

ЛЕКЦИЯ 16

Периодическая система химических элементов

Прежде чем рассматривать периодическую систему элементов, остановимся еще раз на некоторых особенностях атома водорода и водородоподобных атомов. На прошлой лекции было показано, что волновая функция водородоподобного атома может быть представлена в следующем виде:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi),$$

где $R(r)$ — радиальная часть волновой функции

$Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ — угловая часть волновой функции, характеризующая угловое распределение для задачи двух тел в любом центральном потенциале.

Радиальную волновую функцию удобно представить с помощью безразмерных параметров. Характерная атомная длина для водородоподобного атома определяется следующим образом:

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{\mu Ze^2},$$

и, следовательно, первый безразмерный параметр определяется следующим образом

$$\rho = \frac{r}{r_0}. \quad (16.1)$$

Характерная энергетическая единица равна

$$\varepsilon_0 = \frac{(Ze^2)^2 \mu}{\hbar^2},$$

поэтому энергия представляется с помощью следующего безразмерного параметра:

$$E = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}. \quad (16.2)$$

В обозначениях (16.1), (16.2) радиальная часть волновой функции водородоподобного атома имеет вид:

$$R(\rho) = N \rho^l e^{-\frac{\rho}{n}} \mathfrak{F}\left(-n_r; 2l + 2; \frac{2\rho}{n}\right),$$

где N — нормировочный коэффициент.

Вырожденная гипергеометрическая функция представляется степенным рядом:

$$\mathfrak{F}(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{1! \cdot \gamma} z + \frac{\alpha(\alpha + 1)}{2! \cdot \gamma(\gamma + 1)} z^2 + \dots$$

При целом отрицательном значении α этот ряд является конечным, что, в свою очередь, является условием получения связанных состояний в потенциальной яме.

Особенность уровней энергии атома водорода заключается в том, что существует вырождение: одинаковые уровни энергии могут получаться при разных квантовых числах. Потенциальная энергия для водородоподобного атома в кулоновском потенциале имеет вид:

$$V_{\text{эф}} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}.$$

При

$$l = 0$$

эффективный потенциал в точности равен кулоновскому. Вид этого потенциала представлен на рисунке 16.1.

При возникновении орбитального момента вид эффективного потенциала существенно меняется. Например, при

$$l = 1$$

эффективный потенциал представлен на рисунке 16.2: при малых r потенциал резко падает, а при больших r — растет к нулю.

При

$$l = 2$$

вид эффективного потенциала похож на предыдущий, однако, минимум будет наблюдаться при большем (меньшем по модулю) значении энергии (см. рис. 16.3).

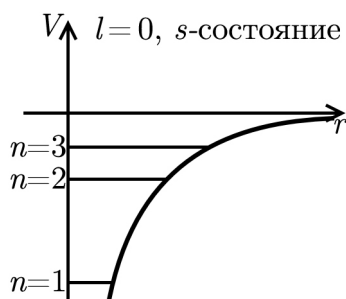


Рис. 16.1.

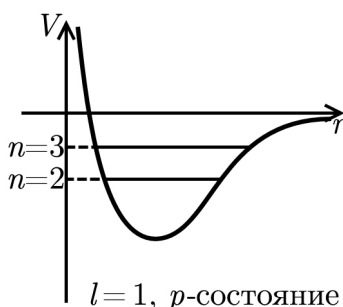


Рис. 16.2.

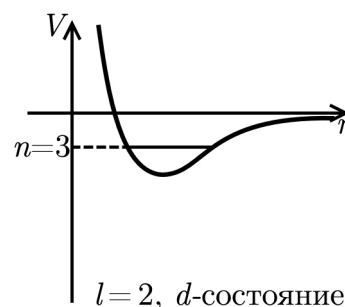


Рис. 16.3.

Нижний уровень энергии при нулевом значении момента количества движения представлен на рисунке 16.1. Обозначим величину

$$n = n_r + l + 1,$$

где n_r — номер уровня в каждой из потенциальных ям.

Состояние $n = 1$ может достигаться только в том случае, когда

$$l = 0, \quad n_r = 0.$$

Состояние $n = 2$ достигается в двух случаях:

$$n = 2 \Rightarrow \begin{cases} l = 0, & n_r = 1 \\ l = 1, & n_r = 0 \end{cases}$$

причем состояние с $n_r = 1$ — первый возбужденный уровень на рис 16.1, а уровень $n = 2, l = 1, n_r = 0$ — в точности совпадает с нижним уровнем на рисунке 16.2.

При $l = 1$ проекция m принимает три значения:

$$m = -1, 0, 1,$$

поэтому нижний уровень на рисунке 16.2 имеет кратность вырождения 3, с учетом спина этот уровень оказывается вырожден шестикратно.

При $n = 3$ возможны следующие состояния:

$$n = 3 \Rightarrow \begin{cases} l = 0, & n_r = 2 \\ l = 1, & n_r = 1 \\ l = 2, & n_r = 0 \end{cases}$$

Следовательно, уровень $n = 3$ будет наблюдаться на всех трех рисунках 16.1 – 16.3, причем на рисунке 16.3 он будет являться нижним уровнем.

