

Министерство образования и науки Российской Федерации
Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ

Методические указания к лабораторным работам
по курсу “Атомная физика” для студентов
физико-технического факультета

Екатеринбург
УрФУ
2010

УДК 539.184(076)

Составители: А. К. Штольц, О. В. Денисова, А. В. Чукин

Научный редактор – доц. канд. техн. наук В. М. Стоцкий

РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ: методические указания к лабораторным работам / сост. А. К. Штольц, О. В. Денисова, А. В. Чукин. Екатеринбург: УрФУ, 2010, 22 с.

Приведена краткая теория рентгеновских спектров и методические рекомендации по порядку выполнения и обработке экспериментальных данных двух лабораторных работ: “Определение констант экранирования в многоэлектронном атоме по его рентгеновскому спектру” и “Определение энергии спин-орбитального взаимодействия в многоэлектронном атоме по его рентгеновскому спектру”. Предполагается, что первой студенты выполняют работу по определению констант экранирования, результаты которой в дальнейшем используют для расчета энергии спин-орбитального взаимодействия.

Указания предназначены для студентов физических и технических специальностей физико-технического факультета.

Библиогр.: 1 назв. Рис. 8.

Подготовлено кафедрами теоретической физики и прикладной математики и кафедрой электрофизики

© УрФУ, 2010

ТЕОРИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ

В 1895 году В. Рентген в ходе экспериментов с разрядной трубкой открыл новые лучи. Эти лучи обладали уникальными свойствами: засвечивали фотографическую пластинку, ионизировали газ, частично проходили через полностью непрозрачные для видимого света тела, не отклонялись электрическим и магнитным полем. Рентген заключил, что эти лучи не являются ни заряженными частицами, ни электромагнитными волнами светового диапазона, и будучи до конца неуверенным в их природе, он назвал их “X-лучами”. Только в 1912 г. дифракция рентгеновских лучей на кристаллах, открытая М. Лауэ, позволила считать их электромагнитными волнами с очень короткой длиной волны (от 0,5 до 2,5 Å). С другой стороны, согласно гипотезе Планка, рентгеновское излучение можно представить как поток частиц – фотонов с энергией $E_{\phi} = \nu \cdot h$, где частота ν по порядку величины составляет 10^{18} с^{-1} .

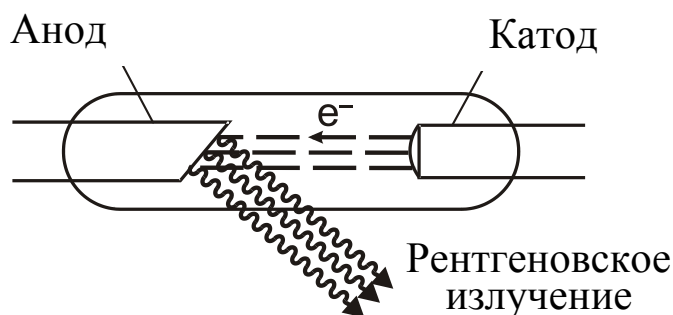


Рис. 1. Схема рентгеновской трубки

Источником рентгеновского излучения является рентгеновская трубка. Она представляет собой стеклянный баллон с двумя электродами, внутри которого создан вакуум (рис. 1). Один из электродов – катод представляет собой спираль из

вольфрамовой нити, которая нагревается проходящим по ней электрическим током и испускает электроны (термоэлектронная эмиссия). Вторым электродом – анодом, является полый медный цилиндр, на торцевую поверхность которого приварена пластинка одного из чистых тугоплавких металлов, в зависимости от требуемой длины волны рентгеновского излучения: Fe, Co, Ni, Cu, Mo, Ag, W.

Между катодом и анодом трубки создается разность потенциалов U порядка десятков киловольт. В результате вырванные из катода электроны ускоряются до энергии eU и взаимодействуют с материалом анода. Примерно 99% из них испытывают скользящие соударения с атомами вещества, теряют свою энергию и приводят лишь к увеличению кинетической

энергии частиц анода, т. е. к его разогреву. Некоторые же электроны испытывают лобовое столкновение с атомами анода и резко замедляются. В результате их торможения возникает излучение электромагнитных волн, в полном согласии с классической электродинамикой. Это так называемое **тормозное излучение** имеет сплошной спектр, ограниченный коротковолновой границей λ_{\min} (рис. 2).

