

6.6. Фізика атома

6.6.1.

- Будова атома. Моделі атома. Дослід Резерфорда.

6.6.2

- Теорія Бора для атома гідрогену. Спектр атома гідрогену.

6.6.3

- Атом де Бройля та рівняння Шредінгера для атома гідрогену. Головні квантові числа. Спін електрона.

6.6.4

- Багатоелектронні атоми. Принцип Паулі. Періодична система хімічних елементів.

6.6.5

- Оптичні та глибинні електрони. Рентгенівські спектри атомів. Енергетичні спектри та рівні молекул. Спектроскопія.

6.6.6

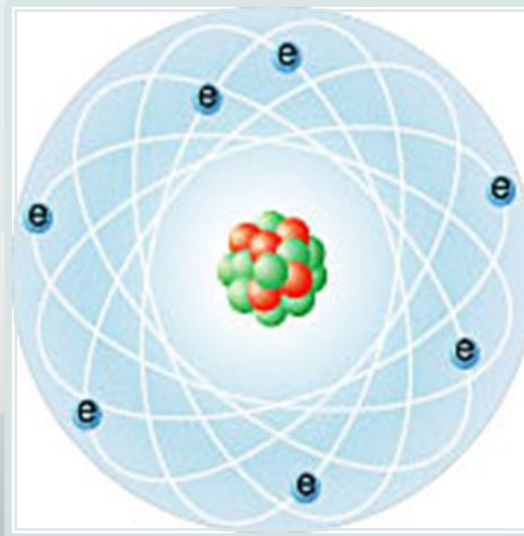
- Взаємодія світла з квантовими системами. Принцип дії лазерів.

Моделі атома

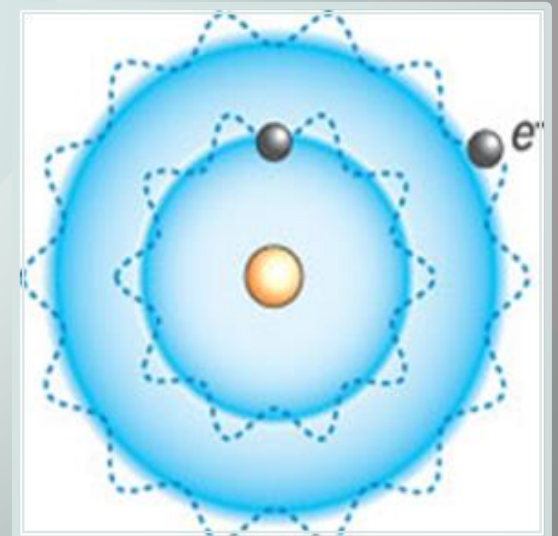
Томсона
1903
“булка з
родзинками”



Резерфорда
1911
планетарна



Л. де Бройля
1923
хвильова

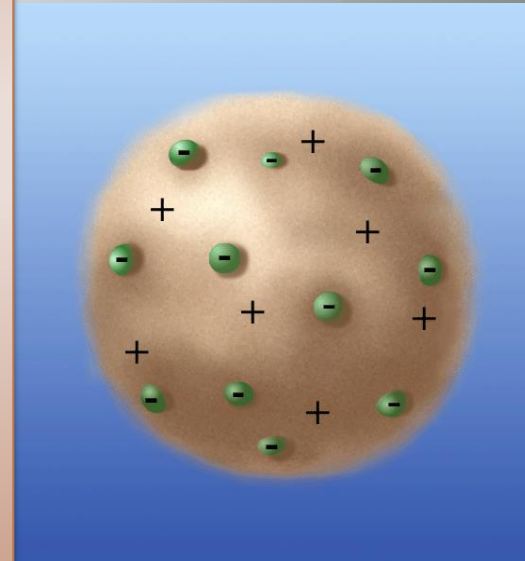


Дж. Дж. Томсон 1903 “булка з родзинками”

Для пояснення лінійчатих спектрів випромінювання атомів: у структурі атома електрони перебувають у таких умовах, за яких кожен може здійснювати гармонічні коливання і бути джерелом монохроматичного випромінювання.

Гіпотеза Томсона:

1. Атом *електрично нейтральна* система сферичної форми радіусом порядку 10^{-10} м
2. Позитивний заряд рівномірно розподілений по всьому об'єму сфери, а електрони утримується біля положень рівноваги *квазіпружньою силою*:
$$f = -kx$$
3. Лінійчатий спектр пояснювався *коливанням* електронів біля положень рівноваги



Недоліки:

1. Не спиралась на будь-які дослідні дані.
2. Не змогла пояснити спектральні закономірності повністю, а саме – кількість ліній мала бути пропорційна кількості електронів у атомі, а насправді навіть у спектрі атома гідрогену цих ліній було понад 30.

Томсон (Thomson) Джозеф Джон

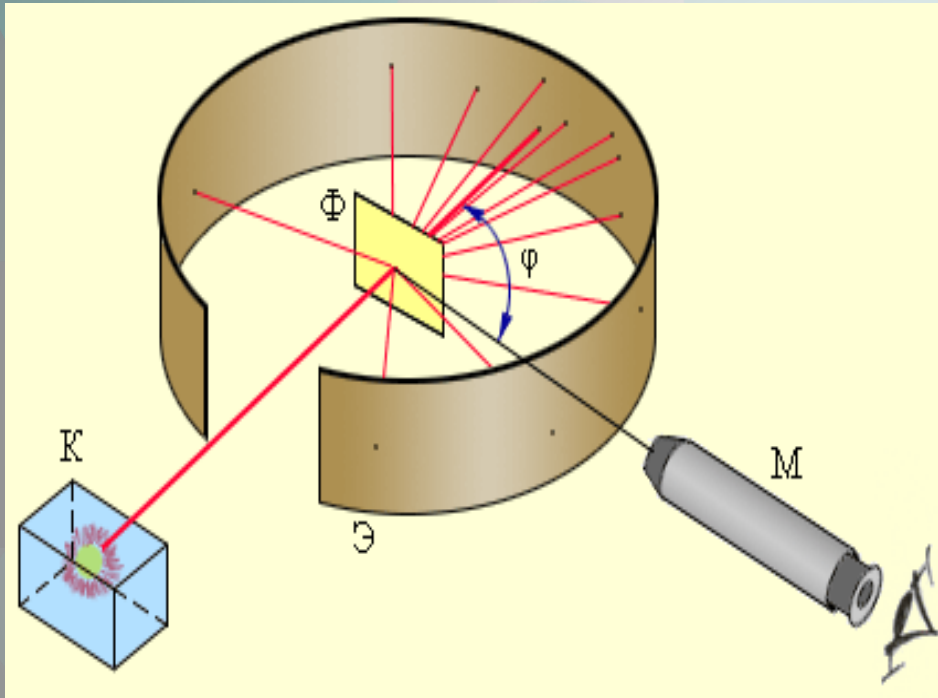
Англійський фізик,



30.08.1871–
19.10.1937

- ❖ Ранні роботи Томсона присвячені обчисленню електромагнітного поля рухомої зарядженої кулі, теорії вихорів.
- ❖ Вперше виміряв відношення заряду електрона до маси, 1897.
- ❖ Нобелівська премія, 1906.
- ❖ Томсон дав пояснення безперервного спектра рентгенівського випромінювання, встановив природу позитивних іонів, запропонував першу модель будови атома.
- ❖ Під його керівництвом працювали Е. Резерфорд, Ч. Вільсон, Ф. У. Астон, У. Річардсон та ін.
- ❖ Будучи переконаним прихильником класичної фізики, Томсон дотримувався гіпотези ефіру.

Дослід Резерфорда 1913



У середньому одна з 8000 α -частинок зазнавала відхилення на кут, більший за 150° .

Висновки:

1. Проходження з незначним відхиленням – про значні відстані між позитивними зарядами атомів
2. Дуже великі відхилення – про те, що розміри позитивного заряду атомів мають бути значно меншими від розмірів атомів

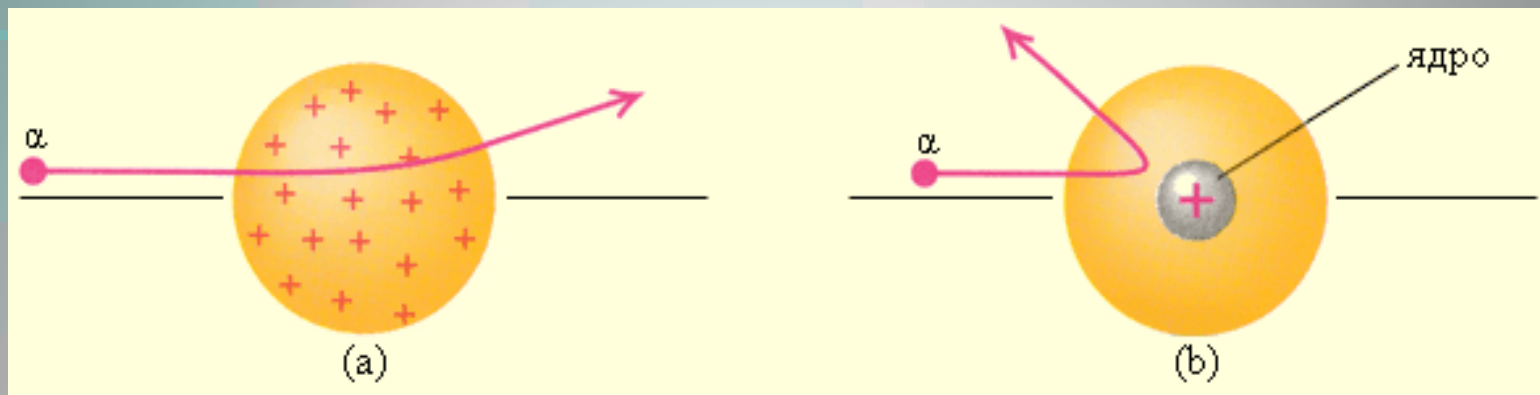
К - свинцевий контейнер з радіоактивною речовиною
Е - екран, покритий сірчистим цинком
Φ - золота фольга
М - мікроскоп



Розсіювання α -частинки

(a) - в атомі Томсона

(b) - в атомі Резерфорда



У розрахунках траєкторій *розсіювання α -частинок* Е. Резерфорд припускав, що розсіювання зумовлюється *кулонівською силою* відштовхування позитивним зарядом атома.

