

АТОМНАЯ ФИЗИКА

А.М.Попов, О.В.Тихонова

издание второе

**Допущено УМО
по классическому университетскому образованию РФ
в качестве учебного пособия
для студентов высших учебных заведений,
обучающихся по направлению подготовки 011200 – Физика
и по специальности 010701.65 - Физика**

**Москва, 2014
Книга по Требованию**

УДК 53
ББК 22.3
А11

Авторы:
сотрудники кафедры атомной физики, физики плазмы и микроэлектроники физического факультета МГУ:
А.М. Попов, О.В. Тихонова

Рецензенты:
Гореславский С.П., доктор физико-математических наук, профессор
(Московский инженерно-физический институт)
Крайнов В.П., доктор физико-математических наук, профессор
(Московский физико-технический институт)

А11 **А.М. Попов, О.В. Тихонова**
Атомная физики: учебное пособие / А.М. Попов, О.В. Тихонова — М.: Книга по Требованию 2014.—
364 с.

ISBN 978-5-518-40180-8

Данное пособие написано на основе лекций, читающихся авторами на протяжении многих лет студентам третьего курса физического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова, и соответствует современной программе курса «Атомная физика». В пособии рассмотрена история развития квантовых представлений в первой четверти XX века, изложены основы математического формализма квантовой теории (координатное представление Шредингера). На основе этого формализма исследуется строение одно- и многоэлектронных атомов, простейших молекулярных систем, а также проблема взаимодействия квантовых систем с внешним электромагнитным полем. Материал разбит на восемнадцать глав, в конце каждой из них предлагаются задачи для самостоятельного решения.

Для студентов физических специальностей университетов.

Ключевые слова: атом, молекула, квантовая физика.

Atomic Physics

A.M. Popov, O.V. Tikhonova

This textbook is written based on the lectures given by the authors for many years for the third-year students of Physics Department of Moscow State University, and corresponds to the modern program of the "Atomic Physics" course at Physics Department. The textbook reviews the history of the progress of quantum-mechanical concepts in the first quarter of the XX century, the fundamentals of the mathematical formalism of quantum theory (Schrödinger coordinate representation). On the basis of this formalism, the structure of one- and many-electron atoms, the simplest molecular systems, as well as the problem of the interaction of quantum systems with an external electromagnetic field are analyzed. The material is divided into eighteen chapters; each chapter contains a number of problems for self-studying.

For students of physical sciences.

Key words: atom, molecule, quantum physics.

ISBN 978-5-518-40180-8

© Коллектив авторов, 2014
© Книга по Требованию, 2014

Оглавление

Введение	8
Глава 1. Классическая картина мира и необходимость введения квантовых представлений	9
Электронная теория Лоренца.....	9
Проблема равновесного электромагнитного излучения.....	12
Фотоэффект.....	18
Эффект Комптона.....	22
Тормозное рентгеновское излучение. Квантовый предел.....	24
Фотон.....	25
Гипотеза де Бройля. Корпускулярно-волновой дуализм.....	30
Волновой пакет. Соотношения неопределенностей.....	35
Глава 2. Модели атомов	40
Атом Томсона.....	40
Опыты Резерфорда. Планетарная модель атома.....	42
Атом Бора.....	45
Модель Бора и гипотеза де Бройля.....	49
Релятивистское обобщение модели Бора.....	50
Экспериментальное доказательство дискретной структуры атомных уровней. Опыты Франка и Герца.....	51
Изотопический сдвиг атомных уровней.....	52
Мюонный атом водорода.....	54
Экситон Ванье – Мотта.....	55
Глава 3. Основы формализма квантовой механики	57
Нестационарное уравнение Шредингера.....	57
Релятивистское волновое уравнение.....	59
Волновая функция и ее физический смысл.....	59
Уравнение непрерывности. Вектор плотности тока вероятности.....	62
Определение средних значений и дисперсии импульса и координаты частицы.....	63
Операторы.....	66
Собственные значения и собственные функции оператора импульса.....	69
Собственные значения и собственные функции оператора z -проекции момента количества движения.....	70
Стационарное уравнение Шредингера.....	71
Коммутатор.....	72
Многочастичная квантовая система.....	74
Понятие о матрице плотности.....	76
Движение волновых пакетов. Предельный переход к классической механике.....	77
Представления Шредингера и Гейзенберга.....	79
Оптико-механическая аналогия.....	80