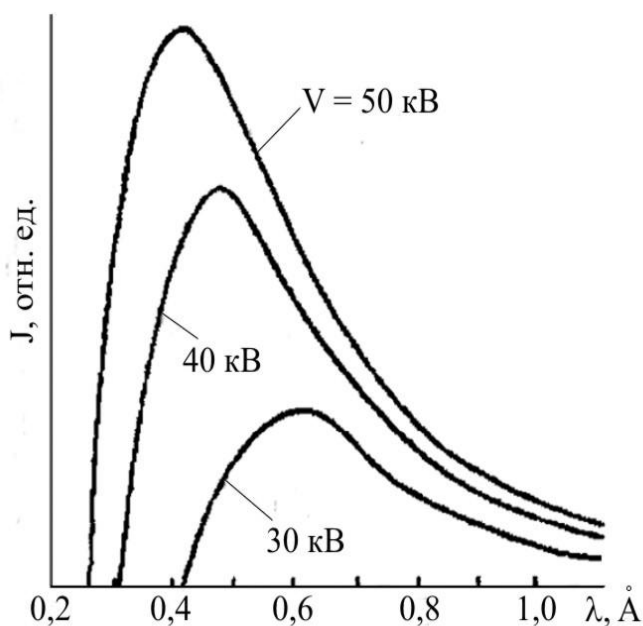


Рис. 2. Спектр тормозного излучения

Наличие коротковолновой границы λ_{\min} этого спектра легко объяснить, представляя излучение потоком фотонов. Электрон в результате соударения с атомами анода теряет часть своей энергии на разогрев анода и порождает фотон с частотой, определяемой законом сохранения энергии: $eU = h\nu + A$. Фотон максимальной частоты (минимальной длины волны) возникает, когда электрон при торможении полностью передает свою энергию фотону ($A=0$).

Коротковолновая граница сплошного спектра обратно пропорциональна ускоряющей разности потенциала рентгеновской трубки $\lambda_{\min} = hc/(eU)$.

При достаточно высоком напряжении на трубке становится возможен и другой вид взаимодействия ускоренных электронов с атомами анода. В этом случае эти электроны приобретают энергию, достаточную для выбивания электронов из внутренних оболочек атома анода. Образовавшиеся в оболочке вакансии мгновенно заполняются электронами, находящимися в более высоких энергетических состояниях. При таких переходах излучаются фотоны, энергия которых определяется разностью энергий начального и конечного состояний атомов анода.

Возникающее таким образом излучение называется **характеристическим**, так как оно характеризует материал анода и определяется строением внутренних оболочек его атомов.

В результате на сплошной спектр тормозного излучения накладывается линейчатый спектр характеристического излучения (рис.3), причем для каждого элемента материала анода линии имеют строго определенные длины волн (частоты).

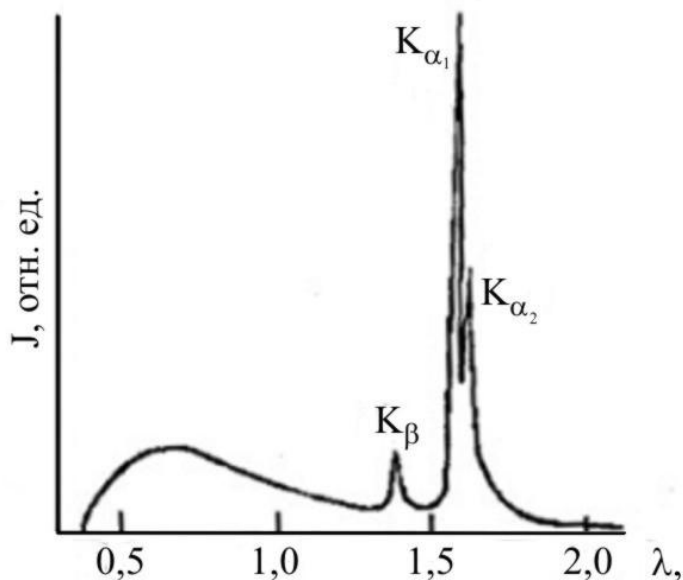


Рис. 3. Характеристическое рентгеновское излучение

Характеристические рентгеновские спектры разных элементов качественно подобны, они состоят из одинаковых совокупностей спектральных линий, называемых сериями. Подобие спектров объясняется тем, что в их образовании участвуют лишь внутренние электронные оболочки, которые заполнены у многоэлектронных атомов одинаково, в отличие от внешних электронных оболочек. Если

учитывать только энергию взаимодействия электронов с ядром, то вид энергетических спектров электронов в атоме будет таким, как представлено на рис. 4.

Принято называть совокупность спектральных линий, возникающих при переходе электронов с верхних уровней на один из нижних, по названию слоя, в котором находится этот нижний уровень. Если переход осуществляется на уровень с главным квантовым числом $n = 1$, то это К-серия, $n = 2$ – L-серия, $n = 3$ – M-серия и т. д. (см. рис. 4). К-серия является наиболее коротковолновой. Спектральные линии этой серии, отвечающие различным способам возвращения атома в исходное невозбужденное состояние, называются K_{α} , K_{β} , K_{γ} . Причем K_{α} -линии соответствует наименьшая частота и наибольшая интенсивность.

Для возникновения спектральной серии необходимо, чтобы электрон в катодном пучке превысил потенциал возбуждения этой серии, т. е. обладал энергией, достаточной для выбивания электрона с определенного внутреннего слоя. Например, для возникновения К-серии нужно превысить энергию связи электрона в атоме E_1 , для возбуждения L-серии – энергию в атоме E_2 и т. д.

(см. рис. 4). Потенциалы возбуждения для разных серий различны и, кроме того, зависят от материала анода. Так, потенциал возбуждения К-серии меди примерно равен 9 кВ, молибдена 20,1 кВ, вольфрама 69,5 кВ и т. д.

