

Тематический модуль 2: «КВАНТОВАЯ ФИЗИКА»

Тема 7:

Энергетический спектр атомов и молекул.
Природа химической связи.
Физика лазеров.

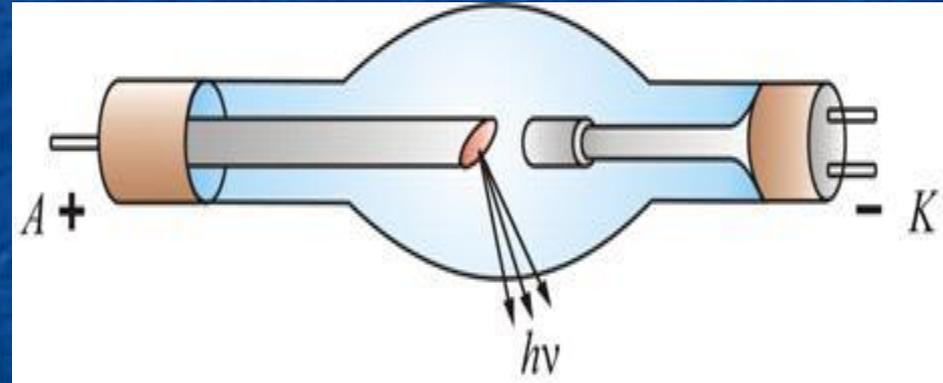
Энергетический спектр атомов и молекул. Природа химической связи. Физика лазеров.

1. Рентгеновские спектры. Тормозное и характеристическое рентгеновские излучения.
2. Молекулы. Химические связи. Энергия молекулы. Молекулярные уровни.
3. Комбинационное рассеяние света.
4. Спонтанное и вынужденное излучения. Оптические квантовые генераторы.

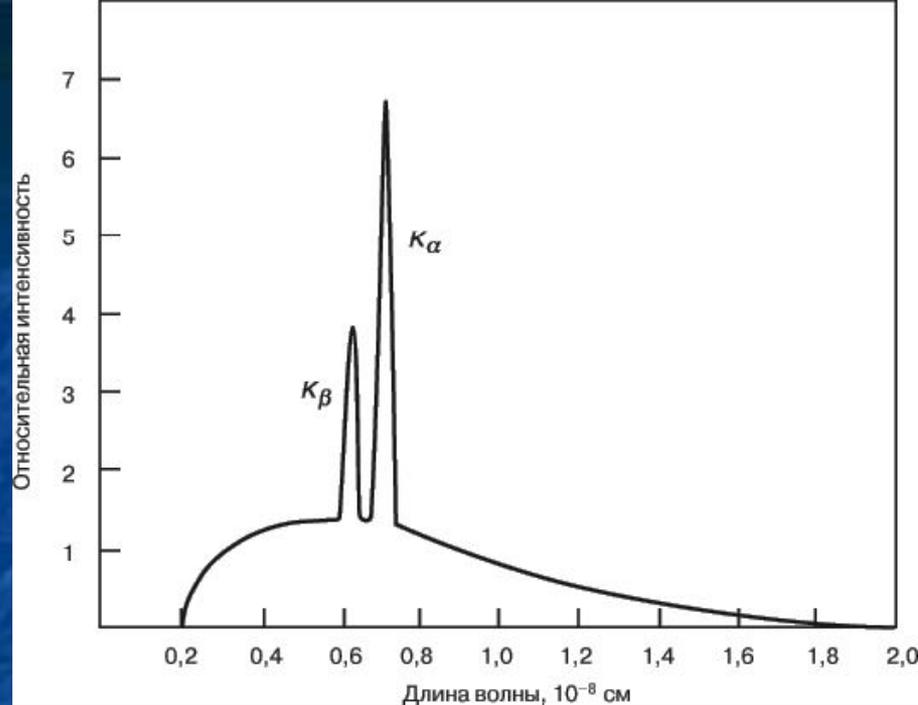
1. Рентгеновские спектры. Тормозное и характеристическое рентгеновские излучения.

Рентгеновские спектры — спектры испускания и поглощения рентгеновского излучения (электромагнитного излучения с длиной волны в пределах от 10^{-12} до 10^{-9} м).

