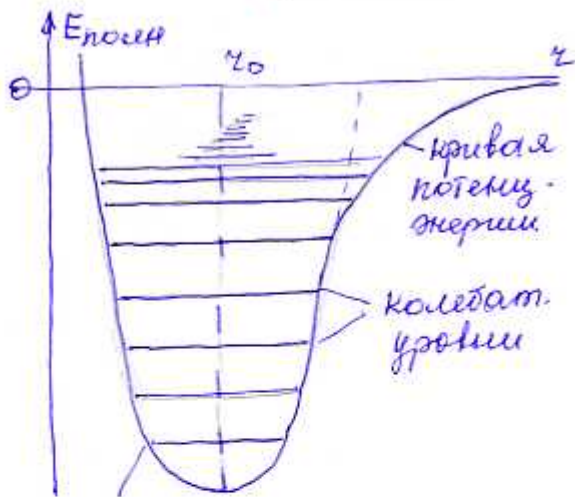


Методические указания к решению
задач по теме 8 модуля.

Для студентов изучающих физику 4 семестра.

О молекулах (двухатомных)



Минимальная колебательная энергия молекулы (при $v=0$)

$$E_{\min} = \frac{\hbar \omega_0}{2}$$

(рис. 1)

На рисунке энергетическая схема, описывающая распределение энергии (полной) молекулы в основном состоянии.

Кривая потенциальной энергии определяется состоянием электронной конфигурацией молекулы. ($E_{эл. конф}$)
 z_0 - равновесное расстояние между ядрами молекулы.

Колебательные уровни - значения колебательной энергии молекулы. ($E_{кол}$)
 Так как молекулы колеблются и вращаются одновременно, то, естественно, существуют так называемые вращательные уровни энергии, которые на такой схеме располагаются между колебательными уровнями энергии. ($E_{вращ}$)

Полная энергия молекулы описывается вращением:

$$E_{\text{полн}} = E_{\text{эл. конф}} + E_{\text{кол}} + E_{\text{вращ}} \quad (E_{\text{эл. конф}} > E_{\text{кол}} > E_{\text{вращ}})$$

где: $E_{\text{кол}} = \hbar \omega_0 \left(v + \frac{1}{2} \right) \cdot [1 - x \left(v + \frac{1}{2} \right)]$ - в общем случае. (*)
 v - колебательное квантовое число - $v = 0, 1, 2, \dots$
 x - коэффициент асимметрии (о нем позже)

$$E_{\text{вращ}} = \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1) \quad (**)$$

I - момент инерции молекулы
 j - вращательное квантовое число - $j = 0, 1, 2, \dots$

$$I = \mu d^2, \text{ где } \mu - \text{приведенная масса } \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

d - расстояние между атомами в двухатомной молекуле.

При изменении энергетического состояния, ^(молекулы) молекулы излучают (и поглощают) так называемые комбинационные спектры молекул.

По типу эти спектры делятся на:

- 1) Электронно-колебательные
- 2) Колебательно-вращательные
- 3) Вращательные

1) Возникают при изменении электронной конфигурации молекул. Поскольку задач на эту тему в оле не предполагается, рассматривать их мы не будем.

2) В области, где кривая потенциальной энергии (рис.) представляет собой параболу (т.е. при малых значениях колебательного квантового числа - v) молекула ведет себя как гармонический осциллятор, и, уровни колебательной энергии располагаются на одинаковом энергетическом расстоянии.

Значения энергии этих уровней описывается выражением

$$E_{\text{кол}} = \hbar \omega_0 \left(v + \frac{1}{2} \right), \text{ (V) где разность между}$$

этими состояниями есть величина постоянная и равна, естественно; (энергия излучения или погл.)

$$\Delta E_{\text{кол}} = \hbar \omega_0, \text{ где } \omega_0 - \text{собственная частота колебаний и является характеристикой молекулы.}$$

Там, где кривая потенциальной энергии перестает совпадать с параболой, колебательные уровни смещаются и выражение (V) преобразуется в выражение (*).
Выражение (*) позволяет рассчитать распределение энергетических состояний молекулы при больших значениях колебательного квантового числа.