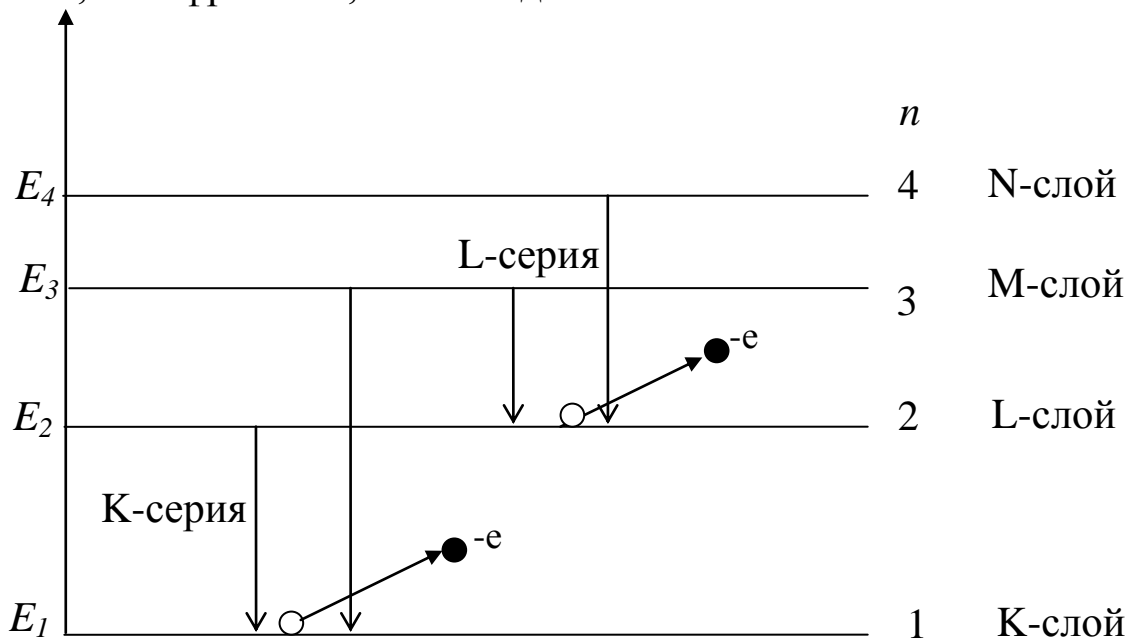


Рис. 4. Схема возникновения рентгеновских спектральных серий

На практике наблюдаются только наиболее интенсивные линии К-серии. Другие рентгеновские серии удается зарегистрировать только для тяжелых элементов.

Для объяснения и расчета экспериментально наблюдаемых рентгеновских спектров приходится обращаться к квантовой теории строения атома, основанной на двойственной природе электронов и учете релятивистских эффектов. В основе нерелятивистской теории лежит уравнение Шредингера, которое для стационарных состояний имеет вид

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2\mu}{h^2} (E - U) \psi = 0, \quad (1)$$

где $h = 6,626 \cdot 10^{-27}$ эрг·с – постоянная Планка, μ – приведенная масса атома, E – полная энергия электрона, U – потенциальная энергия электрона в атоме, $\psi(\theta, \varphi, \rho)$ – волновая функция электрона.

Решением уравнения Шредингера (1) является волновая функция ψ_0 . Квадрат модуля этой функции $|\psi_0|^2$ определяет

вероятность нахождения электрона в единичном объеме около точки (θ, φ, ρ) . Точное решение уравнения (1) возможно только для водородоподобных атомов, т. е. систем с центрально симметричным полем $U = -Ze^2/r$. Для многоэлектронных атомов, даже при применении теории возмущений, уравнение (1) может быть решено только приближенно. Однако в большинстве случаев необходимость в таком решении не возникает.

Из решения уравнения Шредингера для водородоподобных атомов с учетом того, что волновая функция должна быть однозначной конечной и непрерывной, следует, что электрон в атоме может находиться лишь в дискретных состояниях, которым соответствует набор значений волновой функции $\psi_{n,l,m}(\theta, \varphi, \rho)$, где n, l, m – квантовые числа, характеризующие данное состояние.

Главное квантовое число n определяет полную нерелятивистскую энергию электрона водородоподобного атома и может принимать значения $1, 2, 3, \dots$

Орбитальное квантовое число l определяет модули орбитальных механического $|\vec{M}_l| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ и магнитного $|\vec{\mu}_l| = \sqrt{l(l+1)}\mu_B$ моментов электрона в атоме, где $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка, $\mu_B = 927,4 \cdot 10^{-26}$ Дж·Тл⁻¹ – магнетон Бора, $l=0, 1, 2, \dots, (n-1)$.

Квантовое число m_l квантует проекции этих моментов на выделенное в пространстве направление, создаваемое электрическим или магнитным полем, и принимает значения от $0, \pm 1, \dots, \pm l$.