Дж. Чедвік (учень Е. Резерфорда) та Е. Резерфорд показали, що *позитивний заряд атома*, виражений в елементарних зарядах (e), *дорівнює порядку номеру елемента* в таблиці хімічних елементів:

$$q = Ze.$$

Резерфорд (Rutherford) Ернст

Англійський фізик



30.08.1871–
19.10.1937

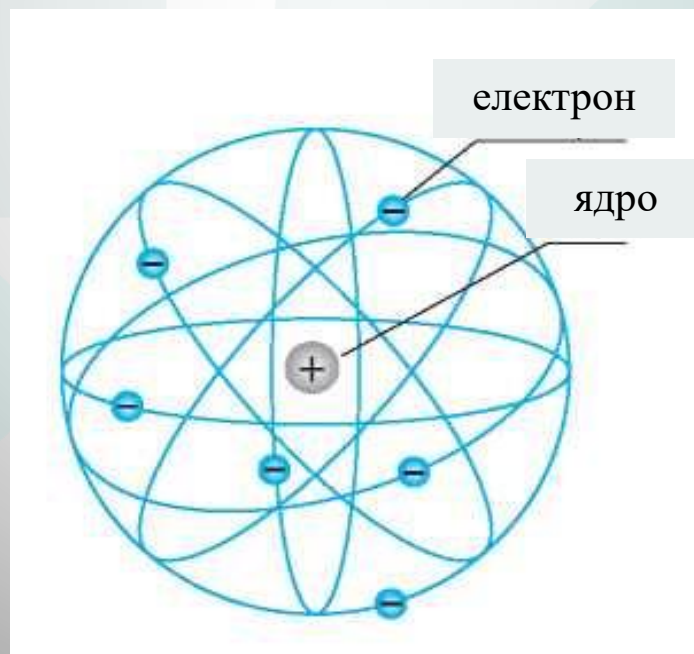
- ❖ Один із засновників вчення про радіоактивність, ядерної фізики та уявлень про будову атомів.
- ❖ Спільно з Ф. Содді дав чітке формулювання (1903) закону радіоактивних перетворень, висловивши його в математичній формі, і ввів поняття «період напіврозпаду».
- ❖ Вивчив розсіювання α -часток атомами різних елементів і запропонував (1911) планетарну (ядерну) модель атома.
- ❖ Бомбардував (1919) α -частинками атоми азоту, здійснивши перше штучне перетворення елементів (азоту в кисень).
- ❖ Запропонував називати ядро атома гідрогену протоном. Нобелівська премія з фізики (1908).

Теорія Резерфорда

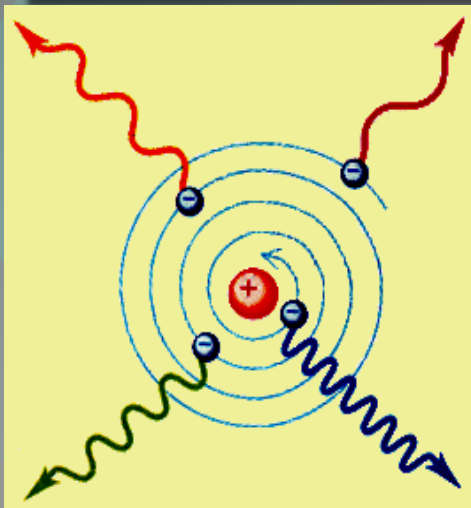
на основі законів *класичної електродинаміки*

Теорія Резерфорда:

1. В центрі атома – позитивне ядро, діаметром порядку 10^{-15} м
2. *Маса* ядра становить 99,95 % всієї маси атома,
а *густина* порядку 10^{15} г/см³
3. Сумарний заряд ядра дорівнює сумарному заряду всіх електронів
4. Електрони рухаються навколо ядра під дією сили Кулона



6.6.2. Теорія Бора для атома гідрогену. Спектр атома гідрогену

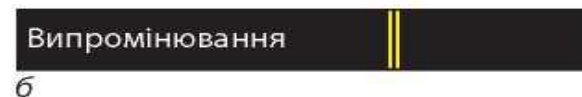
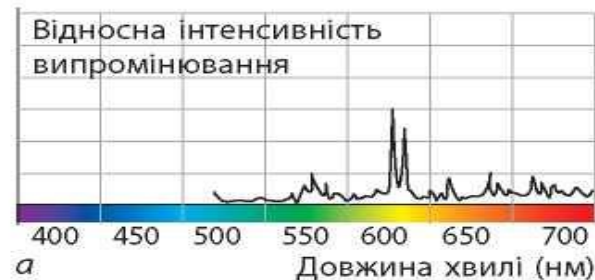
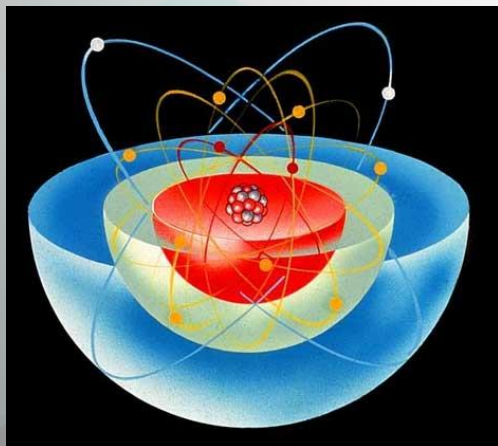


Утруднення теорії Резерфорда:

1. Електрон, рухаючись по коловій орбіті з доцентровим прискоренням має **випромінювати** ЕМ хвилі такої ж частоти, з якою вони обертаються
2. При випромінюванні ЕМ хвиль електрони мають **втрачати** енергію та згодом «впасти» на ядро
3. Спектр випромінювання має бути **суцільним**

Досліди:

1. Атом стійка система
2. Випромінювання ЕМ хвиль відбувається лише за певних умов
3. Спектр випромінювання атомів є лінійчатим



Лінійчастий спектр Натрію:
а — залежність відносної інтенсивності випромінювання полум'я, що містить атоми Натрію, від довжини хвилі; б — спектр випромінювання (подвійна жовта лінія на темному фоні); в — спектр поглинання (подвійна темна лінія на фоні неперервного спектра)

Бор (Bohr) Нільс Хендрік Давид

Датський фізик



07.10.1885 –
18.11.1962

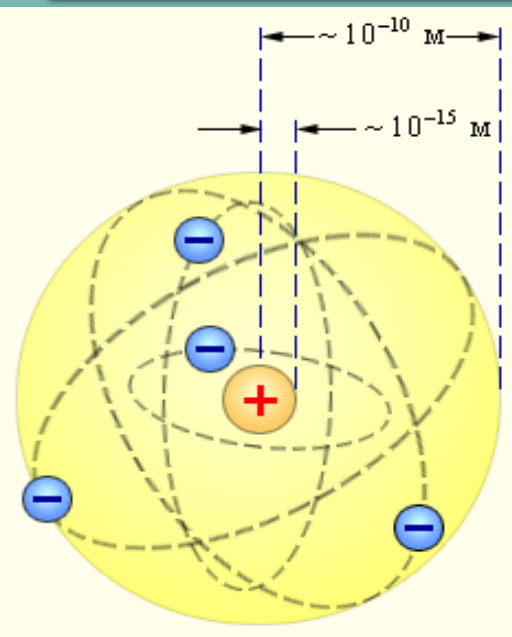
- Заклав основи нових напрямків в розвитку хімії.
- Створив (1913) квантову теорію атома водню. Розрахував спектр атома водню, показавши повний збіг розрахункових даних з емпіричними.
- Побудував (1913–21) моделі атомів інших елементів періодичної системи, розробивши реальну схему формування електронних конфігурацій атомів у міру зростання заряду ядра Z .
- Пов'язав періодичність властивостей елементів з послідовністю побудови електронних конфігурацій атомів.
- Обгрунтував розділ груп періодичної системи на головні та побічні.

Планетарна модель атома (Бор 1913)



Постулати Бора (I та II)

Н. Бор: в мікроструктурі атома закони *класичної електродинаміки* не справджуються, отже він запропонував керуватись ідеєю *квантової теорії* випромінювання М. Планка



I постулат:

Атому властиві стійкі *стаціонарні стани* з відповідним значенням енергії E_1, E_2, \dots, E_n , перебуваючи в яких він не поглинає і не випромінює електромагнітних хвиль.

Або:

I постулат:

Електрони можуть рухатись в атомі тільки певними орбітами, перебуваючи на яких вони не поглинають і не випромінюють енергію.

II постулат:

У стаціонарному стані атома електрон повинен мати квантовані значення *моменту імпульсу*:

$$L_n = m v_n r_n = n \hbar$$

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

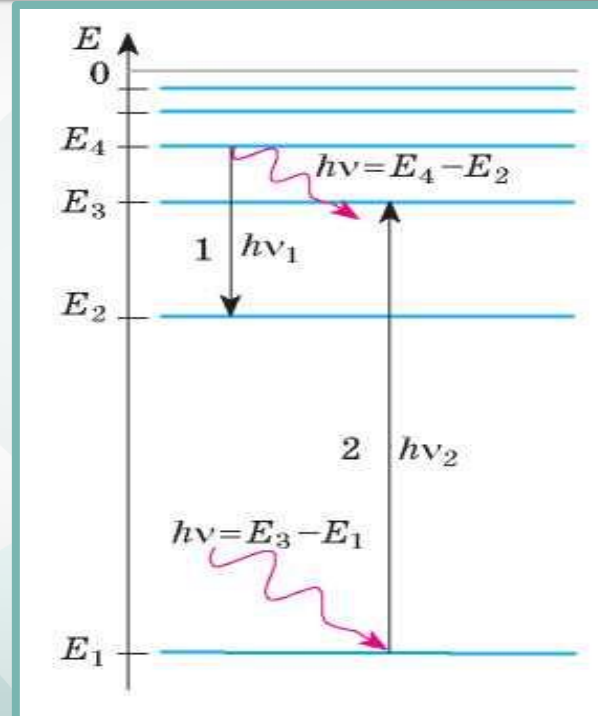
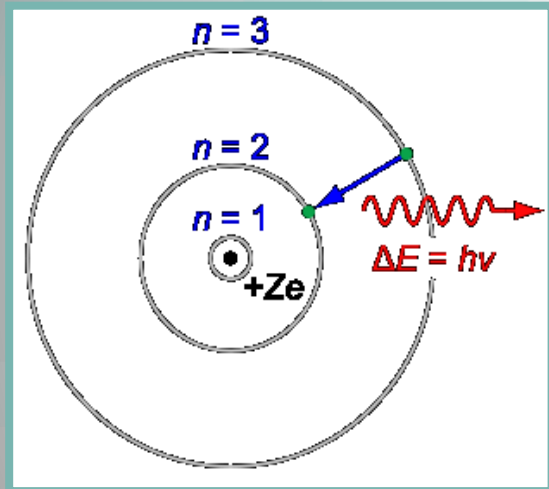
$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Постулати Бора (III)

III постулат:

При переході атома з одного стаціонарного стану в інший атоми випромінюють або поглинають кванти енергії електромагнітних хвиль певних частот:

$$h\nu = E_n - E_k$$



Або:

III постулат:

Електрон при переході з однієї стаціонарної орбіти на іншу випромінює або поглинає один фотон.



Дослід Дж. Франка та Г. Р. Герца 1914

Вивчалась *взаємодія електронів* різної енергії з атомами *парів ртуті*.