Состояния с разным l в спектроскопии носят особые названия:

$$\begin{cases} l = 0 & \rightarrow & \text{s-состояние} \\ l = 1 & \rightarrow & \text{p-состояние} \\ l = 2 & \rightarrow & \text{d-состояние} \\ l = 3 & \rightarrow & \text{f-состояние} \end{cases}$$

Возвращаясь назад, хотелось бы отметить следующий интересный факт: при

$$l = 0$$

момент количества движения равен нулю.

В классической механике если частица вращается вокруг притягивающего центра, то ее орбитальный момент не может быть равен нулю.

В квантовой механике легко понять, почему в случае $l = 0$ электрон не падает на ядро, воспользовавшись соотношением неопределенностей.

Гамильтониан частицы в центральном поле имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}.$$

Выбрав некоторую ширину пакета Δr , получим

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta r}, \quad p \sim \Delta p.$$

Среднее значение гамильтониана в этом случае окажется равным:

$$\overline{\hat{H}} \geq \frac{\hbar^2}{2\mu(\Delta r)^2} - \frac{Ze^2}{\Delta r}, \quad (16.3)$$

вид которого представлен на рисунке 16.4.

Минимум этой функции будет достигаться при

$$r = r_0,$$

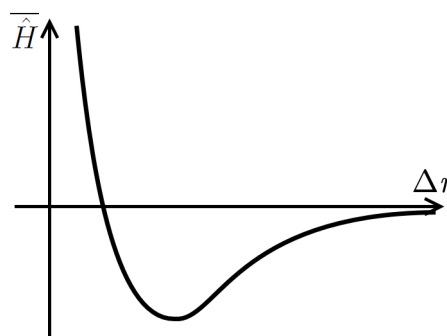


Рис. 16.4.

то есть на расстоянии, равном характерному атомному размеру.

Частица не может упасть на центр, поскольку при приближении к центру ее «кинетическая энергия» (первое слагаемое в (16.3)) стремится к бесконечности.

Таким образом, одна из особенностей квантовой механики заключается в том, что движение вокруг притягивающего центра возможно с нулевым орбитальным моментом.

Лекция 16. Периодическая система химических элементов

Рассмотрим спектр атома водорода. По оси y будем откладывать энергию, а по оси x — различные значения моментов (см. рис. 16.5).

Для удобства уровни энергии на рисунке 16.5 будем изображать не в масштабе, поскольку, на самом деле, первый уровень энергии при

$$l = 0$$

отличается от нижнего в четыре раза: его энергия по модулю в 4 раза меньше.

Кратность вырождения уровней обозначена под соответствующими нижними уровнями на рисунке 16.5. Например, кратность вырождения s -уровня равна 1, p -уровня — 3. Кратность вырождения d -уровня равна пяти, f -уровня — семи, и так далее.

Анализ спектра атома водорода позволяет понять таблицу Менделеева.

Предположим, что в атоме не существует взаимодействия электронов между собой — будем учитывать только взаимодействие электронов с ядром. В этом случае каждое из взаимодействий электрон — ядро будет представлять собой водородоподобный атом.

Существует также принцип запрета Паули, утверждающий, что в каждом состоянии не может находиться более одного электрона. С учетом спина, таким образом, на каждом уровне атома водорода может находиться два состояния.

Состояние водорода записывается в виде $1s$, где первое число обозначает значение n . Атом гелий записывается в виде $1s^2$, поскольку в состоянии $1s$ находятся два электрона (см. рис. 16.7)

У атома лития Li имеется один электрон сверх первой заполненной оболочки, то есть его можно записать так: $1s^2 2s$. У атома бериллия Be таких электронов два, поэтому его состояние записывается в виде $1s^2 2s^2$ или, для краткости, $2s^2$.

Атом бора B находится в p состоянии, поэтому его состояние может быть записано в следующем виде: $s^2 p$. Состояние атома углерода C записывается в виде $s^2 p^2$ и так далее до неона, состояние которого записывается в виде $s^2 p^6$.

Таким образом, у атома неона два электрона находятся на s уровне и шесть — в p -оболочке, имеющей, как было показано ранее, кратность вырождения равную шести. Следовательно, у атома неона Ne p -оболочка заполнена.

Этому соответствуют s и p -состояния при $n = 2$ на рисунке 16.6 (I период таблицы Менделеева).

При $n = 3$ второму периоду таблицы Менделеева соответствуют s и p -состояния при $n = 3$ на рисунке 16.6 (II период таблицы Менделеева).

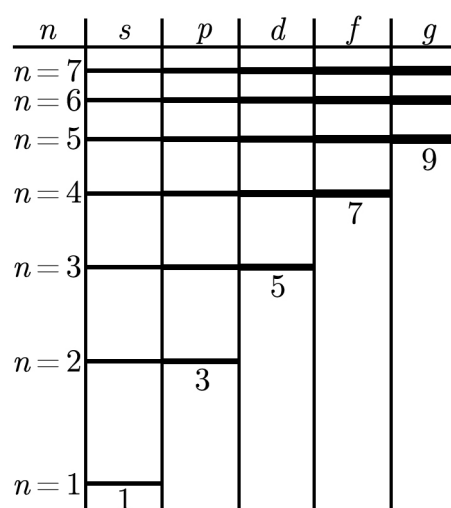


Рис. 16.5.