Полученные результаты позволили рассчитать энергию электрона E_n в водородоподобных атомах без учета их тонкой структуры по формуле

$$E_n = -Rhc \frac{Z^2}{n^2}, \quad (2)$$

где $R = 109737,303 \text{ см}^{-1}$ – постоянная Ридберга, $c = 2,998 \cdot 10^{10} \text{ см/с}$ – скорость света; Z – зарядовое число ядра, n – главное квантовое число.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНСТАНТ ЭКРАНИРОВАНИЯ В МНОГОЭЛЕКТРОННОМ АТОМЕ ПО ЕГО РЕНТГЕНОВСКОМУ СПЕКТРУ

Цель работы. Экспериментально определить константы полного экранирования для К-, L-, M-уровней и константу внутреннего экранирования L-слоя по характеристическому рентгеновскому спектру меди.

В случае многоэлектронных атомов, в отличие от водородоподобного, необходимо учитывать дополнительную энергию – энергию взаимодействия электронов друг с другом. Можно сказать, что электроны “экранируют” ядро, эффективно уменьшая его заряд Z . Поэтому энергетический спектр многоэлектронного атома можно приближенно рассчитать подобно атому водорода, заменив заряд Z на некоторый эффективный заряд $Z_{eff} = Z - \sigma_{n,l}^*$, вводя константу экранирования $\sigma_{n,l}^*$. При этом нерелятивистская энергия электрона в многоэлектронном атоме может быть вычислена по формуле

$$E_{n,l} = -Rhc \left(\frac{(Z - \sigma_{n,l}^*)^2}{n^2} \right). \quad (3)$$

Учет релятивистских эффектов, зависимости массы электрона от скорости и спин-орбитального взаимодействия приводит к следующему выражению для энергии многоэлектронного атома:

$$E_{n,l,j} = -Rhc \frac{(Z - \sigma_{n,l}^*)^2}{n^2} - \alpha^2 Rhc \frac{(Z - \sigma_{n,l}^{**})^4}{n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right), \quad (4)$$

где $\alpha = 1/137$ – постоянная тонкой структуры; $j = l \pm 1/2$ – внутреннее квантовое число. В отличие от выражения (3) в это выражение входят две константы: $\sigma_{n,l}^*$ – константа полного экранирования, $\sigma_{n,l}^{**}$ – константа внутреннего экранирования.

Первое слагаемое в (4) определяет энергию кулоновского взаимодействия электрона на уровне с номером n и ядра, экранированного электронами как внутренних так и внешних по отношению к данному уровню оболочек. Поэтому $\sigma_{n,l}^*$ называется константой полного экранирования, она определяется всеми электронами атома, зависит от Z , n и l и растет с их увеличением.

Второе слагаемое в (4) представляет собой малую поправку к основному уровню энергии ($\alpha^2 \sim 10^{-5}$), обусловленную релятивистской зависимостью массы электрона от скорости и спин-орбитальным взаимодействием.

Дополнительная энергия спин-орбитального взаимодействия является энергией взаимодействия собственного магнитного момента электрона $\vec{\mu}_s$ с магнитным полем, созданным его орбитальным движением \vec{H}_l .

$$E_{ls} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{H}_l \quad (5)$$

Если электрон представить как классическую частицу, то в системе координат, связанной с неподвижным ядром, по закону Био-Савара

$$\vec{H}_0 = \frac{e}{cr^3} \mathbf{r} \times \vec{v} \quad (\text{в системе СГС}), \quad (6)$$

где e – заряд электрона, \vec{v} – его скорость. Чтобы найти \vec{H}_l , действующее на электрон, надо перейти в систему отсчета, связанную с электроном. В такой системе электрон неподвижен, а ядро вращается. Такое преобразование (преобразование Лоренца) приводит к выражению

$$\vec{H}_l = \frac{Ze}{2cr^3} \mathbf{r} \times \vec{v} \quad (7)$$

Если умножить числитель и знаменатель на приведенную массу атома μ , то эта формула принимает вид

$$\vec{H}_l = \frac{Ze\mu}{2cr^3\mu} \mathbf{r} \times \vec{v} \quad (8)$$

Учитывая, что $\vec{M}_l = \mu \mathbf{r} \times \vec{v}$ – орбитальный механический момент количества движения электрона, а заряд ядра Ze уменьшен за счет наличия экранирующих его электронов внутренних оболочек атома и может быть представлен как $(Z - \sigma_{n,l}^{**}) \cdot e$, где $\sigma_{n,l}^{**}$ – постоянная внутреннего экранирования, \vec{H}_l – магнитное орбитальное поле

$$\vec{H}_l = \frac{(Z - \sigma_{n,l}^{**})e\vec{M}_l}{2cr^3\mu} \quad (9)$$

Таким образом, в слагаемом, обусловленном релятивистскими эффектами, появляется константа внутреннего экранирования $\sigma_{n,l}^{**}$.

В этом слагаемом учитывается влияние на заряд ядра электронов только внутренних оболочек по отношению к той, в которой наблюдается спин-орбитальное взаимодействие. Так как внутренние электронные оболочки у всех атомов имеют одинаковое строение, то константа внутреннего экранирования $\sigma_{n,l}^{**}$ не зависит от Z и возрастает с ростом n и l . Кроме того, $\sigma_{n,l}^{**} < \sigma_{n,l}^*$.