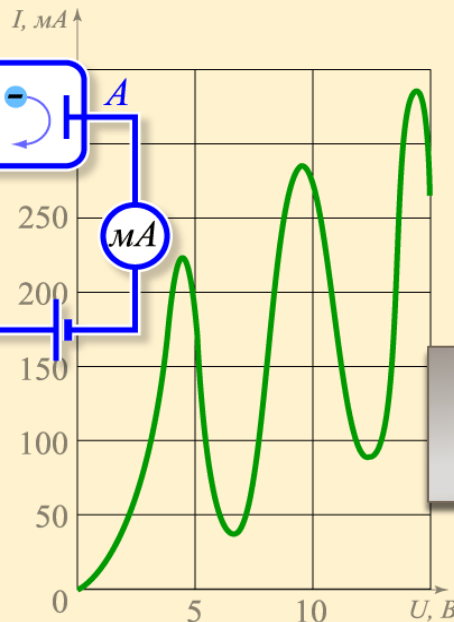
Енергію визначали через гальмівну напругу:

$$\frac{m v^2}{2} = e U; \quad U \approx 0.5 \text{ В}$$

Взаємодія електронів з атомами ртуті мала характер пружних та непружних зіткнень.

За енергії 4.9 eV (6.7 eV, 10.4 eV) зіткнення були *непружними!!*
Тобто атоми ртуті поглинали цю енергію і переходили у збуджений (інший стаціонарний) стан.

Результат:



1. *Раптовий спад сили струму* за 4.86 В; $4.86 \cdot 2 = 9.8 \text{ В}$ – електрони на шляху між катодом та сіткою втрачали енергію і не могли внаслідок гальмівної напруги потрапити на катод.

2. *Експериментально* виявлено, що за напруги 4.9 В атоми ртуті *випромінювали ЕМ* з довжиною хвилі $\lambda_1 = 253.7 \text{ нм}$ (УФ), а за напруги 6.7 В – $\lambda_2 = 185 \text{ нм}$.

3. *Квант енергії ЕМ* з довжиною хвилі $\lambda_1 = 253.7 \text{ нм}$ дорівнював енергії, яку електрон передав атому ртуті: $h\nu_1 = 4.9 \text{ eV}$, та, відповідно, $h\nu_2 = 6.7 \text{ eV}!!!$

**Атом гідрогену за теорією Бора.
Пояснення спектральних закономірностей.
Формула Бальмера (1885 р.)**

Дослід:

1. Світіння атомарного гідрогену в розрядній трубці за низького тиску
2. Спектр є лінійчатим. Лінії спектра згущуються до деякої граничної довжини хвилі (365 нм)



Пояснення:

1. Емпірична формула Бальмера:

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

$$R = 3.28787 \times 10^{15} \text{ c}^{-1}$$

$$k = 3, 4, 5, \dots$$

Атом гідрогену за теорією Бора

Застосування постулатів – обчислення радіусів колових електронних орбіт та пояснити деякі закономірності в спектрі випромінювання

1. За правилом квантування:

$$m v_n r_n = n \frac{h}{2\pi}$$

2. Кулонівська сила є доцентровою:

$$\frac{m v_n^2}{r_n} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2}$$



Радіус:

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} n^2$$

Радіус 1-ої орбіти:

$$r_1 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} n^2 = 0.5 \times 10^{-10} \text{ м}$$



Радіуси орбіт:

$$r_n = \frac{r_1 n^2}{Z}$$

Швидкість:

$$v_n = \frac{e^2}{2\epsilon_0 h} \cdot \frac{1}{n}$$

Атом гідрогену за теорією Бора

Застосування постулатів – обчислення енергії електронів в атомі та процес випромінювання ЕМ

1. Обчислення частоти ЕМ при переході з k -ї на n -у орбіту:

$$\nu = \frac{E_n - E_k}{h}$$

2. Повна енергія електрона на орбіті (кінетична та потенціальна):

$$E_n = \frac{m\nu_n^2}{2} + \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \right)$$

3. Підставимо вирази для швидкості та радіуса:

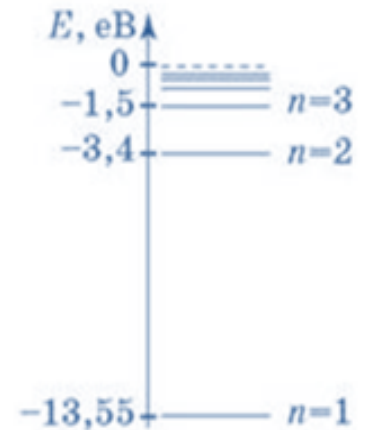
$$E_n = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} - \frac{me^4}{4\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \Rightarrow$$

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Для $n = 1$

$$E_1 = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{1^2}$$

$$E_1 = -13.55 \text{ eV}$$



4. Частота ЕМ:

$$\nu = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right)$$

5. Стала Бальмера – Рідберга:

$$R = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3} = \frac{9.1 \times 10^{-31} \times (1.6 \times 10^{-19})^4}{8 \times (8.85 \times 10^{-12})^2 \times (6.63 \times 10^{-34})^3}$$

$$R = ???$$

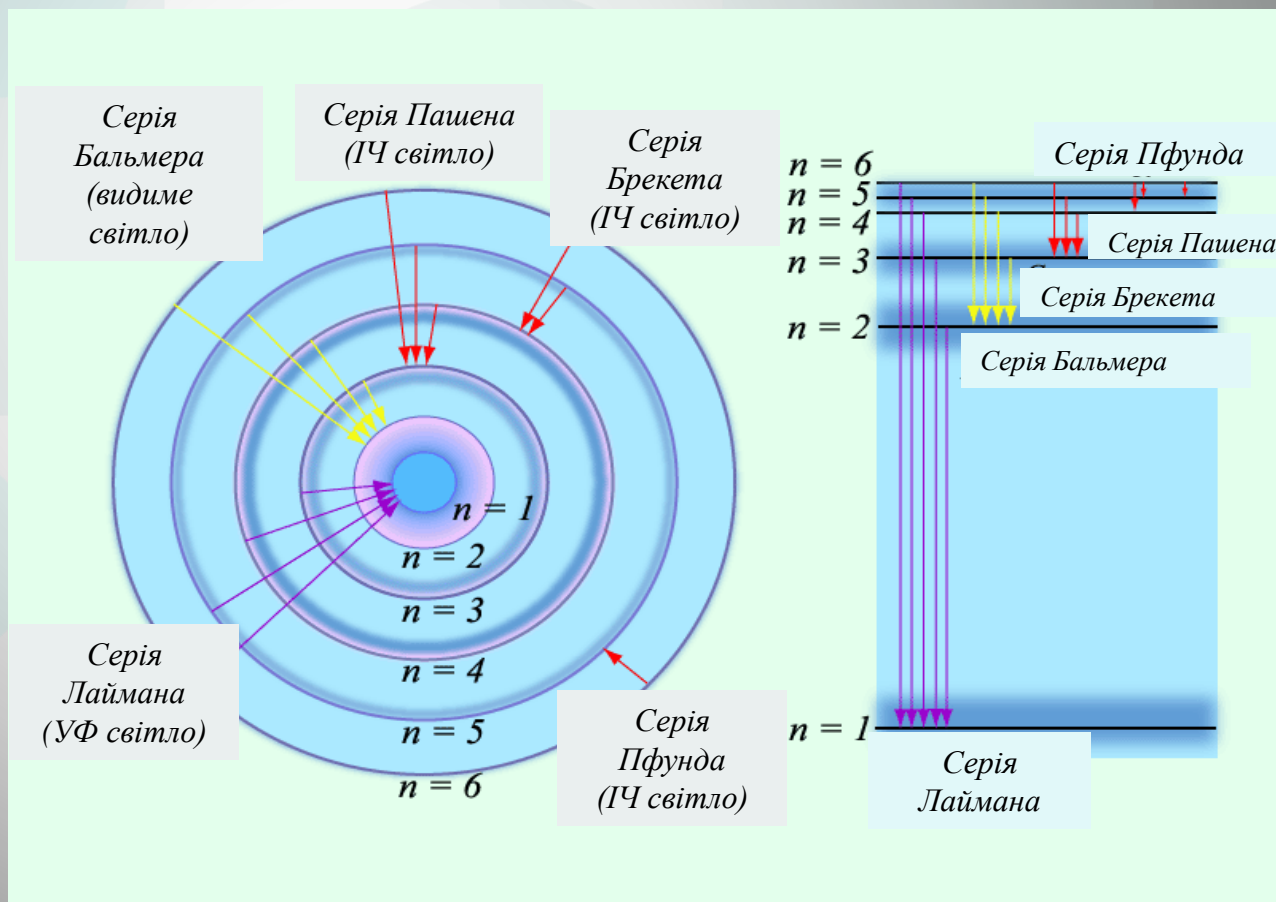
Випромінювання атомів, подібних до атома гідрогену за теорією Бора. Пояснення спектральних закономірностей.

1. Навколо ядра обертається лише один валентний електрон (іони He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} , ...)

2. Заряд ядра дорівнює Ze (Z – порядковий номер хімічного елемента)

3. Формула Бора добре узгоджувалась з дослідними даними

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

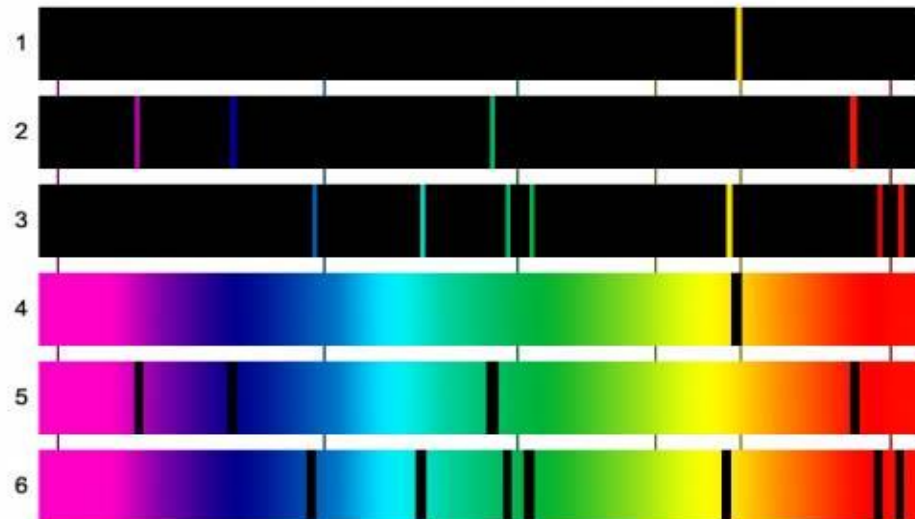
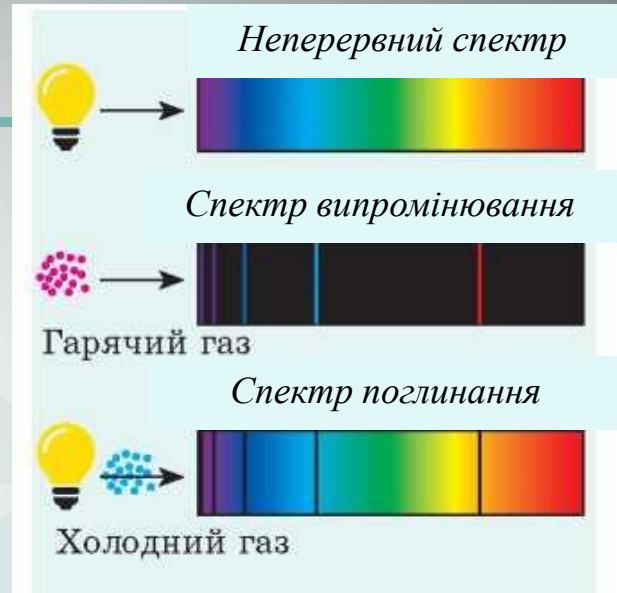


