Очевидно, такую же энергию должен поглотить атом при обратном процессе — вырывании электрона из K-слоя, что необходимо для появления линий K-серии.

Эту энергию ε' атом молибдена получает в результате удара об антикатод электрона, обладающего кинетической энергией eU [см. формулу (1) задачи № 27-1]. Разность потенциалов U будет минимальной, когда *вся* энергия электрона $eU_{мин}$ поглощается атомом, т. е.

$$eU_{мин} = \varepsilon'. \tag{3}$$

Из (3) и (2) получим

$$U_{мин} = \frac{hcR}{e}(Z-1)^2. \tag{4}$$

Используя результат (3) задачи № 28-2, найдем

$$U_{мин} = 13{,}6 \cdot (42-1)^2 \text{ В} = 23 \cdot 10^3 \text{ В} = 23 \text{ кВ}.$$

Замечание. Вычисленный результат для $U_{мин}$ оказался завышенным по сравнению с его истинным значением (20 кВ), так как, приняв в формуле (1) постоянную экранирования $b = 1$, мы учли лишь экранирующее действие одного электрона K-слоя. Это верно при электронном переходе $L \to K$, что соответствует K_α-линии и числу $n_k = 2$ в формуле (1). В данном же случае ($n_k = \infty$) оказывают слабое экранирующее действие и все остальные электроны атома. Поэтому $b > 1$.

§ 29. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Основные формулы

Формула де Бройля

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mv}, \tag{29.1}$$

где λ — длина волны, соответствующая частице с импульсом p; $\hbar = h/2\pi = 1{,}06 \cdot 10^{-34}$ Дж · с.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга

$$\Delta x \Delta p_x \geqslant 2\pi\hbar, \tag{29.2}$$

где Δx — неопределенность координаты частицы, Δp_x — неопределенность проекции импульса частицы на ось x.

Вероятность пребывания частицы в объеме dV

$$dP = |\psi|^2\, dV, \tag{29.3}$$

где ψ — волновая функция, $|\psi|^2$ — плотность вероятности.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(W-U)\psi = 0. \tag{29.4}$$

Здесь ψ — волновая функция, описывающая состояние частицы Δ — оператор Лапласа $\left(\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)$, W — полная энергия частицы, U — ее потенциальная энергия.

Собственная волновая функция частицы, находящейся в бесконечно глубоком одномерном потенциальном ящике (рис 29-1),

$$\psi(x) = \sqrt{2/l}\,\sin(\pi n x/l) \quad (n = 1, 2, 3, \ldots), \tag{29.5}$$

где l — длина ящика, x — координата ($0 < x < l$)

Коэффициент отражения волн де Бройля от низкого ($U < W$) потенциального барьера бесконечной ширины (рис. 29-2) определяется формулой

$$R = (k_1 - k_2)^2/(k_1 + k_2)^2, \tag{29.6}$$

где k_1, k_2 — значения волнового числа в областях I, II (волновое число $k = 2\pi/\lambda$).

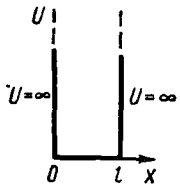

Рис. 29-1

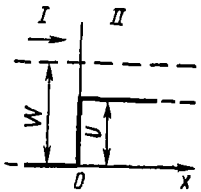

Рис 29-2

Собственная волновая функция, отвечающая 1s-состоянию (основному) электрона в атоме водорода,

$$\psi(r) = e^{-r/a}/\sqrt{\pi a^3}, \tag{29.7}$$

где r — расстояние от ядра, $a = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/me^2$ — радиус первой боровской орбиты

Собственные значения энергии электрона в атоме водорода

$$W_n = -me^4/32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2 n^2, \tag{29.8}$$

где n — главное квантовое число ($n = 1, 2, 3, \ldots$).

Орбитальный момент импульса M_l электрона и его проекция M_{lz} на заданное направление z определяются формулами:

$$M_l = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \tag{29.9}$$

$$M_{lz} = m_l\hbar, \tag{29.10}$$

где l — орбитальное квантовое число ($l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$), m_l — магнитное квантовое число ($m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$).

Спиновый момент импульса M_s электрона и его проекция M_{sz} на заданное направление z выражаются формулами:

$$M_s = \hbar\sqrt{s(s+1)}, \tag{29.11}$$

$$M_{sz} = m_s\hbar, \tag{29.12}$$

где $m_s = \pm s = \pm 1/2$ — спиновое квантовое число.

Результирующие орбитальный M_L и спиновый M_S моменты импульса многоэлектронного атома (имеются в виду атомы с нормальной, или рессел-саундеровской, спин орбитальной связью):

$$M_L = \hbar\sqrt{L(L+1)}, \tag{29.13}$$

$$M_S = \hbar\sqrt{S(S+1)}, \tag{29.14}$$

где L — квантовое число результирующего орбитального момента, S — квантовое число результирующего спинового момента. (Правила определения возможных значений чисел L и S изложены на стр. 317, 318.)