3) Вращательные уровни располагаются между колебательными, при этом интервал между значимыми жерми растет с увеличением вращательного квантового числа на одну и ту же величину, называемую жерметическим смещением вращательных уровней и равная:

$$\Delta E_{\text{вращ.}} = \frac{\hbar^2}{I} \quad \text{— эта величина постоянна для каждой молекулы, зависит от её момента инерции и не зависит от квантового числа } j.$$

Схема распределения вращательных уровней жерми

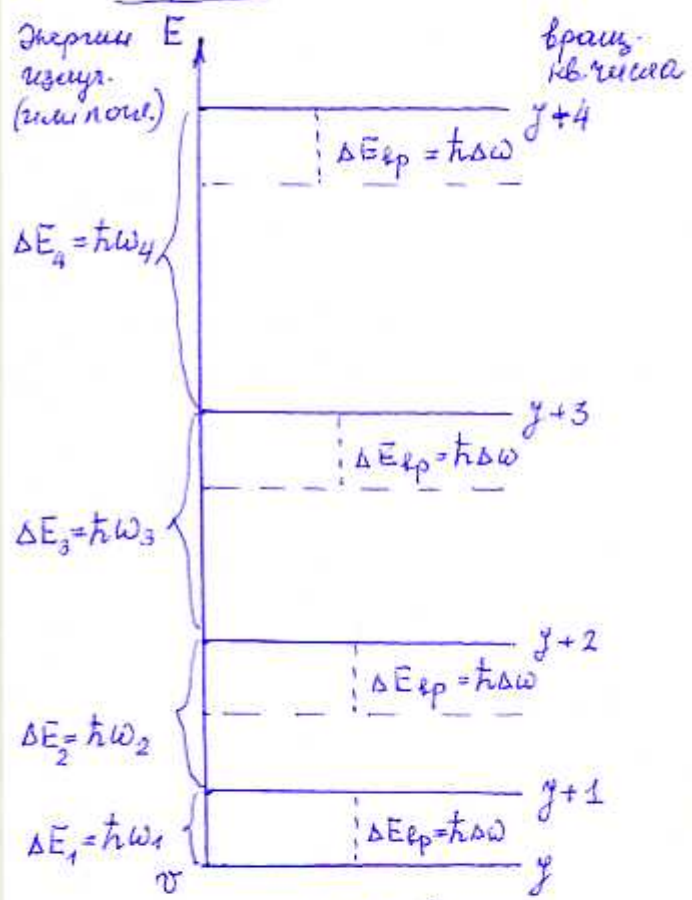


рис. 2.

В общем случае вывод выражения для $\Delta E_{\text{вращ.}}$:

по схеме рис. 2 жерми вращательных уровней:

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1) \\ E_2 &= \frac{\hbar^2}{2I} (j+1)(j+2) \\ E_3 &= \frac{\hbar^2}{2I} (j+2)(j+3) \end{aligned} \right\} \text{ тогда}$$

$$\left. \begin{aligned} \Delta E_1 &= \frac{\hbar^2}{2I} (j+1)(j+2-j) = \frac{\hbar^2}{I} (j+1) \\ \Delta E_2 &= \frac{\hbar^2}{2I} (j+2)(j+3-j-1) = \frac{\hbar^2}{I} (j+2) \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

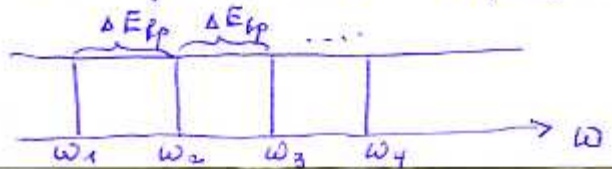
$$\Rightarrow \Delta E_{j,j+1} = \Delta E_2 - \Delta E_1 = \frac{\hbar^2}{I} (j+2-j-1) = \frac{\hbar^2}{I}$$

Если учесть, что жерми излучения $\Delta E = \hbar\omega$, то

$$\Delta E_{j,j+1} = \hbar\omega_2 - \hbar\omega_1 = \hbar(\omega_2 - \omega_1) = \hbar\Delta\omega = \frac{\hbar^2}{I} \quad \text{и}$$
$$\Delta\omega = \frac{\hbar}{I}$$

