

Омский государственный технический университет

Кафедра физики

Калистратова Л.Ф.

**Электронные лекции по разделам оптики,
квантовой механики, атомной и ядерной физики**

**9 лекций
(18 аудиторных часов)**

Лекция 8.

Многоэлектронный атом

План лекции

- 8.1. Периодическая таблица элементов.
- 8.2. Оптические спектры элементов.
- 8.3. Рентгеновские спектры элементов.
- 8.4. Лазерное излучение.

8.1. Периодическая таблица элементов

Атом любого элемента природы имеет много электронов.

Атом любого элемента – нейтрален.

Положительный заряд ядра атома равен суммарному отрицательному заряду всех электронов.

Каждый из электронов движется в усредненном электрическом поле ядра и остальных электронов.

Заряд ядра для конкретного электрона будет экранироваться другими электронами.

Усредненное по времени результирующее поле:

- **можно считать центрально-симметричным** (зависит только от r);
- **не кулоновским** (т.е. пропорциональным $1/r^2$).

Решение уравнения Шредингера для электрона, движущегося в **центрально-симметричном не кулоновском поле**, даёт результат, аналогичный результату для водородного атома.

Сложный атом имеет набор собственных значений энергии и волновых функций.

Этот набор определяется квантовыми числами.

Физическая теория многоэлектронного атома

строится на следующих положениях.

1. **Электроны в атоме** имеют одинаковые физические свойства: массу, электрический заряд, спин.
2. **Электроны в атоме** – неразличимые частицы.

По законам квантовой физики тождественные частицы нельзя различить, т.е. нельзя их пронумеровать и следить за какой-то отдельной частицей.

Неразличимые частицы обязательно должны находиться в **разных квантовых состояниях**.

3. **Состояние электрона в атоме описывается набором четырёх квантовых чисел:**

главное: **$n = 1, 2, 3, \dots$**

орбитальное: **$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$**

магнитное: **$m = -l, \dots, 0, \dots, +l$**

спиновое: **$s = \frac{1}{2}$**

3. **Изменить состояние электрона** – значит изменить хотя бы одно квантовое число.
4. **Принцип Паули:** в одном и том же атоме не может быть двух электронов, обладающих одинаковой совокупностью всех четырёх квантовых чисел (в одном и том же квантовом состоянии не могут находиться одновременно два электрона).
5. **Схема энергетических уровней всех атомов одинакова:** уровни с заданным главным квантовым числом n расщепляются на подуровни в зависимости от остальных квантовых чисел.

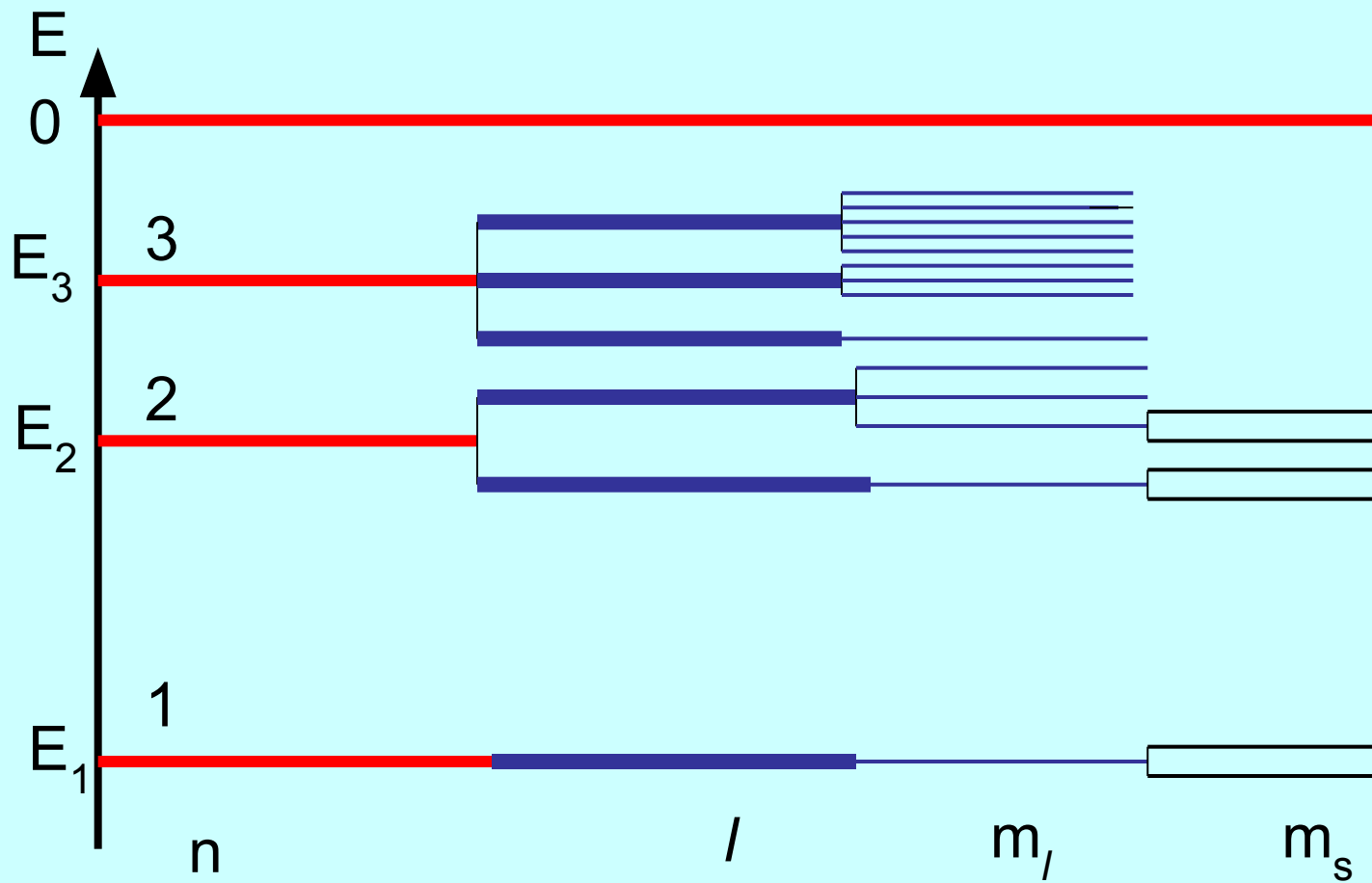
6. **Всего дозволённых энергетических состояний:**

$$2n^2$$

7. **Электроны заполняют энергетические уровни атома**, начиная с уровня с наименьшим значением энергии.

8. **В состоянии равновесия** атом должен иметь минимальное значение потенциальной энергии (общее условие равновесия систем).

Схема энергетических уровней многоэлектронного атома



Электронной оболочкой называется совокупность электронов в атоме, имеющих одинаковое главное квантовое число **n**.

Оболочкам дают обозначения, заимствованные из спектроскопии рентгеновских лучей:

n = **1 2 3 4 5 6 7...**

Обозначения: **K L M N O P Q...**

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

В состояниях с данным значением **n** в атоме **могут** находиться не более **$2n^2$** электронов.

К – оболочка ($n = 1$) может принять только **2** электрона ($2n^2 = 2$): оба электрона в s – состоянии.

L – оболочка ($n = 2$) может принять **8** электронов ($2n^2 = 8$): 2 электрона в s – состоянии и 6 электронов в p – состоянии.

M – оболочка ($n = 3$) может принять **18** электронов ($2n^2 = 18$): 2 электрона в s – состоянии, 6 электронов в p – состоянии и 10 электронов в d – состоянии.

N – оболочка ($n = 4$) может принять **32** электрона и т. д.

Распределение электронов по подоболочкам

Оболочки	s	p	d	Всего
K	2	-	-	2
L	2	6	-	8
M	2	6	10	18

Заполнение электронами К - оболочки

Электронные формулы элементов:

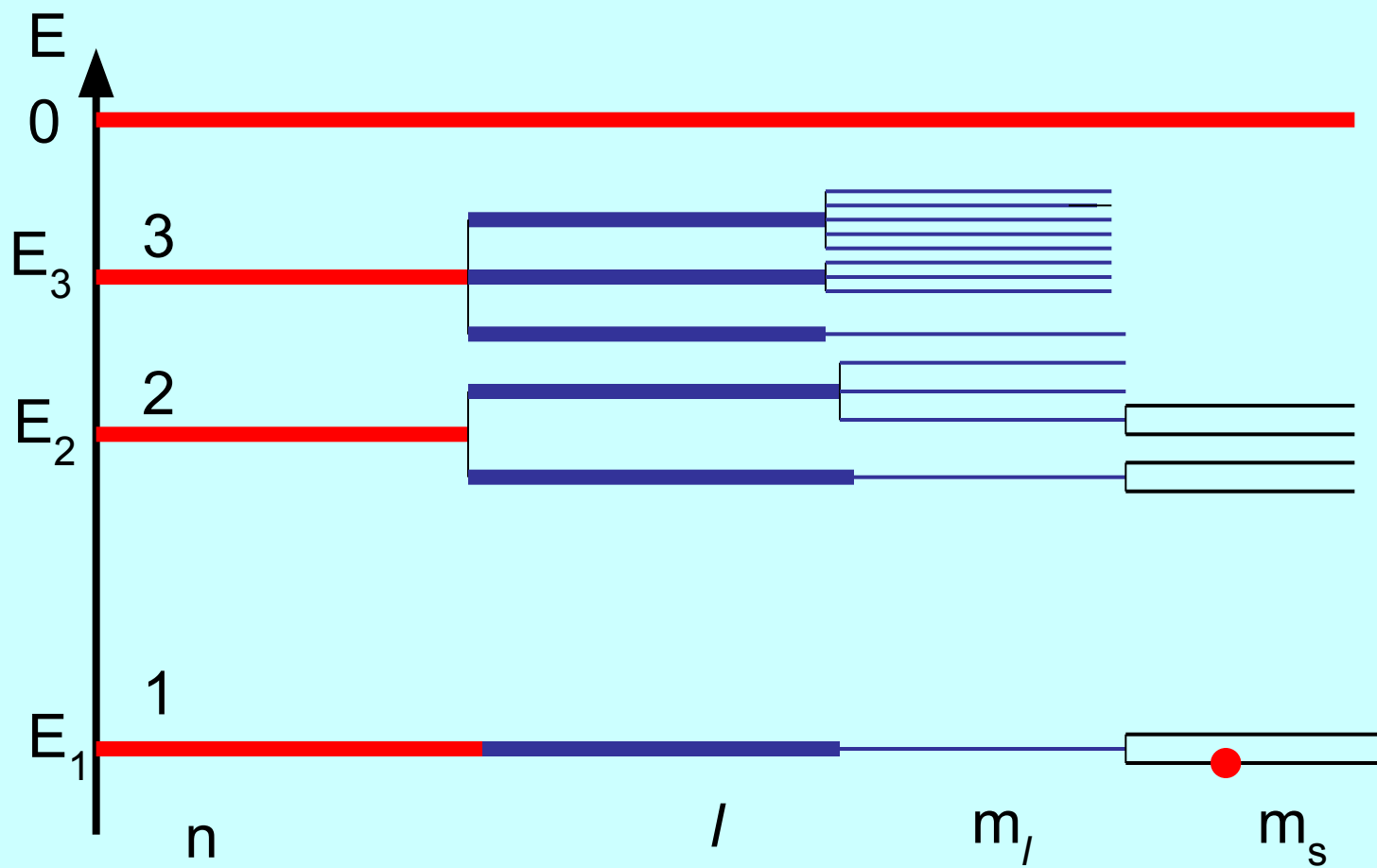
Водород: $1s^1$

Литий: $1s^2$

Атом водорода

- первый элемент периодической таблицы Д. И. Менделеева;
- имеет один электрон в состоянии с $n = 1$ и $l = 0$;
- самое низшее энергетическое состояние описывается набором квантовых чисел:
 $(1, 0, 0, -1/2)$.