Полный момент импульса $\mathbf{M}_J$ атома определяется формулами:

$$\mathbf{M}_J = \mathbf{M}_L + \mathbf{M}_S, \tag{29.15}$$

$$M_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}, \tag{29.16}$$

где J — квантовое число полного момента импульса ($J = L+S,\ L+S-1, \ldots, |L-S|$).

А. ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА МИКРОЧАСТИЦ

Методические указания

1. Нередко для решения задачи требуется выразить импульс p частицы через ее кинетическую энергию T (или наоборот). При этом, а также при вычислении скорости частицы по (29.1) надо различать случаи классических и релятивистских частиц*. Заметим, что во всех случаях движения электрона в *атоме*, где его кинетическая энергия измеряется лишь несколькими электронвольтами, релятивистскими эффектами можно вполне пренебречь.

2. С помощью соотношения неопределенностей (29.2) решают не только задачи, в которых требуется определить наименьшее значение одной из двух неопределенностей Δx, Δp_x при заданном значении другой (в этом случае в формуле пишут знак равенства), но и задачи на приближенный расчет наименьшего значения *самих величин*: линейных размеров области l, в которой находится частица, или импульса p частицы (или связанной с импульсом кинетической энергии T). В задачах второго типа руководствуются следующими соображениями:

1) если даны линейные размеры области l, в которой находится частица, то считают $\Delta x \approx l$; если известен модуль импульса p, но неизвестно его направление, то полагают $\Delta p \approx p$ (см. задачу № 29-3);

2) искомая величина не может быть меньше наименьшей неопределенности в ее измерении, т. е. в качестве минимального значения искомой величины приближенно берут минимальную неопределенность этой величины: $l_{\text{мин}} = (\Delta x)_{\text{мин}}$, $p_{\text{мин}} = (\Delta p)_{\text{мин}}$.

Решение задач

29-1. Найти длину волны де Бройля для электрона, обладающего кинетической энергией: 1) $T = 100$ эВ; 2) $T = 3{,}0$ МэВ.

Решение. Как видно из соотношения (29.1), определяющего длину волны де Бройля, задача сводится к выражению импульса p электрона через его кинетическую энергию T. Решение задачи зависит от того, классической или релятивистской частицей следует считать электрон.

1. Так как $T \ll m_0c^2$, где $m_0c^2 = 0{,}51$ МэВ — энергия покоя электрона, то в данном случае электрон является классической ча-

* См. «Общие замечания» к § 18, а также формулы (18.2), (18.5), (18.6).

стицей. Значит, его импульс и кинетическая энергия связаны соотношением

$$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{m^2 v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}.$$

Отсюда

$$p = \sqrt{2mT}. \qquad (1)$$

Подставив это значение импульса в (29.1), получим

$$\lambda_1 = 2\pi\hbar/\sqrt{2mT}.$$

Заменим в формуле величины их числовыми значениями, выраженными в единицах СИ: $2\pi\hbar = h = 6{,}62 \cdot 10^{-34}$ Дж · с, $m = 9{,}11 \cdot 10^{-31}$ кг, $T = 1{,}00 \cdot 10^2 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Дж. Выполнив вычисление, найдем

$$\lambda_1 = 1{,}23 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 1{,}23 \text{ Å}.$$

2. Теперь $T > m_0c^2$. Поэтому электрон следует считать релятивистской частицей, импульс и кинетическая энергия которой выражаются формулами (18.5), (18.6). Исключив из этих формул величину β, получим

$$p = \sqrt{2m_0 T (1 + T/2m_0 c^2)}, \qquad (2)$$

где $m_0 = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ кг — масса покоя электрона. Следовательно,

$$\lambda_2 = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 T (1 + T/2m_0 c^2)}} = \frac{\lambda_1}{\sqrt{1 + T/2m_0 c^2}}.$$

Взяв величины T и m_0c^2 в мегаэлектронвольтах и произведя вычисление, найдем

$$\lambda_2 \approx \lambda_1/2 = 0{,}62 \text{ Å}.$$

29-2. Параллельный пучок электронов падает нормально на диафрагму с узкой прямоугольной щелью, ширина которой $a = 2{,}0$ мкм. Определить скорость электронов (считая ее одинаковой для всех частиц), если известно, что на экране, отстоящем от щели на расстоянии $l = 50$ см, ширина центрального дифракционного максимума $b = 80$ мкм.

Решение. Дифракция электронов является следствием волновой природы частиц. Поэтому для определения скорости электронов применим формулу де Бройля (29.1), откуда

$$v = 2\pi\hbar/m\lambda. \qquad (1)$$

Чтобы найти длину волны де Бройля λ, воспользуемся тем обстоятельством, что дифракционная картина, возникающая при прохождении через узкую щель параллельного пучка электронов, вполне соответствует дифракционной картине, полученной от этой же щели при освещении ее параллельным пучком монохроматического света, длина волны которого равна длине волны де Бройля для электрона.

Это значит, что в случае дифракции электронов положение дифракционных минимумов можно определять по формуле (24.2), если понимать в ней под λ длину волны де Бройля для электрона.