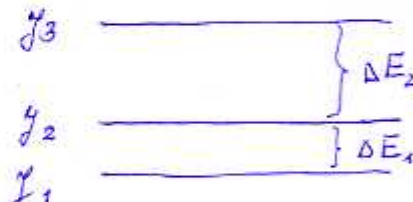
Более простой вывод этого выражения можно сделать учитывая численные значения вращательного квантового числа.

$$\left. \begin{aligned} \text{Если } j=0, \text{ то } E_{1 \text{ вращ.}} &= 0 \\ \text{— или } j=1, \text{ то } E_{2 \text{ вращ.}} &= \frac{\hbar^2}{I} \end{aligned} \right\} \Delta E_1 = \frac{\hbar^2}{I} \text{ и равна } = \hbar\omega_1$$



Примеры решения задач по молекулам.

Задача 1. Для двухатомной молекулы известны интервалы между тремя последовательными вращательными уровнями энергии $\Delta E_1 = 0,2 \text{ мэВ}$ и $\Delta E_2 = 0,3 \text{ мэВ}$.
Найти вращательную энергию среднего уровня.

$\left. \begin{array}{l} \Delta E_1 = 0,2 \text{ мэВ} \\ \Delta E_2 = 0,3 \text{ мэВ} \\ \hline E_{(j_2)} = ? \end{array} \right\}$	<p>Пусть:</p> 	<p>Обозначим:</p> $\begin{aligned} j_3 &\equiv j+1 \\ j_2 &\equiv j \\ j_1 &= j-1 \end{aligned}$	<p>тогда надо найти <u>энергию</u> уровня с кв. квантом <u>j</u></p>
---	---	--	--

При наших обозначениях энергии вращательных уровней определяются:

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= \frac{\hbar^2}{2I} (j-1)j \\ E_2 &= \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1) \\ E_3 &= \frac{\hbar^2}{2I} (j+1)(j+2) \end{aligned} \right\} \text{отсюда}$$

$$\Delta E_1 = E_2 - E_1 = \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1 - j+1) = \frac{\hbar^2}{I} j \quad (1)$$

$$\Delta E_2 = E_3 - E_2 = \frac{\hbar^2}{2I} (j+1)(j+2 - j) = \frac{\hbar^2}{I} (j+1) \quad (2)$$

Для того, чтобы найти E_2 надо знать j ; $j+1$; $\frac{\hbar^2}{I}$

Из равенства (1) найдем $j = \frac{\Delta E_1 I}{\hbar^2}$

Из равенства (2) найдем $j+1 = \frac{\Delta E_2 I}{\hbar^2}$

$\frac{\hbar^2}{I}$ - смещение вращательных уровней $\Delta E_{\text{вр}} = \Delta E_2 - \Delta E_1 = \frac{\hbar^2}{I}$
(смотри теорию впереди),

тогда $E_2 \equiv E_{(j_2)} = \frac{\hbar^2}{2I} \cdot \frac{\Delta E_1 I}{\hbar^2} \cdot \frac{\Delta E_2 I}{\hbar^2} = \frac{\Delta E_1 \cdot \Delta E_2}{2} \cdot \frac{I}{\hbar^2} = \frac{\Delta E_1 \cdot \Delta E_2}{2(\Delta E_2 - \Delta E_1)} =$
= расчет.

Задача 2. Сколько линий содержит чисто вращательный спектр молекул OH между колебательными уровнями с колебательными квантовыми числами $\nu=0$ и $\nu=1$?

