k-го порядка

$$R = k\frac{l}{d}$$

зависит от периода дифракционной решетки d и ее длины l. Поэтому, чтобы разрешить спектральные линии зеемановского триплета в k-м порядке спектра, необходима решетка длиной

$$l = \frac{d}{k}R_C = \frac{d}{k}\frac{4\pi m_0 c}{eB\lambda_0}$$

Отсюда следует, что с ростом порядка спектра k уменьшается длина дифракционной решетки, с помощью которой можно разрешить близкие спектральные линии.
При дифракции света на решетке угловое положение спектральных линий определяется по формуле главных дифракционных максимумов

$$d\,sin\,\varphi = k\lambda, \quad 0 \le \varphi \le \frac{\pi}{2}.$$

Из этой формулы находим, что максимальный порядок спектра, в котором можно наблюдать спектральную линию с длиной волны λ_0, равен $k_{max} = \frac{d}{\lambda_0}$. Подставляя это значение в формулу (2.10), получаем для минимальной длины дифракционной решетки значение

$$l_{min} = \frac{d}{k_{max}}\frac{4\pi m_0 c}{eB\lambda_0} = \frac{4\pi m_0 c}{eB}.$$

Для магнитного поля с индукцией B=0,2 Тл расчет дает l_{min}=0,107 м=10,7 см.
Задача 2.4. Атом в состоянии $^2S_{1/2}$ находится на оси кругового тока I=10 А радиуса R_0=5 см. Расстояние атома до центра кругового тока z=10 см. Определите силу, действующую на атом со стороны магнитного поля тока в вакууме.
Решение. На магнитный момент, помещенный в магнитное поле, направленное вдоль оси z, действует сила

$$F_z = \mu_z\left|\frac{\partial B}{\partial z}\right|. \tag{2.11}$$

Здесь μ_z - проекция магнитного момента на направление поля, а $\left|\frac{\partial B}{\partial z}\right|$ - величина градиента индукции магнитного поля, которая характеризует степень его неоднородности.

Индукцию магнитного поля на оси кругового тока на расстоянии z от его центра определим по известной формуле магнитостатики

$$B(z) = \frac{\mu_0 I R_0^2}{2\left(R_0^2 + z^2\right)^{3/2}}. \tag{2.12}$$

Здесь I - сила тока, R_0 - радиус кругового тока, а $\mu_0=4\pi\cdot10^{-7}$ Гн/м - магнитная постоянная в СИ. Дифференцируя (2.12) по переменной z, находим величину градиента индукции магнитного поля

$$\left|\frac{\partial B}{\partial z}\right| = \frac{3}{2}\frac{\mu_0 I R_0^2 z}{\left(R_0^2 + z^2\right)^{5/2}}$$

Для атома формула (2.7) определяет проекцию полного магнитного момента на направление внешнего магнитного поля. Эта проекция

$$\mu_{Jz} = g\mu_Б m_J \, .$$

может принимать 2J + 1 различных значений в зависимости от значения магнитного квантового числа m_J.

Поэтому для заданного значения магнитного квантового числа на атом, помещенный на оси кругового тока, действует сила

$$F_z = \frac{3}{2}\frac{\mu_0 I R_0^2 z}{\left(R_0^2 + z^2\right)^{5/2}} g\mu_Б m_J \, .$$

По условию задачи атом находится в состоянии $^2S_{1/2}$. В этом состоянии квантовые числа L, S и J имеют следующие значения: L=0, S=1/2, J=1/2. Поэтому для этого состояния фактор Ланде

$$g = 1 + \frac{J\left(J+1\right) + S\left(S+1\right) - L\left(L-1\right)}{2J\left(J+1\right)} = 2 \, ,$$

а магнитное квантовое число может принимать два одинаковых по модулю значения $m_J = \pm 1/2$. На такой атом в магнитном поле кругового тока действует сила, модуль которой

$$F_z = \frac{3}{2}\frac{\mu_0 I R_0^2 z}{\left(R_0^2 + z^2\right)^{5/2}} \mu_Б \, .$$

Подставляя числовые значения из условия задачи, находим, что на атом действует сила $F = 2{,}51 \cdot 10^{-26}$ Н.

Задача 2.5. В опыте Штерна и Герлаха пучок атомов серебра в состоянии $^2P_{1/2}$ движущихся со скоростью $v_0 = 250$ м/с, пролетает через область поперечного неоднородного магнитного поля протяженностью $l = 5$ см с градиентом индукции $\frac{\partial B}{\partial z} = 100$ Тл/м. Определите расстояние между крайними расщепленными магнитным полем атомными пучками на экране, отстоящем от магнита на расстояние $l_2 = 20$ см. Силой тяжести пренебречь.

