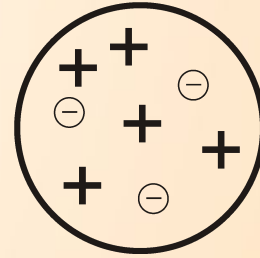


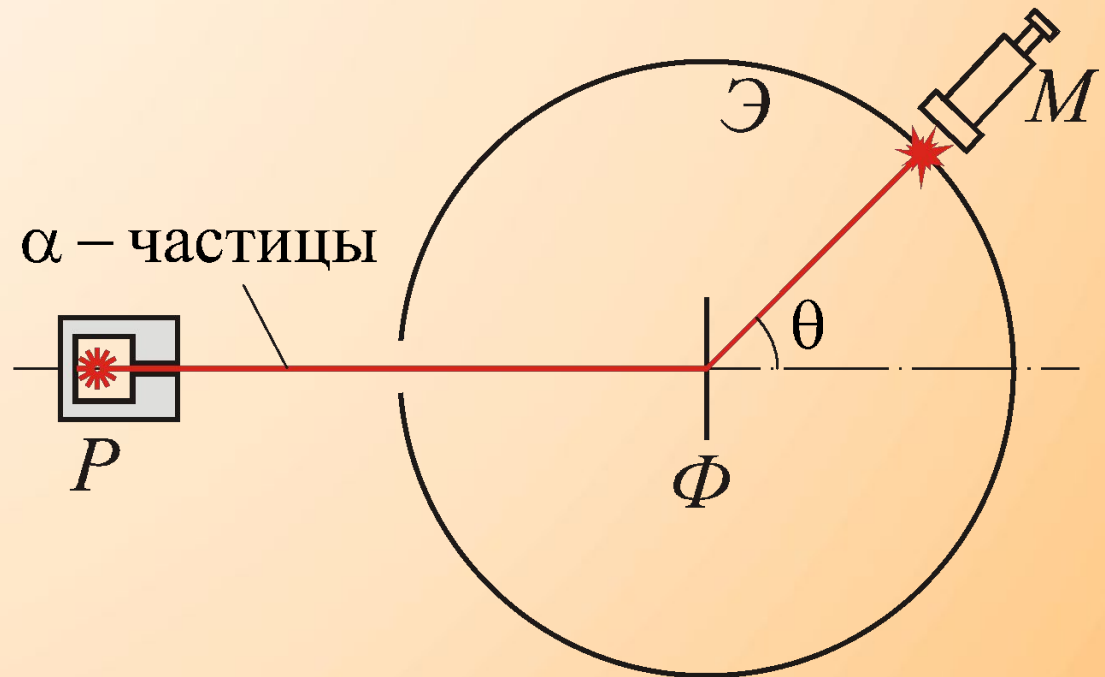
4. Элементы атомной физики

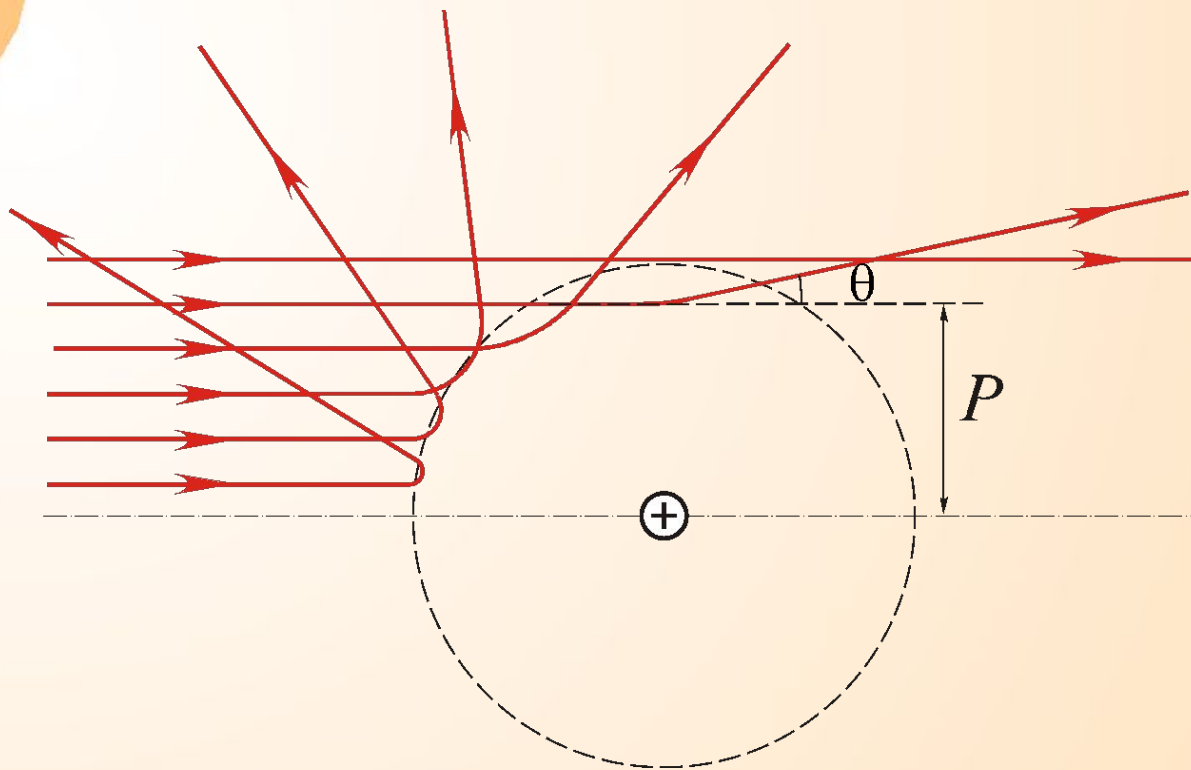
4.1. Ядерная модель атома.

Модель атома по Томсону

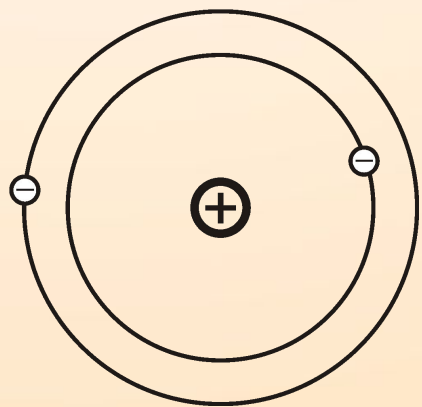


Опыты Резерфорда по рассеянию α -частиц





Планетарная модель атома по Резерфорду

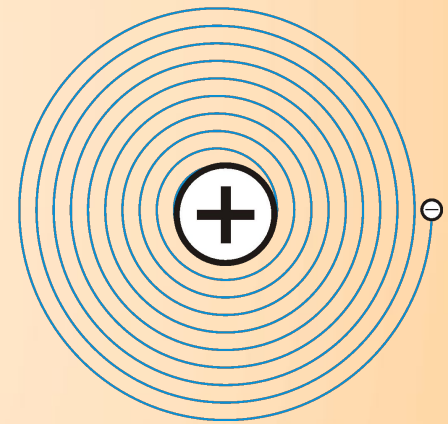


Размеры атома – порядка 10^{-10} м

Размеры ядра – порядка 10^{-14} м

Недостатки модели:

$$a = \frac{v^2}{r}$$

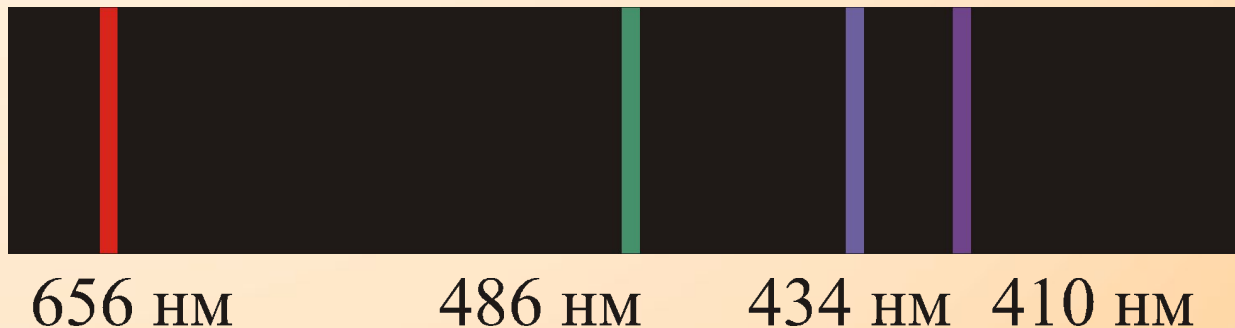


Время жизни атома – порядка 10^{-7} с

Спектр излучения – непрерывный

На самом деле:

- спектр излучения линейчатый
- время жизни – очень большое





В 1885г. Бальмер нашел, что длину волны λ , которая соответствует линиям водорода, расположенным в видимой части спектра, можно вычислить по эмпирической формуле:

$$\lambda = B \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad (4.1)$$

БАЛЬМЕР
Иоганн Якоб
(1825-98)

где вместо n следует подставлять
целые числа 3, 4, 5, 6,
а B - эмпирическая константа,
равная $3645,6 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 3645,6 \text{ \AA}$

Волновое число:

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{\nu}{\lambda \nu} = \frac{1}{\lambda}$$

Тогда формула Бальмера принимает вид:

$$\tilde{\nu} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (4.2)$$

R - постоянная Ридберга
($R=1,097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$).



Johannes Robert Rydberg, 1854-1919 - шведский физик

В ультрафиолетовой части спектра находится
серия Лаймана

$$\tilde{\nu} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 2, 3, 4, \dots)$$

Остальные серии лежат в инфракрасной области

серия Пашена:

$$\tilde{\nu} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 4, 5, 6, \dots)$$

серия Брэкета:

$$\tilde{\nu} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 5, 6, 7, \dots)$$

4.2. Модель атома водорода по Н. Бору.