Как уже указывалось, теоретический расчет констант экранирования чрезвычайно сложен, поэтому они определяются в основном из экспериментальных данных рентгеновских спектров атомов.

Схема энергетических уровней в соответствии с приведенной выше формулой (4) изображена на рис 5.

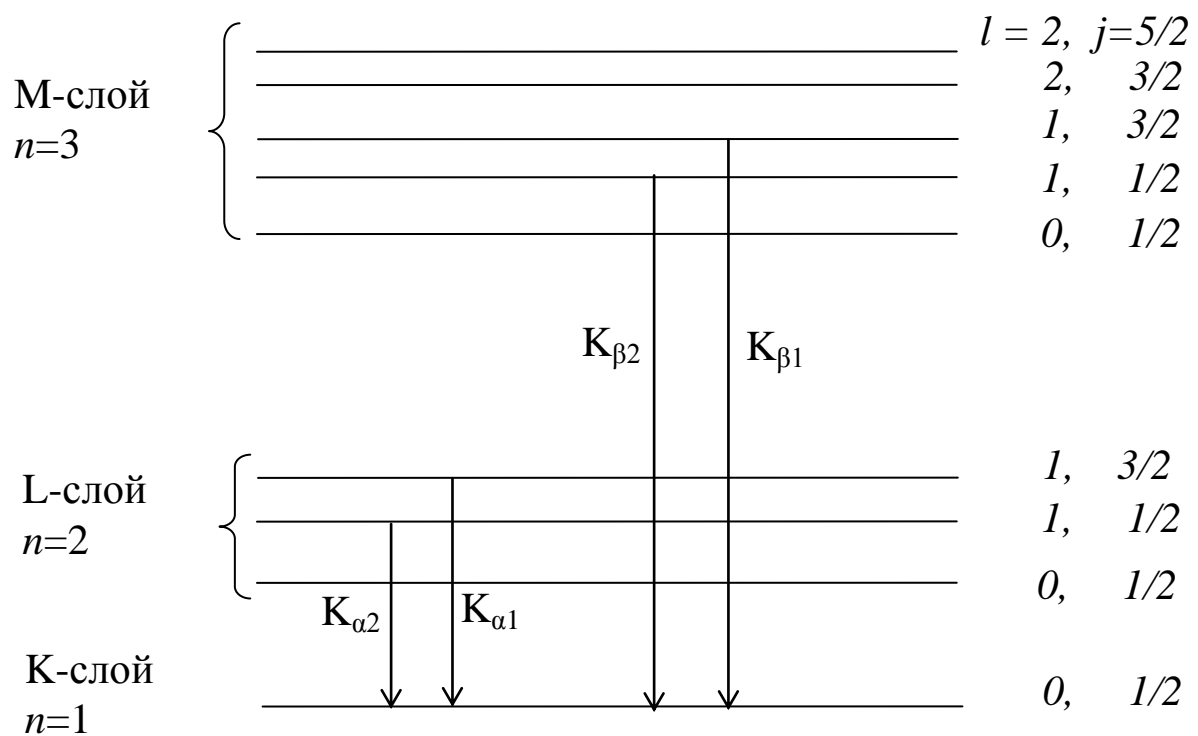


Рис. 5. Уровни энергии многоэлектронного атома с учетом тонкой структуры

Как уже указывалось, наиболее интенсивной из описанных выше серий, лежащей по длинам волн в рентгеновской области, является К-серия, которая и будет исследоваться в данной лабораторной работе. С учетом тонкой структуры рентгеновского спектра линия K_{α} представляет собой дублет – совокупность двух близких по длине волны линий $K_{\alpha 1}$ и $K_{\alpha 2}$ (см. рис. 5).

Используя формулу (4) для расчета полной энергии каждого электрона в атоме, легко найти частоту излучаемой атомом линии при переходе в нем электрона на К-уровень (К-серия). Частота определяется разностью энергий начального и конечного состояния электрона:

$$\nu_{\alpha 1} = \frac{(E_{2,1,1/2} - E_{1,0,1/2})}{h} = -Rc \left(\frac{(Z - \sigma_L^{**})^2}{2^2} + \frac{5\alpha^2 (Z - \sigma_L^{**})^4}{4 \cdot 2^4} - \frac{(Z - \sigma_K^*)^2}{1^2} \right), \quad (10)$$

$$\nu_{\alpha 2} = \frac{(E_{2,1,3/2} - E_{1,0,1/2})}{h} = -Rc \left(\frac{(Z - \sigma_L^{**})^2}{2^2} + \frac{\alpha^2 (Z - \sigma_L^{**})^4}{4 \cdot 2^4} - \frac{(Z - \sigma_K^*)^2}{1^2} \right), \quad (11)$$

$$\nu_{\beta} = (E_{3,1,3/2} - E_{1,0,1/2}) / h = -Rc \left(\frac{(Z - \sigma_M^*)^2}{3^2} - \frac{(Z - \sigma_K^*)^2}{1^2} \right). \quad (12)$$

В выражении (12) для частоты К_β-линии пренебрегли релятивистским слагаемым, так как экспериментально не удается наблюдать её расщепление.