Энергетическая схема атома водорода

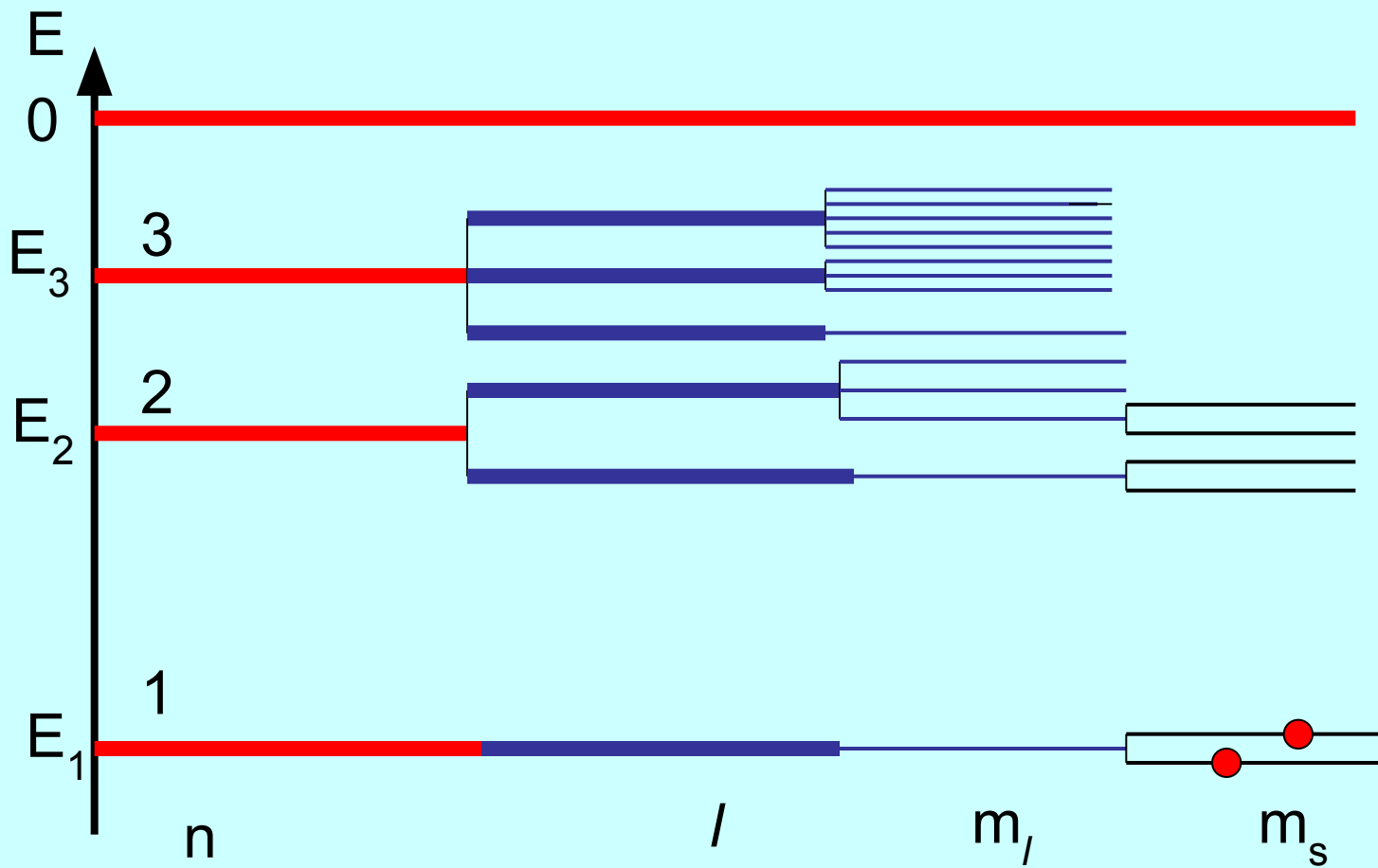


Атом гелия

- второй элемент периодической таблицы Д. И. Менделеева;
- имеет два электрона в состоянии с $n = 1$ и $l = 0$;
- самое низшее энергетическое состояние описывается набором квантовых чисел:
 $(1, 0, 0, -1/2)$
 $(1, 0, 0, +1/2)$
- электронная формула атома гелия: $1s^2$

На атоме гелия заканчивается заполнение так называемой **K – оболочки**.

Энергетическая схема атома гелия



Заполнение электронами L - оболочки

Электронные формулы элементов:

Литий: $1s^2 2s^1$

Бериллий: $1s^2 2s^2$

Бор: $1s^2 2s^2 2p^1$

Углерод: $1s^2 2s^2 2p^2$

Азот: $1s^2 2s^2 2p^3$

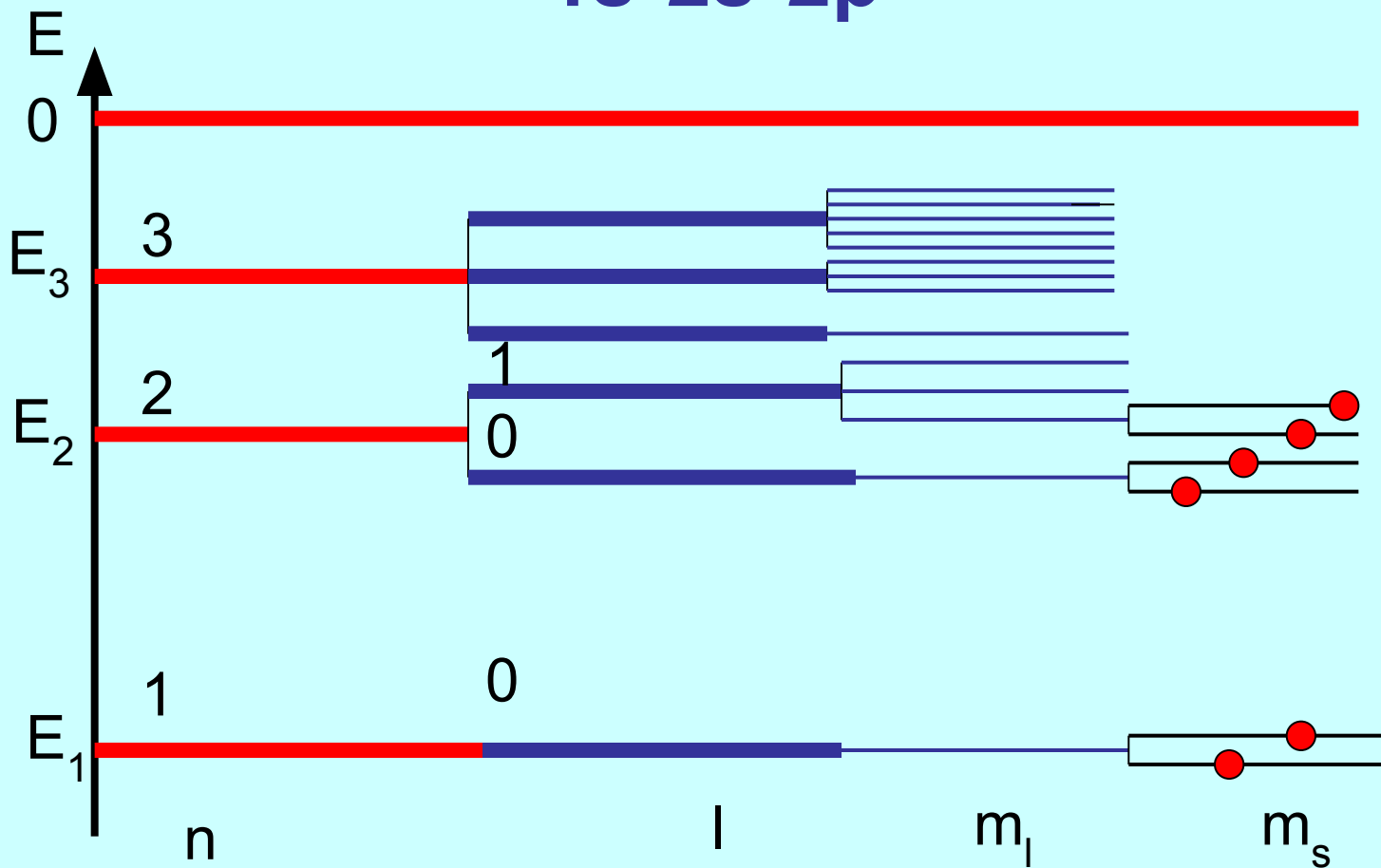
Кислород: $1s^2 2s^2 2p^4$

Фтор: $1s^2 2s^2 2p^5$

Неон: $1s^2 2s^2 2p^6$

Заполнение L – оболочки заканчивается неоном (инертным газом).

Энергетическая схема атома углерода



Заполнение электронами М - оболочки

М – оболочка может содержать **18** электронов.