Спектральний аналіз

1. Будь-який хімічний елемент характеризується певною кількістю та певним *розподілом* оптичних (валентних) *електронів у атомах*

2. *В атомарному стані* кожен елемент може випромінювати *властивий* лише йому лінійчатий спектр

3. За наявності або відсутності у *спектрі випромінювання* (поглинання) досліджуваної *речовини характерних спектральних ліній* заданого хімічного елемента визначають його наявність (або відсутність)



Спектри випромінювання: 1-натрію; 2-гідрогену; 3-гелію

Спектри поглинання: 1-натрію; 2-гідрогену; 3-гелію

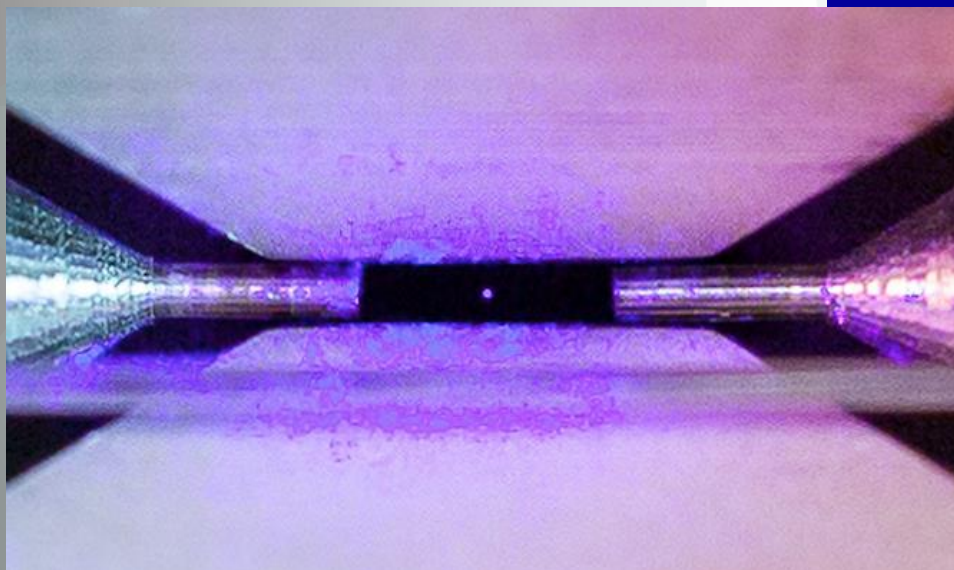
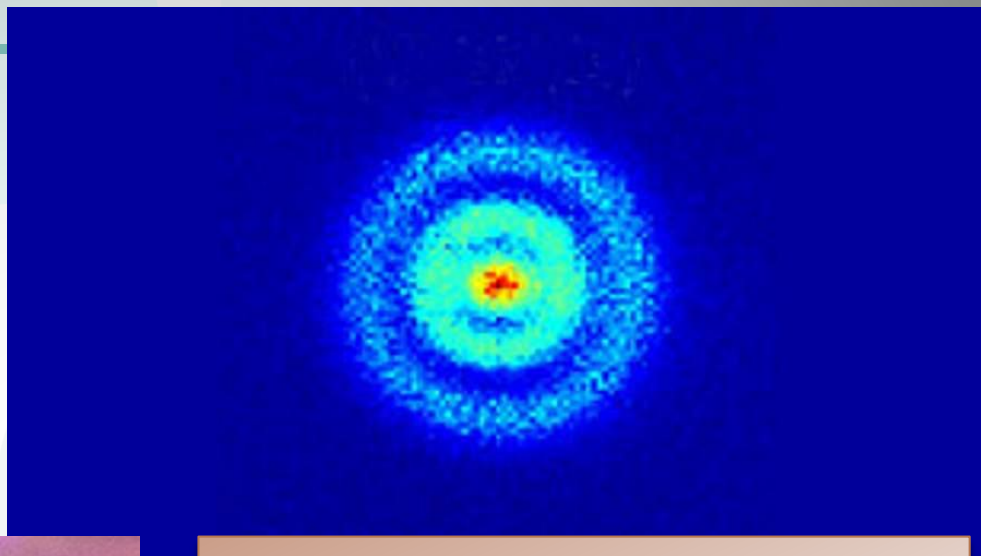
Застосування спектрального аналізу

1. Відкриті такі хімічні елементи: рубідій, цезій, талій, індій, галій і гелій. Гелій спочатку виявили на Сонці, а потім на Землі.
2. Вивчення хімічного складу зірок.
3. У промисловості для швидкого та надійного аналізу хімічного складу матеріалів, що покращує технічний контроль за процесами виробництва.



Фотографії атомів

Для отримання фотографії орбітальної структури атома гдрогену нідерландські дослідники використовували найновіший **квантовий мікроскоп**



Це *реальне фото* атома під електронним мікроскопом зроблено Девідом Недлінгером і називається "Одиночний атом в іонній пастці".

На фото зображено одиночний *атом стронцію* у потужному електричному полі.

На нього спрямовані лазери, через що атом випромінює світло.

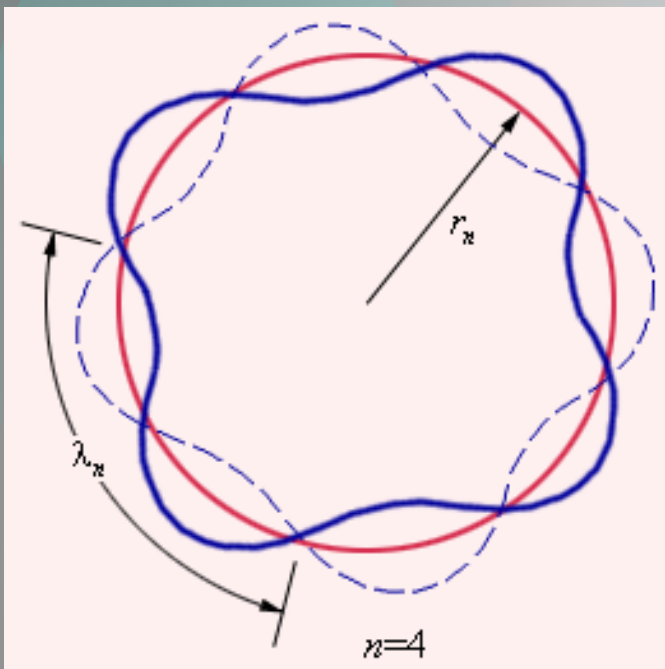
Утруднення теорії Бора

1. Не змогла пояснити спектральні закономірності *складних* багато електронних *атомів*
2. Не давала обґрунтування *інтенсивності ліній* у спектрі атома гідрогену
3. Поза теорією залишались явище *поляризації, дисперсії та поглинання*
4. Не вдалось розрахувати будову та спектр *атома гелію*
5. Поза теорією залишались *хвильові властивості електронів*
6. Не давала *фізичну інтерпретацію правила квантування*

Висновки:

1. Теорія Бора неспроможна була пояснити всі особливості мікросвіту, бо штучно поєднувала класичну механіку з деякими квантовими принципами
2. Отже теорія могла бути тільки перехідним етапом на шляху до створення послідовної теорії атомних явищ
3. З відкриттям хвильових властивостей електронів уявлення про електрон як частинку та його колові або еліптичні орбіти в атомі не відповідають дійсності

6.6.3. Атом де Бройля



1. Кожна орбіта в атомі гідрогену відповідає хвилі матерії, що розповсюджується навколо ядра

2. Стаціонарна орбіта виникає, якщо хвиля неперервно повторює себе після кожного оберту навколо ядра

3. Стаціонарна орбіта відповідає коловій стоячій хвилі де Бройля на довжині орбіти:

$$n\lambda_n = 2\pi r_n$$



В стаціонарному квантовому стані атома на довжині орбіти вкладається ціле число довжин хвиль

$$\lambda_D = \frac{h}{p}$$

$$p = m v_n$$



$$n \frac{h}{m v_n} = 2\pi r_n$$



$$m v_n r_n = n \hbar$$

Висновки:

1. Борівське правило квантування пов'язане з хвильовими властивостями електрона
2. Атоми – квантові системи
3. Енергетичні рівні стаціонарних станів атомів є дискретними

Квантова теорія атома за Шредінгером

1. Потенціальна енергія електрона в атомі, подібному до атома гідрогену

$$E_{\text{пот}} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

2. Стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E_{\text{пов}} + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0$$

3. Електрон рухається у кулонівському центрально-симетричному полі ядра, рівняння Шредінгера розглядається у сферичних координатах

$$\Psi = F(r)\Phi(\theta, \varphi)$$

4. Функція $F(r)$ залежить тільки від **відстані** електрона до початку координат, в якому міститься ядро; функція $\Phi(\theta, \varphi)$ виражає **кутовий розподіл**

5. За функцією $F(r)$ можна визначити **ймовірність знаходження** електрона на відстані r від ядра

6. Для **основного стану**, в якому енергія електрона мінімальна і якому відповідає сферична хвильова функція $F(r)$, рівняння Шредінгера:

$$\frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E_{\text{пов1}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) F = 0$$

Квантова теорія атома за Шредінгером

$$\frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E_{\text{пов1}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) F = 0$$

7. Розв'язок рівняння шукають у вигляді:

$$F = be^{-\frac{r}{a_0}}$$

8. Візьмемо першу та другу похідну цієї функції за відстанню та підставимо у рівняння Шредінгера:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{ra_0} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = E_1$$

Дана тотожність виконується за таких умов:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{ra_0} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r};$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$$

9. З останніх рівнянь знаходимо сталі розв'язку функції F :

- Радіус першої борівської орбіти атома гідрогену

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2};$$

- Енергія атома гідрогену в основному стані

$$E_1 = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2}$$

Аналіз квантової теорії атома за Шредінгером

1. Вирази для борівського радіуса та енергії атома в основному стані збігаються з відповідними формулами Бора

2. *Розв'язки* рівняння Шредінгера дають результати, аналогічні *емпіричним правилам* квантування моменту імпульсу та енергії в теорії Бора

3. Збіг формул квантової механіки з формулами теорії Бора не означає однакового їх тлумачення:

- з погляду квантової механіки існування електронних орбіт в атомі не має змісту, оскільки воно суперечить принципу невизначеностей Гейзенберга
- оперуючи хвильовою функцією $F(\mathbf{r})$ можна говорити лише про *ймовірність* перебування електрона в шарі між \mathbf{r} та $\mathbf{r}+d\mathbf{r}$, тобто в об'ємі dV .

$$F = be^{-\frac{r}{a_0}}$$

4. Для електрона в основному стані густина ймовірності:

$$dP = |F(r)|^2 dV = b^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 dr$$

Криві розподілу густини ймовірності виявлення електрона в атомі гідрогену на різних відстанях від ядра в станах $1s$ і $2s$.