Глава 4. Стационарное уравнение Шредингера. Спектры простейших одномерных систем	85
Свободное движение частицы	85
Частица в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме	86
Частица в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины	89
Глава 5. Туннельный эффект	94
Автоэлектронная эмиссия	95
Явление α - распада атомных ядер	96
Туннельная ионизация атомов в оптическом поле	97
Туннельный микроскоп	99
Туннельный эффект: оптическая аналогия	100
Туннельный эффект и зонная структура спектра в периодическом потенциале	101
Глава 6. Гармонический осциллятор	104
Стационарные состояния	104
Нестационарные состояния	108
Когерентные состояния и переход к классическому описанию	109
«Сжатый» вакуум	114
Глава 7. Стационарные состояния в центрально-симметричном поле. Задача Кеплера	117
Общая постановка задачи	117
Задача Кеплера	122
Переход к классическому описанию	127
Понятие о квазиклассическом приближении. Квантовые условия Бора и Бора – Зоммерфельда	128
Глава 8. Момент количества движения	133
Орбитальный механический и магнитный моменты электрона	133
Экспериментальное определение атомных магнитных моментов	134
Собственный механический и магнитный моменты электрона. Спин	135
Сложение невзаимодействующих моментов количества движения	139
Систематика состояний атома водорода	142
Волновые функции электрона в атоме водорода в базисах n, ℓ, m_ℓ, m_s и n, ℓ, j, m_j	143
Глава 9. Приближенное решение стационарного уравнения Шредингера. Теория возмущений	146
Случай невырожденного спектра	146
Случай вырожденного спектра	148
Изотопическое смещение атомных уровней, связанное с конечным размером ядра	150
Тонкая структура спектра атома водорода	152
Учет релятивистской связи импульса и энергии электрона	154

<i>Спин – орбитальное взаимодействие</i>	155
Понятие о тонкой структуре спектров многоэлектронных атомов	158
Понятие о сверхтонкой структуре атомных спектров	159
Сверхтонкая структура основного состояния атома водорода	160
Атом в электрическом поле. Эффект Штарка	162
<i>Квадратичный эффект Штарка</i>	162
<i>Линейный эффект Штарка</i>	163
Глава 10. Тождественность микрочастиц	166
Неразличимость микрообъектов	166
Бозоны и фермионы. Принцип Паули	169
Макроскопические ансамбли микрочастиц	169
Глава 11. Многоэлектронный атом	173
Вариационный метод	173
Приближение самосогласованного поля	175
Атомные оболочки и подоболочки. Электронная конфигурация	177
Атомы щелочных металлов	178
Атом гелия	182
Отрицательный ион водорода	191
Общие принципы описания многоэлектронных атомов	193
<i>Заполнение атомных оболочек электронами</i>	193
<i>Термы многоэлектронных атомов</i>	194
<i>Тонкая структура терма. Состояния</i>	196
<i>Правило интервалов Ланде</i>	196
<i>Приближение LS - и jj -связей</i>	197
<i>Основные термы атомов. Правила Хунда</i>	200
<i>Правило интервалов Ланде для сверхтонкой структуры</i>	203
Глава 12. Взаимодействие квантовой системы с электромагнитным полем	206
Общая постановка задачи. Электрическое дипольное приближение	206
Нестационарная теория возмущений	209
Вероятность перехода	211
<i>Случай мгновенного включения поля</i>	211
<i>Случай адиабатически плавного включения поля</i>	214
Правила отбора	215
<i>Линейный гармонический осциллятор</i>	215
<i>Центрально-симметричное поле</i>	216
Спектральные серии атома водорода	218
Спектральные серии атомов щелочных металлов	219
Электромагнитные переходы в многоэлектронных атомах	220
Квантовая теория дисперсии	224
Фотоионизация атомов	227
Глава 13. Фундаментальные основы нелинейной оптики	229
Второй порядок нестационарной теории возмущений	229
Двухфотонные переходы	231