Решение. В области неоднородного магнитного поля на пролетающий атом действует сила, проекция которой на направление магнитного поля z определяется формулой

$$F_z = \mu_{Jz}\left|\frac{\partial B}{\partial z}\right| = g\mu_Б m_J \left|\frac{\partial B}{\partial z}\right| .$$

Поэтому после пролета через неоднородное магнитное поле атомный пучок расщепляется на 2J+1 пучков, каждый из которых соответствует заданному значению магнитного квантового числа m_J из набора значений - J, (- J+1), … , (J - 1), J. Крайним расщепленным пучкам соответствуют два максимальных по модулю значения $m_J = \pm J$. Эти пучки отклоняются в противоположных направлениях (рис. 2).

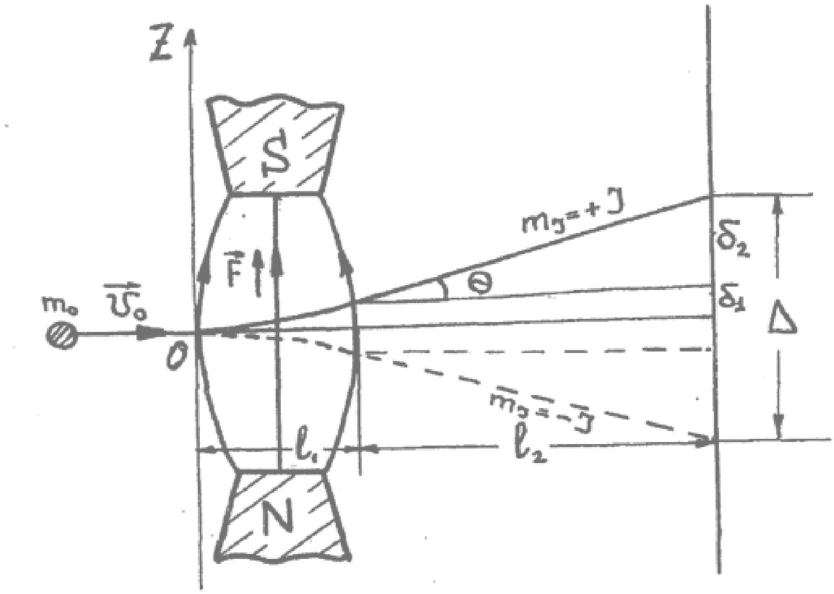

Рис. 2

Выделим крайний пучок, в котором отсепарированы атомы, имеющие значения квантового числа m_J=J. На атомы этого пучка в области магнитного поля действует сила

$$F_z = g\mu_Б J\left|\frac{\partial B}{\partial z}\right|.$$

Под действием этой силы атомы массой m_a приобретают в направлении оси z ускорение

$$a = \frac{F_z}{m_\text{a}} = \frac{g\mu_Б J\left|\frac{\partial B}{\partial z}\right|}{m_\text{a}}. \tag{2.13}$$

Поэтому закон движения этих атомов можно записать в виде

$$\begin{cases} x = \text{v}_0 t; \\ z = \dfrac{at^2}{2}. \end{cases}$$

Отсюда, исключив время, находим параболическую траекторию движения атомов в магнитном поле

$$z = \frac{ax^2}{2\text{v}_0^2}.$$

Атомы, движущиеся по этой траектории, на вылете из магнитного поля смещаются на расстояние

$$\delta_1 = \frac{al_1^2}{2\text{v}_0^2}.$$

После пролета магнита атомы движутся по прямолинейной траектории, угол наклона θ которой к первоначальному направлению движения (см. рис. 2) можно определить из соотношения

$$tg\theta = \left.\frac{dz}{dx}\right|_{x=l_1} = \frac{al_1}{\text{v}_0^2}$$

Пролетая по инерции по прямолинейной траектории до экрана, атомы расщепленного пучка приобретают дополнительное смещение

$$\delta_2 = l_2 tg\theta = \frac{al_1 l_2}{\text{v}_0^2}.$$

Таким образом, результирующее смещение атомов

$$\delta=\delta_1+\delta_2=\frac{al_1}{v_0^2}\left(\frac{l_1}{2}+l_2\right)=\frac{al_1}{2v_0^2}\left(l_1+2l_2\right).$$

Поэтому расстояние на экране между крайними расщепленными атомными пучками определяется как

$$\Delta=2\delta=\frac{al_1}{v_0^2}\left(l_1+2l_2\right) \tag{2.14}$$

Подставляя в (2.14) значение ускорения a из (2.13), получим

$$\Delta=\frac{g\mu_Б J\left|\frac{\partial B}{\partial z}\right|}{m_a v_0^2}l_1\left(l_1+2l_2\right).$$

Массу атома серебра m_a можно определить через атомную массу серебра A=108·10^{-3} кг/моль и число Авогадро N_A=6,02·10^{+23} 1/моль по формуле: $m_a=A/N_A$.