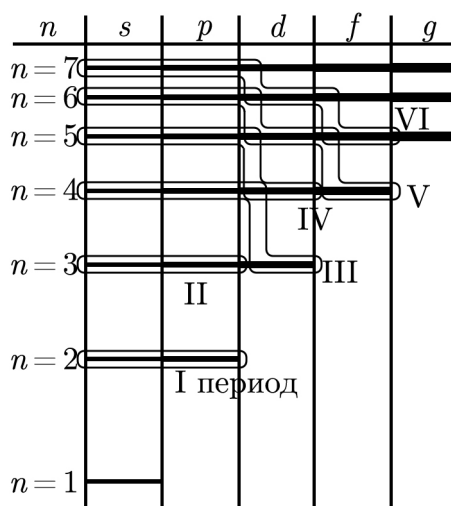


Рис. 16.6.

n	s	s^2	s^2p	s^2p^2	s^2p^3	s^2p^4	s^2p^5	s^2p^6	
$n=1$	H							He	2
$n=2$	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	8
$n=3$	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	8
$n=4$	K	Ca	$3d$ оболочка – группа железа Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni						18
	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
$n=5$	Rb	Sr	$4d$ оболочка – группа палладия Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd						18
	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	J	Xe	
$n=6$	Cs	Ba	$4f$	$5d$ оболочка – группа платины Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt					32
	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	

Рис. 16.7. Периодическая система химических элементов

Казалось бы, $3d$ состояние также должно быть заполнено. Однако, учитывая взаимодействие электронов между собой, в d -состоянии вблизи ядра радиальная часть волновой функции ведет себя как r^l .

Если $l = 2$, то радиальная часть волновой функции вблизи нуля ведет себя как r^2 . Если же $l = 0$, то радиальная волновая функция не обращается в ноль при малых расстояниях от ядра.

Следовательно, следующее $4s$ -состояние находится ближе к ядру (притягивается сильнее), и, следовательно, оказывается ниже по энергии.

Поэтому заполнение уровней идет следующим образом: сначала заполняется s -оболочка уровня $n = 4$, затем d -оболочка уровня $n = 3$, и только после этого p -оболочка уровня $n = 4$, что соответствует III периоду таблицы Менделеева (см. рис. 16.6).

Таким образом, после калия K и кальция Ca с состояниями, соответственно, $4s$ и $4s^2$, сначала заполняется $3d$ -оболочка — группа железа. Всего в этой группе

$$5 \cdot 2 = 10 \text{ элементов.}$$

Элементы этой группы имеют сходные химические свойства, поскольку химические свойства одинаковы, когда похожи внешние электронные оболочки.

В первую и вторую группу следующего ряда попадают медь Cu и цинк Zn, а затем располагаются шесть элементов, у которых заполняется $4p$ -уровень: Ga (галлий), Ge (германий), As (астат), Se (селен), Br (бром) и Kr (криптон).

При $n = 5$ на уровне снова будут присутствовать 18 элементов, соответствующих заполнению $5s$, $4d$ и $5p$ подуровней, соответствующих IV периоду таблицы Менделеева.

Один из элементов этого периода — рутений Ru был впервые открыт в Казани и назван в честь латинского названия России.

Завершается $4d$ -оболочка серебром Ag и кадмием Cd. В основной $5p$ -оболочке опять расположено шесть элементов — In (индий), Sn (олово), Sb (сурьма), Te (теллур), I (йод) и Xe (ксенон).

В следующем периоде, при $n = 6$, будут заполняться последовательно $6s$, $4f$, $5d$ и $6p$ подуровни (V период на рисунке 16.6). Напомним, что в f -оболочке может содержаться не более 14 электронов, которые в случае $4f$ оболочки образуют группу редкоземельных элементов.

Таким образом, после цезия Cs и бария Ba располагается четырнадцать редкоземельных элементов (лантаноидов), а после них — 10 элементов группы платины.

После этого незаполненным остается только $6p$ -оболочка, последним элементом которой является радон Rn. Таким образом, всего в шестом периоде располагается

$$2 + 2 \cdot 7 + 10 + 6 = 32 \text{ элемента.}$$

Следующая оболочка при $n = 7$ (VI период таблицы Менделеева (см. рис. 16.7)) заполняется аналогично пятому периоду — сначала заполняется $7s$, $5f$, $6d$ и только затем — $7p$ оболочка. Таким образом, число элементов в этом периоде равно 32, как и в прошлом периоде.

Таким образом, последний элемент в этом периоде имеет атомный номер 118. Этот элемент был синтезирован в Дубне, то есть седьмой период таблицы Менделеева полностью заполнен. Некоторые элементы, например дубний Db, флеровий Fl были синтезированы в Дубне.

Итак, простое рассмотрение атома водорода позволяет понять всю периодическую систему химических элементов.