Густина ймовірності:

$$P(r) = b^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 dr$$



5. Максимум густини ймовірності:
(похідна $(dp/dr)=0$)
припадає на $r_{max}=a_0$

6. Висновок:

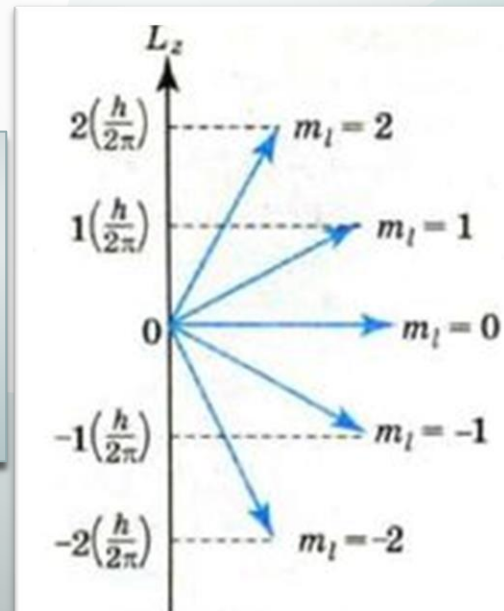
Борівські орбіти – це сукупність точок, імовірності перебування електрона в яких максимальні

Атом у зовнішньому магнітному полі

1. У попередніх розрахунках стаціонарних орбіт та енергії електронів розглядалися лише колові орбіти.
2. У полі дії кулонівської сили притягання (аналог поля тяжіння) існують також еліптичні орбіти електронів, які задовольняють певні правила квантування.
3. Врахування просторової орієнтації електронних орбіт у зовнішньому магнітному полі

Момент імпульсу електрона L на орбіті у зовнішньому магнітному полі може **орієнтуватись** тільки під такими кутами до напрямку поля, за яких його проекції на цей напрям будуть кратними:

$$\frac{h}{2\pi} = \hbar$$



Орієнтація моменту імпульсу

Магнітні моменти електрона μ на стаціонарних орбітах також квантовані, та кратні сталій величині – **магнетону Бора**

$$\mu_B = \frac{\hbar e}{2m}$$

Розв'язки стаціонарного рівняння Шредингера для атома гідрогену.

Головні квантові числа

1. **Квантування енергії:** *головне квантове число n* – визначає *номер орбіти* (в спектроскопії числову послідовність значень n замінюють послідовністю прописних літер K, L, M, N, \dots), а отже *енергію* електрона на ній:

$$W_n = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

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

До виразу кутового розподілу хвильової функції $\Phi(\theta, \varphi)$ як параметри входять квантові числа l та m

2. **Квантування моменту імпульсу L :** *азимутальне (орбітальне) квантове число l* – визначає розподіл імовірності знаходження електрона в даній точці простору та величини модулів механічного та магнітного моментів орбітального руху електрона, тобто *форму електронної хмаринки* (в спектроскопії атомні підоболонки мають літерні позначення s, p, d, f, \dots)

$$L_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

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

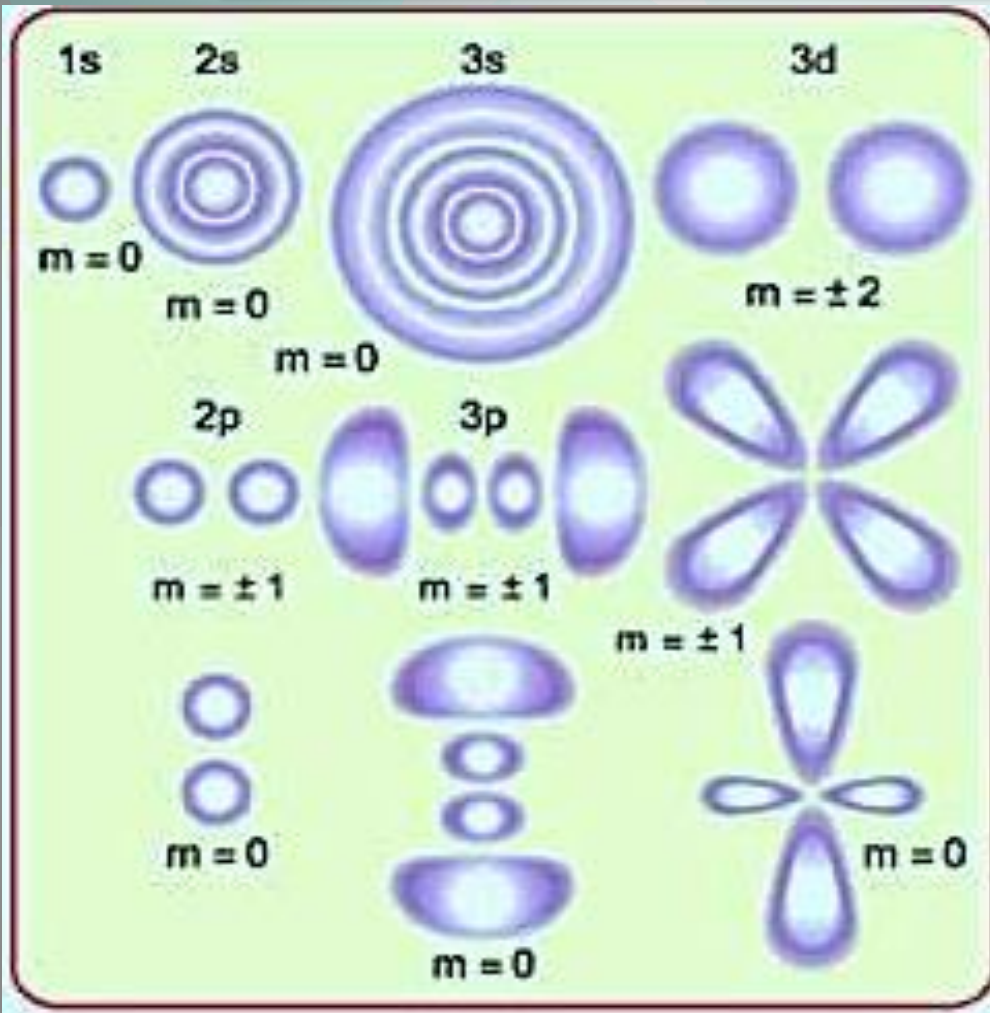
3. **Квантування проекції моменту імпульсу на напрям зовнішнього магнітного поля:** *магнітне квантове число m* – визначає *проекцію моменту імпульсу L_z* електрона в атомі, тобто *орієнтацію електронної хмаринки* у просторі

$$L_z = \hbar m$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, l$$

Атом за Бором-Шредінгером:

Орбіти електрона - це геометричне місце точок, у яких з найбільшою імовірністю може перебувати електрон в атомі



$$1s : n = 1, l = 0, m = 0$$

$$2s : n = 2, l = 0, m = 0$$

$$2p : n = 2, l = 1, m = 0, \pm 1$$

$$3s : n = 3, l = 0, m = 0$$

$$3p : n = 3, l = 1, m = 0, \pm 1$$

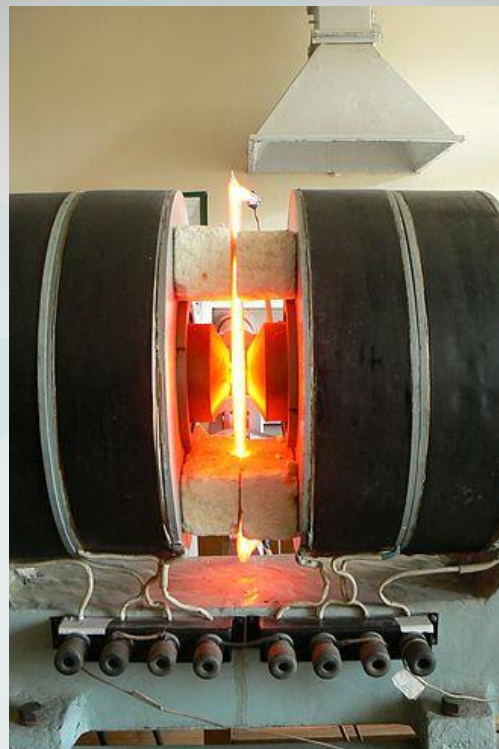
$$3d : n = 3, l = 2, m = 0, \pm 1, \pm 2$$

Ефект Зеємана (1895)

Розщеплення спектральних ліній на 3 складові при розміщенні джерела світла в дуже сильному магнітному полі

Обладнання для спостереження ефекту Зеємана:

трубка з неоновим газом розташована між полюсами великого електромагніту



$B=0$	$B \neq 0$
a, b, c	_____ a
	_____ b
	_____ c
d, e, f	_____ d
	_____ e
	_____ f

Ефект Штарка (1913)

Розщеплення спектральних ліній під впливом *електричного* поля. Електронні терми розщепляються не лише в зовнішньому полі, а й в полі, створеному сусідніми атомами й молекулами

Дослід Штерна та Герлаха (1922)

Мета: підтвердити просторове квантування магнітних моментів атомів.

Схема досліду: вакуум, срібна кулька, піч, діафрагма, вузький пучок атомів $v \sim 100 \text{ м/с}$, сильне неоднорідне магнітне поле, фотопластинка

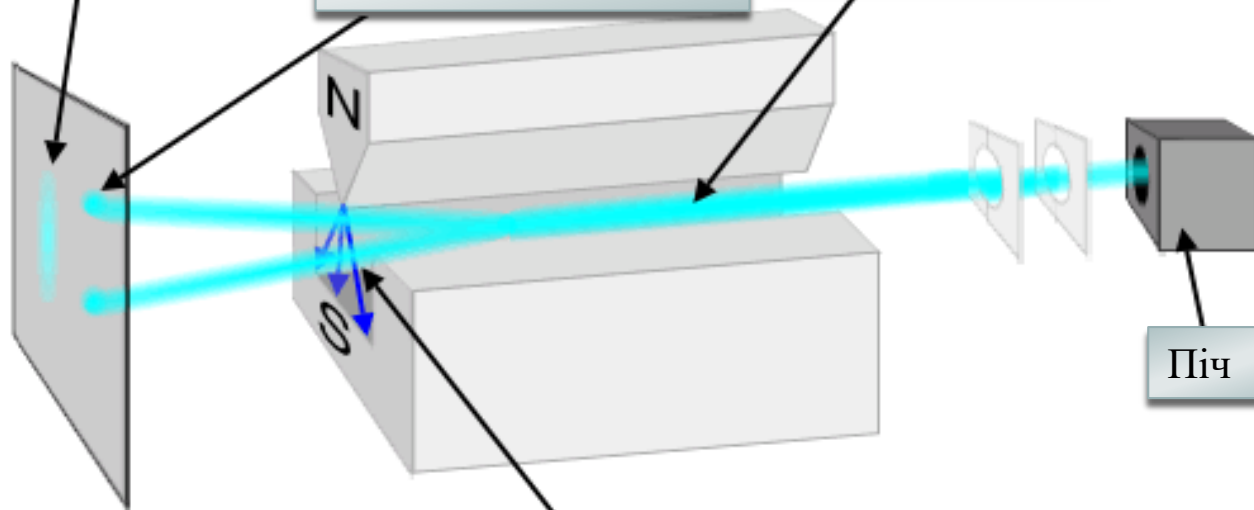
Результат: утворення двох різких симетричних смуг, тобто відхилення атомів у два боки; розщеплення навпіл пучка лужних металів (натрій, водень, літій), пучка ванадію – на 4 окремі пучки, мангану – на 6, феруму – на 9.