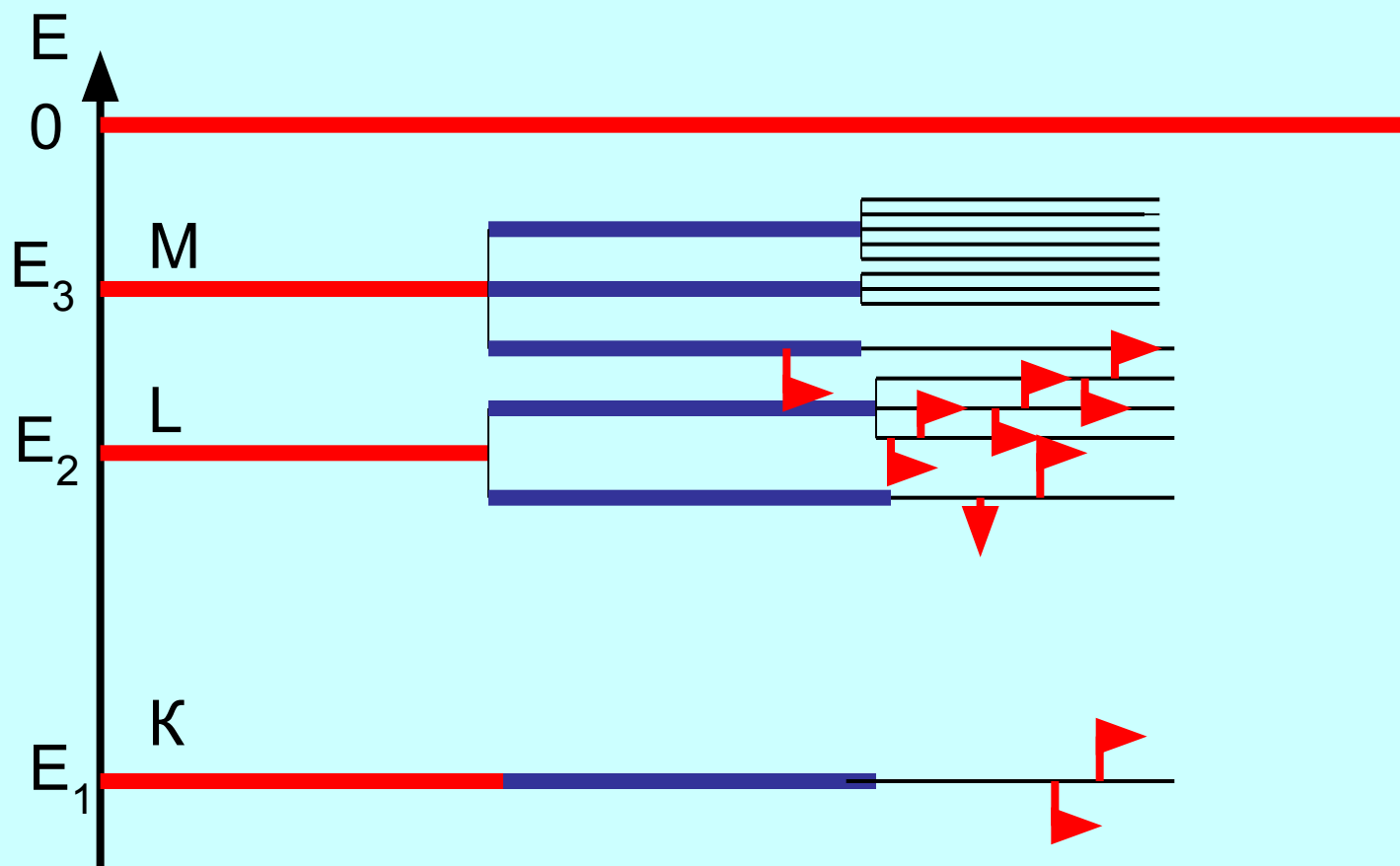
Последовательно заполняются:

сначала **s** – состояния **двумя** электронами
Na, Mg ,

затем **p** – состояния **шестью** электронами
Al, Si, P, S, Cl, Ar,

затем **d** – состояния **десятью** электронами
K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni.

Энергетическая схема атома натрия



Объяснение периодичности в свойствах элементов

Принцип Паули дает объяснение периодической повторяемости свойств атомов.

Проследим построение периодической системы элементов Менделеева.

В атоме **водорода** имеется один электрон с произвольной ориентацией спина в состоянии $1s$.

Если заряд ядра атома водорода увеличить на единицу и добавить еще один электрон, получится атом гелия.

Оба электрона в атоме **гелия** находятся в К – оболочке, но с антипараллельной ориентацией спинов.

Больше двух электронов К - оболочка принять не может.

Каждый последующий атом будет получаться при увеличении заряда ядра предыдущего атома на единицу и добавлении одного электрона, который помещается в L - оболочке.

Так третий электрон атома **лития** оказывается в L - оболочке в 2s-состоянии и он слабее остальных связан с ядром атома.

У четвёртого элемента, **бериллия**, полностью заполняется подоболочка 2s.

У следующих шести элементов (В, С, N, О, F и Ne) происходит заполнение электронами подоболочки 2p

Таким образом, **гелий** имеет полностью заполненную K – оболочку, а **неон** имеет полностью заполненную L – оболочку.

Таким образом, специфические свойства **гелия, неона и остальных инертных газов**, объясняются **полным заполнением электронами электронных оболочек атома.**

Натрий ($Z = 11$) имеет заполненные К – оболочку и L – оболочку; одиннадцатый электрон обязан находиться в состоянии 3s М – оболочки.

Электронная конфигурация натрия имеет вид:



Заполнение М - оболочки идет до 19 номера.

Электрон 3s в атоме натрия связан с ядром слабее других и является **валентным**.

В связи с этим химические свойства лития, натрия и цезия подобны:

Литий: **$1s^2 2s^1$**

Натрий: **$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$**

Цезий: **$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 6s^1$**

Таким образом, химические свойства **щелочных металлов** определяются одним валентным электроном, слабо связанным с ядром.

Отступления от периодичности заполнения электронами электронных подоболочек начинается в **N – оболочке**, начиная с 20 элемента (**$Z = 20 - 30$**).

В этих элементах **подоболочка 3d** в **N - оболочке** при данной общей конфигурации **оказывается энергетически выше подоболочки 4s**.

Поэтому сначала заполняется **подоболочка 4s**, затем заполняется **подоболочка 3d**.

Следующие отступления составляют элементы с номерами **58 – 71**, которые образуют группу **лантанидов** или редкоземельных металлов.

У них вперёд идёт заполнение электронами **5f - подболочки**, которая лежит ниже, чем **4d – подболочки**.

Поэтому у всех **лантанидов** внешняя подболочка **6s²** оказывается одинаковой, что и объясняет близость их химических свойств.

Группу химически родственных элементов образуют **актиниды** (атомные номера **90 - 103**), у которых заполняется 5f - подболочка при неизменной внешней оболочке **7s²**.

Все элементы рядов как актинидов, так и лантанидов находятся в соответствующей одной клетке периодической таблицы, так как химические свойства этих элементов очень близки.

Таким образом, **квантовая механика** полностью может описать

- **строение атомов химических элементов;**
- **объяснить их свойства повторяемостью в структуре внешних оболочек у атомов.**

8.2. Оптические спектры

В атоме электроны заполняют нижние энергетические уровни, верхние уровни свободны от электронов.

Атом может находиться в основном состоянии бесконечно долго.

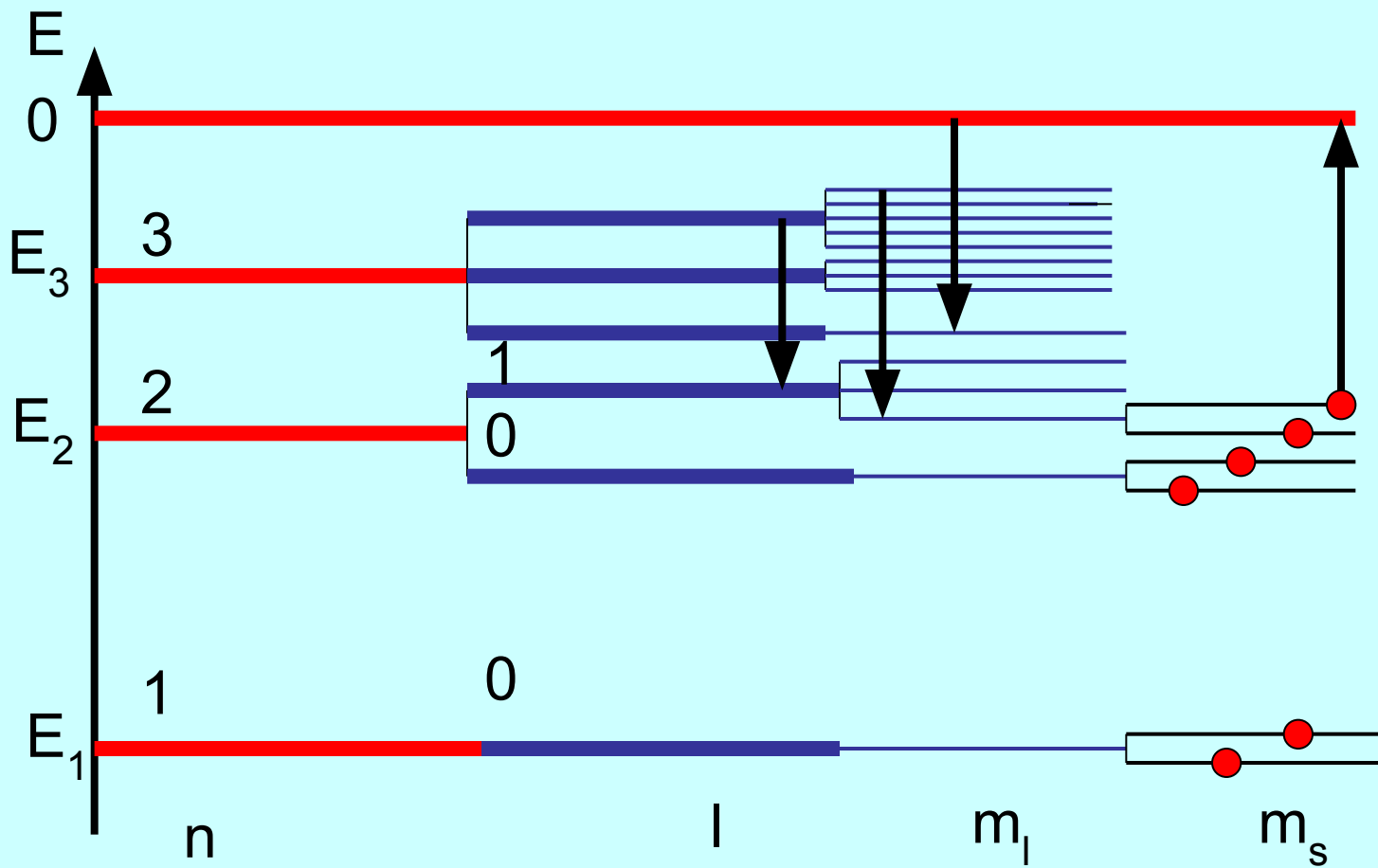
Если атом возбудить, то внешний валентный электрон в более высокое энергетическое состояние, в котором он может находиться 10^{-8} с.