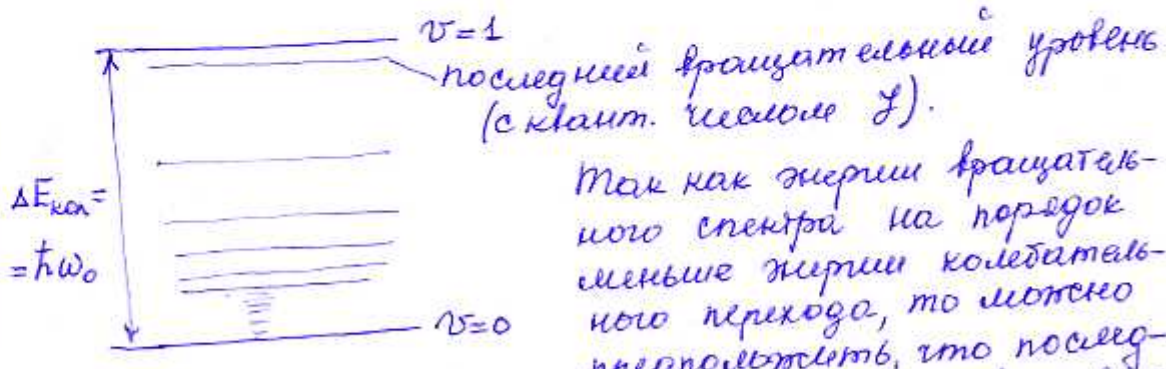
OH
 $\nu=0; \nu=1$

 $J=?$

Число спектральных линий равно числу вращательных уровней, заключенных между колебательными уровнями.

табличные данные:

$d = 97,1 \text{ нм}$
 $\omega_0 = 7,036 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ — собственная частота колеб.
 $m(O) = 15,9994 \text{ а.е.м}$
 $m(H) = 1,0079 \text{ а.е.м}$



Так как энергии вращательного спектра на порядок меньше энергии колебательного перехода, то можно предположить, что последний вращательный уровень по энергии близок к энергии верхнего (с $\nu=1$) колебательного уровня.

Тогда $\Delta E_{\text{кол}} = E_J \text{ вращ.}$

(при заданных условиях коэфф. ангармон. можно пренебречь)

$$\hbar\omega_0 = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow J(J+1) = \frac{2I\omega_0}{\hbar} \quad (*)$$

пусть $I = \mu d^2 = \frac{m_O m_H}{m_O + m_H} d^2 = 1,48 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2$

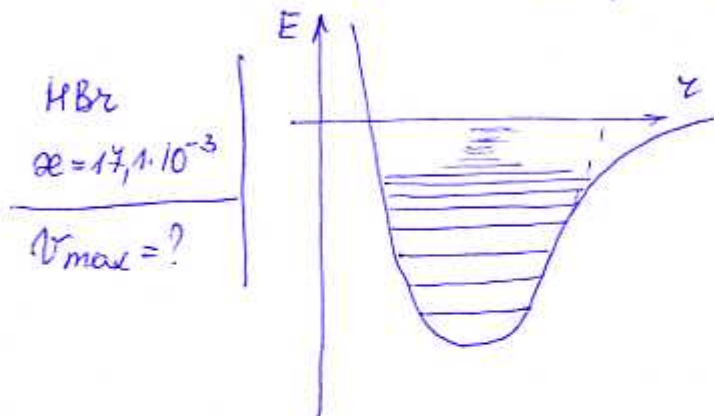
$$(*) \quad J(J+1) \leq \frac{2 \cdot 1,48 \cdot 10^{-47} \cdot 7,036 \cdot 10^{14}}{1,0546 \cdot 10^{-34}} = 197,5, \text{ тогда}$$

$$J = 13 \quad (13 \times 14 = 182)$$

Итого: между двумя колебательными уровнями в молекуле OH в области, где кривая потенц. энергии подoben параболой, находится 13 вращат. уровней.

P.S. Константы двухатомных молекул (собственная частота колебаний и межъядерное расстояние) написаны на стенде кафедры физики рядом с домашними заданиями.

Задача 3 Определить число колебательных энергетических уровней, которое имеет молекула HBr , если коэффициент ангармоничности $\alpha = 17,1 \cdot 10^{-3}$.



При увеличении значений квантовых чисел соответствующих колебательным состояниям энергетические уровни сгущаются, а интервал между ними уменьшается.

Квантовое число соответствующее последнему колебательному уровню, после которого молекула диссоциирует, обозначим v_{max} . В этом случае можно считать, что энергетическое расстояние между последними соседними уровнями практически равно 0.