Экспериментально регистрируя характеристические рентгеновские спектры, можно получить сведения о частотах ν (длинах волн $\lambda = c/\nu$) рентгеновских лучей.

В данной лабораторной работе спектр представляет совокупность трех дифракционных линий К_{α1}, К_{α2}, К_β. Зная экспериментальные значения частоты рентгеновских линий К_{α1}, К_{α2}, К_β и используя уравнения (10)–(12), можно получить формулы для расчета констант экранирования.

Рассчитать константу σ_K^* из этих уравнений не удастся. Принимая во внимание отсутствие спин-орбитального взаимодействия для К-слоя, можно найти приближенное значение константы σ_K^* , приравняв значение энергии К-слоя к энергии возбуждения К-серии $E_{1,0,1/2} = E_{\text{возб}} = Ue$.

Константу внутреннего экранирования можно рассчитать только для L-слоя, используя формулы (10) и (11). Можно также рассчитать константы полного экранирования для L- и M-слоя, если известна константа полного экранирования для К-слоя.

Порядок выполнения работы

1. Познакомиться с устройством и работой рентгеновского дифрактометра.
2. Зная среднюю длину волны K_α излучения меди $\lambda_\alpha=1,541 \cdot 10^{-8}$ см и используя справочные данные об образце, играющем роль дифракционной решетки, выбрать плоскость (H, K, L) с таким межплоскостным расстоянием d , чтобы измерения длин волн были наиболее точными, а линия достаточно интенсивная.
3. Рассчитать для выбранного d примерный угол дифракционных максимумов K_α и K_β , полагая $\lambda_\beta=1,392 \cdot 10^{-8}$ см.
4. Снять дифрактограмму в диапазоне углов в окрестности выбранных θ_α и θ_β .
5. Определить по дифрактограмме углы $\theta_{\alpha 1}$, $\theta_{\alpha 2}$ и θ_β и рассчитать длины волн.
6. По измеренным длинам волн дублета рассчитать константу внутреннего экранирования для L-слоя σ_L^{**} , используя формулы (10) и (11), записав их через длины волн.
7. Для расчета константы полного экранирования σ_K^* воспользоваться справочным значением потенциала возбуждения K-серии меди U :
$$E_{1,0,1/2} = E_{\text{возб}} = eU.$$
8. Рассчитать по формулам, полученным из (10) и (12) без учета тонкой структуры, константы полного экранирования второго и третьего уровней (σ_L^* , σ_M^*).
9. Проанализировать полученные результаты, сравнить константы между собой и сделать выводы о характере зависимости от n , l .

Контрольные вопросы

1. Каков механизм возникновения рентгеновского спектра в рентгеновской трубке?
2. Какая серия рентгеновского спектра является К-серией?
3. Почему атом водорода нельзя заставить излучать характеристические рентгеновские лучи?
4. Каков спектр энергетических уровней многоэлектронного атома?
5. Каков физический смысл постоянной экранирования?
6. От каких величин зависит постоянная полного экранирования и как объяснить эту зависимость?
7. Почему постоянная внутреннего экранирования не зависит от порядкового номера элемента?
8. Выведите формулу для экспериментального определения константы σ_K^* .
9. Получите расчетные формулы для констант полного экранирования σ_L^* и σ_M^* .
10. Получите расчетную формулу для константы внутреннего экранирования σ_L^{**} .
11. Как экспериментально определить длины волн рентгеновского излучения?
12. Какие величины приводят к возникновению погрешности в определении длины волны?

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МНОГОЭЛЕКТРОННОМ АТОМЕ ПО ЕГО РЕНТГЕНОВСКОМУ СПЕКТРУ

Цель работы. Определить экспериментальное значение энергии спин-орбитального взаимодействия атома меди по дублету $K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$ ее характеристического спектра и рассчитать ее теоретическое значение.

В методических указаниях к работе “Определение констант экранирования в многоэлектронном атоме по его рентгеновскому спектру” приведена формула для полной энергии электрона в многоэлектронном атоме и пояснен физический смысл входящих в нее слагаемых:

$$E_{n,l,j} = -Rhc \frac{(Z - \sigma_{n,l}^*)^2}{n^2} - \alpha^2 Rhc \frac{(Z - \sigma_{n,l}^{**})^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (13)$$

Эта формула вытекает из решения уравнения Дирака при учете спина электрона и релятивистских эффектов. Но ее можно получить и другим, нестрогим, способом, используя решения нерелятивистского уравнения Шредингера для водородоподобных атомов и векторную модель атома. При таком подходе наряду с уравнением Шредингера учитывают релятивистскую зависимость массы электрона от скорости и существование спина электрона.

Каждому из этих факторов соответствует свой добавочный член в формуле для полной энергии электрона в атоме, причем оба этих вклада в энергию одного порядка малости, поэтому их нужно учитывать одновременно.