Рассмотрим теперь отдельные состояния, прежде всего — основное состояние. Исходя из квантовых чисел, волновая функция атома водорода обычно обозначается следующим образом:

$$\Psi = \Psi_{n,l,m}, \quad (16.4)$$

где n — главное квантовое число.

Если бы рассматривалось не кулоновское центральное поле, а любое другое, то естественно было бы считать, что энергия зависела бы от радиального квантового числа и величины орбитального момента:

$$E = E_{n,l}.$$

Зависимости энергии от m не наблюдается, поскольку центральное поле обладает сферической симметрией.

Поскольку в атоме водорода энергия определяется главным квантовым числом, а не радиальным

$$n = n_r + l + 1,$$

то обозначения вводятся именно как в выражении (16.4).

Рассмотрим нижнее состояние с волновой функцией $\Psi_{1,0,0}$ которая определяется следующим образом:

$$\Psi_{1,0,0} = ce^{-\rho}.$$

Нормируя эту волновую функцию, получим:

$$|c|^2 \int_0^\infty e^{-2\rho} \rho^2 d\rho \cdot 4\pi = 1. \quad (16.5)$$

Полезно запомнить следующий прием, известный из курса математического анализа. Многие интегралы легко вычислять, пользуясь гамма-функцией Γ .

По определению, гамма функция определяется следующим образом:

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt,$$

причем

$$\Gamma(z+1) = z!, \quad z \in \mathbb{Z}.$$

Приведем интеграл (16.5) к Γ -функции. Введя обозначение

$$2\rho = t,$$

вычислим этот интеграл:

$$|c|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\rho} \rho^2 d\rho \cdot 4\pi = 4\pi |c|^2 \int_0^{\infty} e^{-t} \cdot \frac{1}{8} t^2 dt = \frac{\pi}{2} |c|^2 \cdot 2! = \pi |c|^2 = 1.$$

Следовательно, волновая функция, отвечающая основному состоянию, имеет следующий вид:

$$\Psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\rho}.$$

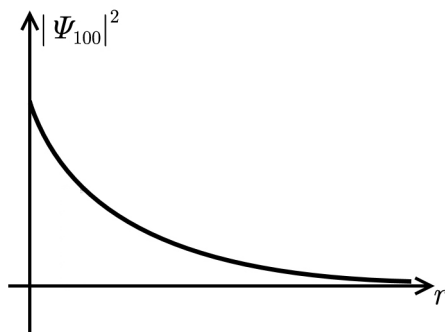


Рис. 16.8.

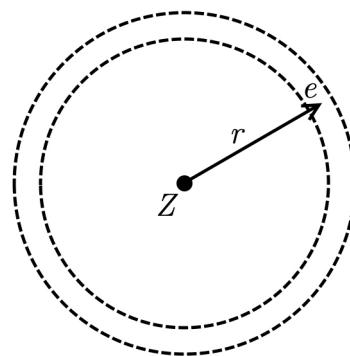


Рис. 16.9.

Пользуясь размерными (не приведенными) координатами, получим следующий вид волновой функции основного состояния:

$$\Psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}, \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu Z e^2}.$$

Зависимость плотности вероятности $|\Psi_{1,0,0}|^2$ от расстояния r представлена на рисунке 16.8. Вычислим вероятность обнаружить электрон на расстоянии r от ядра (см. рис. 16.9).

Эта вероятность определяется следующим соотношением:

$$dW = |\Psi|^2 \cdot 4\pi r^2 dr.$$

Плотность вероятности $\eta(r)$ в этом случае оказывается пропорциональной следующему выражению:

$$\eta(r) \sim e^{-\frac{2r}{a}} r^2,$$

и, следовательно,

$$dW = \eta(r) dr.$$

Величина $\eta(r)$ при малых расстояниях растет как r^2 (участок I на рисунке 16.10), а при больших — экспоненциально падает, чему соответствует участок II на рисунке 16.10.

Следовательно, в некоторой точке между этими областями функция $\eta(r)$ принимает максимальное значение. Продифференцировав плотность вероятности, получим:

$$\eta'(r) \sim 2re^{-\frac{2r}{a}} + \left(-\frac{2}{a}\right)r^2e^{-\frac{2r}{a}} = re^{-\frac{2r}{a}} \left(2 - \frac{2r}{a}\right).$$

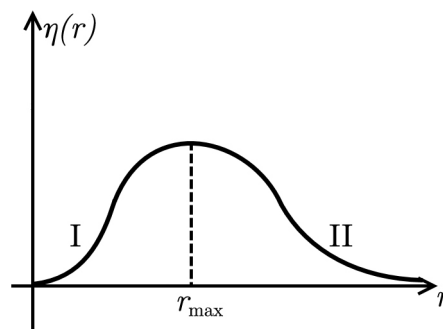


Рис. 16.10.

Следовательно, функция $\eta(r)$ принимает максимальное значение в точке, где ее производная равна нулю:

$$\eta'(r) = 0 \Rightarrow r_{max} = a.$$

Таким образом, вероятность встретить электрон на расстоянии порядка характерного размера a — наибольшая.