Энергетическое расстояние между соседними уровнями в области ангармоничности обозначим ΔE .

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{v+1} - E_v = \hbar\omega_0 \left[\left(v + \frac{3}{2} - \alpha \left(v + \frac{3}{2} \right)^2 \right) - \left(v - \frac{1}{2} + \alpha \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \right) \right] = \\ &= \hbar\omega_0 \left[1 + \alpha \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 - \left(v + \frac{3}{2} \right)^2 \right] = \\ &= \hbar\omega_0 \left[1 + \alpha \left(v + \frac{1}{2} - v - \frac{3}{2} \right) \cdot \left(v + \frac{1}{2} + v + \frac{3}{2} \right) \right] = \hbar\omega_0 \left[1 - 2\alpha(v+1) \right] \end{aligned}$$

если $v = v_{\text{max}}$, то

$$\hbar\omega_0 [1 - 2\alpha(v_{\text{max}} + 1)] = 0 \text{ м.е.}$$

$$2\alpha(v_{\text{max}} + 1) = 1 \text{ и отсюда:}$$

$$v_{\text{max}} = \frac{1}{2\alpha} - 1 = \left(2 \cdot 17,1 \cdot 10^{-3} \right)^{-1} - 1 = 28,2, \text{ м.е.}$$

$$\boxed{v_{\text{max}} = 28,}$$

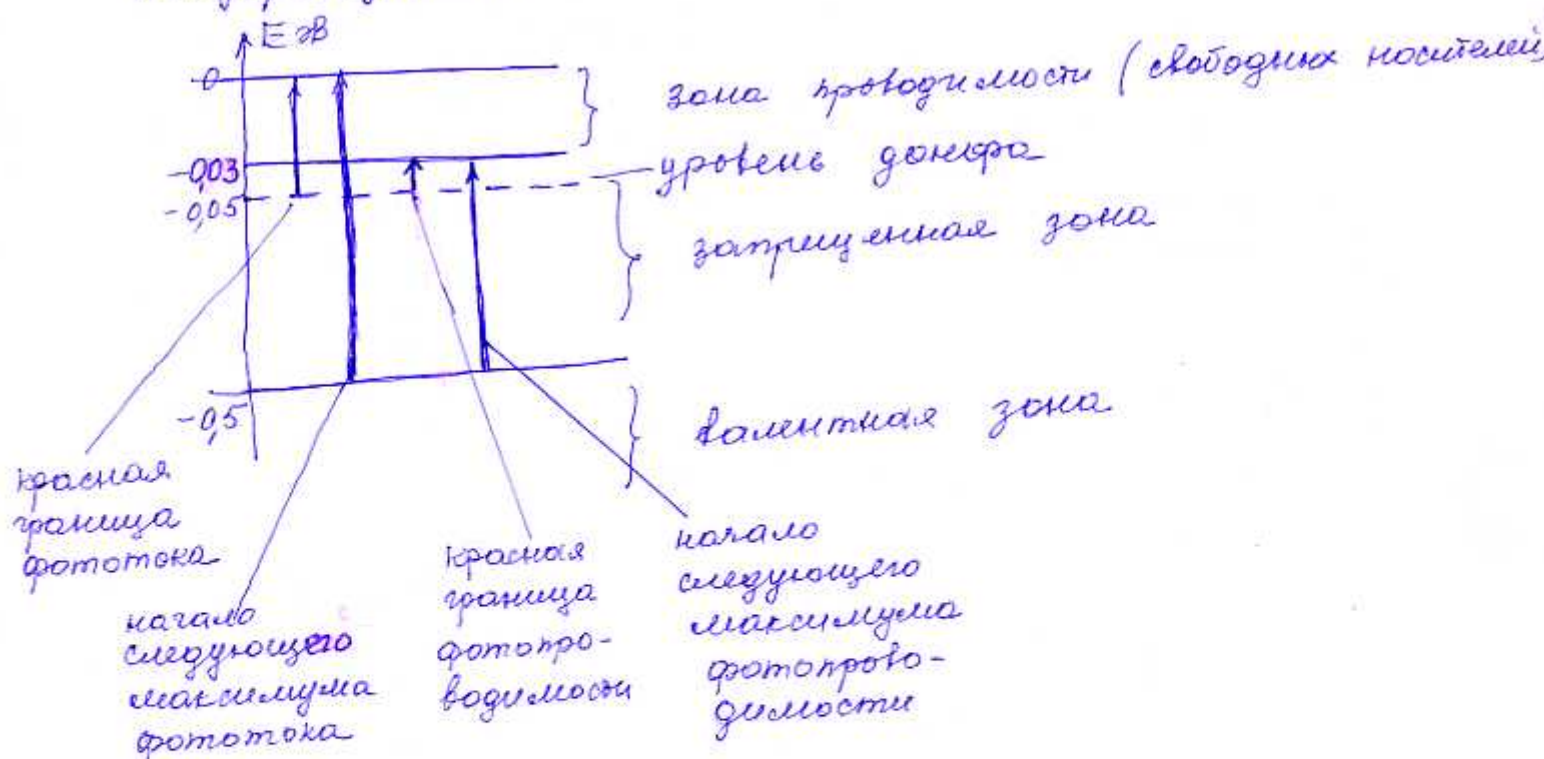
И задание по теме "Зонная теория твердого тела."