Воспользуемся решением задачи № 24-2, основанным на применении формулы (24.2). По-прежнему считая, что центральный дифракционный максимум заключен между двумя минимумами первого порядка и учитывая соотношение между величинами b и l, получим (см. рис 24-2)

$$\sin\varphi \approx \operatorname{tg}\varphi = b/2\,l.$$

Отсюда, полагая в формуле (24.2) $k = 1$, имеем

$$\lambda = ab/2l.$$

Подставив это значение λ в (1), найдем

$$v = 4\pi\hbar l/mab. \qquad (2)$$

Произведем вычисление по (2), предположив, что $v \ll c$. Считая электрон классической частицей, пренебрежем зависимостью его массы от скорости. Тогда $m = m_0 = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ кг и расчет дает

$$v = 4{,}5 \cdot 10^6 \text{ м/с}. \qquad (3)$$

Так как в действительности масса движущегося электрона *не меньше* его массы покоя m_0, то истинное значение скорости v, определяемое по (2), будет *не больше*, чем вычисленное нами. Таким образом, предположение о том, что $v \ll c$, соответствует действительности и, значит, результат (3) правильный.

Замечание. Если бы полученный результат противоречил неравенству $v \ll c$, это означало бы, что электрон следует рассматривать как релятивистскую частицу, масса которой зависит от скорости. Тогда, чтобы получить ответ, надо подставить в (2) вместо m ее значение по формуле (18.2) и решить квадратное относительно v уравнение.

29-3. Средняя кинетическая энергия электрона в невозбужденном атоме водорода равна 13,6 эВ. Исходя из соотношения неопределенностей, найти наименьшую неточность, с которой можно вычислить координату электрона в атоме.

Решение Как следует из соотношения неопределенностей (29.2), неточность координаты частицы

$$\Delta x \geqslant \frac{2\pi\hbar}{\Delta p_x}. \qquad (1)$$

Величина Δp_x неизвестна, однако сам импульс p (точнее: его среднее квадратичное значение) легко найти, поскольку нам известна средняя кинетическая энергия T электрона. Рассматривая электрон как нерелятивистскую частицу (так как $T \ll m_0c^2$), запишем выведенное в задаче № 29-1 соотношение между величинами p, T:

$$p = \sqrt{2mT}. \qquad (2)$$

Теперь сравним величины Δp_x, p. Поскольку импульс $\mathbf{p}$ — вектор, то формула (2) позволяет лишь вычислить модуль этого вектора, тогда как его направление остается неизвестным. Поэтому проекция p_x импульса на какую-либо фиксированную ось x оказывается неопределенной: ее величина лежит в интервале $(-p, p)$. Это значит, что неопределенность проекции импульса на ось x равна

$$\Delta p_x = 2p \text{ или } \Delta p_x \sim p,$$

т. е. величины Δp_x и p одного порядка. Поэтому заменив Δp_x в формуле (1) величиной p и учитывая соотношение (2), получим ответ:

$$\Delta x \gtrsim \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mT}}. \qquad (3)$$

Произведя вычисления по (3), найдем

$$\Delta x \gtrsim 10^{-10} \text{ м}.$$

Следовательно, наименьшая, допустимая соотношением неопределенностей неточность $(\Delta x)_{\text{мин}}$, с которой можно определить координату электрона в атоме водорода, есть величина порядка 10^{-10} м.

Замечание. Сравнив полученный результат с ответом к задаче № 28-1, видим что $(\Delta x)_{\text{мин}} = 2r$, где r — радиус первой боровской орбиты. Отсюда следует, что боровскую орбиту нельзя представлять как траекторию, по которой движется электрон, так как он может оказаться в любом месте атома, находящегося в определенном (в данном случае — невозбужденном) состоянии, а не только на расстоянии r от ядра. Из решения задачи № 29-8 видно, что r есть *наиболее вероятное* расстояние, на котором можно встретить электрон в атоме.

6. ПРОСТЕЙШИЕ СЛУЧАИ ДВИЖЕНИЯ МИКРОЧАСТИЦ

Методические указания

1. Так как микрообъекты проявляют наряду с корпускулярными также и волновые свойства, состояние «частицы» в квантовой механике описывается волновой функцией $\Psi(x, y, z, t)$, зависящей от координат и времени. В курсе общей физики обычно рассматривают движение частиц лишь в постоянном во времени силовом поле (при этом потенциальная энергия U частицы не зависит явно от времени). В этом случае функция $\Psi(x, y, z, t)$ распадается на два сомножителя, один из которых зависит только от времени, другой — только от координат:

$$\Psi(x, y, z, t) = e^{-iWt/\hbar} \cdot \psi(x, y, z).$$

Такая функция описывает монохроматическую стоячую волну де Бройля с амплитудой $\psi(x, y, z)$, квадрат модуля которой согласно (29.3) определяет вероятность dP пребывания частицы в данном элементе объема dV. Зная величину $\psi(x, y, z)$ как функцию координат (функ-

цию $\psi(x, y, z)$ также называют волновой функцией], можно найти вероятность пребывания частицы в заданном объеме V по формуле

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

где тройной интеграл берется по всей области изменения переменных x, y, z. Таким образом, знание волновой функции $\psi(x, y, z)$ позволяет решать задачи на вычисление вероятности пребывания частицы в данной области.