Как показал А. Зоммерфельд, учет релятивистской зависимости массы электрона от скорости при решении задачи о его движении как частицы в кулоновском поле ядра приводит к сложной траектории. Ее можно представить состоящей из движения электрона по эллипсу (не по окружности) и медленного вращения этого эллипса в своей плоскости. Результирующая траектория имеет вид розетки (рис. б).

Расчет добавочной энергии E_r такого движения электрона с учетом эффекта экранирования приводит к соотношению

$$E_r = Rhc\alpha^2 \frac{(Z - \sigma^{**})^4}{n^3} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (14)$$

Учет наличия спина электрона дает еще дополнительную энергию – энергию спин-орбитального взаимодействия E_{ls} . Как указано выше (с. 9), энергия спин-орбитального взаимодействия E_{ls} может быть вычислена по известной из электродинамики формуле:

$$E_{ls} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{H}_l, \quad (15)$$

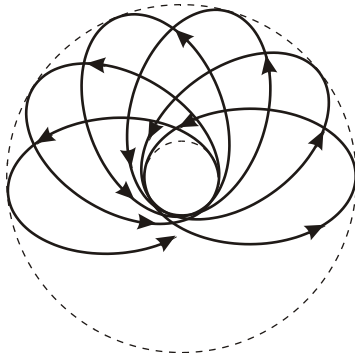


Рис. 6. Орбита электрона при учете релятивистской зависимости его массы от скорости

где \vec{H}_l – напряженность магнитного поля, созданного орбитальным движением электрона, а $\vec{\mu}_s$ – собственный магнитный момент электрона ($|\vec{\mu}_s| = 2 \cdot \sqrt{s(s+1)} \cdot \mu_B$, μ_B – магнетон Бора, $s = 1/2$).

Напряженность магнитного поля \vec{H}_l в месте нахождения электрона с координатой \vec{r} проще всего вычислить, если связать систему отсчета не с ядром, как предполагается обычно, а с электроном. Такой переход от одной системы координат к другой выполняется с помощью преобразования Лоренца. В новой системе отсчета электрон покоится, а ядро с зарядом Ze вращается вокруг электрона со скоростью \vec{v} , создавая кольцевой ток. В соответствии с законом Био-Савара напряжение магнитного поля \vec{H}_l теперь можно рассчитать по формуле

$$\vec{H}_l = \frac{Ze}{2cr^3} \mathbf{r} \times \vec{v}. \quad (16)$$

Принимая во внимание приведенную массу μ системы электрон-ядро,

$$\mu = \frac{m_e M_{\text{я}}}{m_e + M_{\text{я}}}, \quad (17)$$

где m_e – масса электрона, $M_{\text{я}}$ – масса ядра, можно найти

$$\vec{H}_l = \frac{Ze\mu}{2cr^3 \mu} \mathbf{r} \times \vec{v}. \quad (18)$$

Так как орбитальный механический момент атома $\vec{M}_l = \mu \cdot \vec{r} \times \vec{v}$, выражение (18) принимает вид:

$$\vec{H}_l = \frac{Ze}{2cr^3\mu} \vec{M}_l. \quad (19)$$

При учете экранирования заряда ядра внутренними электронами будем иметь

$$\vec{H}_l = \frac{(Z - \sigma^{**})e}{2cr^3\mu} \vec{M}_l. \quad (20)$$

Подставляя (20) в (15), получим

$$E_{l,s} = -\frac{(Z - \sigma^{**})e}{2cr^3\mu} (\vec{\mu}_s \vec{M}_l). \quad (21)$$

Поскольку представляет интерес только среднее значение спин-орбитальной энергии электрона, то $E_{l,s}$ надо усреднить по координатам, т. е. в формулу (21) вместо $1/r^3$ подставить среднее значение $\langle 1/r^3 \rangle$.

Средние значения в квантовой механике находят через волновые функции, соответствующие данному состоянию электрона. В данном случае

$$\langle 1/r^3 \rangle = \int \psi_{nlm}^* (1/r^3) \psi_{nlm} dV. \quad (22)$$

Для многоэлектронных атомов волновые функции неизвестны. Они известны только для водородоподобных атомов. При выводе искомой формулы выполняется приближенное вычисление для $\langle 1/r^3 \rangle$ с использованием волновых функций для водородоподобного атома. В результате получается выражение

$$\langle 1/r^3 \rangle = \frac{(Z - \sigma^{**})^3}{a_1^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)}, \quad (23)$$

где $a_1 = \hbar^2 / (m_e \cdot e^2)$ – первый боровский радиус.

Далее в формуле (21) необходимо вычислить скалярное произведение $(\vec{\mu}_s \vec{M}_l)$. Для этого следует ввести вместо собственного магнитного момента электрона $\vec{\mu}_s$ его собственный механический момент, спин \vec{M}_s . Магнитный и механический моменты связаны гиромангнитным отношением $\vec{\mu}_s = \gamma_s \cdot \vec{M}_s$, а $\gamma_s = e / (m_e c)$, где c – скорость света; e , m_e – заряд и масса электрона соответственно.