В заданиях 21; 22; 23; 28 обязательно рисовать энергетическую схему полупроводника с конкретными указанием значений по шкале энергии, соответствующих границам зон, принятым уровням.

Под красной (длинноволновой) границей фототока (фотопроводимости) понимают так λ фотона (и соответственно, $h\nu$ энергию, необходимую для создания фототока (фотопроводимости).

Под фототок здесь понимается движение носителей (электронов), выбитых с поверхности полупроводника в результате фотозудректа.

Под фотопроводимостью - направившее движение (во внешнем электрическом поле) свободных носителей внутри полупроводника.



Формулы для решетки задают по
полупроводникам (n/n) (разной концентра-
ции носителей)

Электропроводность (σ) чистого беспримесного n/n
определяется как $\sigma = n_e \bar{e} \mu_e + n_D e_D \mu_D$, где

$n_e = n_D = n$ (концентрация электронов =
= концентрации дырок = n)

\bar{e} - заряд электрона и, соответственно $e_D = |\bar{e}|$

μ_e - подвижность электронов } в зависимости от
 μ_D - подвижность дырок } значения подвиж-
ности в чистом
(идеальном) n/n
наблюдается тот или
иной тип проводимости
(электронный - n-типа,
или дырочный - p-типа)

Для электронного типа проводимости в идеальном
n/n $n_e = n_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$ где ΔE - ширина запрещенной
зоны
 k - постоянная Больцмана

$n_0 = 2 \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2}$
и $\sigma_0 = 2 \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2} e \mu_e$, тогда

Электропроводность
 $\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$

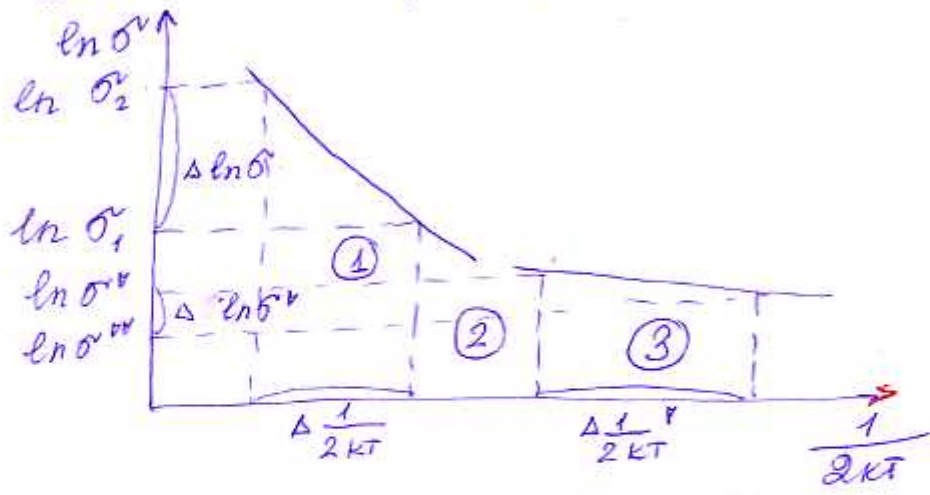
Для дырочного n/n, если концентрация
донорных примесей $n_{прим}$