2. Волновая функция $\psi(x, y, z)$ может быть найдена путем решения уравнения Шредингера для стационарных состояний (29.4) (его называют также *амплитудным уравнением Шредингера*).

Решение уравнения Шредингера зависит от вида входящей в него функции $U(x, y, z)$ В связи с математическими трудностями, возникающими при решении уравнения, в курсе общей физики обычно ограничиваются одномерными задачами, когда $U = U(x)$; при этом рассматривают лишь случаи, в которых потенциальная энергия постоянна в определенных интервалах изменения координаты x, но испытывает скачки на их границах. Эти случаи соответствуют частице, находящейся в потенциальном ящике (см. рис. 29-1), а также движению частицы при наличии низкого или высокого потенциального барьера (рис. 29-2, 29-3).

При $U(x) = \text{const}$ уравнение (29.4) принимает вид

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0 \text{ при } U < W, \tag{29.17}$$

где

$$k = \sqrt{2m(W-U)}/\hbar; \tag{29.18}$$

$$\psi''(x) - k^2\psi(x) = 0 \text{ при } U > W, \tag{29.19}$$

где

$$k = \sqrt{2m(U-W)}/\hbar. \tag{29.20}$$

Уравнения (29.17), (29.19) — дифференциальные уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами. Из теории дифференциальных уравнений известно, что их общие решения соответственно для (29.17) и (29.19) таковы:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx; \tag{29.21}$$

$$\psi(x) = Ce^{kx} + De^{-kx}, \tag{29.22}$$

где A, B, C, D — постоянные. Их значения (или соотношения между ними) находят, используя свойства волновой функции, обусловленные ее физическим смыслом: она должна быть однозначной, конечной и непрерывной во всей области изменения x; ее производная $\psi'(x)$ также должна быть непрерывной. Кроме того, волновая функция

должна отвечать условию нормировки, которое для одномерной задачи имеет вид

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

3. Из перечисленных свойств волновой функции следует, что волновое число k и, значит, полная энергия частицы W могут иметь во многих случаях не любые значения, а лишь ряд определенных значений: $k_1, k_2, k_3, \ldots, W_1, W_2, W_3, \ldots$ Эти *уровни энергии* W_i можно найти, исследуя полученное решение уравнения Шредингера для ψ-функции. В отдельных случаях, например когда частица находится в бесконечно глубоком потенциальном ящике, уровни энергии можно определить, не решая уравнения Шредингера, а лишь используя указанные выше свойства волновой функции, рассматривая ее как амплитуду стоячих волн де Бройля (см. задачу № 29-4).

Решение задач

29-4. Электрон находится в одномерном бесконечно глубоком потенциальном ящике шириной l (рис. 29-1). Вычислить наименьшую разность двух соседних энергетических уровней (в электронвольтах) электрона в двух случаях: 1) $l = 10$ см; 2) $l = 10$ Å.

Решение. Задачу можно было бы решить с помощью уравнения Шредингера (29.4), однако необходимости в этом нет, достаточно использовать лишь некоторые свойства волновой функции.

Так как внутри потенциального ящика (при $0 \leqslant x \leqslant l$) потенциальная энергия электрона $U = 0$, то его полная энергия есть кинетическая энергия T. Согласно закону сохранения энергии, при движении электрона $T = \text{const}$. Следовательно, сохраняется и импульс электрона $p = \sqrt{2mT}$. Учитывая два возможных направления движения электрона вдоль оси x, запишем для проекций импульса на ось x:

$$p_{x1} = p; \; p_{x2} = -p.$$

Согласно соотношению де Бройля, двум, отличающимся лишь знаком проекциям p_x импульса соответствуют две плоские монохроматические волны де Бройля, распространяющиеся в противоположных направлениях вдоль оси x. В результате их интерференции возникнут *стоячие волны* де Бройля, характеризующиеся стационарным, т. е. не зависящим от времени, распределением вдоль оси x амплитуды колебаний. Эта амплитуда и есть волновая функция $\psi(x)$, квадрат которой согласно формуле (29.3) определяет плотность вероятности пребывания электрона в точке с координатой x.