Спектр излучения рентгеновской трубки представляет собой наложение тормозного и характеристического рентгеновских спектров.



Сплошной (тормозной) рентгеновский спектр возникает при *торможении* бомбардирующих анод рентгеновской трубки быстрых электронов. Определяется только энергией бомбардирующих анод электронов и не зависит от материала анода.

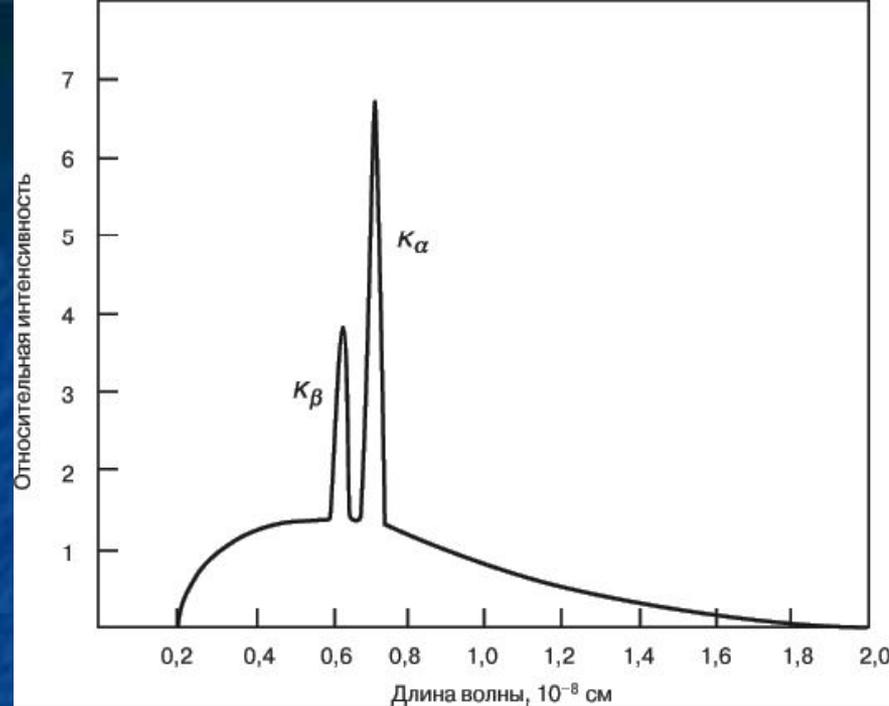


Особенности тормозного спектра:

- существование максимума интенсивности;
- существование минимальной длины волны — коротковолновой границы сплошного спектра.

Характеристический рентгеновский спектр возникает, когда энергия бомбардирующих анод электронов достаточна для выбивания электронов с внутренних оболочек атомов вещества.

На фоне сплошного спектра — линейчатый спектр, определяемый материалом анода.



Особенности характеристического спектра:

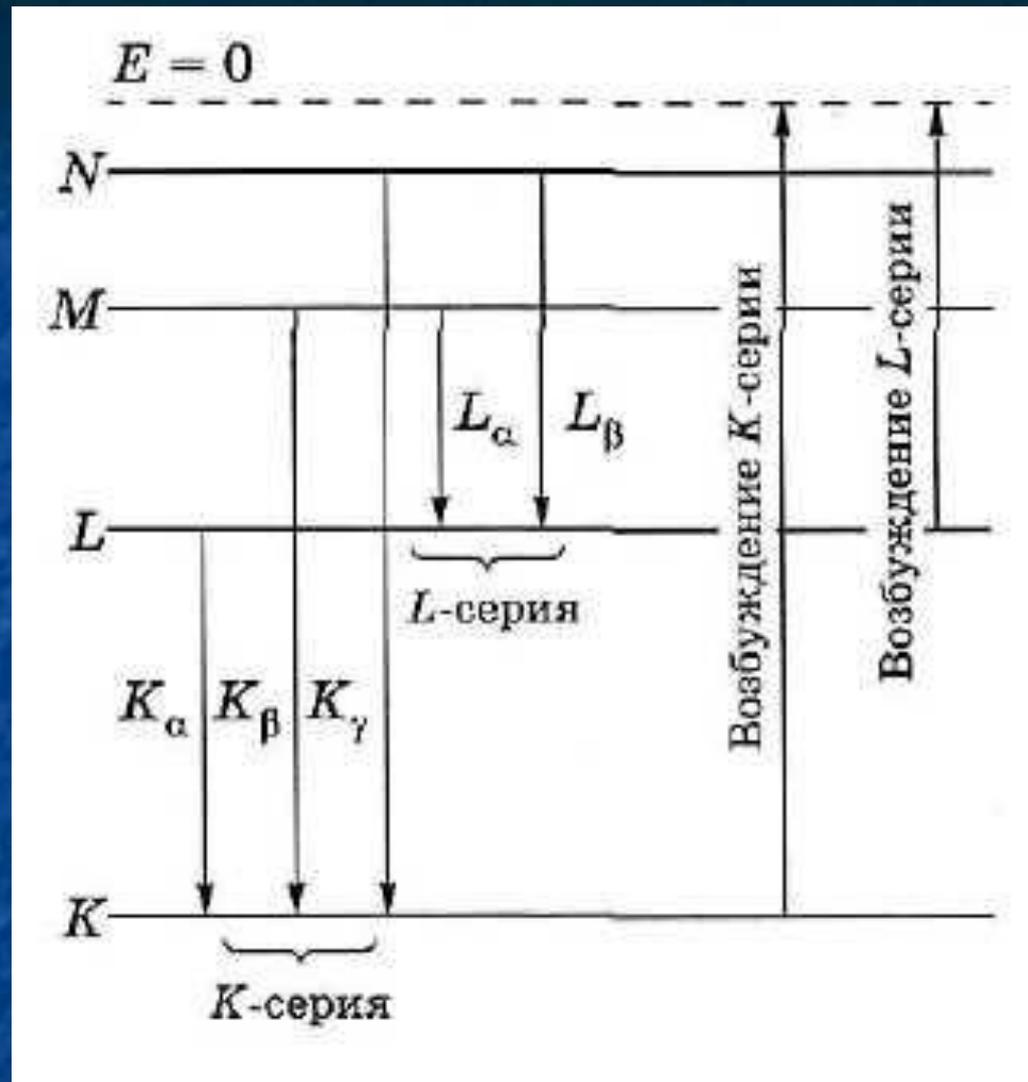
- состоят из нескольких серий, обозначаемых K , L , M , N и O ;
- каждая серия содержит набор отдельных линий, обозначаемых в порядке убывания длины волны индексами α , β , γ , ...;
- при переходе от легких элементов к тяжелым весь спектр смещается в сторону коротких волн;
- атомы каждого химического элемента обладают определенным, присущим данному элементу, характеристическим спектром.

Возбуждение характеристических рентгеновских серий обусловлено процессами, происходящими во внутренних, застроенных оболочках атомов.

Самая длинноволновая линия — K_α , так как частоты линий возрастают в ряду:

$$K_\alpha \rightarrow K_\beta \rightarrow K_\gamma$$

Интенсивности линий в ряду $K_\alpha \rightarrow K_\beta \rightarrow K_\gamma$ убывают, т.к. вероятность переходов электронов с L - оболочки на K - оболочку больше, чем с более удаленных оболочек M и N .



Закон Мозли (определяет частоту линий характеристического рентгеновского излучения):

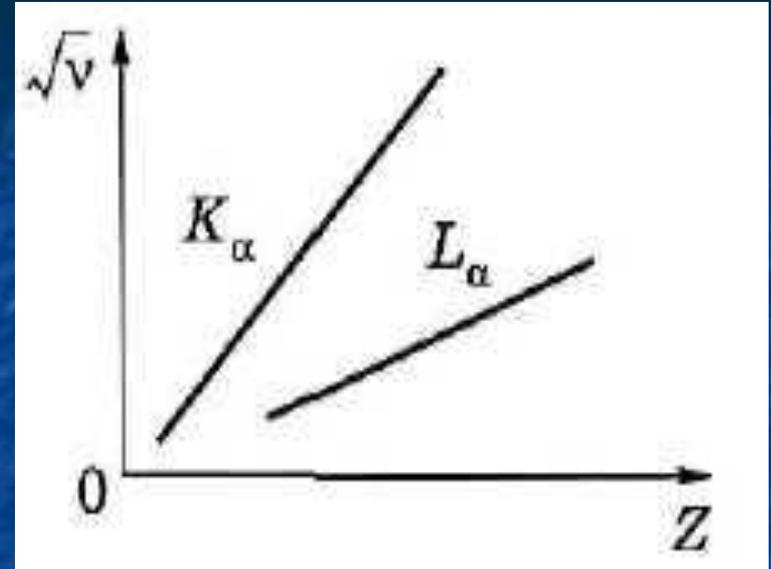
$$\nu = R \cdot (Z - \sigma)^2 \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Закон Мозли (другая форма записи):