Розподіл атомів,
який підлягав
класичній теорії

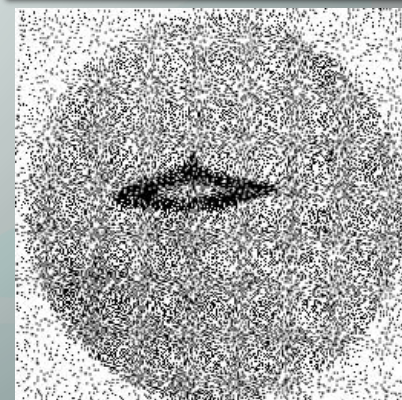
Розподіл атомів, який
спостерігався

Атоми срібла

Неоднорідне
магнітне поле



Класична теорія:
орбітальний та
магнітний моменти
одного електрона
мають будь-яку
орієнтацію і дають
неперервний
розподіл



Нове у досліді Штерна та Герлаха: обчислення магнітних моментів атомів p_m за відхиленням у магнітному полі показали, що значення їх для деяких атомів виражаються цілими кратними, а для інших – раціональними дробовими числами від *магнетона Бора*.

Результати *не можна було пояснити*, виходячи з уявлень, що магнітний момент атома є результатом *лише орбітальних рухів* його електрона

Спін електрона

Гіпотеза Дж. Уленбека та С.А. Гаудсмита (1925)

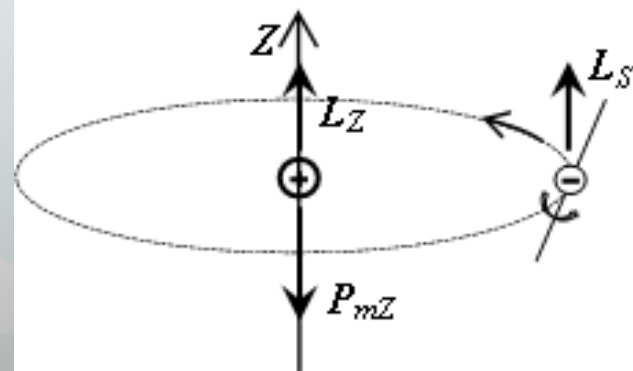
Кожний електрон має власний механічний момент імпульсу – спін L_s та власний магнітний момент p_{ms}

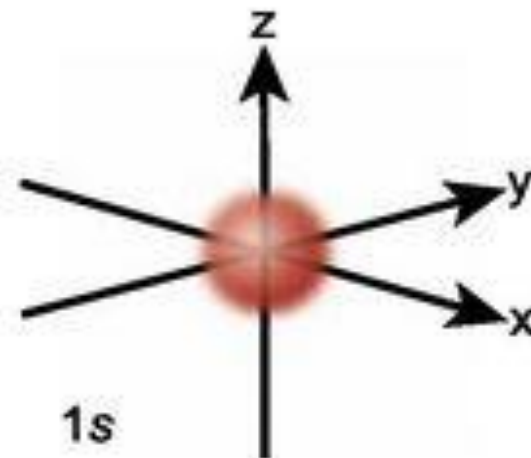
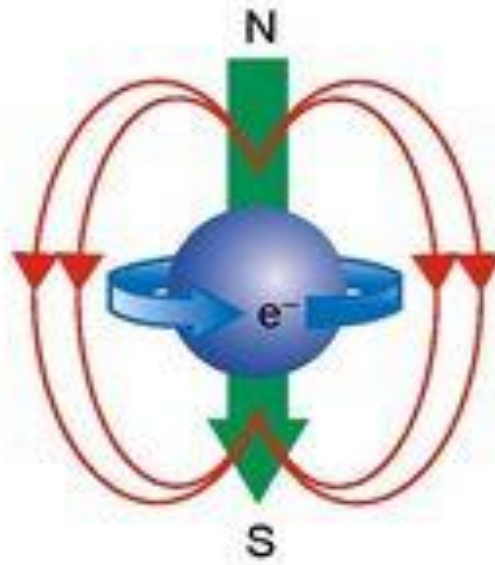
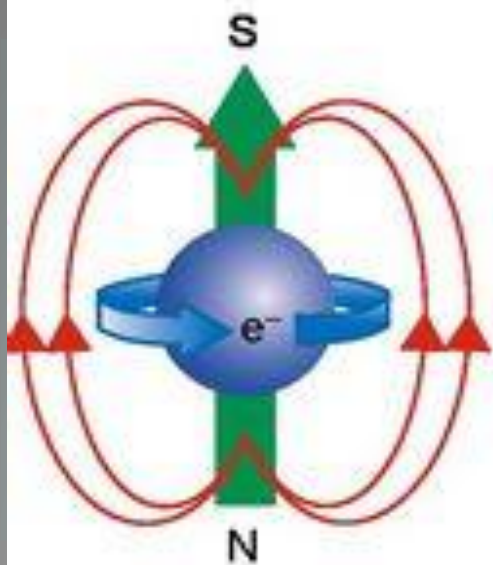
$$L_s = S\hbar$$

$$p_{ms} = \mu_B = \frac{\hbar e}{2m}$$

S – *спінове квантове число*, яке визначає напрямок обертання електрона навколо власної осі

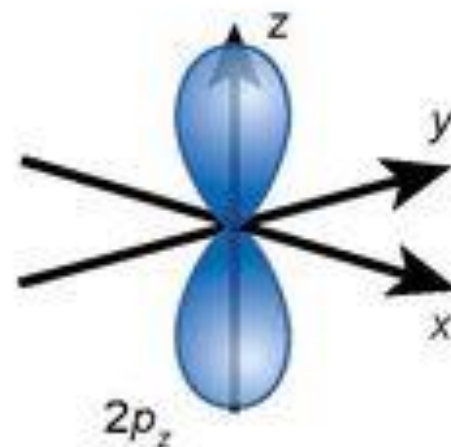
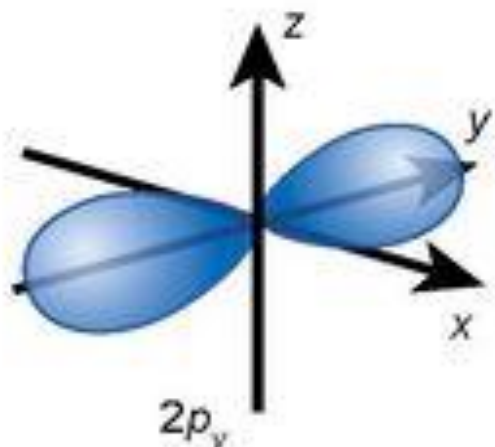
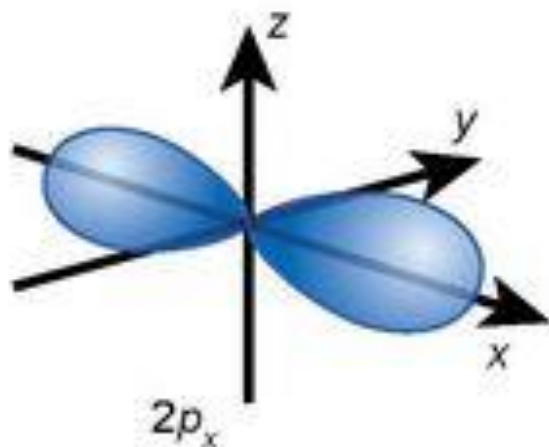
$$S = \pm \frac{1}{2}$$





Схематичне зображення двох електронів з протилежними спінами

Розміщення у просторі 1s-орбіталі



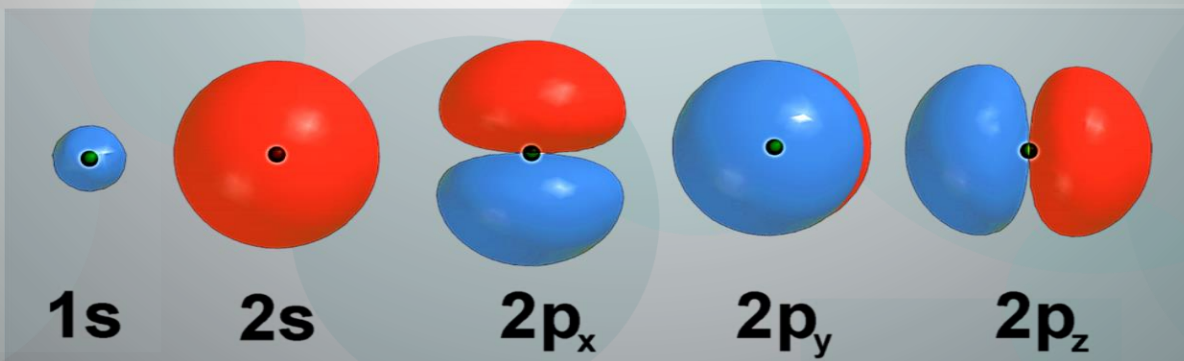
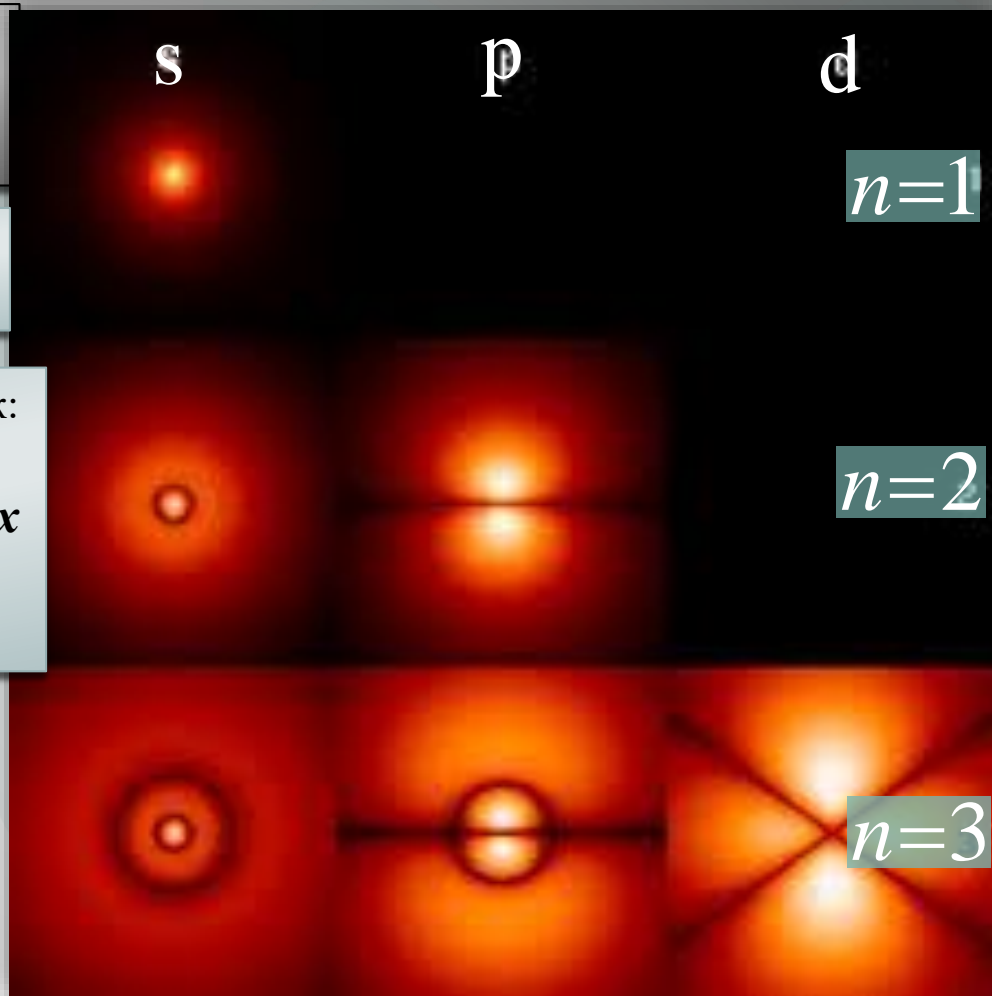
Взаємне розташування p -орбіталей у просторі

Принцип Паулі

Визначає специфіку статистики частинок з напівцілим спіном (ферміонів)

Для електронів в атомах він сформулюється так:
в квантових станах атома, які характеризуються набором всіх чотирьох квантових чисел, не може бути більше одного електрона.