Правила отбора для двухфотонных переходов	232
Двухквантовый фотоэффект	232
Высшие порядки теории возмущений	233
Рамановские переходы Λ - типа и комбинационное рассеяние	235
Динамический эффект Штарка	237
Нелинейные атомные восприимчивости второго порядка	239
Глава 14. Квантовое электромагнитное поле и его взаимодействие с атомом	242
Электромагнитное поле как квантовый объект	243
Классическое электромагнитное поле в квантовой теории	247
«Сжатый» свет	248
Взаимодействие атомной системы с квантовым электромагнитным полем.	
Спонтанные переходы	249
Спонтанные переходы и естественная ширина спектральной линии	254
Формула Планка	259
Лэмбовский сдвиг атомных уровней	260
<i>Опыты Лэмба – Ризерфорда</i>	261
<i>Качественный анализ лэмбовского сдвига</i>	262
<i>Опыты Хэнша</i>	264
<i>Лэмбовский сдвиг в спектре водорода и размер протона</i>	266
Аномальный магнитный момент электрона	267
Эффект Казимира	267
Глава 15. Переходы внутренних электронов в атомах	270
Характеристическое рентгеновское излучение	270
Тонкая структура рентгеновских линий	272
Закон Мозли	273
Эффект Оже	273
Глава 16. Основы квантовомеханической теории столкновений	275
Общая постановка задача	275
Борновское приближение	276
Рассеяние на потенциале Юкавы	279
Рассеяние электронов на атомах во внешнем электромагнитном поле.	
Вынужденный тормозной эффект	280
Глава 17. Атом в магнитном поле	285
Эффект Зеемана	290
Эффект Пашена и Бака	292
Электронный парамагнитный резонанс	293
Опыты Штерна и Герлаха	295
Глава 18. Основы физики молекул	297
Адиабатическое приближение	298
Молекулярный ион водорода	303
Молекула водорода. Теория Гайтлера – Лондона	308
Насыщение химических связей. Валентность	310

Метод линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Ковалентная полярная и ионная связи	312
Элементы стереохимии	313
Основы систематики электронных состояний двухатомных молекул	315
Ядерная подсистема молекулы	317
Электромагнитные переходы в молекулах	322
Приложения	329
1. Эрмитовы операторы	329
2. Прохождение потока частиц через прямоугольный потенциальный барьер	330
3. Полиномы Эрмита	332
4. Сферические функции	332
5. Момент количества движения в многоэлектронном атоме	334
6. Расчет энергии электростатического взаимодействия двух атомных электронов	335
7. Электронные термы конфигураций np^2 и $npn'p$	336
8. Основы общей теории взаимодействия квантовой системы с электромагнитным полем	339
9. Расчет вероятности спонтанного перехода $2p \rightarrow 1s$ в водородоподобном ионе	342
10. Силы Ван-дер-Ваальса	343
Справочные данные	345
Дополнительная литература	362

Введение

Данное пособие посвящено изложению основ атомной физики, как одного из разделов курса Общей физики. В основе этого раздела курса лежит изучение строения вещества и описания различных явлений на микроскопическом уровне атомно-молекулярных масштабов.

Обычно в макроскопических теориях различные характеристики вещества, такие как, например, плотность, проводимость, диэлектрическая проницаемость, коэффициент поверхностного натяжения и т. д., вводятся феноменологически. Задача микроскопической теории – научиться вычислять эти и многие другие характеристики. Для этого необходимо научиться описывать строение атомов и молекул, их взаимодействие друг с другом, а также с внешними (прежде всего электромагнитными) полями. Оказывается, в таком микромире атомно-молекулярных масштабов законы классической физики уже не действуют. Мы вступаем в область действия законов квантовой механики. Поэтому большое внимание в курсе будет уделено основам квантовой теории: истории ее создания, физической сущности и изучению математического аппарата в объеме, минимально необходимом для решения конкретных прикладных задач. Отметим, что существует, конечно, и другой значительно более глубокий уровень описания строения вещества. Например, при изучении строения атома мы будем полагать, что существует атомное ядро с вполне определенными характеристиками. Как и откуда они возникают – важный вопрос, но он уже рассматривается в микроскопической теории более глубокого уровня (физике атомного ядра). Безусловно, в рамках микроскопического подхода правомерны и вопросы о том, почему входящие в атом частицы, электроны и образующие ядра протоны и нейтроны, характеризуются вполне определенными свойствами, и почему именно такие частицы и виды взаимодействий существуют в природе? Мы не будем касаться этих вопросов, для нас будет представлять интерес построение микроскопической теории вещества в мире атомно-молекулярных масштабов.