Так как потенциальный ящик бесконечно глубок ($U = \infty$ при $x < 0$ и $x > l$), электрон не может оказаться за его пределами. Поэтому $\psi(x) = 0$ при $x < 0$ и $x > l$. Отсюда в силу свойства непрерывности волновой функции следует

$$\psi(0) = 0, \; \psi(l) = 0.$$

Таким образом, амплитуда колебаний в стоячей волне де Бройля равна нулю в точках $x = 0$, $x = l$, т. е. здесь находятся узлы стоячей волны. Поскольку расстояние между двумя соседними узлами равно половине длины волны, то в потенциальном ящике могут быть лишь волны де Бройля, длина которых удовлетворяет условию

$$l = n\lambda_n/2 \quad (n = 1, 2, 3, \ldots),$$

т. е. на ширине ящика l должно укладываться целое число полуволн*. Отсюда

$$\lambda_n = 2\,l/n. \tag{1}$$

Из соотношения (1) делаем вывод, что в потенциальном ящике существуют *уровни энергии* частицы. Действительно, полная энергия электрона в ящике с учетом (29.1) равна

$$W = T = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{m\lambda^2}.$$

Подставив сюда значение λ из (1), получим

$$W_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\,n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \ldots). \tag{2}$$

Так как отношение уровней энергии $W_1 : W_2 : W_3 \ldots = 1 : 4 : 9 \ldots$, то наименьшая разность уровней

$$\Delta W = W_2 - W_1 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ml^2} - \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ml^2}. \tag{3}$$

Произведя вычисление по (3), найдем для двух случаев:
1) $\Delta W = 1{,}8 \cdot 10^{-35}$ Дж $= 1{,}1 \cdot 10^{-16}$ эВ;
2) $\Delta W = 1{,}8 \cdot 10^{-19}$ Дж $= 1{,}1$ эВ.

29-5. Частица находится в основном состоянии ($n = 1$) в одномерном потенциальном ящике шириной l с абсолютно непроницаемыми стенками ($0 < x < l$). Найти вероятность пребывания частицы в областях: $0 < x < l/3$ и $l/3 < x < 2l/3$.

Решение. Вероятность dP пребывания частицы в интервале dx выразим через плотность вероятности $|\psi(x)|^2$ при помощи формулы (29.3), которая для данного случая одномерной задачи примет вид

$$dP = |\psi(x)|^2\,dx.$$

Отсюда вероятность найти частицу в области $0 < x < l/3$ выразится интегралом:

$$P_1 = \int_0^{l/3} |\psi(x)|^2\,dx. \tag{1}$$

* Аналогичная ситуация встречалась уже в задаче № 20-3 при рассмотрении упругих волн в стержне. Данный случай соответствует стержню, закрепленному на концах.

Так как частица находится в бесконечно глубоком потенциальном ящике, то, положив $n = 1$, по формуле (29.5) получим для собственной волновой функции:

$$\psi(x) = \sqrt{2/l}\,\sin(\pi x/l).$$

Подставив это значение $\psi(x)$ в (1), найдем

$$P_1 = \frac{2}{l}\int_0^{l/3} \sin^2\frac{\pi x}{l}\,dx.$$

Используя соотношение $\sin^2\alpha = (1 - \cos 2\alpha)/2$, вычислим интеграл:

$$P_1 = \frac{1}{l}\left[\int_0^{l/3} dx - \int_0^{l/3} \cos\frac{2\pi x}{l}\,dx\right] = \frac{1}{l}\left[\frac{l}{3} - \frac{l}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{l}\right] =$$

$$= \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi} = 0,195.$$

Вероятность P_2 пребывания частицы в области $l/3 < x < 2\,l/3$ (т. е. в средней трети ящика) можно вычислить тем же способом, которым мы нашли вероятность P_1. Но можно поступить проще. Если сложить вероятности P_1, P_2, P_3 пребывания частицы соответственно в первой, второй и третьей частях ящика, то получим вероятность пребывания частицы во всем ящике, которая равна единице, как вероятность достоверного события. Учитывая при этом, что в силу симметрии ящика $P_1 = P_3$, получим

$$P_2 = 1 - 2P_1 = 0,61.$$

29-6. Пучок электронов с энергией $W = 25,0$ эВ встречает на своем пути потенциальный барьер высотой $U = 9,0$ эВ (рис. 29-2). Определить коэффициент отражения R и коэффициент пропускания D волн де Бройля для данного барьера.

Решение. В силу неравенства $U < W$ данный потенциальный барьер является *низким*. Поэтому для вычисления коэффициента отражения R воспользуемся формулой (29.6). Чтобы найти входящие в нее волновые числа k_1, k_2, выразим длины волн де Бройля λ_1, λ_2, соответствующие областям I, II, через импульсы p_1, p_2 электрона, а последние — через его кинетические энергии. При этом учтем, что в области I кинетическая энергия равна полной энергии W (так как $U = 0$), а в области II она, согласно закону сохранения энергии, равна $W - U$. Тогда получим

$$\lambda_1 = \frac{2\pi\hbar}{p_1} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mW}}, \qquad (1)$$

$$\lambda_2 = \frac{2\pi\hbar}{p_2} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(W-U)}}. \qquad (2)$$

Отсюда

$$k_1 = \frac{2\pi}{\lambda_1} = \frac{\sqrt{2mW}}{\hbar},$$

$$k_2 = \frac{2\pi}{\lambda_2} = \frac{\sqrt{2m(W-U)}}{\hbar}.$$

Подставив эти значения k_1, k_2 в формулу (29.6) и произведя сокращение, имеем

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{W} - \sqrt{W-U}}{\sqrt{W} + \sqrt{W-U}}\right)^2 = \left(\frac{5-4}{5+4}\right)^2 = \frac{1}{81}.$$