Так как движущиеся атомы находятся в $^2P_{1/2}$ состоянии, то для этого состояния квантовые числа имеют значения L=1, S=1/2, J=1/2, а фактор Ланде

$$g=1+\frac{J\left(J+1\right)+S\left(S+1\right)-L\left(L-1\right)}{2J\left(J+1\right)}=\frac{4}{3}.$$

Поэтому окончательно находим величину смещения крайних атомных пучков на экране в виде

$$\Delta=\frac{2N_A\mu_Б\left|\frac{\partial B}{\partial z}\right|}{3Av_0^2}l_1\left(l_1+2l_2\right).$$

Подставляя числовые значения, после вычислений получаем Δ=1,2·10^{-3}·м=1,2 мм.

3. ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. Электрон в атоме водорода находится в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией вида $\psi\left(r\right)=Ae^{\beta r}$, где A и β - некоторые постоянные. Определите значения постоянных A, β и полную энергию электрона E.

Ответ: $A=\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$, $\beta=-\frac{1}{a}$, где $a=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0e^2}$ - первый боровский радиус.

$E=-\frac{\hbar^2}{2m_0a}=-\frac{m_0e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}$.

2. В рамках теории Бора решите задачу о спектре атома водорода с учетом движения протона. *Указание*. Перейдите к системе отсчета, связанной с центром масс системы «электрон - протон».

Ответ: $E=-\frac{e^4m_0}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\frac{1}{1+\frac{m_0^{ЭЛ}}{m_0^{ПРОТ}}}$.

3. Воспользовавшись приведенными в табл. 2 волновыми функциями, найдите среднее значение $<r>$ расстояния электрона от ядра для 2p-состояния атома водорода с m=0.

Ответ: $<r>=5a=\frac{20\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0e^2}$.

4. Найдите наиболее вероятное расстояние электрона от ядра атома водорода в состоянии 2p.

Ответ: $r_{ВЕР}=4a=\frac{16\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0e^2}$.

5. Электрон в возбужденном атоме водорода находятся в 3p-состоянии. Определите изменение величины магнитного момента $\Delta\mu_l$, обусловленного орбитальным движением электрона, при

переходе атома в основное состояние.

Ответ: $\Delta\mu_l = -\mu_Б\sqrt{2}$.

6. Вычислите магнитный момент атома в ^1F состоянии.

Ответ: μ_J=3,21·10^{-23} Дж/Тл.

7. Найдите возможные значения проекции магнитного момента на направление магнитного поля для атома в состоянии а) ^1D, б) $^2P_{3/2}$.

Ответ: а) μ_{Jz}=0, ± $\mu_Б$, ±2$\mu_Б$;

б) $\mu_{Jz} = \pm\frac{2}{3}\mu_Б, \pm 2\mu_Б$.

8. Найдите величину расщепления энергетического уровня, соответствующего терму ^1D, в магнитном поле с индукцией B=1,5 Тл.

Ответ: ΔE=3,5·10^{-4} эВ.

9. На сколько подуровней расщепится в магнитном поле с индукцией B=1 Тл терм с L=3 при простом эффекте Зеемана? Какова разность энергий крайних расщепленных энергетических уровней?

Ответ: На 7 подуровней. ΔE_{max}=3,45·10^{-4} эВ.

10. Найдите минимальное значение индукции B магнитного поля, при которой спектральным прибором с разрешающей силой R_C=10^5 можно разрешить все компоненты спектральной линии λ_0=536 нм при ее расщеплении в простом эффекте Зеемана.

Ответ: B=0,4 Тл.

11. Пучок атомов натрия в состоянии $^2S_{1/2}$ вылетает из печи, температура которой T=700 К. Пучок расщепляется в поперечном магнитном поле с градиентом индукции $\frac{dB}{dz}$=500 Тл/м на пути l_1=10 см. Экран удален от магнита на расстоянии l_2=65 см. Найдите расстояние между расщепленными пучками на экране.

Ответ: $\Delta = 2\mu_Б \frac{dB}{dz}\frac{l_1\left(l_1 + 2l_2\right)}{3kT} = 2{,}1\cdot 10^{-2}$ м.

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иродов И.Е. Задачи по квантовой физике. М.: Высш. шк., 1991.
2. Иродов И.Е. Задачи по общей физике. М.: БИНОМ, 1998.
3. Мартинсон Л. К. Методические указания к решению задач по курсу общей физики. Разделы «Элементы квантовой механики», «Физика твердого тела». М.: МВТУ им. Н.Э. Баумана, 1983.
4. Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В. Методические указания к решению задач по курсу общей физики. Раздел «Уравнение Шредингера. Стационарные задачи квантовой механики». М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2002.
5. Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В. Методические указания к решению задач по курсу общей физики. Раздел «Измерение физических величин в квантовых системах». М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2002.
6. Савельев И.В. Курс общей физики. Кн. 5. М.: Наука; Физматлит, 1998.
7. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Атомная и ядерная физика. Ч. 1. М.: Наука, 1986.
8. Чертов А.Г., Воробьев А.А. Задачи по физике. М.: Высш. шк., 1988.