**Нильс Хенрик Давид Бор
(1885 - 1962)**

Постулаты Бора

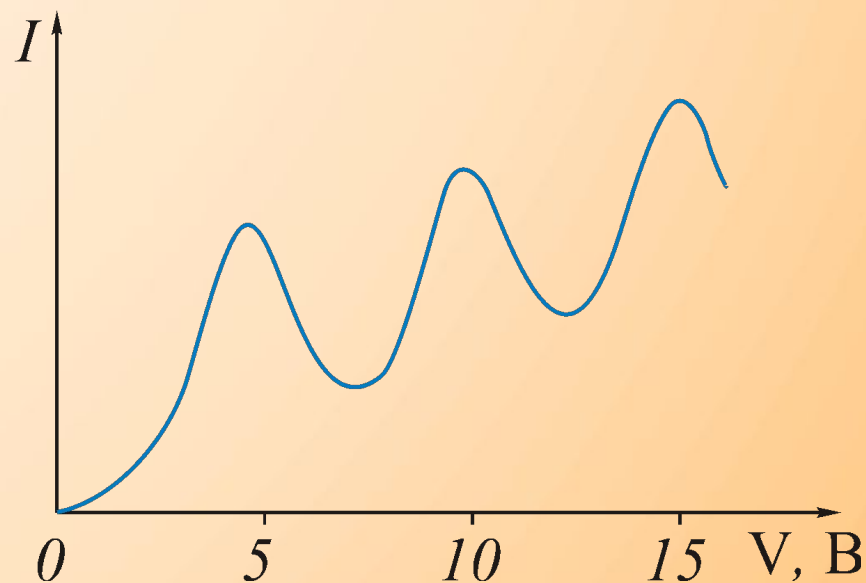
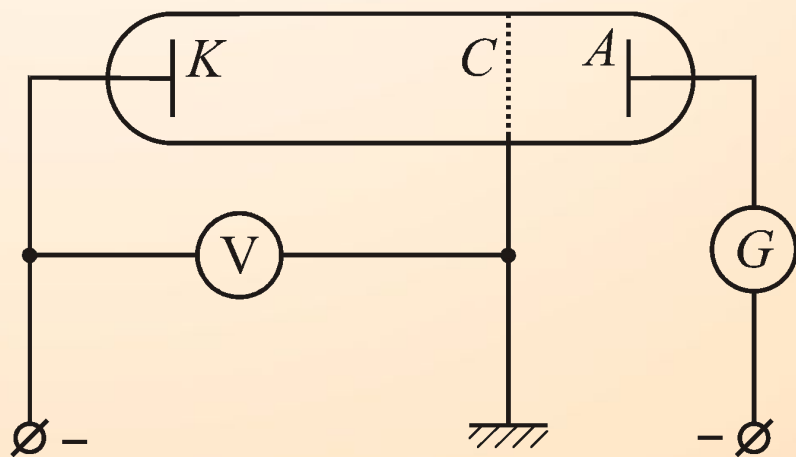
1. Существуют стационарные состояния атома. Этим стационарным состояниям соответствуют вполне определенные (стационарные) орбиты электронов. При движении по стационарным орбитам электроны не излучают электромагнитные волны.