После электрон через серию последовательных переходов должен вернуться в своё прежнее основное энергетическое состояние, при этом **атом излучает энергию разных частот.**

Так получаются спектральные серии атома в **оптическом диапазоне частот** (инфракрасное, видимое и ультрафиолетовые излучения).

Оптические спектры атомов получаются при переходах его валентных электронов между верхними энергетическими уровнями.

Оптические спектры атома углерода



Верхние энергетические уровни имеют сложное строение, поэтому расшифровка оптических спектров затруднена.

Имеются **каталоги оптических спектров** всех элементов.

Отдел физики, занимающийся расшифровкой оптических спектров называется **оптическим спектральным анализом**.

Ширина и интенсивность спектральных линий различна.

Интенсивность линий определяется вероятностью перехода электрона с одного энергетического уровня на другой.

Каждый переход имеет вполне определённую вероятность, а некоторые переходы вообще запрещены законами квантовой механики.

Правила отбора

Правила отбора ограничивают число возможных переходов электронов в атоме.

Возможны только такие переходы, при которых квантовые числа изменяются в соответствии **с правилами отбора**:

- главное квантовое число

$$\Delta n = 1, 2, 3, \dots ;$$

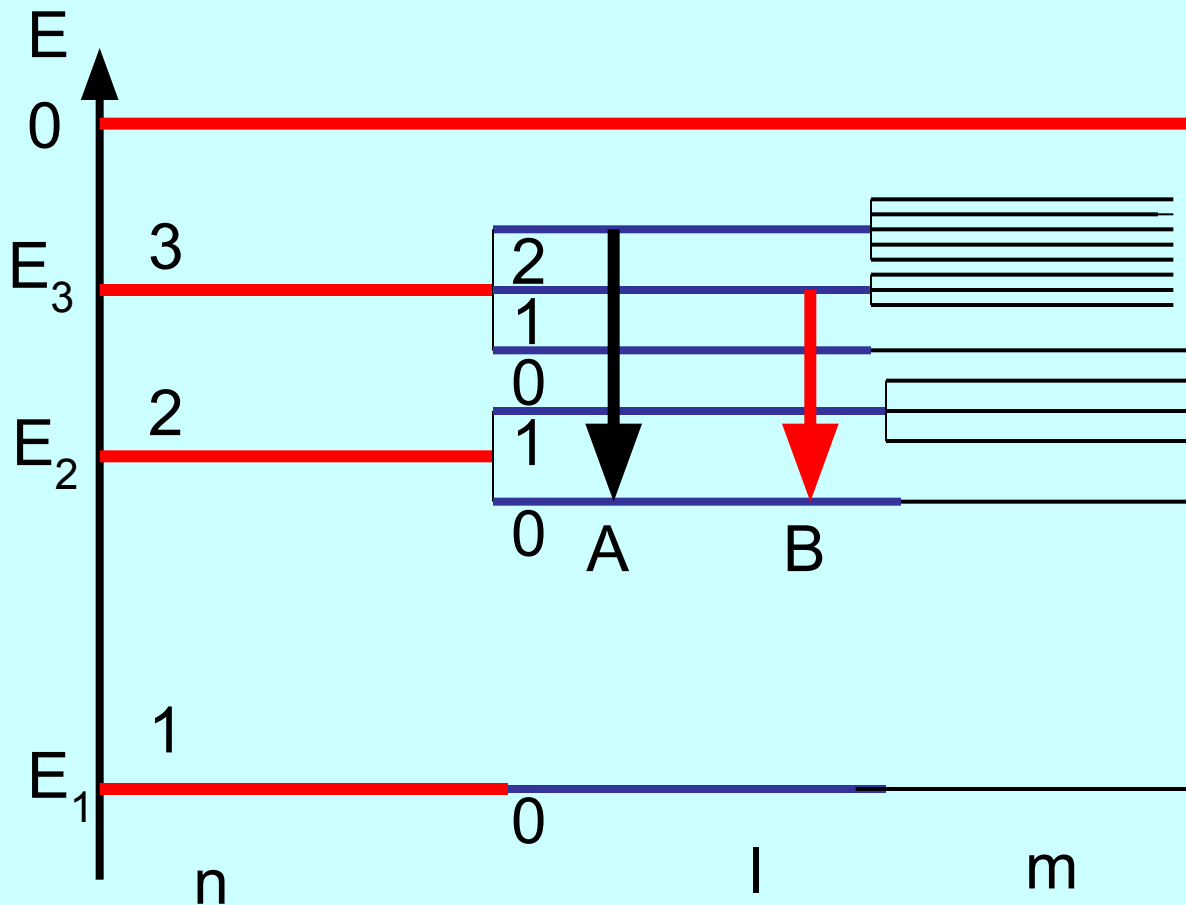
- орбитальное квантовое число

$$\Delta l = \pm 1 ;$$

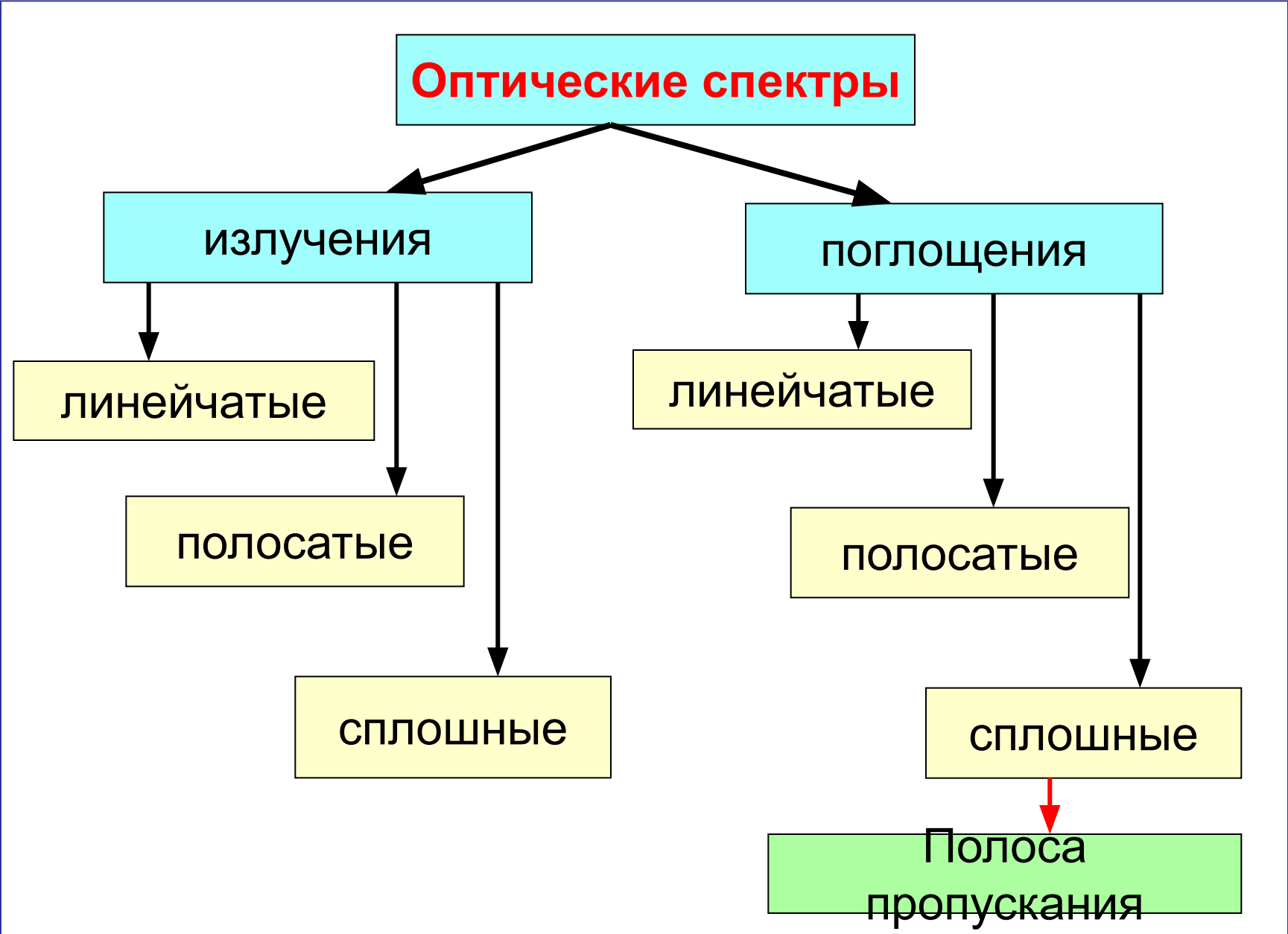
- магнитное квантовое число

$$\Delta m = 0, \pm 1 .$$

Правила отбора: 1) переход A – запрещён $\Delta l = 2$;
 2) переход B - разрешён $\Delta l = 1$.



Оптические спектры



```
graph TD; A[Оптические спектры] --> B[излучения]; A --> C[поглощения]; B --> D[линейчатые]; B --> E[полосатые]; B --> F[сплошные]; C --> G[линейчатые]; C --> H[полосатые]; C --> I[сплошные]; I --> J[Полоса пропускания]; style A fill:#e0ffff,stroke:#000,stroke-width:1px; style B fill:#e0ffff,stroke:#000,stroke-width:1px; style C fill:#e0ffff,stroke:#000,stroke-width:1px; style D fill:#ffffe0,stroke:#000,stroke-width:1px; style E fill:#ffffe0,stroke:#000,stroke-width:1px; style F fill:#ffffe0,stroke:#000,stroke-width:1px; style G fill:#ffffe0,stroke:#000,stroke-width:1px; style H fill:#ffffe0,stroke:#000,stroke-width:1px; style I fill:#ffffe0,stroke:#000,stroke-width:1px; style J fill:#90ee90,stroke:#000,stroke-width:1px;
```

The diagram is a hierarchical flowchart titled "Оптические спектры" (Optical Spectra). It starts with a root node "Оптические спектры" in a light blue box. This node branches into two main categories: "излучения" (emission) and "поглощения" (absorption), both in light blue boxes. Each of these categories further branches into three sub-types: "линейчатые" (line spectra), "полосатые" (band spectra), and "сплошные" (continuous spectra), all in yellow boxes. A red arrow points from the "сплошные" box under "поглощения" to a final green box labeled "Полоса пропускания" (pass band).