$$\sqrt{\nu} = \sqrt{a} \cdot (Z - \sigma)$$

R — постоянная Ридберга; Z — порядковый номер в периодической системе элементов; σ — постоянная экранирования, одинаковая в пределах каждой серии для всех элементов, $m=1,2,3,\dots$ (определяет рентгеновскую серию), $n=m+1, m+2,\dots$ (определяет линию соответствующей серии); a — постоянная, имеющая определенное значение для каждой линии.

Смысл постоянной экранирования: на электрон, совершающий переход, действует не весь заряд ядра Ze , а заряд $(Z-\sigma)e$, ослабленный экранирующим действием других электронов.



2. Молекулы. Химические связи. Энергия молекулы. Молекулярные уровни.

Молекула - наименьшая частица вещества, состоящая из одинаковых или различных атомов, соединенных химическими связями, и являющаяся носителем его основных химических и физических свойств.

Двухатомные молекулы - число атомов, составляющих молекулу, равно двум (H_2 , CO , KCl).

Многоатомные молекулы - число атомов, составляющих молекулу, более двух, а для некоторых молекул составляет от сотен до тысяч (белки, гормоны,..).

Ионная (гетерополярная) химическая связь осуществляется благодаря кулоновскому притяжению между разноименно заряженными ионами ($NaCl$, KBr).

Ковалентная (гомополярная) химическая связь осуществляется в результате *обменного взаимодействия*, носящего квантовый характер и не имеющего аналога в классической физике (H_2 , CO).

Адиабатическое приближение:

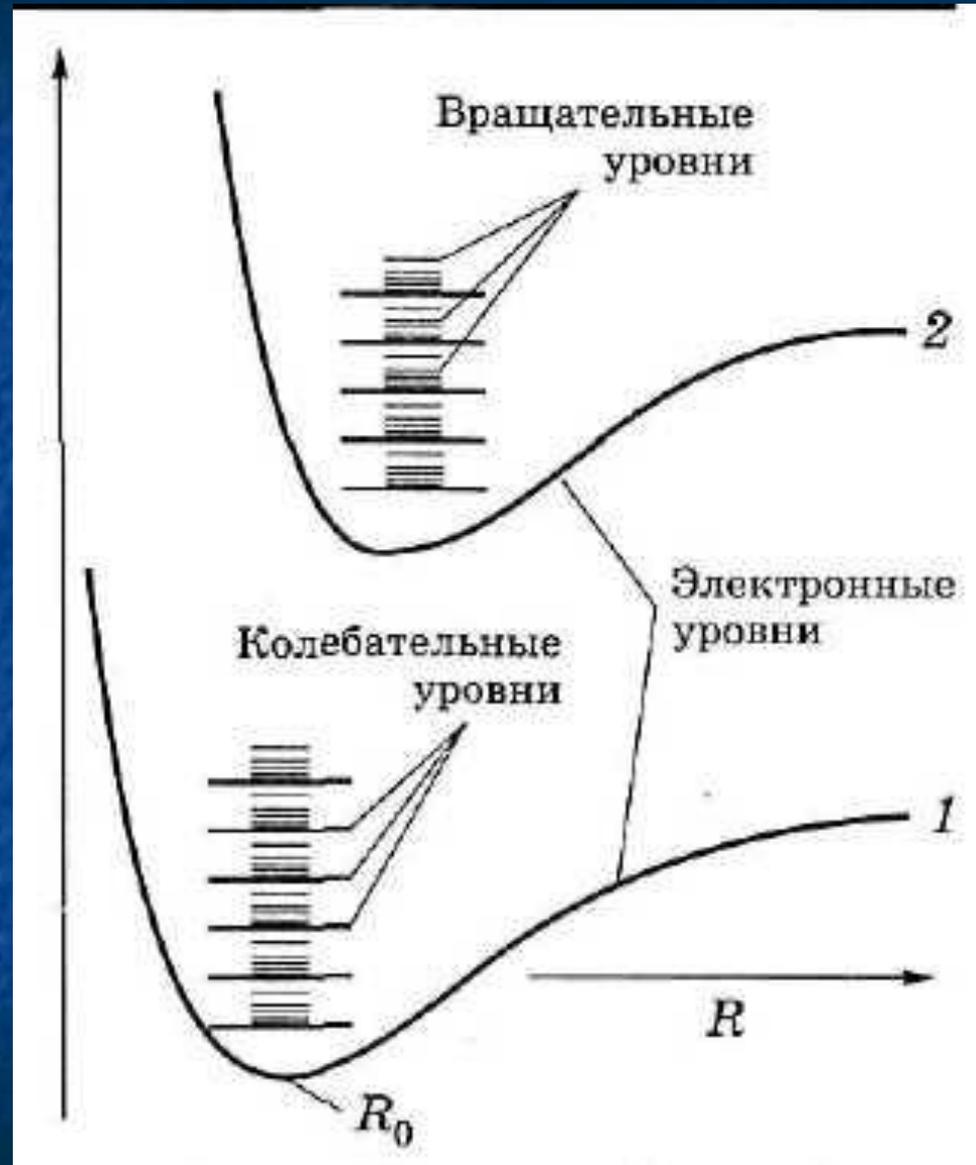
Для приближенного решения задачи квантово-механическая система разделяется на тяжелые и легкие частицы — ядра и электроны. Массы m скорости этих частиц сильно различаются, поэтому считается, что электроны движутся в поле неподвижных ядер, а медленно движущиеся ядра находятся в усредненном поле электронов.