Чтобы найти коэффициент пропускания D, выясним смысл коэффициентов R, D с корпускулярной точки зрения. Пусть за некоторый промежуток времени к барьеру подлетело n электронов. Из них n' электронов отразилось от барьера, а n'' электронов прошло через барьер. Тогда

$$R = n'/n; \quad D = n''/n.$$

Так как $n' + n'' = n$, то

$$R + D = 1.$$

Отсюда находим

$$D = 1 - R = 1 - 1/81 = 80/81.$$

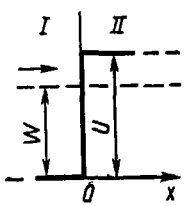

Рис. 29-3

29-7. Пучок электронов с энергией $W = 25$ эВ встречает на своем пути потенциальный барьер высотой $U = 26$ эВ (рис. 29-3). Определить относительную плотность вероятности η пребывания электрона в области II на расстоянии $x = 1{,}0$ Å от границы областей I, II (т. е. отношение плотности вероятности пребывания электрона в точке $x = 1{,}0$ Å к плотности вероятности его пребывания на границе областей при $x = 0$).

Решение. Здесь в отличие от предыдущей задачи дан *высокий* ($U > W$) потенциальный барьер бесконечной ширины. Несмотря на то, что в этом случае коэффициент отражения $R = 1$, т. е. *все* падающие на барьер электроны отражаются, существует вероятность обнаружить электрон и в области II, за барьером. Чтобы найти эту вероятность, надо решить уравнение Шредингера (29.4). В данном случае одномерной задачи оно запишется с учетом неравенства $U > W$ так:

$$\psi''(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(U - W)\psi(x) = 0.$$

Решение этого уравнения (см. стр. 312) дается формулой (29.22). Из нее следует: если $x \to \infty$, то $\psi \to \infty$ Но волновая функция по своему физическому смыслу должна оставаться конечной при всех значениях x. Следовательно, $C = 0$. Поэтому из (29.22) с учетом (29.20) получим

$$\psi(x) = De^{-kx} = De^{-\sqrt{2m(U-W)}\,x/\hbar}.$$

Значит, плотность вероятности пребывания частицы в точке x равна

$$|\psi(x)|^2 = D^2 e^{-2\sqrt{2m(U-W)}\,x/\hbar}.$$

Отсюда относительная плотность вероятности

$$\eta = \frac{|\psi(x)|^2}{|\psi(0)|^2} = e^{-2\sqrt{2m(U-W)}\,x/\hbar}.$$

Выразим числовые значения величин, входящих в формулу, в единицах СИ: $\hbar = 1{,}06 \cdot 10^{-34}$ Дж · с, $m = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ кг, $U - W = 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Дж, $x = 1{,}0 \cdot 10^{-10}$ м. Произведя вычисление, найдем

$$\eta = 0{,}3.$$

В СТРОЕНИЕ АТОМОВ

Методические указания

1. В зависимости от значения орбитального квантового числа l состояния электрона в атоме записывают различными буквами. Значениям $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \ldots$ соответствуют буквы $s, p, d, f, g, h, \ldots$ (далее по алфавиту); перед ними указывают значение главного квантового числа n. Например, электрон в состоянии с $n = 2$ и $l = 1$ обозначается символом $2p$.

2. Решение задач на определение результирующих орбитального M_L и спинового M_S моментов импульса многоэлектронного атома связано с вычислением возможных значений квантовых чисел L и S, входящих в формулы (29.13), (29.14). При этом руководствуются следующими правилами:

а) так как каждая из величин M_L и M_S равна нулю для заполненных оболочек атома*, то последние не учитываются при вычислении L и S;

б) квантовое число L принимает все целочисленные значения, заключенные между наибольшим и наименьшим значениями векторной суммы $\Sigma \mathbf{l}_i$, где l_i — квантовые числа отдельных электронов, определяющие, согласно (29.9), их моменты импульса M_l. Так, для двух электронов с квантовыми числами l_1 и l_2 имеем

$$L = l_1 + l_2,\ l_1 + l_2 - 1,\ \ldots,\ |l_1 - l_2|; \qquad (29.23)$$

в) квантовое число S получается целым или полуцелым в зависимости от того, четным или нечетным является число N электронов в атоме. Число S принимает все целые или полуцелые значения, заклю-

* Оболочку составляют электроны с одинаковыми числами n и l.