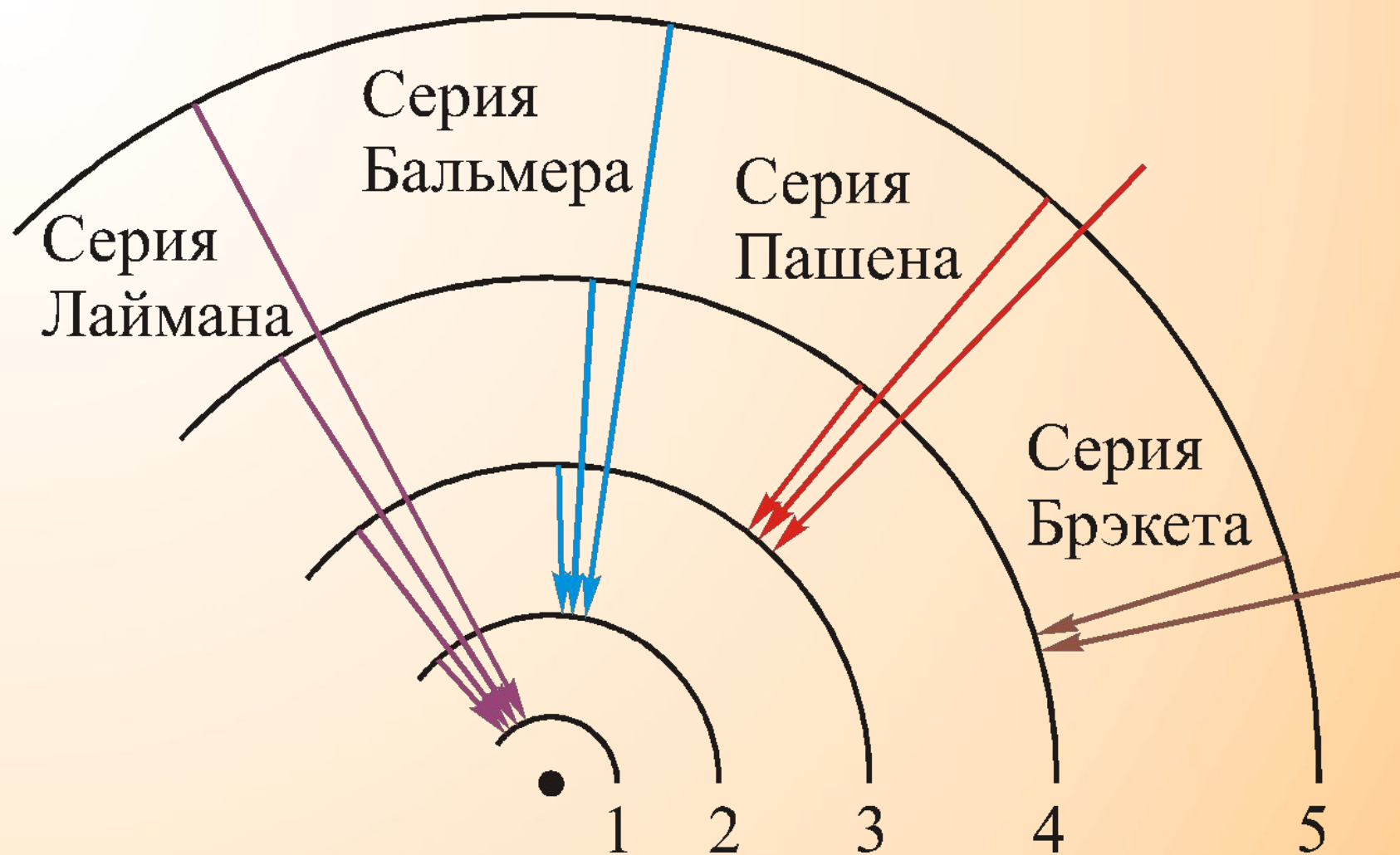
$$L_n = mvr_n = n\hbar \quad (4.3)$$

2. При переходе электрона с внешней стационарной орбиты на внутреннюю, ближе к ядру, атом излучает квант энергии:

$$h\nu = E_k - E_m \quad (4.4)$$

Опыт Франка – Герца.





Чтобы электрон удержался на орбите, сила кулоновского взаимодействия должна сообщать ему центростремительное ускорение.

$$ma = m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (4.5)$$

Кинетическая
энергия

$$W_K = \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2r}$$

Потенциальная
энергия

$$W_{\Pi} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

Полная энергия электрона на орбите:

$$W = W_K + W_\Pi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2r} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2r}$$