Энергия молекулы:

$$E = E_e + E_K + E_{BP}$$

$$E_e \div E_K \div E_{BP} = 1 \div \sqrt{\frac{m}{M}} \div \frac{m}{M}$$

Приближенная квантовая модель молекулы — совокупность далеко отстоящих друг от друга электронных уровней (различные E_e при $E_K = E_{BP} = 0$), близко расположенных друг к другу колебательных уровней (заданное E_e при различных E_K и $E_{BP} = 0$) и еще более близких друг к другу вращательных уровней (заданные E_e и E_K при различных E_{BP}).



Спектры молекул:

Молекулярные спектры - спектры излучения (поглощения), возникающие при квантовых переходах между уровнями энергии молекул.

Электронные спектры - соответствуют переходам с одного электронного уровня на другой.

Колебательные спектры - соответствуют переходам с одного колебательного уровня на другой.

Вращательные спектры - соответствуют переходам с одного вращательного уровня на другой.

Электронно-колебательные спектры - соответствуют переходам между электронным и колебательным уровнями.

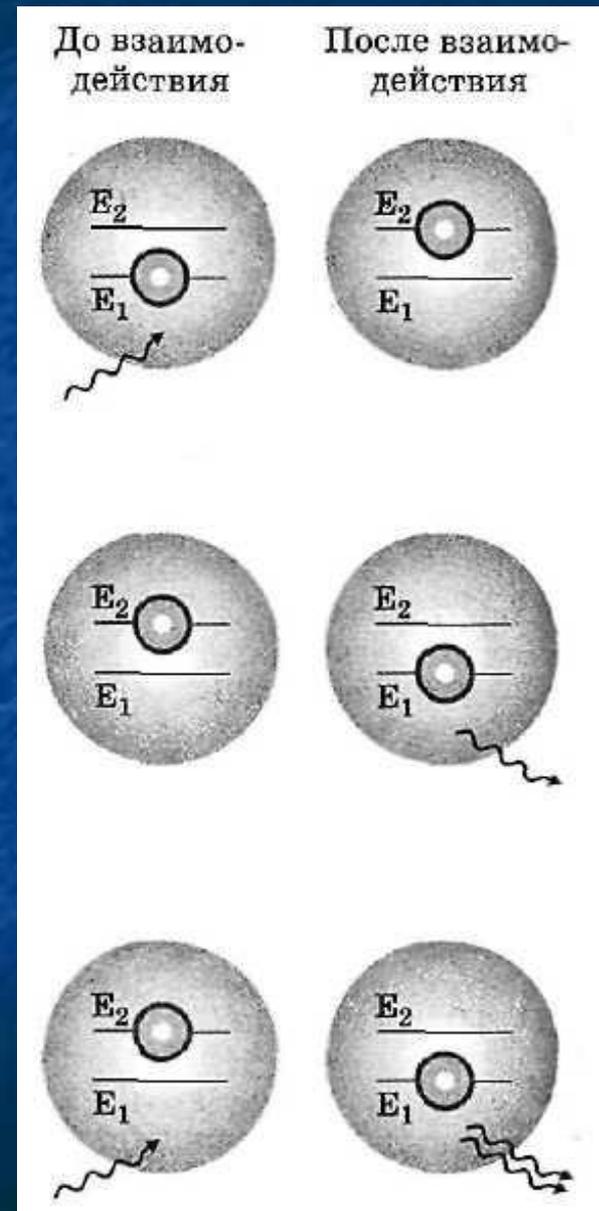
Колебательно-вращательные спектры - соответствуют переходам между колебательными и вращательным уровнями.

Полосатые спектры - полосы имеют различную интенсивность в зависимости от относительных вероятностей переходов.

4. Спонтанное и вынужденное излучения. Оптические квантовые генераторы.

Три типа переходов атомов из одного состояния в другое:

- 1) Поглощение излучения.
- 2) Спонтанное (самопроизвольное) излучение.
- 3) Вынужденное (индуцированное) излучение.



Тождественность вынужденного излучения вынуждающему излучению:

Вторичный фотон, испускаемый атомом, неотличим от первичного фотона, стимулирующего переход.

Вынужденное излучение имеет такую же частоту, фазу, поляризацию и направление распространения, как и вынуждающее излучение, т. е. вынужденное излучение строго когерентно с вынуждающим.

Состояния с инверсией заселенностей - неравновесное состояние системы атомов, в котором число атомов в возбужденном состоянии больше, чем их число в основном состоянии.