ченные между наибольшим и наименьшим значениями модуля алгебраической суммы Σm_{sl}, где m_{sl} — спиновые квантовые числа электронов, равные $\pm 1/2$. Так, для двух электронов $S = 1/2 + 1/2 = 1$ или $S = 1/2 - 1/2 = 0$, для трех электронов $S = 1/2 + 1/2 + 1/2 = 3/2$ или $S = 1/2 + 1/2 - 1/2 = 1/2$ и т. д.;

г) при вычислении значений L и S важно следить, чтобы полученный результат не противоречил *принципу Паули*, согласно которому в атоме не может быть хотя бы двух электронов, обладающих одинаковой совокупностью четырех квантовых чисел n, l, m_l, m_s. Например, если при определении возможных значений полного момента импульса двух эквивалентных электронов (т. е. электронов с одинаковыми числами n и l) для числа L выбрано максимальное значение в ряду (29.23), равное $l_1 + l_2$, то при этом число S может иметь только одно значение: $S = 0$.

Действительно, равенство $L = l_1 + l_2$ означает, что орбитальные моменты импульса двух эквивалентных электронов не только равны по модулю, но и имеют одинаковую ориентацию. Поэтому квантовые числа m_l у этих электронов будут совпадать. Но тогда их спиновые числа, как это следует из принципа Паули, должны иметь противоположные знаки, откуда $S = 1/2 - 1/2 = 0$.

3. Следует помнить об условности *векторной модели атома*, в которой момент импульса **M** электрона изображают на чертеже как вектор, приписывая ему, таким образом, определенное направление в пространстве. Между тем согласно законам квантовой механики всегда существует некоторая неопределенность направления вектора **M**. Так, например, если модуль вектора $\mathbf{M}_l$ и его проекция M_{lz} на заданное направление z выражаются формулами (29.9) и (29.10), то остальные проекции M_{lx}, M_{ly} остаются неопределенными. Вектор $\mathbf{M}_l$ может с равной вероятностью иметь любое направление, при котором образуемый им с осью z угол α находится из соотношения $\cos\alpha = M_{lz}/M_l$.

Решение задач

29-8. Атом водорода находится в 1*s*-состоянии. Определить наиболее вероятное расстояние электрона от ядра.

Решение. Прежде всего уточним понятие наиболее вероятного расстояния, так как из законов теории вероятности следует, что вероятность обнаружить электрон на любом наперед заданном расстоянии от ядра *равна нулю*.

1*s*-состояние электрона в атоме водорода описывается собственной волновой функцией $\psi(r)$, зависящей только от расстояния r до ядра и выражаемой формулой (29.7). Тогда вероятность найти электрон в элементарном объеме dV, находящемся на расстоянии r от ядра, согласно (29.3) равна

$$dP = |\psi(r)|^2\, dV. \qquad (1)$$

В силу сферической симметрии функции $\psi(r)$ элементарным объемом dV, все точки которого удалены на расстояние r от ядра, будет шаровой слой радиуса r и толщиной dr, т. е.

$$dV = 4\pi r^2 dr. \tag{2}$$

Подставив в (1) значения $\psi(r)$ по (29.7) и dV по (2), получим

$$dP = \frac{4}{a^3} e^{-2r/a} r^2 dr. \tag{3}$$

Величина $w(r) = \frac{dP}{dr}$, измеряемая отношением вероятности обнаружить частицу в шаровом слоем к толщине этого слоя, называется *линейной плотностью вероятности* в шаровом слое. Тогда на основании (3) запишем

$$w(r) = \frac{4}{a^3} e^{-2r/a} r^2. \tag{4}$$

Функция $w(r)$ имеет максимум при некотором расстоянии $r = r_в$ (см. ниже), которое и называют *наиболее вероятным*.

Чтобы вычислить $r_в$, применим обычный метод исследования функций на экстремум. Найдем $r_в$ из условия $w'(r) = 0$. Произведя дифференцирование, получим

$$2re^{-2r/a} - \frac{2r^2}{a} e^{-2r/a} = 0.$$

Отсюда

$$r_в = a.$$

Таким образом, искомое расстояние совпадает с радиусом первой боровской орбиты.

29-9. Определить возможные значения орбитального момента импульса M_l электрона в возбужденном атоме водорода, если энергия возбуждения $\varepsilon = 12{,}09$ эВ.

Решение. Орбитальный момент импульса M_l электрона определяется квантовым числом l по формуле (29.9). Так как ряд возможных значений l ограничен величиной $n - 1$, найдем главное квантовое число n с помощью формулы (29.8), которую перепишем, учитывая, что при $n = 1$ $W_1 = -13{,}6$ эВ:

$$W_n = -\frac{13{,}6}{n^2} \text{ эВ}.$$

Энергия возбуждения ε есть квант энергии, поглощенный атомом при переходе из основного состояния ($n = 1$) в возбужденное. Следовательно,

$$W_n - W_1 = \varepsilon.$$

Подставив числовые значения величин, выраженные в электронвольтах, получим

$$-\frac{13,6}{n^2}+13,6=12,09,$$

откуда $n = 3$. Следовательно, $l = 0, 1, 2$.

Теперь по (29.9) найдем возможные значения M_l:

$$\text{при } l=0 \quad M_l=0;$$

$$\text{при } l=1 \quad M_l=\hbar\sqrt{2}=1,49\cdot10^{-34} \text{ Дж·с};$$

$$\text{при } l=2 \quad M_l=\hbar\sqrt{6}=2,60\cdot10^{-34} \text{ Дж·с}.$$

29-10. Используя векторную модель атома, вычислить наименьший угол α, который может образовать вектор $\mathbf{M}_l$ орбитального момента импульса электрона в атоме с направлением внешнего магнитного поля. Электрон в атоме находится в d-состоянии.