$n_0 = \sqrt{n_{прим}} 2 \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/4}$; $\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$, где ΔE - энергия
активации
примеси

если в задачах дана зависимость
электропроводности n/n от температуры
(или удельного сопротивления от температуры),
тогда зависимость $\sigma = \frac{1}{\rho}$

строим графики зависимости $\ln \sigma$ от

$\frac{1}{2kT}$, например:



и по графику определим 1) ширину запрещенной зоны

$$\Delta E = \frac{-\Delta \ln \sigma}{\Delta \frac{1}{2kT}} \quad \text{в эВ}$$

2) энергию активации примеси

$$\Delta E^v = \frac{-\Delta \ln \sigma^v}{\Delta \frac{1}{2kT}} \quad \text{в эВ}$$

P.S. Энергия активации примеси \ll энергии ширины запрещенной зоны, поэтому
 угловой коэффициент 1ой части графика больше углового коэффициента второй части.

Если в ответе вопрос, где на графике проявляется собственная проводимость, то ответ - в области ②, а примесная - в области ③.

К тому же примесная проводимость работает при очень низких температурах, а собственная - при более высоких.

И задано по теме "Ядерные реакции."

(4)

Состав ядра. Атомное ядро состоит из частиц, в общем называемых нуклонами. Это протоны и нейтроны.

Протон имеет положительный заряд e и массу

$$m_p = \begin{cases} 1836,1 m_e \\ 1,6726 \text{ а.е.м.} \end{cases} \quad \text{где } m_e - \text{масса электрона}$$

1 а.е.м. - атомная единица массы, равная $\frac{1}{12}$ массы нейтрально атома углерода C^{12} , т.е.

$$1 \text{ а.е.м.} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ кг} \quad (\text{обозначается } e)$$

Нейтрон не имеет заряда (нейтральная частица), а его масса близка к массе протона

$$m_n = \begin{cases} 1839,6 m_e \\ 1,00867 \text{ а.е.м.} \end{cases}$$

Основными величинами, характеризующими атомное ядро являются зарядовое Z и массовое M числа. Число Z равно количеству протонов в ядре и определяет его электрический заряд Ze (порядковый номер в таблице Менделеева). Массовое число равно числу в табл. Менд. равно числу нуклонов в ядре. Таким образом число нейтронов в ядре равно $N = M - Z$.

Символически эти характеристики у хим. элемента обозначают так:

$${}_Z X^M, \quad \text{например } {}_2 \text{He}^4, \quad {}_{92} \text{U}^{238}$$

Атомы с одинаковым числом протонов в ядре, но разным числом нейтронов (т.е. принадлежащие одному химическому элементу) наз. изотопами.

У разных атомов число изотопов различно, среди них имеются стабильные и радиоактивные.

(11)

Масса ядра не является аддитивной величиной: (5)
 она не равна сумме масс образующих ядро нуклонов.
 Причиной этого является сильное взаимодействие нуклонов
 в ядре. Из-за этого взаимодействие для полного разде-
 ления ядра на отдельные свободные нуклоны необходи-
 мо произвести некоторую min работу, которая определяет
энергию связи ядра $E_{св}$

Наоборот, при образовании ядра из свободных нуклонов
 эта энергия выделяется.

Энергия покоя частицы $E_0 = mc^2$. Тогда:

$$E_{св} = (\sum m_{нукл} - m_{ядра}) c^2 = \Delta m \cdot c^2$$

Масса в этих случаях выражается в а.е.м (по таблице
 масс нуклонов).

Значит: $E_{св} = \Delta m \cdot \underbrace{a.е.м \cdot c^2}_{e = 931,5 \text{ МэВ}}$ } Деление следует
 (а.е.м. по табл.) } проводить по
 такой схеме.