Накачка - процесс перевода системы в инверсное состояние. Инверсию заселенностей создают внешним воздействием (оптическими, электрическими и другими способами).

Активная среда - среда с инверсной заселенностью уровней: в такой среде вынужденное излучение может превышать поглощение света атомами и падающий пучок света при прохождении через вещество будет усиливаться.

Закон Бугера—Ламберта—Фабриканта:

$$I = I_0 e^{-\alpha x}$$

Для получения когерентного излучения в результате вынужденного излучения необходимо:

1) Наличие инверсии заселенностей - число атомов в более высоком состоянии должно превышать число атомов в более низком состоянии.

2) Наличие метастабильного состояния - возбужденное энергетическое состояние атомной системы, в котором она может существовать длительное время, в результате чего переход в более низкое состояние происходит благодаря вынужденному, а не спонтанному излучению.

Оптический квантовый генератор (лазер, *laser, light amplification by stimulated emission of radiation*) - прибор, генерирующий узкий пучок монохроматического когерентного излучения высокой интенсивности в оптическом диапазоне.

<i>Тип активной среды</i>	<i>Метод накачки</i>	<i>Режим генерации</i>
Твердотельные Газовые Полупроводниковые Жидкостные	Оптические Тепловые Химические Электроионизационные и др.	Непрерывный Импульсный

Активная среда - среда, в которой создаются состояния с инверсией заселенностей

Система накачки - устройство для создания инверсии в активной среде.

Оптический резонатор - устройство, выделяющее в пространстве избирательное направление пучка фотонов и формирующее выходящий световой пучок.



Свойства лазерного излучения:

- ◆ временная и пространственная когерентность (из-за пространственной когерентности излучение может быть сфокусировано в объеме $\sim \lambda^3$);
- ◆ строгая монохроматичность ($\Delta\lambda < 10^{-11}$ м);
- ◆ большая плотность потока энергии;
- ◆ очень малое угловое расхождение в пучке.