излучения

линейчатые

полосатые

сплошные

поглощения

линейчатые

полосатые

сплошные

Полоса
пропускания

8.3. Рентгеновские спектры элементов

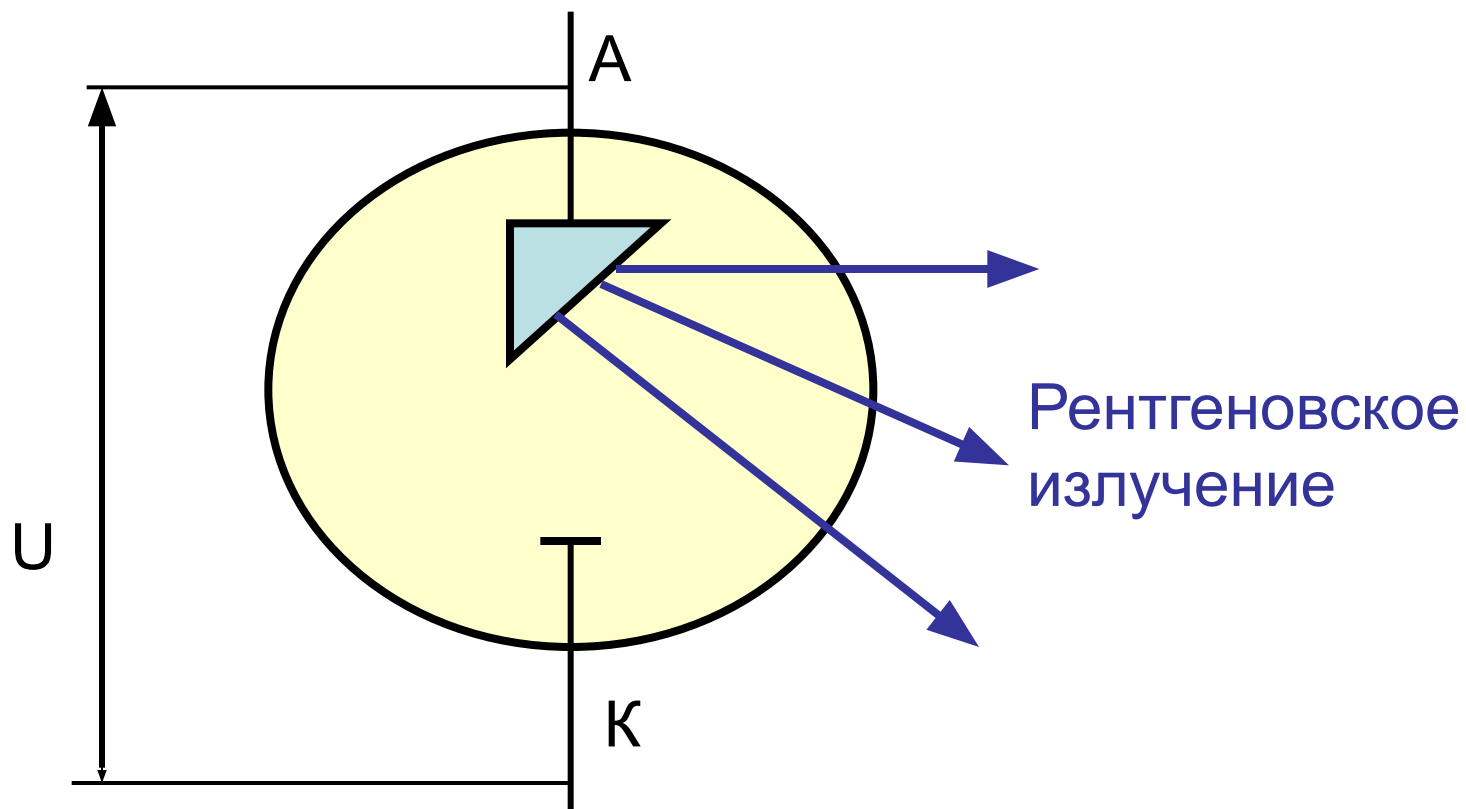
Любой элемент периодической таблицы даёт как оптические спектры, так и рентгеновские спектры.

Рентгеновские спектры бывают двух видов: тормозной (сплошной) и характеристический (линейчатый).

Оба вида спектров получают при работе рентгеновских трубок.

Рентгеновская трубка – вакуумный баллон с впаянными электродами (катодом К и анодом А), между которыми создаётся высокое напряжение (600 – 800 В).

Рентгеновская трубка



Рентгеновское излучение создаёт вещество анода (антикатода). Обычно это медь, хром, вольфрам, железо, кобальт.

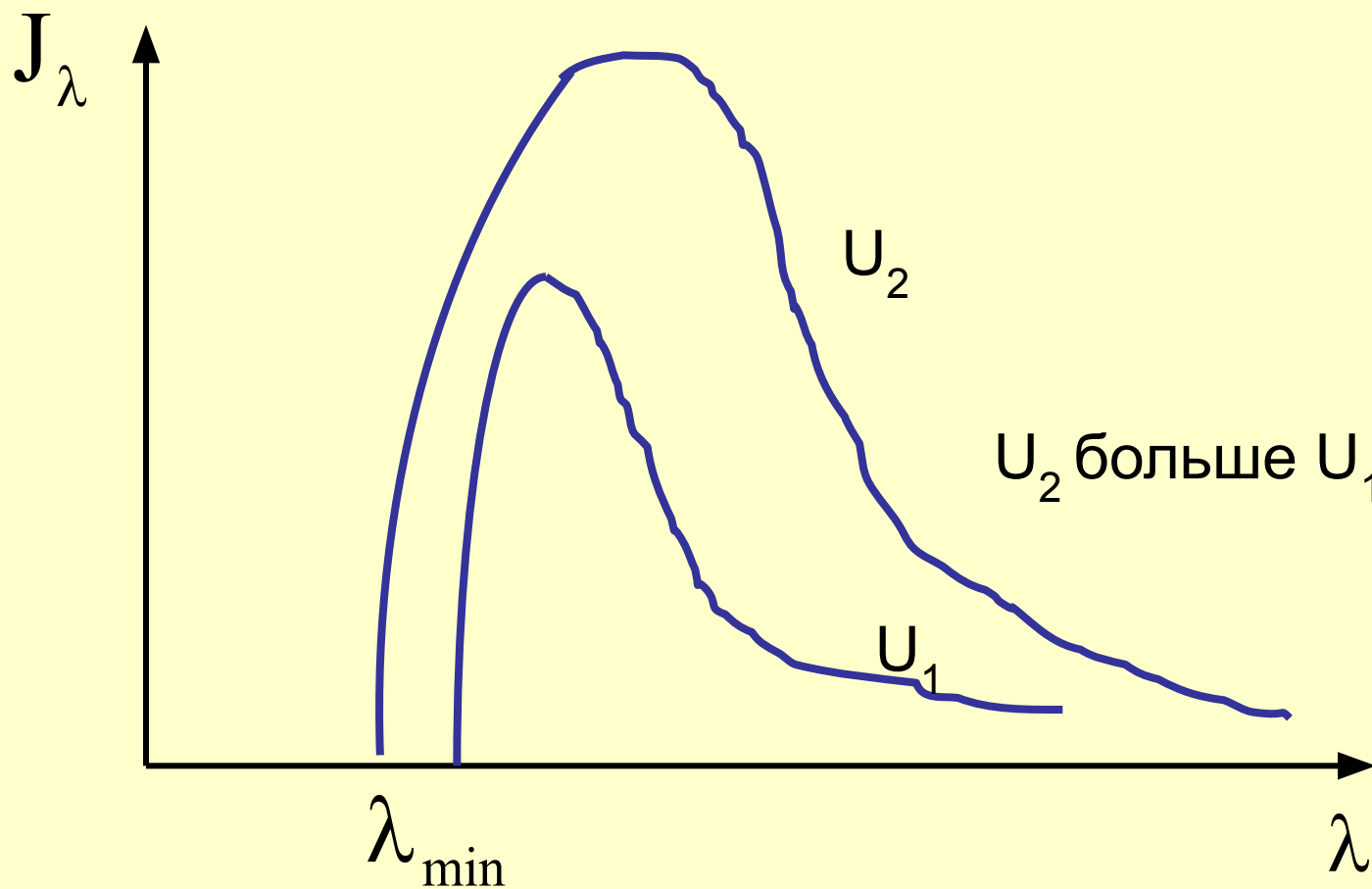
Сплошной рентгеновский спектр ($10^3 - 10^{-3}$ нм) :

- **получается** при резком торможении летящих из катода электронов, попавших в вещество антикатода;
- **не зависит** от вещества антикатода;
- **зависит** от напряжения на рентгеновской трубке;
- **имеет** резко выраженную коротковолновую границу.

Энергию рентгеновского кванта с длиной волны приравняем работе сил электрического поля, разогнавшего электрон:

$$\frac{hc}{\lambda} = eU$$

Сплошной рентгеновский спектр

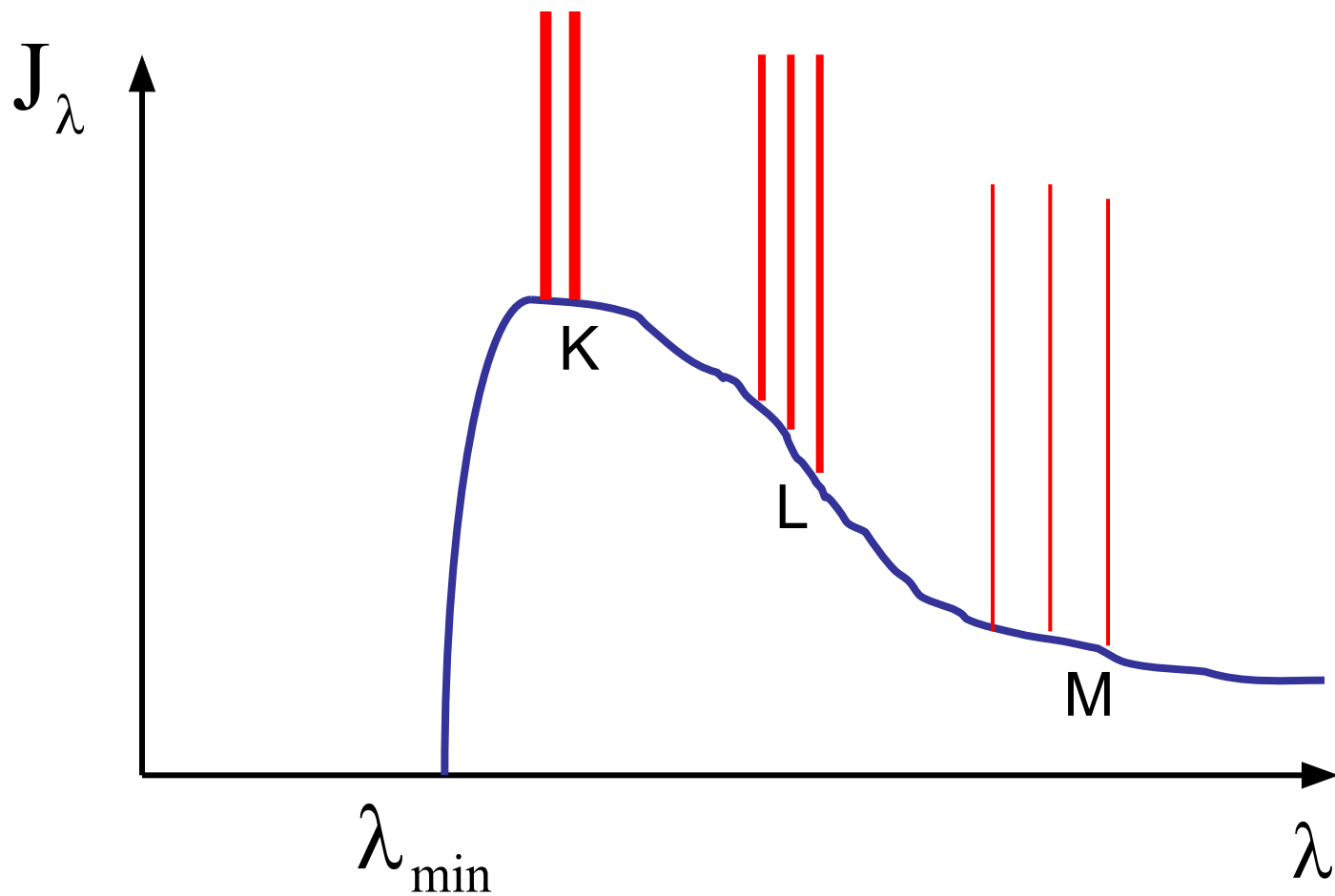


При определённом достаточно большом напряжении U на рентгеновской трубке **на фоне сплошного спектра возникают очень большие по интенсивности узкие спектральные линии** — это **характеристический спектр**.

Характеристический (линейчатый) **спектр**:

- получается при переходах электронов вещества антиматериала между внутренними энергетическими уровнями атома;
- его свойства напрямую определяются веществом антиматериала.

Характеристический рентгеновский спектр



При большом напряжении на рентгеновской трубке внешний электрон приобретёт кинетическую энергию равную энергии ионизации атома.

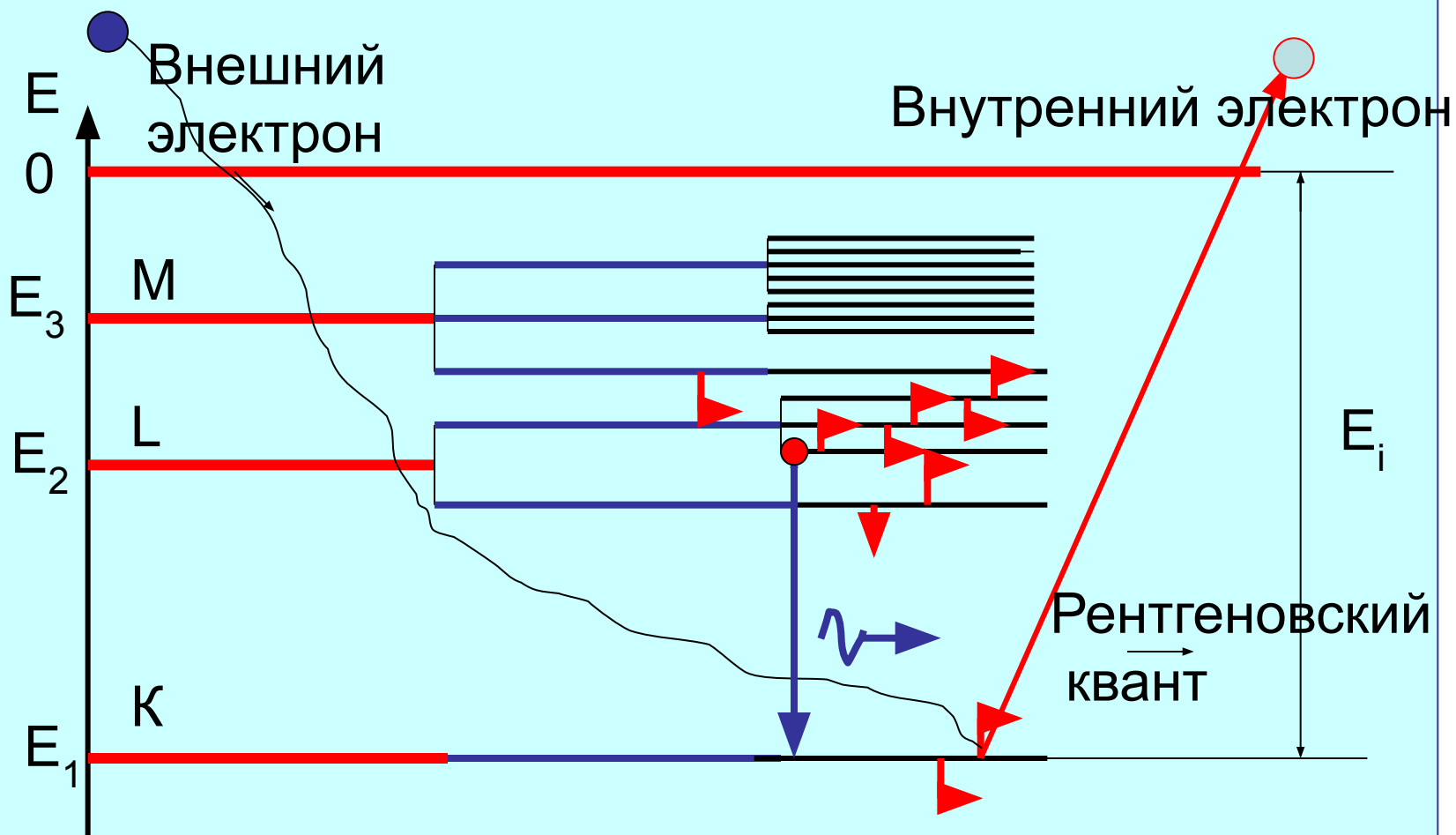
$$eU_K = \frac{mv^2}{2} = E_i$$

Он передаёт её внутреннему электрону вещества антикатада.

Внутренний электрон атома, приняв энергию от внешнего электрона, уйдёт за пределы атома.

Внутри атома начнутся переходы вышележащих электронов на освободившиеся энергетические уровни. При этом атом испускает фотоны рентгеновского диапазона частот.

Возникновение линейчатого рентгеновского спектра



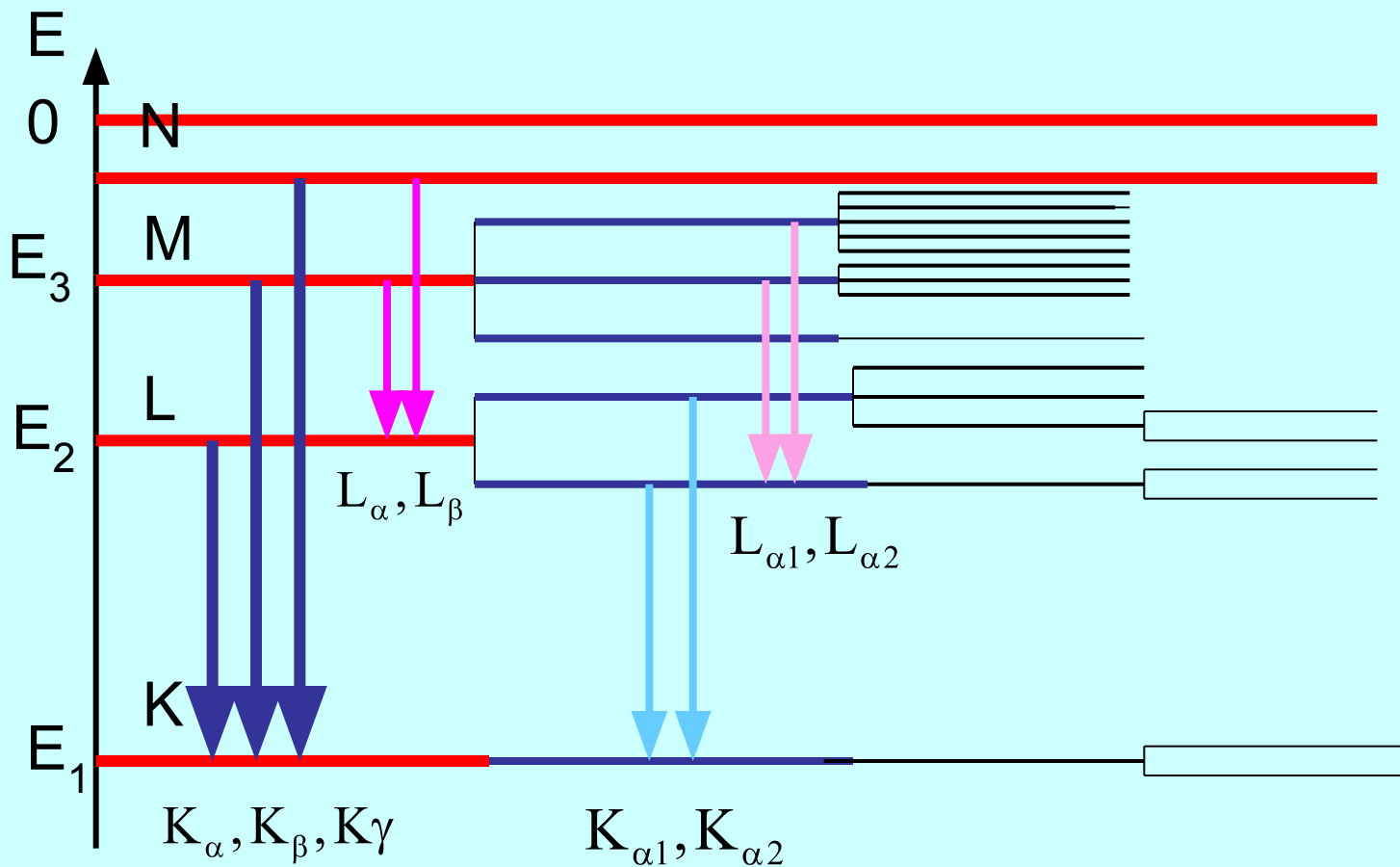
Рентгеновские характеристические спектры всех элементов совершенно идентичны между собой, потому что все атомы имеют одинаковую схему нижних энергетических уровней.

Для каждого элемента они состоят из нескольких серий : K, L, M, N, ...