Вырождение уровней энергии, которое имеет место для водорода, иногда называется случайным вырождением. В действительности, оно не случайно и связано с определенной симметрией кулоновского взаимодействия, что было показано В.А. Фоком. Это вырождение приводит к некоторым физическим следствиям.

Угловая часть волновой функции $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ имеет определенную четность, которая определяется следующим соотношением:

$$C = (-1)^l.$$

Ранее говорилось, что операторы момента количества движения и инверсии коммутируют между собой, поэтому состояние с определенным моментом количества движения должно иметь некоторую четность. Угловая часть волновой функции имеет следующий вид:

$$Y_{l,m} \sim e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos \theta), \quad (16.6)$$

где $P_l^{|m|}$ — присоединенный полином Лежандра.

Рассмотрим действие оператора инверсии в сферической системе координат (см. рис. 16.11). Пусть есть некоторый радиус-вектор \vec{r} . При инверсии относительно начала координат

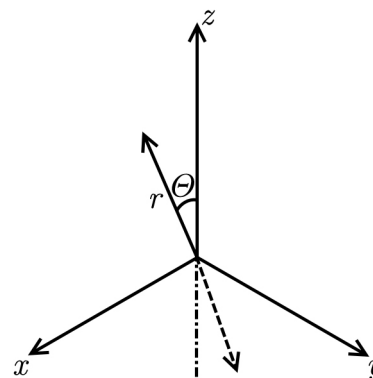


Рис. 16.11.

$$\begin{cases} \theta \rightarrow \pi - \theta \\ \varphi \rightarrow \varphi + \pi \end{cases}$$

При такой замене

$$e^{im\varphi} \rightarrow e^{im\varphi} \cdot e^{im\pi}, \quad \cos \theta \rightarrow -\cos \theta.$$

Присоединенный полином Лежандра — полином степени

$$(\cos \theta)^{l-|m|}.$$

Следовательно, волновая функция (16.6) примет следующий вид:

$$Y_{l,m}^{\text{инв}} = e^{im\pi} (-1)^{l-|m|} Y_{l,m} = (-1)^m \cdot (-1)^{l-|m|} = (-1)^{l+m-|m|}.$$

Поскольку

$$m - |m| = \begin{cases} 0, & m \geq 0 \\ -2, & m < 0. \end{cases} \Rightarrow (-1)^{m-|m|} = 1.$$

Следовательно, после применения оператора инверсии

$$Y_{l,m}^{\text{инв}} = (-1)^l Y_{l,m},$$

то есть ее четность действительно равна $(-1)^l$.

На рисунках 16.1–16.2 уровни энергии при

$$n \geq 2$$

совпадают, хотя на рисунке 16.1 момент количества движения l равен нулю, а на рисунке 16.2 момент количества движения равен единице.

Следовательно, возможна суперпозиция двух состояний с одной и той же энергией. Это означает, что такое состояние не будет иметь определенной четности.

При рассмотрении четности было показано, что если состояние невырождено, то четность запрещает существование дипольного момента. В случае возбужденных уровней атома водорода в результате суперпозиции состояний может возникнуть дипольный момент.

Следовательно, если атом водорода находится в электромагнитном поле, направленном, например, по оси z , то уровень $2s$ и уровень $2p_0$ могут смешиваться

$$2s \pm 2p_0,$$

где индекс 0 определяет значение проекции на ось z .

В результате, возникающий дипольный момент и Штарковское расщепление будут линейны по полю.

Если при рассмотрении атома в электромагнитном поле смешения состояний не происходит, то под влиянием поля в атоме происходит смещение зарядов, пропорциональное полю и, следовательно, возникает дипольный момент с которым, в свою очередь, взаимодействует поле.

Следовательно, эффект смещения квадратичен по полю, а в случае атома водорода эффект Штарка —линеен по полю.

Рассмотрим теперь состояния, когда

$$n = 2,$$

то есть возможны состояния $\Psi_{2,0,0}$, $\Psi_{2,1,0}$, $\Psi_{2,1,1}$.

Волновая функция $\Psi_{2,1,1}$ находится в нижнем состоянии с орбитальным моментом единица, поэтому

$$n_r = n - l - 1 = 2 - 1 - 1 = 0.$$

Следовательно, с точностью до нормировки волновая функция имеет следующий вид:

$$\Psi_{2,1,1} \sim \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} \mathfrak{F}\left(0, 2l + 2, \frac{2\rho}{n}\right) Y_{1,1} = \rho e^{-\frac{\rho}{2}} \sin \theta e^{i\varphi}. \quad (16.7)$$

Чтобы записать функцию $\Psi_{2,1,-1}$, необходимо изменить знак при φ в выражении (16.7):

$$\Psi_{2,1,-1} \sim \rho e^{-\frac{\rho}{2}} \sin \theta e^{-i\varphi}.$$

Рассмотрим теперь вид волновой функции $\Psi_{2,1,0}$. Радиальная функция в этом случае, очевидно, не изменится, поэтому с точностью до нормировки:

$$\Psi_{2,1,0} \sim \rho e^{-\frac{\rho}{2}} \cos \theta.$$

Волновая функция $\Psi_{2,0,0}$ имеет следующий вид:

$$\Psi_{2,0,0} \sim e^{-\frac{\rho}{2}} \mathfrak{F}(-1, 2, \rho) \sim e^{-\frac{\rho}{2}} \left(1 - \frac{1}{2}\rho\right).$$

Поскольку этой волновой функции соответствует второй уровень в потенциальной яме с $l = 0$, то, очевидно, у волновой функции будет существовать один ноль (см. рис. 16.12).