А что такое мир атомно-молекулярных масштабов? О каких пространственно-временных, энергетических и других масштабах будет идти речь? Для ответа на этот вопрос вспомним, что размер простейшего атома, атома водорода, в основном состоянии составляет величину порядка одного ангстрема (более точно – $5.29 \cdot 10^{-9}$ см). Считая, что этот размер a_0 – радиус круговой орбиты электрона в атоме (боровский радиус)¹, и используя второй закон Ньютона

$$\frac{mv_0^2}{a_0} = \frac{e^2}{a_0^2}$$

(m – масса электрона, e – его заряд), легко найти значение скорости движения электрона по орбите $v_0 = \sqrt{e^2/m a_0} \approx 2.18 \cdot 10^8$ см/с. Тогда характерное время движения электрона по орбите можно оценить как $\tau = a_0/v_0 \approx 2.42 \cdot 10^{-17}$ с. Другими словами, при изучении атомов и молекул речь будет идти о процессах, протекающих в фемтосекундном масштабе времен. Характерный энергетический масштаб легко определить, вычислив кинетическую или потенциальную энергию электрона на орбите. Соответствующая величина оказывается порядка 10 эВ ($1 \text{ эВ} = 1.6 \cdot 10^{-12}$ эрг). Приведенные выше значения как раз и характеризуют масштабы микромира, о котором мы будем в дальнейшем говорить.

¹ Безусловно, остается непонятным, откуда взялся этот размер. На самом деле объяснить его происхождение в рамках классических (неквантовых) представлений невозможно. Поэтому сами масштабы микромира оказываются неразрывно связаны с квантовомеханическим описанием вещества.

Глава 1. Классическая картина мира и необходимость введения квантовых представлений

Электронная теория Лоренца

Вернемся мысленно в самый конец XIX века. Уже созданы классическая механика и электродинамика Максвелла. Успех этих теорий при описании широкого круга явлений в окружающем нас макроскопическом мире не вызывает сомнения. Поэтому совершенно естественной представляется попытка использовать эти теории для описания строения вещества на микроскопическом уровне. При этом делается важное допущение – законы физики в макромире и микромире считаются одинаковыми. Теория микроскопического строения вещества, основанная на наиболее общих законах классической механики и электродинамики, была создана Г.А.Лоренцем² в 1896 году и известна как электронная теория Лоренца. В основе этой теории – представление об электронах, входящих в состав атомов и способных совершать гармонические колебания на определенных частотах. Теория Лоренца оказалась исключительно продуктивной, она позволила объяснить на микроскопическом уровне огромное количество оптических эффектов, в частности явления испускания и поглощения света атомами, законы распространения света в веществе (дисперсия). Применение идей Лоренца позволило создать кинетическую теорию газов и твердых тел, электронную теорию металлов (совместно с П.Друде³).

Рассмотрим несколько примеров успешного использования электронной теории для объяснения различных физических явлений.

Остановимся сначала на объяснении в рамках подхода Лоренца так называемого эффекта Зеемана⁴, сущность которого заключается в явлении расщепления на несколько компонент спектральной линии атома, помещенного во внешнее магнитное поле (1896). Общая схема установки, позволяющей наблюдать расщепление, приведена на рис.1.1. Излучающие атомы (S) помещаются между полюсами электромагнита.