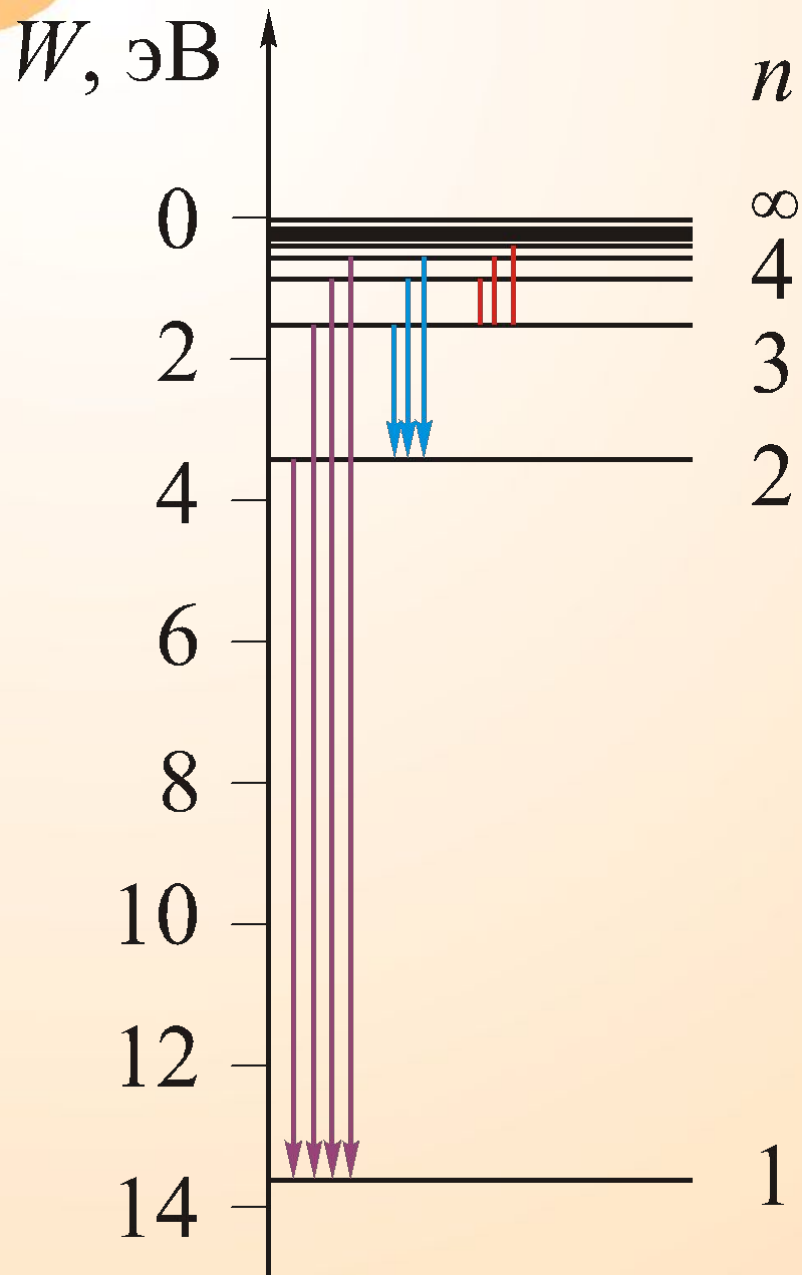
Из первого постулата Бора:

$$v = \frac{n\hbar}{mr}$$

Из (4.5)

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} n^2 = a_0 \cdot n^2 \quad (4.6)$$

$$r_1 = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \underline{0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}} \quad - \text{ Боровский радиус}$$



$$W_n = -\frac{me^4}{8h^2\varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (4.7)$$

Основное состояние:

$$W_1 = -13,53 \text{ эВ}$$

• **Энергией ионизации** называется энергия, которую необходимо сообщить электрону, находящемуся в основном состоянии, чтобы оторвать его из атома.

$$W_i = W_\infty - W_1 = \underline{13,53 \text{ эВ}}$$

$$W_n = -\frac{W_i}{n^2} \quad (4.8)$$

Водородоподобные системы:

H, He⁺, Li⁺⁺, ...

$$W_n = -\frac{me^4 Z^2}{8h^2 \varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (4.9)$$

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{Zme^2} n^2 \quad (4.10)$$

Задача 4.1

Определить по теории Бора радиус, частоту и скорость обращения электрона для первой орбиты, а также энергию ионизации для атома гелия.

Дано:

$$Z = 2$$

$$n = 1$$

$r - ? \quad v - ? \quad v - ?$

$W_i - ?$

$$r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{Zme^2} \cdot 1^2 = \frac{a_0}{Z} =$$

$$= \frac{0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}}{2} = \underline{0,265 \cdot 10^{-10} \text{ м}}$$

$$v_1 = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{1 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 0,265 \cdot 10^{-10} \text{ м}} = \underline{4,36 \cdot 10^6 \text{ м/с}}$$

$$T_1 = \frac{2\pi r_1}{v_1} \Rightarrow$$

$$\nu_1 = \frac{1}{T_1} = \frac{v_1}{2\pi r_1} = \frac{4,36 \cdot 10^6 \text{ м/с}}{2\pi \cdot 0,265 \cdot 10^{-10} \text{ м}} = \underline{2,6 \cdot 10^{16} \text{ Гц}}$$

$$W_{i\text{He}} = W_{i\text{H}} \cdot Z^2 = 13,6 \text{ эВ} \cdot 2^2 = \underline{54,4 \text{ эВ}}$$

Задача 4.2

Атом водорода в основном состоянии поглотил квант света с длиной волны 0,1215 мкм. Определить радиус электронной орбиты возбужденного атома водорода.