Рассмотрим теперь состояния с очень большими значениями n — Ридберговские состояния. При очень больших n энергия уровней приближается к нулю и, следовательно, легко показать, что в этом случае длина волны де-Бройля движущейся частицы будет существенно меньше диаметра орбиты. В этом случае движение будет близко к классическому.

Следовательно, рассмотрев классическое движение в центральном поле, можно установить некоторую связь с квантовыми явлениями.

В классическом случае энергия вращающейся частицы имеет следующий вид:

$$E = \frac{\mu \dot{r}^2}{2} + \left(-\frac{Ze^2}{r} + \frac{L^2}{2\mu r^2}\right). \quad (16.8)$$

Поскольку рассматриваются связанные состояния, у которых

$$E < 0,$$

то, следовательно, в формуле (16.8) можно заменить

$$E \rightarrow -|E| \quad \Rightarrow \quad -|E| = \frac{\mu \dot{r}^2}{2} + \left(-\frac{Ze^2}{r} + \frac{L^2}{2\mu r^2}\right).$$

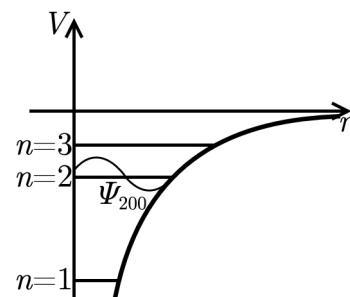


Рис. 16.12.

В этом случае движение представляет собой эллипс (см. рис. 16.13), в одном из фокусов которого находится центральный потенциал (начало сферической системы координат).

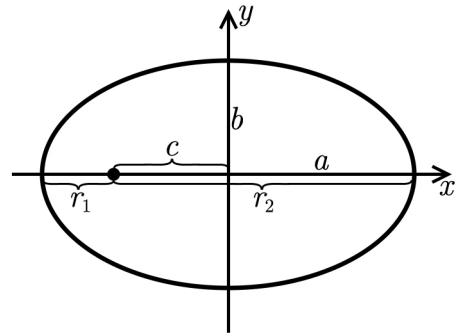
Чтобы вычислить величины r_1 и r_2 , положим в формуле (16.8)

$$\dot{r} = 0.$$

В этом случае уравнение (16.8) примет следующий вид:

$$|E|r^2 - Ze^2r + \frac{L^2}{2\mu} = 0.$$

Рис. 16.13.



Это уравнение можно записать следующим образом, поделив левую и правую часть на $|E|$:

$$r^2 - \frac{Ze^2}{|E|}r + \frac{L^2}{2\mu|E|} = 0. \quad (16.9)$$

Решая это квадратное относительно r уравнение, легко найти величины r_1 и r_2 :

$$r_1 = \frac{Ze^2}{2|E|} - \sqrt{\frac{Z^2e^4}{|E|^2} - \frac{2L^2}{\mu|E|}}, \quad r_2 = \frac{Ze^2}{2|E|} + \sqrt{\frac{Z^2e^4}{|E|^2} - \frac{2L^2}{\mu|E|}}.$$

В этом случае легко получить величину большой полуоси эллипса:

$$2a = r_1 + r_2 = \frac{Ze^2}{|E|} \Rightarrow a = \frac{Ze^2}{2|E|}. \quad (16.10)$$

Можно заметить, что, не решая квадратное уравнение (16.9), длину большой полуоси эллипса легко найти, поскольку по теореме Виета сумма корней квадратного уравнения равна с обратным знаком коэффициенту при r :

$$a = \frac{r_1 + r_2}{2} = -\frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{Ze^2}{|E|}\right) = \frac{Ze^2}{2|E|}.$$

Таким образом, величина большой полуоси не зависит от величины момента, а определяется только энергией. Свободный член в уравнении (16.9), согласно теореме Виета, равен произведению корней. Поскольку

$$r_1 = a - c, \quad r_2 = a + c,$$

где a — длина большой полуоси,

c — расстояние от центра до фокуса (см. рис. 16.13).

Следовательно, произведение корней примет вид:

$$r_1r_2 = (a - c)(a + c) = a^2 - c^2 = b^2 = \frac{L^2}{2\mu|E|}, \quad (16.11)$$

где b — длина малой полуоси эллипса.

Для больших орбит движение, таким образом, оказывается почти классическое. Подставляя в (16.10) выражения для уровней энергии водородоподобного атома, получим:

$$a = \frac{Ze^2}{2|E|} = \frac{Ze^2}{2 \frac{(Ze^2)^2 \mu}{2\hbar^2 n^2}} = \frac{\hbar^2}{\mu Ze^2} n^2 = a_0 n^2,$$

где a_0 — боровский радиус.