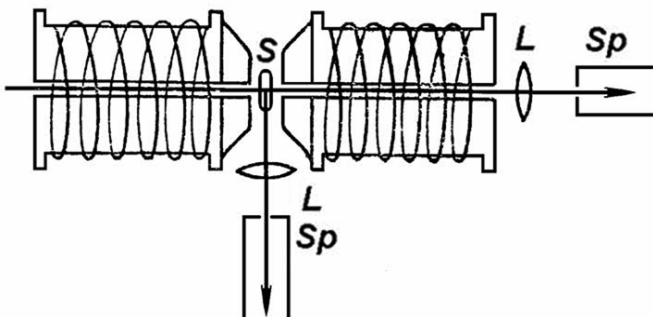


Рис.1.1. Схема опыта по наблюдению эффекта Зеемана.

На выходной щели спектрографа (Sp) формируется изображение, позволяющее анализировать спектральный состав излучения. В полюсах магнита имеется сквозное отверстие, позволяющее наблюдать спектр излучения, в том числе, в направлении вектора напряженности магнитного поля \vec{H} . Как уже отмечалось, в рам-

² Н. А. Lorentz (1853 - 1928) – нидерландский физик – теоретик, Нобелевская премия (1902) «В знак признания исключительных услуг, которые они оказали науке своими исследованиями влияния магнетизма на явления излучения», совместно с П.Зееманом.

³ Р. Drude (1863 - 1906) – немецкий физик.

⁴ Р. Zeeman (1865 - 1943) – нидерландский – физик, Нобелевская премия (1902), совместно Г. А. Лоренцем.

ках теории Лоренца атомный электрон являются гармоническим осциллятором. Поэтому уравнения движения атомного электрона при наложении внешнего магнитного поля имеют следующий вид:

$$\ddot{\vec{r}} + \omega_0^2 \vec{r} = \frac{e}{mc} [\dot{\vec{r}}, \vec{H}], \quad (1.1)$$

здесь ω_0 - частота колебаний атомного электрона, \vec{H} - напряженность внешнего магнитного поля. Вводя обозначение $\Omega = eH/2mc$, и расписывая (1.1) в проекциях на координатные оси (ось z направлена по вектору \vec{H}), получим

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= -\omega_0^2 x + 2\Omega \dot{y}, \\ \ddot{y} &= -\omega_0^2 y - 2\Omega \dot{x}, \\ \ddot{z} &= -\omega_0^2 z. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Заметим, что колебания электрона вдоль оси z не зависят от наличия магнитного поля и происходят с атомной частотой ω_0 . Значит, атом будет излучать на этой частоте, как в отсутствие, так и при наличии внешнего магнитного поля. Что касается двух оставшихся уравнений, то несложный их анализ показывает, что колебания в направлении перпендикулярном \vec{H} происходят с частотами $\omega = \omega_0 \pm \Omega$ (мы полагаем здесь выполненным условие $\Omega \ll \omega_0$). Таким образом, при наложении магнитного поля атомная линия расщепляется на три (несмещенная частота и две сдвинутых на $\pm \Omega$ - триплет Лоренца). Особенности углового распределения дипольного излучения (диполь не излучает в направлении колебаний дипольного момента) приводят к тому, что в направлении перпендикулярном магнитному полю будут видны все три линии, в то время как в направлении магнитного поля будут видны только две смещенные компоненты (центральная частота исчезнет). Такая картина расщепления действительно наблюдалась экспериментально и известна как нормальный эффект Зеемана. В экспериментах, однако, наблюдается и аномальный эффект Зеемана, когда картина расщепления отличается от описанной выше (число линий либо не равно трем, либо величина расщепления не совпадает с рассчитанной). Однако, и в этом случае порядок величины расщепления правильно описывается рассмотренной выше моделью, и вполне можно было надеяться, что развитие теории в дальнейшем позволит получить согласие с экспериментом и в этом случае.

В качестве еще одно примера использования электронной теории Лоренца рассмотрим классическую теорию электропроводности металлов, предложенную П. Друде в 1900 году.

Будем считать, что в металлах имеется свободный электронный газ, причем электроны с частотой ν испытывают столкновения с ионами, образующими кристаллическую решетку. В случае, если внутри металла есть электрическое поле с напряженностью E , на свободные электроны действует ускоряющая сила $\vec{F} = e\vec{E}$, столкновения электронов с ионами может быть сведено к тормозящей силе, которая в предположении, что в результате столкновения электрон полностью потерял свою направленную ско-