Каждая серия состоит из нескольких линий:

$$K_{\alpha}, K_{\beta}, K_{\gamma}, L_{\alpha}, L_{\beta}, \dots$$

Рентгеновский характеристический спектр



Все серии имеют более **тонкую структуру**:

$$K_{\alpha} : K_{\alpha 1}, K_{\alpha 2}$$

$$L_{\alpha} : L_{\alpha 1}, L_{\alpha 2}$$

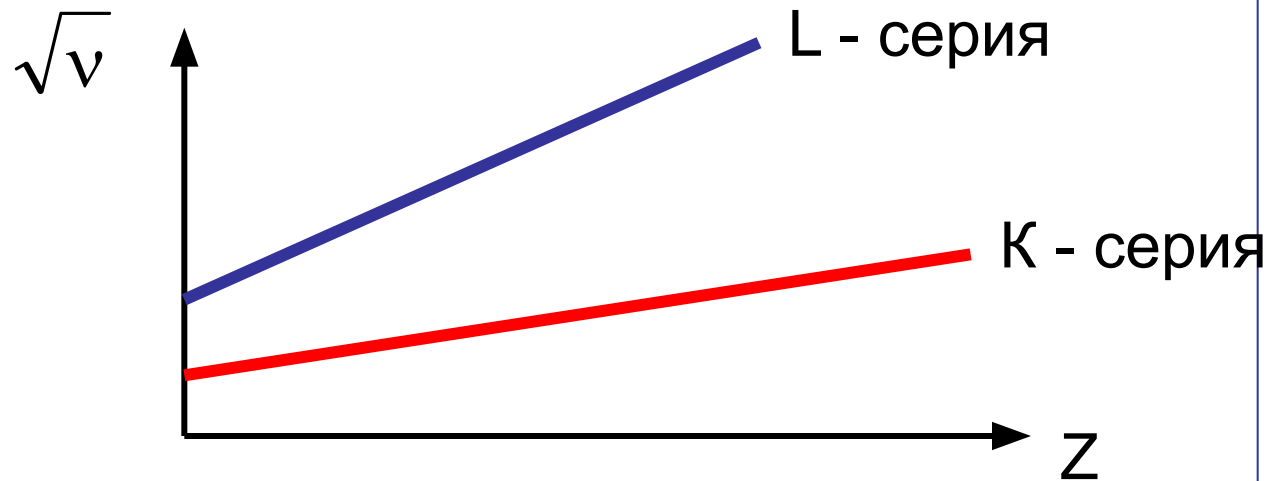
Тонкая структура рентгеновских спектров обусловлена переходами с изменением орбитального и магнитного квантовых чисел, для которых должны учитываться правила отбора.

Закон Г. Мозли: корень из частоты рентгеновской линии пропорционален порядковому номеру элемента.

Закон Мозли:

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

R – постоянная Ридберга, σ – постоянная экранирования, n и m – номера энергетических уровней.



Расшифровкой рентгеновских спектров занимается
рентгеновский спектральный анализ.

Рентгеновские спектры элементов:

- значительно проще их оптических спектров;

Спектр сложного по составу материала является
простой суммой спектров отдельных элементов.

8.4. Лазерное излучение

Лазеры или **оптические квантовые генераторы** – это современные когерентные источники излучения, обладающие целым рядом уникальных свойств.

Создание лазеров явилось одним из самых замечательных достижений физики второй половины XX века, которое привело к революционным изменениям во многих областях науки и техники.

Лазеры излучают свет в различных оптических диапазонах.

Лазеры могут работать в импульсном и непрерывном режимах.

Создано большое количество лазеров с различными характеристиками:

- газовых;
- твердотельных;
- полупроводниковых.

Мощность излучения лазеров может изменяться в пределах от долей милливатта до 10^{12} – 10^{13} Вт (в импульсном режиме).

Хотя первый лазер был построен сравнительно недавно (1960 г.), современную жизнь уже невозможно представить без лазеров.

Лазеры находят широкое применение:

- в военной технике;
- в технологии обработки материалов;
- в медицине;
- в оптических системах навигации, связи и локации;
- в прецизионных интерференционных экспериментах;
- в химии и т. д.

Уникальные свойства лазерного излучения возникают в результате согласованного, кооперативного испускания световых квантов многими атомами рабочего вещества.

Свойства лазерного излучения:

- высокая степень монохроматичности и когерентности, недостижимая в излучении других источников;
- поляризованность;
- большая мощность;
- узкая направленность излучения.

Стабильным состоянием, в котором атом может находиться бесконечно долго в отсутствие внешних возмущений, является только **основное состояние с наименьшей энергией**.

Возбужденный атом может пребывать в **нестабильных состояниях** лишь очень короткое время, порядка 10^{-8} с, после этого он самопроизвольно переходит в одно из низших состояний, испуская квант света.

Спонтанным называется излучение, испускаемое при самопроизвольном переходе атома из одного состояния в другое.

Метастабильными называются энергетические состояния, в которых атом может пребывать значительно большее время, порядка 10^{-3} с.

Физической основой работы лазеров является **индуцированное излучение**: излучение атома при переходе электрона с верхнего энергетического уровня на нижний в присутствии внешнего электромагнитного поля, частота которого равна собственной частоте перехода.

Такой переход предсказал в 1916 году А. Эйнштейн

Вынужденное (или индуцированное) излучение обладает удивительным свойством.

В результате взаимодействия возбужденного атома с фотоном атом испускает еще один фотон той же самой частоты, распространяющийся в том же направлении.

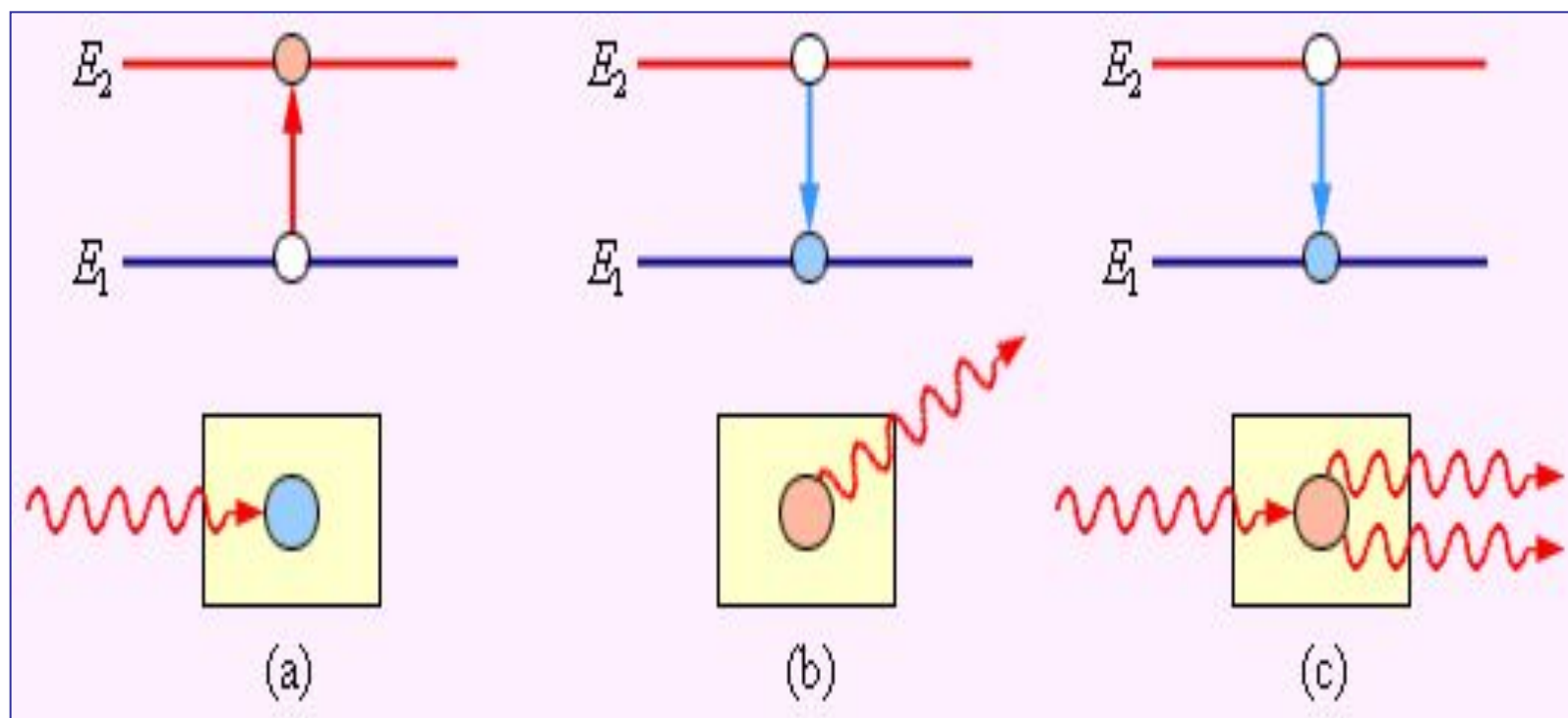
С точки зрения квантовой теории, в результате взаимодействия возбужденного атома с фотоном, частота которого равна частоте перехода, появляются два совершенно одинаковых **фотона-близнеца**.

На языке волновой теории это означает, что **атом излучает электромагнитную волну**, у которой частота, фаза, поляризация и направление распространения точно такие же, как и у первоначальной волны.

В результате вынужденного испускания фотонов амплитуда волны, распространяющейся в среде, возрастает.

Условное изображение процессов:

(а) поглощения, (b) спонтанного испускания и
(с) индуцированного испускания кванта.



Рассмотрим слой прозрачного вещества, атомы которого могут находиться в состояниях с энергиями E_1 и $E_2 > E_1$.

Пусть в этом слое распространяется излучение резонансной частоты перехода:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h}$$

Согласно распределению Больцмана, при термодинамическом равновесии **большее количество атомов** вещества будет находиться в **нижнем энергетическом состоянии**.

Обозначим населенности нижнего и верхнего уровней соответственно через n_1 и $n_2 < n_1$.

При распространении резонансного излучения в такой среде будут происходить все три процесса.

Эйнштейн показал, что процесс (а) поглощения фотона невозбужденным атомом и процесс (с) индуцированного испускания кванта возбужденным атомом имеют одинаковые вероятности.

Так как $n_2 < n_1$, то поглощение фотонов будет происходить чаще, чем индуцированное испускание.

В результате прошедшее через слой вещества излучение будет **ослабляться**.

Чтобы проходящая через слой вещества волна усиливалась, **нужно** искусственно создать условия, при которых $n_2 > n_1$, т. е. **создать инверсную населенность уровней**.

Такая среда является **термодинамически неравновесной** (с отрицательной температурой **T**).

Существуют различные способы получения среды с инверсной населенностью уровней.

В рубиновом лазере используется **оптическая накачка**.