Дано:

$$Z = 1$$

$$n = 1$$

$$\lambda = 0,1215 \text{ мкм} = \\ = 0,1215 \cdot 10^{-6} \text{ м}$$

$$r_k - ?$$

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

$$1 - \frac{1}{k^2} = \frac{1}{\lambda R}$$

$$\frac{1}{k^2} = 1 - \frac{1}{\lambda R} = \frac{R\lambda - 1}{R\lambda}$$

$$k = \sqrt{\frac{R\lambda}{R\lambda - 1}}$$

$$R\lambda = 1,1 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \cdot 0,1215 \cdot 10^{-6} \text{ m} = 1,34$$

$$k = \sqrt{\frac{1,34}{1,34 - 1}} \approx 2$$

$$r_k = a_0 \cdot k^2 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} \cdot 4 = \underline{2,15 \cdot 10^{-10} \text{ m}}$$

4.3. Квантовые числа.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi$$

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

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

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}$$

$$E_n = -\frac{me^4}{8h^2\varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (4.11)$$

$$\psi = \psi_{nlms}(r, \theta, \varphi)$$

- *Главное квантовое число n* определяет возможное значение энергии электрона в атоме.

$$n = 1, 2, 3, 4 \dots$$

- *Орбитальное квантовое число l* определяет модуль момента импульса электрона.

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots (n-1).$$

$$M = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad (4.12)$$

- **Магнитное квантовое число m** определяет проекцию модуля момента импульса электрона на некоторое направление z .

Согласно принципу неопределенности Гайзенберга одновременно могут иметь определенные значения лишь модуль момента импульса и одна из проекций момента на координатные оси.

$$M_z = m\hbar \quad (4.13)$$

Магнитное квантовое число m характеризует пространственную ориентацию орбит в магнитном поле. Под действием внешнего магнитного поля, направленного по оси z , орбита электрона в атоме принимает такую ориентацию, при которой проекция вектора момента импульса на заданное направление z будет определяться формулой (4.13)

$$|m\hbar| \leq \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad (4.14)$$

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots -1, 0, 1, 2, \dots l-2, l-1, l$$

m — магнитное число, так как момент импульса и магнитный момент однозначно связаны гиромагнитным соотношением.

- **Спиновое квантовое число s** определяет собственный момент импульса (спин).

$$s = \pm \frac{1}{2}$$

$$M_{sz} = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (4.15)$$

Одному значению n соответствует несколько собственных функций:

$$\Psi_{nlms}$$

- Состояния с одинаковой энергией, но с различными значениями других квантовых чисел, называются **вырожденными**.

Число вырожденных состояний с одним значением энергии называется **кратностью вырождения** данного энергетического уровня.

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots (n-1).$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_n$

$$s = \underbrace{-1/2, +1/2}_2$$

$$m = \underbrace{-l, -l+1, -l+2, \dots -1, 0, 1, 2, \dots l-2, l-1, l}_{2l+1}$$

Кратность вырождения:
$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$$

В электрическом и магнитном полях вырождение снимается (эффекты Штарка и Зеемана).

$|\Psi_{nlms}|^2$ - определяет вероятность состояния электрона.

l – определяет форму волновой функции («орбиты») электрона.

$l = 0$ – сферическая симметрия (s – состояние)

$l = 1$ – p - состояние

$l = 2$ – d - состояние

$l = 3$ – f - состояние

m – определяет ориентацию орбиты в магнитном поле.