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

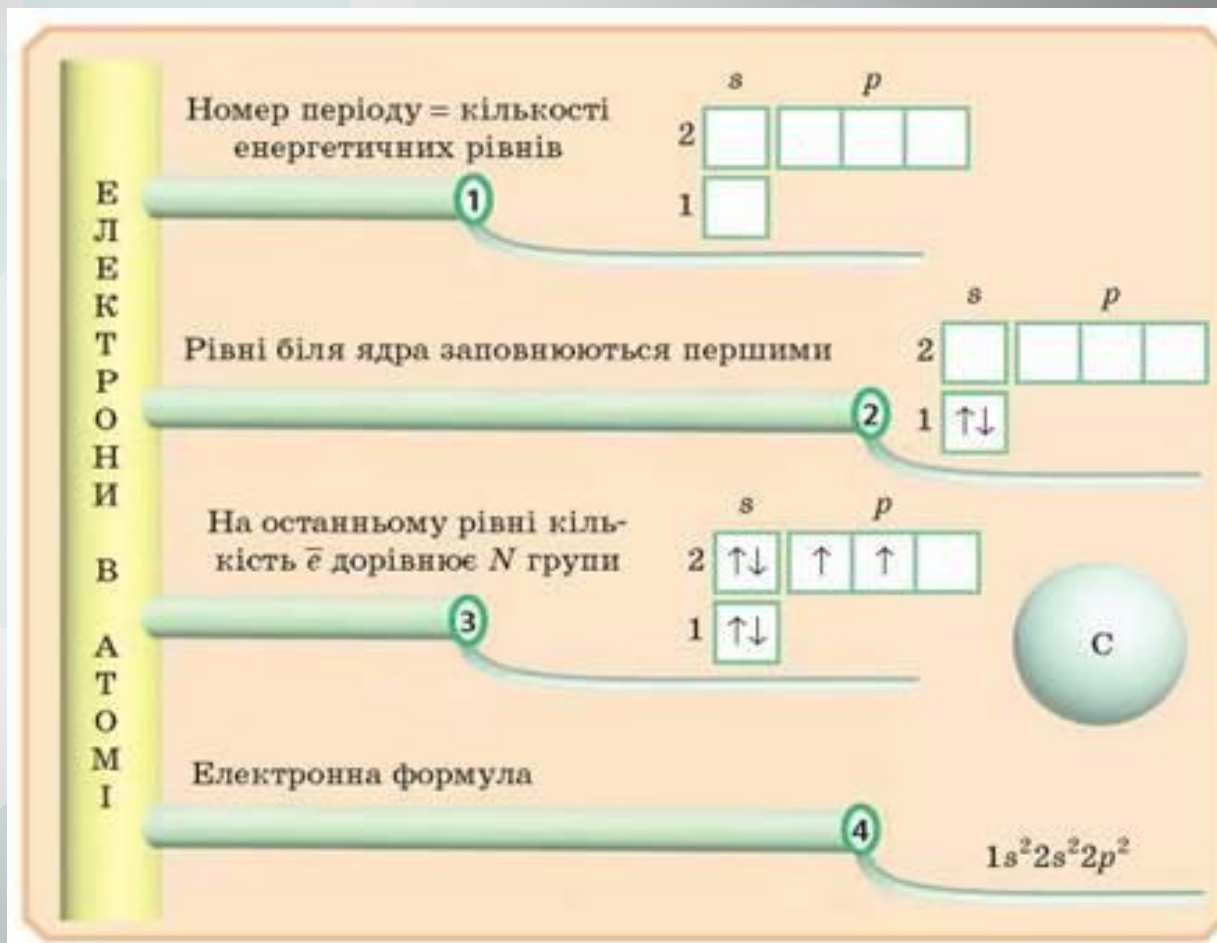


Принцип побудови таблиці хімічних елементів

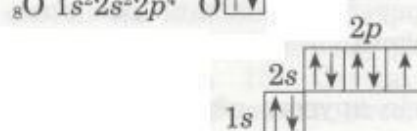
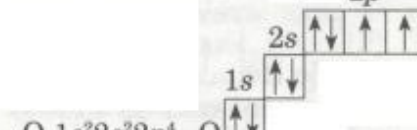
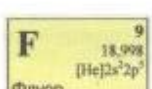
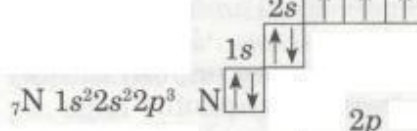
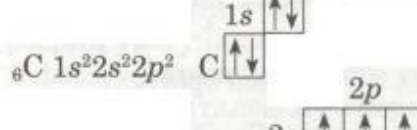
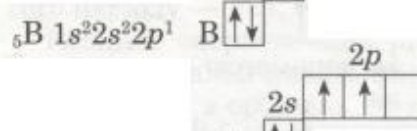
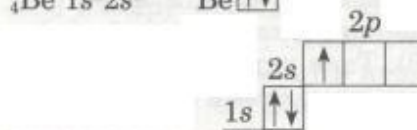
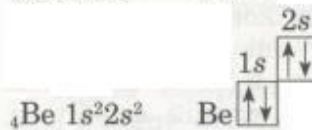
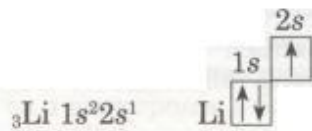
1. **Принцип послідовності:** кожний наступний атом таблиці Менделєєва має ядро, у якого, як мінімум, на один протон більше ніж у попереднього та на один електрон збільшується кількість електронів в атомній оболонці.

2. **Принцип мінімізації повної енергії системи.** Стійкий стан кожного атома відповідає мінімуму повної енергії.

3. **Принцип заборони Паулі.** Заповнення електронних оболонок атома не повинно порушувати *принцип Паулі*.



Принцип побудови таблиці хімічних елементів



Оптичні та глибинні електрони

I. Електрони на найбільш віддаленій від ядра оболонки:

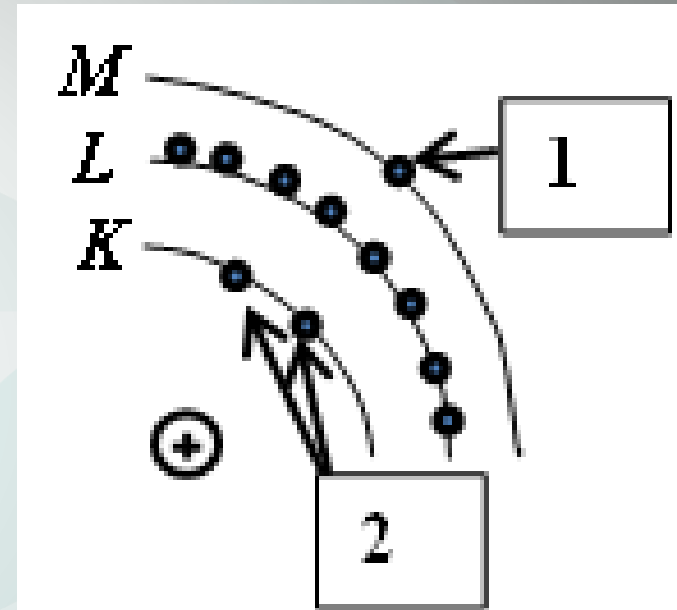
оптичні (слабко зв'язані, зовнішні, валентні).

Наприклад, в атомі натрію Na позначено цифрою 1 - оболонка M.

II. Електрони на найближчих оболонках до ядра:

глибинні, сильнозв'язані.

Наприклад, в атомі натрію Na позначено цифрою 2 - оболонка K.



- *Оптичні* (валентні) електрони визначають величину хімічної взаємодії.
- Перевірити стан *глибинних* електронів можна тільки в сильних взаємодіях з атомом: через *рентгенівські спектри*.



Вільгельм Рентген

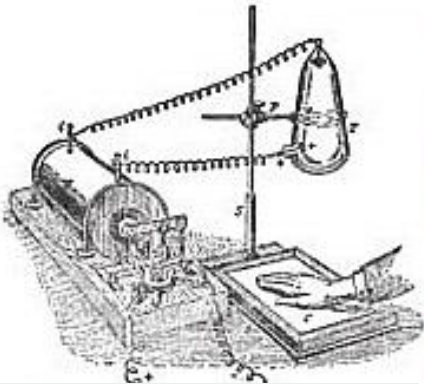


Схема установки Рентгена



Рентгенівське фото руки

Рентгенівське випромінювання

Рентгеноструктурний аналіз

Дефектоскопія

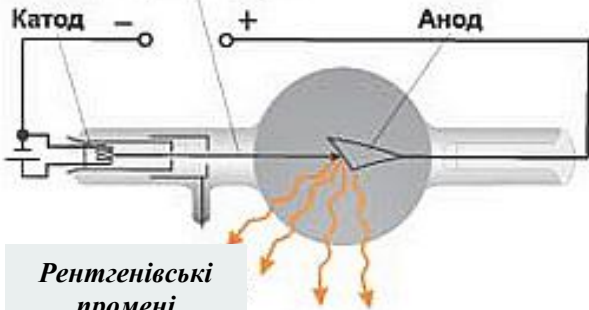
Рентгенівська мікроскопія

Рентгенологія

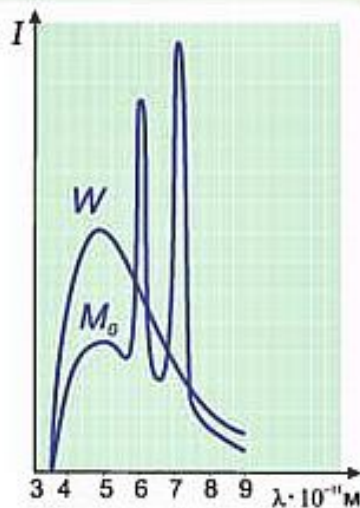
Рентгенотерапія

Для виявлення прихованих або стертих написів

Електронний промінь

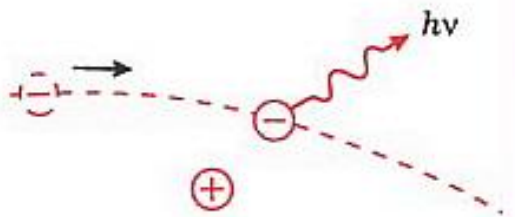
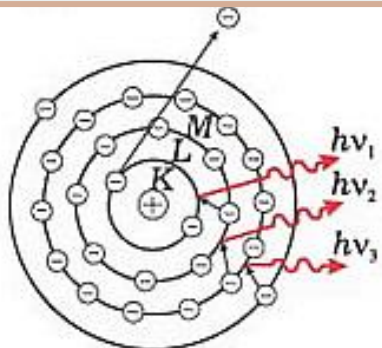