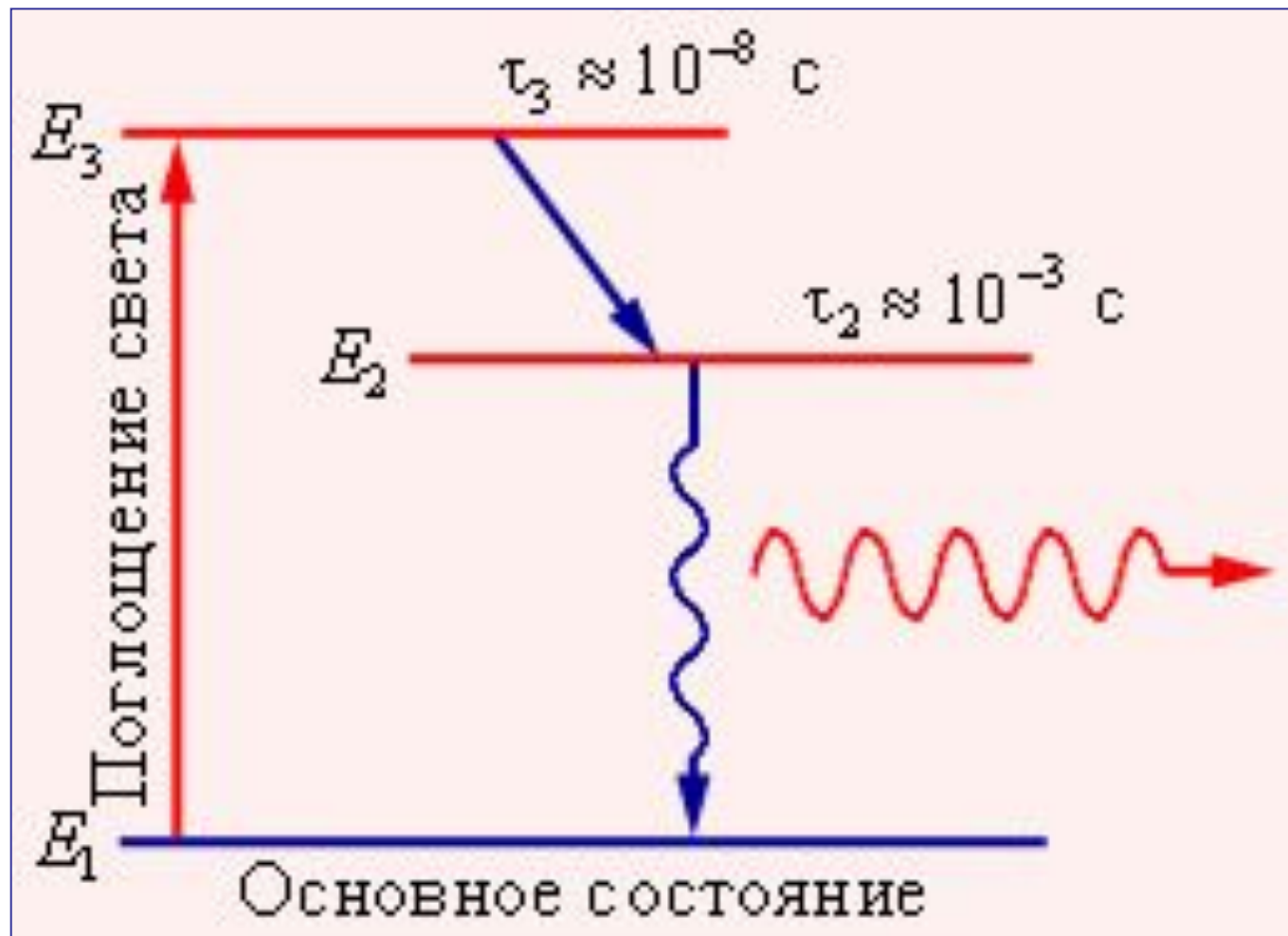
Атомы возбуждаются за счет поглощения света.

Но для этого **недостаточно только двух уровней**.

Каким бы мощным не был свет лампы—накачки, число возбужденных атомов не будет больше числа невозбужденных.

В рубиновом лазере **накачка производится через третий выше расположенный уровень**.

Трехуровневая схема оптической накачки



В кристалле рубина уровни E_1 , E_2 и E_3 принадлежат примесным атомам хрома.

После вспышки мощной лампы, расположенной рядом с рубиновым стержнем, многие атомы хрома, который входит в виде примеси в кристалл рубина (около 0,05 %), переходят в состояние с энергией E_3 .

Через промежуток 10^{-8} с они переходят в состояние с энергией E_2 .

Уровень E_2 – **метастабильный**.

Лазерный переход осуществляется между уровнями E_2 и E_1 .

Перенаселенность возбужденного уровня E_2 по сравнению с невозбужденным уровнем E_1 возникает из-за относительно большого времени жизни электронов на уровне E_2 .

Активной средой лазера является среда, в которой создана инверсная населенность уровней.

Активная среда служит резонансным усилителем светового сигнала.

Накачка - процесс для поддержания инверсной населенности уровней.

Идея использования неравновесных сред для получения оптического усиления впервые была высказана В. А. Фабрикантом в 1940 году.

В 1954 году русские физики Н. Г. Басов В 1954 году русские физики Н. Г. Басов и А. М. Прохоров и американский ученый **Ч. Таунс** использовали явление индуцированного испускания для создания микроволнового генератора радиоволн с длиной волны **$\lambda = 1,27$** см.

За разработку нового принципа усиления и генерации радиоволн в 1964 году все трое были удостоены Нобелевской премии.

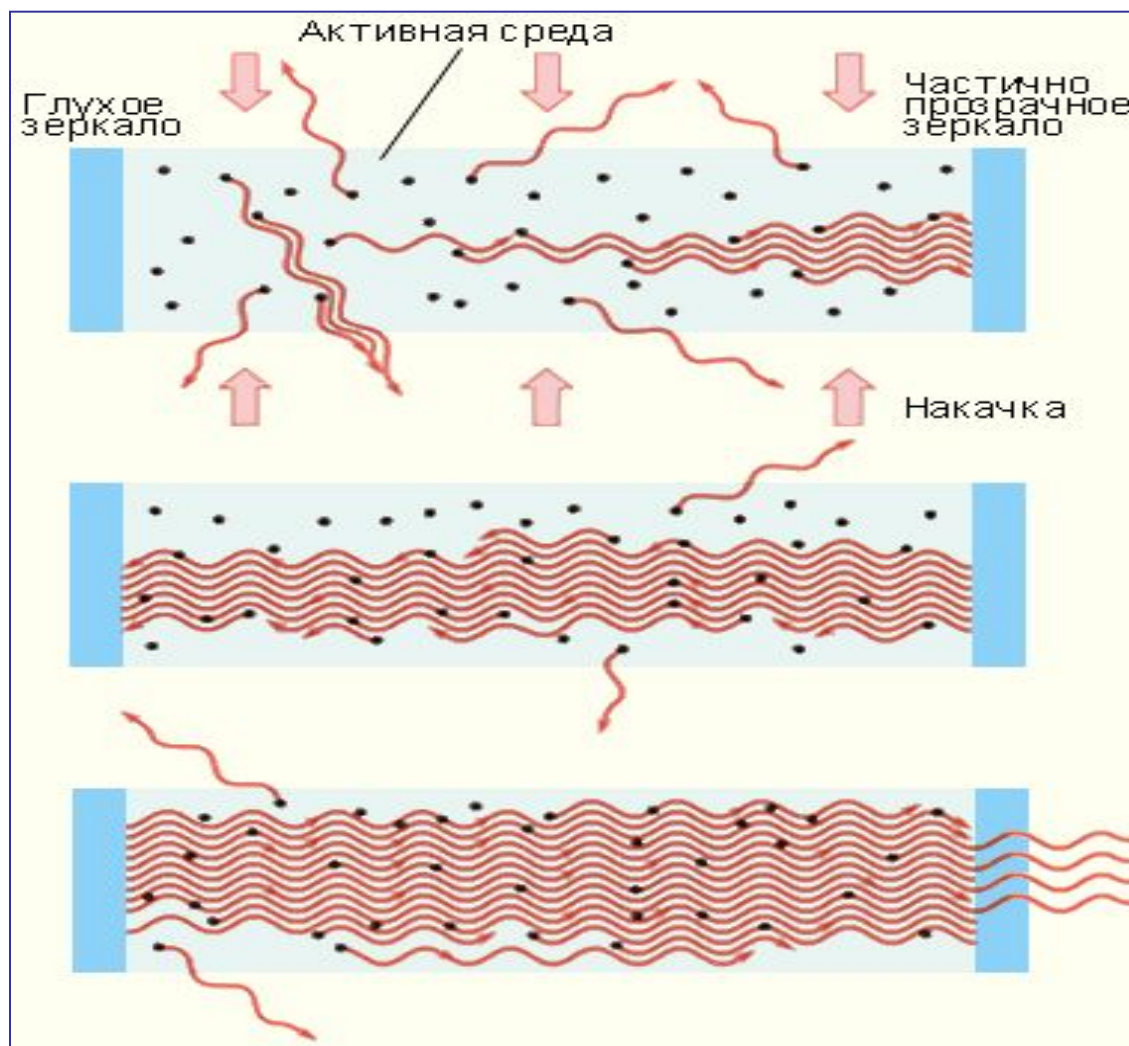
Резонатор (два зеркала) осуществляет обратную **связь** для того, чтобы возникала генерация света.

Для этого активную среду нужно расположить между двумя **высококачественными зеркалами**, отражающими свет строго назад.

Свет многократно проходит через активную среду, вызывая лавинообразный процесс индуцированной эмиссии когерентных фотонов.

Через некоторое время в такой системе возникает стационарный режим генерации.

Развитие лавинообразного процесса генерации в лазере



Лазерное излучение выводится наружу через одно (или оба) из зеркал, обладающее частичной прозрачностью.

Лазер на рубине работает в импульсном режиме на длине волны **694 мм** (темно-вишневый свет), мощность излучения может достигать в импульсе **10^6 – 10^9 Вт**.

Исторически это был первый действующий лазер (американский физик [Т. Майман](#), 1960 г.).

Идея использования неравновесных сред для получения оптического усиления впервые была высказана В. А. Фабрикантом в 1940 году.

В 1954 году русские физики Н. Г. Басов В 1954 году русские физики Н. Г. Басов и А. М. Прохоров и американский ученый **Ч. Таунс** использовали явление индуцированного испускания для создания микроволнового генератора радиоволн с длиной волны **$\lambda = 1,27$** см.

За разработку нового принципа усиления и генерации радиоволн в 1964 году все трое были удостоены Нобелевской премии.