Таким образом, длина большой полуоси эллипса пропорциональна n^2 . Состояния с большими значениями n , которые впервые наблюдал Ридберг, сейчас наблюдаются при

$$n \sim 200.$$

Таким образом, если для водорода боровский радиус

$$a_B = 0,5 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$

то длина большой полуоси окажется порядка

$$a \sim 10^{-4} \text{ см}.$$

Обычно эти состояния не наблюдаются, поскольку в атмосфере при определенном давлении атом не может «вырасти» до подобных состояний. Однако в радиодиапазоне переходы между уровнями ридберговского атома наблюдаются в космосе.

С помощью мазеров можно изучать ридберговские состояния в вакууме. Величина b^2 , согласно (16.11), определяется следующим образом:

$$b^2 = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu \frac{(Ze^2)^2 \mu}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}} = \frac{\hbar^4}{\mu^2 (Ze^2)^2} \cdot n^2 l(l+1) = a_0^2 n^2 l(l+1).$$

Предположим, что величина орбитального момента велика:

$$l \gg 1.$$

В этом случае

$$l(l+1) = l^2 + l = l^2 + l + \frac{1}{4} - \frac{1}{4} = \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{1}{4} \approx \left(l + \frac{1}{2}\right)^2.$$

Следовательно, величина малой полуоси определяется следующим образом:

$$b \simeq a_0 n \left(l + \frac{1}{2}\right).$$

Поскольку всегда

$$l \leq n - 1,$$

то малая полуось b будет примерно равна большой, когда

$$l = n - 1.$$

При этом значении орбитального момента эллипс практически превратится в окружность:

$$a \Big|_{l=n-1} = a_0 n^2, \quad b \Big|_{l=n-1} = a_0 n \left(n - \frac{1}{2}\right).$$

Таким образом, состояния с

$$l = n - 1$$

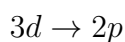
называются круговыми состояниями.

При захвате электрона протоном на высокие орбиты переход происходит именно по круговым состояниям (см. рис. 16.14).

Пример 16.1. Используя переходы по круговым состояниям в водородоподобных атомах средних элементов, планировалось создать рентгеновский лазер.

Предполагалось, что в результате взрыва атомной бомбы в образовавшейся плазме будут захватываться электроны и наблюдаться переходы по круговым орбитам.

Переход



в этом случае может попадать в рентгеновскую область.

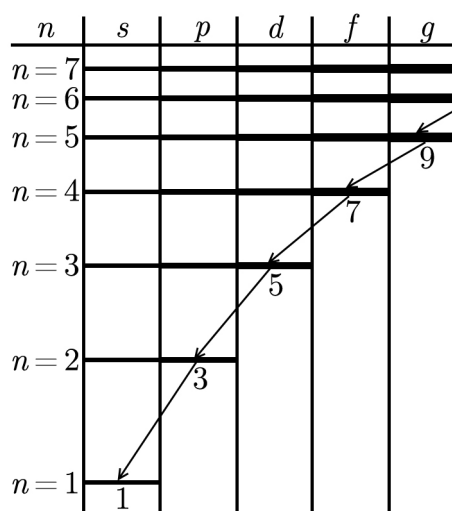


Рис. 16.14.

Рассмотрим теперь различные водородоподобные атомы. Частица



называется позитроний.

Если позитроний «влетает» в вещество, то от него может оторваться электрон, что приведет к образованию связанного состояния. В этой задаче двух тел приведенная масса в два раза меньше массы электрона:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_e} = \frac{2}{m_e} \Rightarrow \mu = \frac{m_e}{2}.$$

Следовательно, энергия связи окажется в два раза меньше энергии связи атома водорода, то есть будет примерно равна

$$E \approx 6,7 \text{ эВ}.$$

Позитроний может находиться в двух состояниях — с сонаправленными спинами (ортопозитроний) и противоположно направленными (парапозитроний). Состояния с антипараллельными спинами имеет положительную C -четность и может распадаться на два фотона, каждый из которых имеет энергию примерно равную 0,5 МэВ (см. рис. 16.15).

В наше время удается наблюдать эти фотоны в космосе. Множество позитронных монохроматических линий возникает из-за того, что при взрыве сверхновых звезд возникает радиоактивный алюминий с малой энергией, который испускает позитроны. Впоследствии эти позитроны захватываются электронами.

Ортопозитроний, в свою очередь, распадается на три фотона, от которых в космосе также наблюдается некоторый фон (см. рис. 16.15).

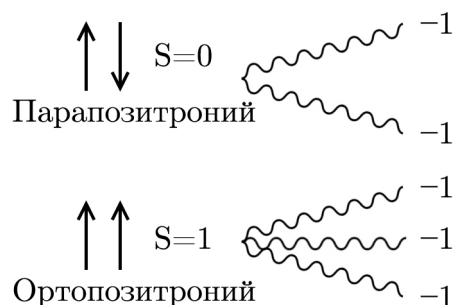


Рис. 16.15.