Полный момент импульса электрона:

$$\vec{M}_j = \vec{M}_l + \vec{M}_s \quad (4.16)$$

$$M_j = \hbar \sqrt{j(j+1)}, \quad j = l + s = l \pm 1/2 \quad (4.17)$$

$$M_{jz} = \hbar m_j, \quad m_j = j, j-1, j-2, \dots -j \quad (4.18)$$

Для каждого j есть $2j+1$ значений m_j

$$j_1 = 1 + 1/2 = 3/2, \quad m_j = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$$

$$j_2 = 1 - 1/2 = 1/2, \quad m_j = 1/2, -1/2$$

Правила отбора:

$$\Delta j = 0, \pm 1$$

(4.19)

Пример

Переход из d – состояния ($l = 2$) с $s = 1/2$ ($j = 5/2$)
возможен в состояние p ($l = 1$) с $s = 1/2$ ($j = 3/2$) и
невозможен в состояние p с $s = -1/2$ ($j = 1/2$)

4.4. Принцип Паули. Распределение электронов в атоме.

Любая система стремится занять состояние с минимальной энергией.

В атоме это состояние $n = 1, l = 0, m = 0$.



Вольфганг
Эрнст Паули
1900 - 1958



Принцип Паули:

В одном атоме не может быть двух электронов, у которых все четыре квантовых числа одинаковы.

$$n=1 \quad l=0 \quad m=0 \quad s=\pm\frac{1}{2}$$

- 2 электрона

$$n=2 \quad l=0, 1 \quad m=-1, 0, +1 \quad s=\pm\frac{1}{2}$$

- 8 электронов

$$n=3 \quad l=0, 1, 2 \quad m=-2, -1, 0, 1, 2 \quad s=\pm\frac{1}{2}$$

- 18 электронов

- Совокупность электронов, имеющих одинаковое значение квантового числа n , образует **оболочку**.

Оболочки подразделяются на **подоболочки**, отличающиеся значением числа l .

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

Подоболочки:

$1s$; $2s, 2p$; $3s, 3p, 3d$; $4s, 4p, 4d, 4f$;

Число состояний в подоболочке $2(2l+1)$

Оболочка	n	l	m	s	Подоболочка
К	1	0	0	$\uparrow\downarrow$	1s
L	2	0	0	$\uparrow\downarrow$	2s
		1	-1	$\uparrow\downarrow$	2p
			0	$\uparrow\downarrow$	
			+1	$\uparrow\downarrow$	
M	3	0	0	$\uparrow\downarrow$	3s
		1	-1	$\uparrow\downarrow$	3p
			0	$\uparrow\downarrow$	
			+1	$\uparrow\downarrow$	
		2	-2	$\uparrow\downarrow$	3d
			-1	$\uparrow\downarrow$	
			0	$\uparrow\downarrow$	
			+1	$\uparrow\downarrow$	
			+2	$\uparrow\downarrow$	

4.5. Периодическая система Д.И. Менделеева.

В 1869 г. Д.И. Менделеев открыл периодический закон изменения химических и физических свойств элементов в зависимости от их атомных масс.

Порядковый номер элемента Z совпадает с числом положительных элементарных зарядов в ядре и количеством электронов в атоме.

Периодичность свойств химических элементов связана с определенной периодичностью в расположении электронов в атоме.

Квантовые числа атома равны сумме соответствующих квантовых чисел всех электронов атома.

$$L = \sum_i l_i$$

$$S = \sum_i s_i$$

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|$$

Для полностью заполненной подоболочки $L = 0$, $S = 0$, $J = 0$.

Правило Хунда (для электронов одной оболочки):

1. Минимальная энергия соответствует состоянию с наибольшим возможным спином S и с наибольшим возможным при таком S значении L .

2. При этом квантовое число

$J = |L - S|$, если подболочка заполнена менее, чем наполовину;

$J = L + S$, в остальных случаях.

$3p$												
$3s$											↑	↑↓
$2p$				↑	↑↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
$2s$			↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
$1s$	↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
	Н	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg
J	$1/2$	0	$1/2$	0	$1/2$	0	$3/2$	2	$3/2$	0	$1/2$	0