Рентгенівські промені



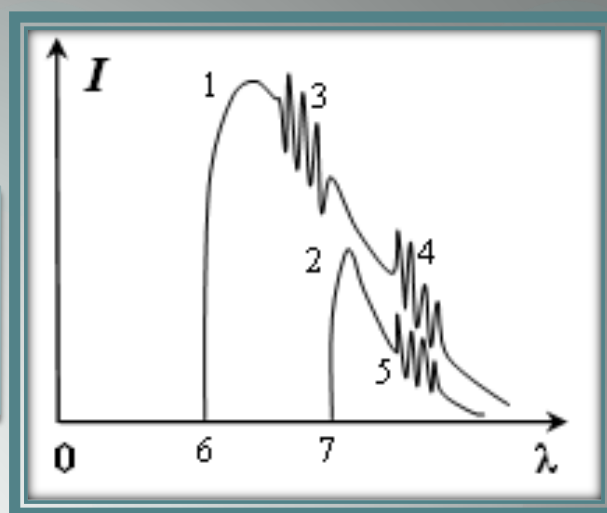
Спектри рентгенівського випромінювання

Будова рентгенівської трубки



Рентгенівські спектри атомів

Типові спектри, зняті Мозлі у рентгенівській установці, в якій аноди виготовлялись з атомів різного сорту, мають такий вигляд:



- Спектри складаються з *суцільної частини* (гладкі лінії) та *характеристичного спектру* (серії ліній 3, 4, 5).
- При високій напрузі на установці U_1 (крива 1) спостерігається найбільш короткохвильова **K-серія** (3), при нижчих напругах U_2 – тільки **L-серія** (5), розташована на тому ж місці, що й **L-серія** при високій напрузі (4).
- Нижні межі суцільних спектрів (6, 7) (найменші довжини хвиль) визначаються напругами на рентгенівській установці:

$$\lambda_{\min 1} = hc/eU_1 \quad (6),$$

$$\lambda_{\min 2} = hc/eU_2 \quad (7).$$

Формула Мозлі для характеристичного рентгенівського спектру

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

Z – порядковий номер атома в таблиці Менделєєва,
 n і m – цілі числа, $\sigma_n = 1$ ($n = 1$);
 $\sigma_n \approx 5$ ($n = 2$) тощо – стала екранування.

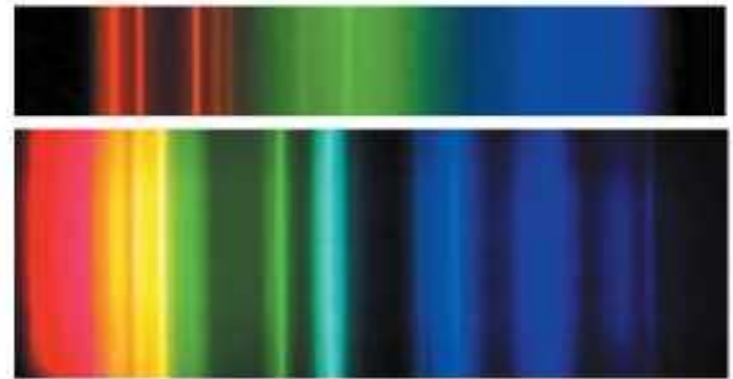
Енергетичні рівні та спектри молекул

I. Повна енергія електрона в молекулі розраховується значно складніше, ніж в атомі, тому що враховує не тільки взаємодію електронів з ядрами $W_{\text{ел-ядро}}$, а й енергію коливальних $W_{\text{кол}}$ та обертальних $W_{\text{об}}$ рухів молекули:

$$W = W_{\text{ел-ядро}} + W_{\text{кол}} + W_{\text{об}}$$

II. Розв'язок рівняння Шредінгера для такого електрона в молекулі показує, що всі види енергій *квантуються*, тобто, поряд з електронними рівнями енергії з'являється низка близько розташованих коливальних та обертальних рівнів.

III. Тому спектри молекул **не лінійчаті**, на відміну від атомів, а **смугасті**, оскільки представляють собою серії близько розташованих ліній.



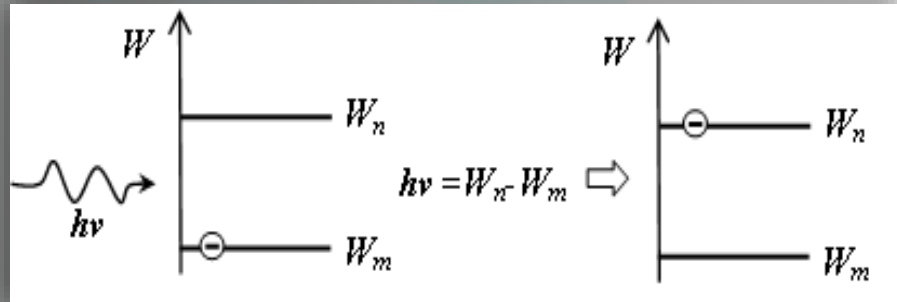
Смугасті спектри складаються з низки смуг, розділених темними проміжками

1. В діапазоні **видиме світло – ультрафіолет**: електронно-коливально-обертальні **смуги**.
2. В діапазоні **інфрачервоних** променів: коливально-обертальні **смуги**.
3. В діапазоні **радіохвиль**: обертально-обертальні **лінії**.

Взаємодія світла з квантовими системами

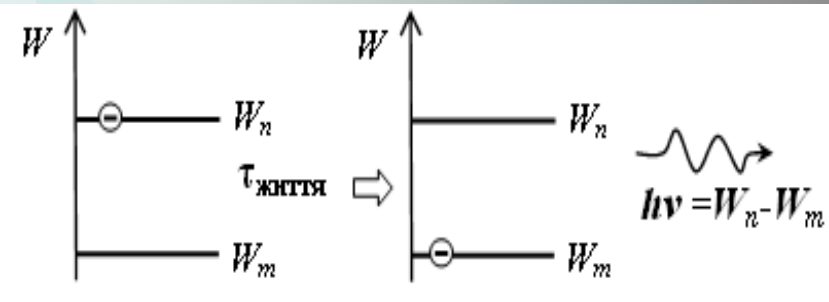
Резонансне поглинання

Квантова система – двоурівнева: нижній рівень з енергією W_m , верхній – з енергією W_n . Квантова система знаходиться в **основному стані** (електрон на нижньому енергетичному рівні). На систему в основному стані падає квант світла з енергією $h\nu$. При виконанні умови **резонансу** (рівність енергії кванта різниці енергій) система з високою ймовірністю переходить в **збуджений стан** (електрон на верхньому енергетичному рівні).



Спонтанне випромінювання

Квантова система знаходиться в **збудженому стані** (електрон на верхньому енергетичному рівні). Через деякий час (час життя) вона самодовільно переходить в **основний стан**, випускаючи резонансний квант енергії.



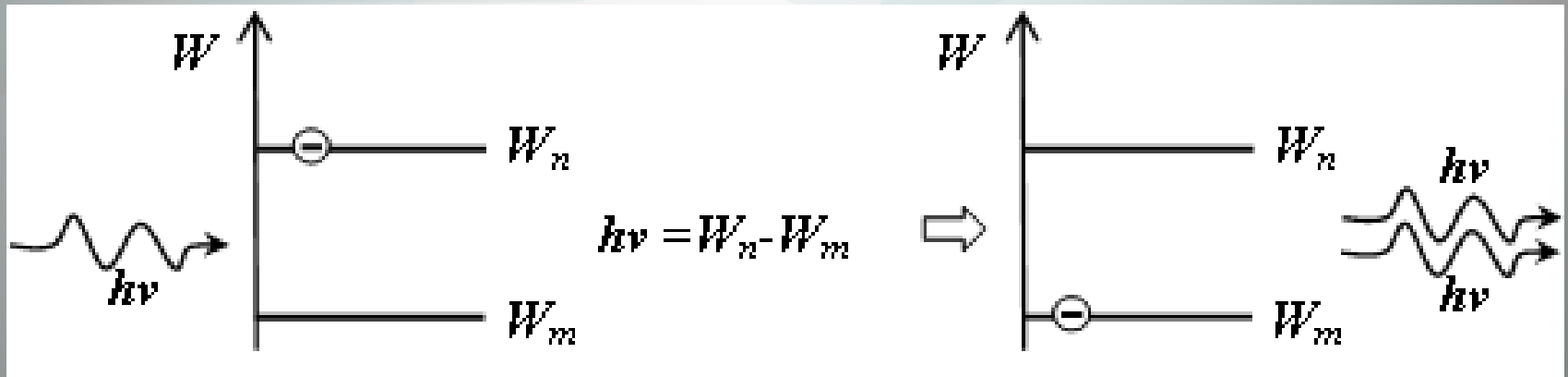
Взаємодія світла з квантовими системами

Вимушене резонансне випромінювання

Третім елементарним актом взаємодії світла з квантовою системою, спочатку гіпотетично, Ейнштейн допустив існування високоїмовірного процесу **вимушеного резонансного випромінювання** (рисунок).

Квантова система знаходиться в **збудженому стані** (електрон на верхньому енергетичному рівні). На неї падає **резонансний квант енергії**. Після чого система миттєво переходить в **основний стан** (електрон на нижньому енергетичному рівні). При цьому з'являються **два кванти-близнюки**.

Вимушене резонансне випромінювання лежить в основі роботи квантових підсилювачів та генераторів світла (лазерів)



Принцип дії лазерів

Для створення оптичних квантових генераторів (лазер) необхідно виконати дві умови:

- створити **активне середовище** – перевести більшість квантових елементів системи в збуджений стан (здійснити інверсію заселеності рівнів електронами);
- створити **позитивний зворотній зв'язок** – організувати **резонатор**.

В оптичному діапазоні таким резонатором є система **двох дзеркал**, розташованих перпендикулярно осі оптичної системи на відстані, **кратній половині довжини хвилі** випромінювання лазера (для виконання умови стоячої хвилі).

За способом створення активного середовища лазери поділяють на:

- лазери з оптичною накачкою;
- газорозрядні лазери;
- напівпровідникові лазери;
- лазери з хімічною накачкою тощо

Оптичні квантові генератори