Величина Δm наз. дефектом массы, ядра

Обычно это выражается так:

$$\Delta m = Z m_p + (M - Z) m_n - m_{атома}$$

($m_{атома} \approx m_{ядра}$)

или

$$\Delta m = Z \cdot \Delta m_p + (M - Z) \Delta m_n - \Delta m_{атома}$$

дефекты (избытки) масс ??

$$\Delta m_p = \frac{m_p}{(a.е.м)} - M_p = m_p - 1$$

малое
число
протона

$$\Delta m_{атома} = m_a - M$$

массовое
число атома

Массовое и зарядовое числа - всегда целые

Т.о., энергия связи нуклонов в ядре - это энергия, необходимая для разделения ядра на отдельные нуклоны.

Таким же образом можно рассчитать энергию, необходимую для отщепления от ядра некоторой части (например α -частицы) - энергию связи данной части с ядром. В этом случае надо записать уравнение ядерной реакции.

Наиболее распространенные ядерные реакции:

- 1) α -распад ${}_Z X^M \rightarrow {}_{Z-2} Y^{M-4} + {}_2 He^4$
- 2) β -распад ${}_Z X^M \rightarrow {}_{Z+1} Y^M + e^0$
- 3) нейтронный распад ${}_Z X^M \rightarrow {}_Z Y^{M-1} + {}_0 n^1$

Суммарное число Z и M в левой и правой части должно быть одинаковым

Пример: ${}_{10} Ne^{21} \rightarrow {}_{10} Ne^{20} + {}_0 n^1$

Тогда энергия связи нейтрона в ядре изотопа Ne^{21} :

$E_{св} = \Delta m c^2 = \Delta m \cdot 931,5 \text{ МэВ}$, где

$\Delta m = (m(Ne^{20}) + m_n) - m(Ne^{21}) = \dots \text{ а.е.м.}$

Д.С. таблица свойств нуклидов (энергии масс и периоды полураспада) вывешены на стенде каф. физики рядом с домашним заданием.

Радиоактивность.

Радиоактивность - самопроизвольное превращение одних атомных ядер в другие, сопровождаемое испусканием элементарных частиц.

Основное уравнение радиоактивного распада:

$$N = N_0 \cdot e^{-\lambda t}, \text{ где}$$

N_0 - кол-во ядер в начальный момент

N - кол-во ядер, не распавшихся по истечении времени t

λ - постоянная распада (характерная для данн. вещ-ва)

Количество распавшихся ядер: $N_0 - N = N_0 (1 - e^{-\lambda t})$

Время, за которое распадается половина первоначального количества ядер, называется периодом полураспада T :

$$\frac{1}{2} N_0 = N_0 e^{-\lambda T}$$

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

T - табличн. значен. для веществ.

Среднее время жизни радиоактивного ядра: $\tau = \frac{1}{\lambda}$

Активность A радиоактивного вещ-ва есть число распадов, происходящих в препарате в единицу времени.

Активность характеризует интенсивность радиоактивного распада.

$$A = \frac{dN_{расп}}{dt} = \lambda N$$

- количество происходящих в препарате не распавшихся ядер.

$$A = N_0 \cdot e^{-\lambda t}$$

N_0 - начальная активность

A [Бк]

или [Ки]

Беккерель (единица СИ)

Кюри

(более удобная по величине единица)

$$1 \text{ Бк} = 1 \text{ распад/сек}$$

$$1 \text{ Ки} = 37 \cdot 10^{10} \text{ Бк}$$

В задачах: $e^{-\lambda t} = e^{-\frac{\ln 2}{T} t} = (e^{\ln 2})^{-\frac{t}{T}} = 2^{-\frac{t}{T}}$, если

$\frac{t}{T}$ мало, то выражение $2^{-\frac{t}{T}}$ можно разложить в ряд и ограничиться (с учетом степени малости) первыми членами разложения.

$$2^{-\frac{t}{T}} = 1 + \frac{-\frac{t}{T} \ln 2}{1!} + \frac{(-\frac{t}{T} \ln 2)^2}{2!} + \dots \quad \text{Тогда приближенно:}$$

$$2^{-\frac{t}{T}} \approx 1 - \ln 2 \cdot \frac{t}{T}$$