Решение. Проекция вектора $\mathbf{M}_l$ на направление внешнего магнитного поля определяется формулой (29.10). Поэтому, учитывая также соотношение (29.9), можно найти искомый угол из условия

$$\cos\alpha=\frac{M_{lz}}{M_l}=\frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}. \qquad (1)$$

Так как d-состоянию электрона соответствует $l = 2$, то $m_l = 0, \pm1, \pm2$. Наименьшему значению α соответствует наибольшее значение квантового числа m_l в формуле (1). Положив $m_l = 2$, получим:

$$\cos\alpha=2/\sqrt{2\cdot3}=0,82, \quad \alpha=35°\ 10'.$$

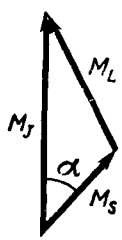

Рис 29 4

29-11. Атом кроме заполненных оболочек имеет три электрона (s, p, d) и находится в состоянии с максимально возможным для этой конфигурации полным моментом импульса Определить, используя векторную модель атома, угол между спиновым ($\mathbf{M}_S$) и полным ($\mathbf{M}_J$) моментами импульса атома.

Решение. Полагая, что в данном атоме существует нормальная спин-орбитальная связь, изобразим в соответствии с формулой (29.15) векторный треугольник моментов импульсов $\mathbf{M}_S$, $\mathbf{M}_L$, $\mathbf{M}_J$ (рис. 29-4). Согласно теореме косинусов получим для искомого угла

$$\cos\alpha=\frac{M_J^2+M_S^2-M_L^2}{2M_S M_J}, \qquad (1)$$

и задача сводится к определению величин M_L, M_S, M_J.

Из формулы (29.16) видно, что величина M_J будет наибольшей при наибольшем значении квантового числа J. Последнее равно сумме наибольших значений квантовых чисел L и S:

$$J_{\text{макс}} = L_{\text{макс}} + S_{\text{макс}}. \qquad (2)$$

Так как полный момент импульса заполненной электронной оболочки равен нулю, то будем рассматривать только три данных электрона. Соответствующие им квантовые числа l равны: $l_1 = 0$, $l_2 = 1$, $l_3 = 2$. Следовательно, $L_{\text{макс}} = l_1 + l_2 + l_3 = 3$.

Чтобы найти максимальное значение S, сложим спиновые квантовые числа трех электронов: $S_{\text{макс}} = {}^1/_2 + {}^1/_2 + {}^1/_2 = {}^3/_2$. Подставив в (2) значения $L_{\text{макс}}$ и $S_{\text{макс}}$, получим $J_{\text{макс}} = 9/2$.

Теперь по формулам (29.13), (29.14), (29.16) вычислим:

$$M_L = \sqrt{48}\,\hbar/2;\ M_S = \sqrt{15}\,\hbar/2;\ M_J = \sqrt{99}\,\hbar/2.$$

Подставив эти значения M_L, M_S, M в (1) и произведя вычисление, найдем:

$$\cos\alpha = 0{,}857;\ \alpha = 31^\circ.$$

§ 30. РАДИОАКТИВНОСТЬ. ПОГЛОЩЕНИЕ γ-ЛУЧЕЙ

Основные формулы

Закон радиоактивного распада: число радиоактивных ядер — dN, распадающихся за промежуток времени между t и $t + dt$, пропорционально этому промежутку dt и числу ядер N, еще не распавшихся к моменту t, т. е.

$$-dN = \lambda N dt, \qquad (30.1)$$

где λ — постоянная радиоактивного распада. Интегрируя (30.1), получим

$$N = N_0 e^{-\lambda t}, \qquad (30.2)$$

где N_0 — число радиоактивных ядер в момент $t = 0$.

Период полураспада T, т. е. промежуток времени, за который распадается половина начального числа ядер, и постоянная распада λ связаны соотношением

$$T\lambda = \ln 2. \qquad (30.3)$$

Активность препарата измеряется числом ядер, распадающихся в единицу времени:

$$a = -\frac{dN}{dt} = \lambda N. \qquad (30.4)$$

Если радиоизотоп A_1 с постоянной распада λ_1 превращается в радиоизотоп A_2 с постоянной распада λ_2, то число ядер радиоизотопа A_2 изменяется со временем по закону

$$N_2(t) = N_1(0)\frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}\left(e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}\right), \qquad (30.5)$$

где $N_1(0)$ — число ядер радиоизотопа A_1 в момент $t = 0$.

Интенсивность узкого пучка монохроматических γ-лучей, прошедших сквозь слой вещества толщиной x, уменьшается по закону

$$I = I_0 e^{-\mu x}, \qquad (30.6)$$

где I_0 — интенсивность излучения, падающего на слой, μ — линейный коэффициент ослабления.