Пусть есть два μ -мезона

$$\mu^+, \quad \mu^-,$$

с массой примерно в 200 раз больше массы электрона:

$$\mu = 200m_e$$

и временем жизни

$$\tau \sim 2 \cdot 10^6 \text{ сек.}$$

Возможно существование частицы μ^+e^- , которая представляет собой модель протона, поскольку в дальнейшем мю-мезона распадается следующим образом:

$$\mu^+ \rightarrow e^+ + \tilde{\nu}_\mu + \nu_e,$$

причем направление e^+ указывает на направление спина μ^+ .

В веществе поведение мюониевых атомов при наблюдении угловой симметрии может показать, например, скорость реакции при присоединении протона к тому или иному химическому соединению.

С помощью мюониевых атомов можно изучать сверхпроводящие вихри — вихри Абрикосова.

В результате наблюдений за мюониевыми атомами возникла μSR -теория, основатели которой — Белоусов Юрий Михайлович, прочитавший прошлую лекцию, и его научный руководитель профессор Смилга Вольдемар Петрович.

Водородоподобный атом также может иметь вид μ^-Z . Изучая γ -кванты, возникающие при переходах в атомах μ^-Z , можно с большой точностью измерить массу μ -мезона.

Рассмотрим атомы, состоящие из μ^- -мезона и атома водорода (или его изотопов):

$$\mu^-p, \quad \mu^-d, \quad \mu^-t.$$

Размер этих атомов примерно в 200 раз меньше размера обычных атомов, то есть

$$a_B(\mu) \sim 2,5 \cdot 10^{-11} \text{ см,}$$

однако они являются нейтральными.

В результате образующийся атом может свободно двигаться внутри вещества, проникая в оболочки атомов и приближаясь к другим ядрам. При этом наблюдается интересное явление, на возможность которого впервые указал Я.Б. Зельдович и, независимо, А.Д. Сахаров.

Представим, что μ^-d атом оказался вблизи атома водорода (см. рис. 16.16). Когда атом μ^-d подходит близко к протону, они объединяются, отдавая энергию в виде вылетающего электрона, в результате чего образуется молекулярный ион

$$p\mu d.$$

Протон и дейтрон в этом соединении находятся на расстоянии порядка 10^{-11} см, поэтому вероятность проникновения через барьер довольно велика. В этом случае может произойти следующая реакция:

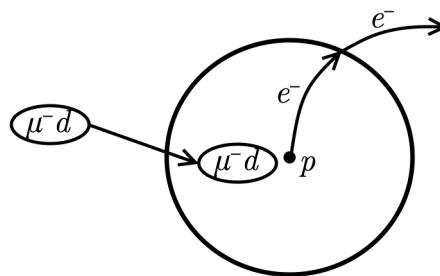
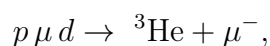


Рис. 16.16.

или, например, следующая:



В дальнейшем μ -мезон снова мог бы захватить дейтрон и, снова приблизившись к протону, вызвать подобную реакцию.

С.С. Герштейном совместно с Л.И. Пономаревым было обнаружено, что для молекулы тритий-мезон-дейтрон



возникает резонансный эффект, в результате чего подобный эффект с этой молекулой имеет гораздо большую интенсивность, чем с молекулой $p\mu d$.

Также было обнаружено, что в этом случае в веществе один μ -мезон может вызвать более ста реакций катализа:



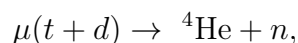
в результате чего освобождается μ -мезон для новых реакций.

Это предположение было подтверждено на опыте: за одну микросекунду происходило более ста реакций. Это явление могло бы решить проблему ядерного синтеза.

Пусть для производства μ -мезона с энергией 100 МэВ на ускорителе необходима энергия 10 ГэВ. В этом случае при тысяче реакций от каждого μ -мезона в каждой из тысячи реакций возникал бы быстрый нейтрон.

Если окружить эту систему ураном или торием, то каждый быстрый нейтрон мог бы вызвать деление, в результате чего число нейтронов увеличивалось бы. Каждый синтез дейтерий-трития мог бы вызвать образование пяти атомов плутония, энергия деления которого в реакторе атомной АЭС составляет около 200 МэВ.

Следовательно, возможен 10–20-кратный выигрыш по энергии, что позволило бы осуществлять синтез при низких температурах. К сожалению, этот эффект не осуществим, поскольку в случае, если реакция (16.12) происходит в присутствии μ -мезона



то в примерно 50% случаев μ -мезон «прилипает» к ${}^4\text{He}$ и выводится из реакции, поскольку $\text{He}\mu$ — нейтральная частица.

Последние данные, полученные в ЦЕРНе, содержат наблюдения за атомами



В этом случае захват происходит на очень высокие круговые орбиты и, постепенно опускаясь, антипротон \tilde{p} может существовать в веществе довольно длительное время. Изучение этих переходов позволило с высокой точностью определить массу антипротона — она оказалась совпадающей с массой протона, что и было предсказано теоретически.

При наблюдении взрыва сверхновой были обнаружены ядра железа с одним электроном — остальные 27 были удалены. Это позволило утверждать, что температура при взрыве сверхновой звезды должна быть достаточна, чтобы вызвать такую ионизацию атома — то есть порядка 10^{10} К.