После такой замены

$$\vec{\mu}_s \cdot \vec{M}_l = \frac{e}{\mu c} \vec{M}_s \cdot \vec{M}_l = \frac{e}{\mu c} |\vec{M}_s| \cdot |\vec{M}_l| \cdot \cos \varphi, \quad (24)$$

где φ – угол между векторами \vec{M}_s и \vec{M}_l , $|\vec{M}_s| = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar$,
 $|\vec{M}_l| = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$.

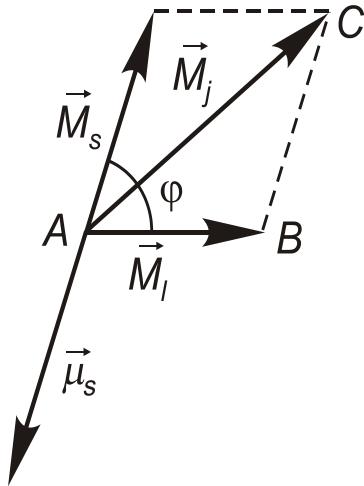


Рис. 7. Векторная модель сложения моментов электрона в атоме

Значение $\cos \varphi$ можно найти, пользуясь векторной моделью сложения моментов электрона в атоме и теоремой косинусов (рис. 7).

Согласно теореме сложения, спиновый и орбитальный моменты складываются по правилу сложения векторов при сохранении правил квантования. Полный механический момент электрона $\vec{M}_j = \vec{M}_s + \vec{M}_l$, его модуль $|\vec{M}_j| = \sqrt{j(j+1)} \cdot \hbar$.

Угол между векторами \vec{M}_s и \vec{M}_l равен $180 - \pi$, т. е. углу ABC в треугольнике ABC (см. рис. 7).

Используя приведенные выше формулы, необходимые для вычисления, получим выражение для $\cos \varphi$:

$$\cos \varphi = \frac{j(j+1) - s(s+1) - l(l+1)}{2\sqrt{l(l+1)s(s+1)}}. \quad (25)$$

Теперь, подставляя полученные выражения $\langle 1/r^3 \rangle$ (23), $(\vec{\mu}_s \vec{M}_l)$ (24) и (25) в формулу для энергии спин-орбитального взаимодействия (21), имеем:

$$E_{ls} = -\frac{(Z - \sigma^{**})^4 e^8 \mu}{2c^2 \hbar^4} \cdot \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2n^3 l(l+1/2)(l+1)}. \quad (26)$$

Данную формулу можно записать в более удобном для вычисления виде, если ввести две константы: постоянную Ридберга

$$R = \frac{\mu e^4}{4\pi \hbar^3 c} = 109737 \text{ см}^{-1} \quad \text{и} \quad \text{постоянную тонкой структуры}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}.$$

После такого преобразования получим:

$$E_{ls} = -Rhc\alpha^2 \frac{(Z - \sigma^{**})^4}{n^3 l(l+1/2)(l+1)} \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2}. \quad (27)$$

Зная E_r (14) и E_{ls} (27), можно найти суммарный вклад в энергию с учетом обоих факторов. Полная поправка к нерелятивистской энергии электрона в многоэлектронном атоме будет иметь вид

$$E_r + E_{ls} = E_{n,j} = -Rhc\alpha^2 \frac{(Z - \sigma^{**})^4}{n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (28)$$

Теперь для многоэлектронных атомов можно записать полную энергию электронов с учетом спин-орбитального взаимодействия и релятивистской поправки, введя константу полного σ^* и внутреннего σ^{**} экранирования:

$$E_{n,l,j} = -Rhc \left(\frac{(Z - \sigma^*)^2}{n^2} + \alpha^2 \frac{(Z - \sigma^{**})^4}{n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right). \quad (29)$$

Как видно из формулы (29), уровни энергии для состояния с $l=0$ не будут расщепляться, так как в этом случае квантовое число j имеет всего одно значение $1/2$. Все остальные уровни энергии (с $l \neq 0$) расщепятся на два подуровня за счет энергии спин-орбитального взаимодействия. Энергетическое расстояние между подуровнями равно удвоенной энергии спин-орбитального взаимодействия $2E_{ls}$. Явление расщепления энергетических уровней приводит к возникновению в спектрах дублетных линий, называемых тонкой структурой спектра (рис. 8).

Релятивистская добавка E_r приводит только лишь к незначительному смещению энергетических уровней по сравнению с их положением для нерелятивистского приближения.

Как уже говорилось, рентгеновские спектры многоэлектронных атомов возникают в результате сообщения атому энергии, достаточной для удаления одного из электронов атома из ближайших к ядру слоев (чаще из К-слоя с $n = 1$) и последующего заполнения вакантного положения электронами с вышележащих по энергии слоев. Наиболее частым будет переход электронов с близлежащего к К-слою из L-слоя ($n = 2$). При этом атом будет излучать спектральную серию K_α . Из-за наличия спин-орбитального взаимодействия эта линия представляет собой дублет $K_{\alpha 1}$ и $K_{\alpha 2}$ (см. рис. 8).

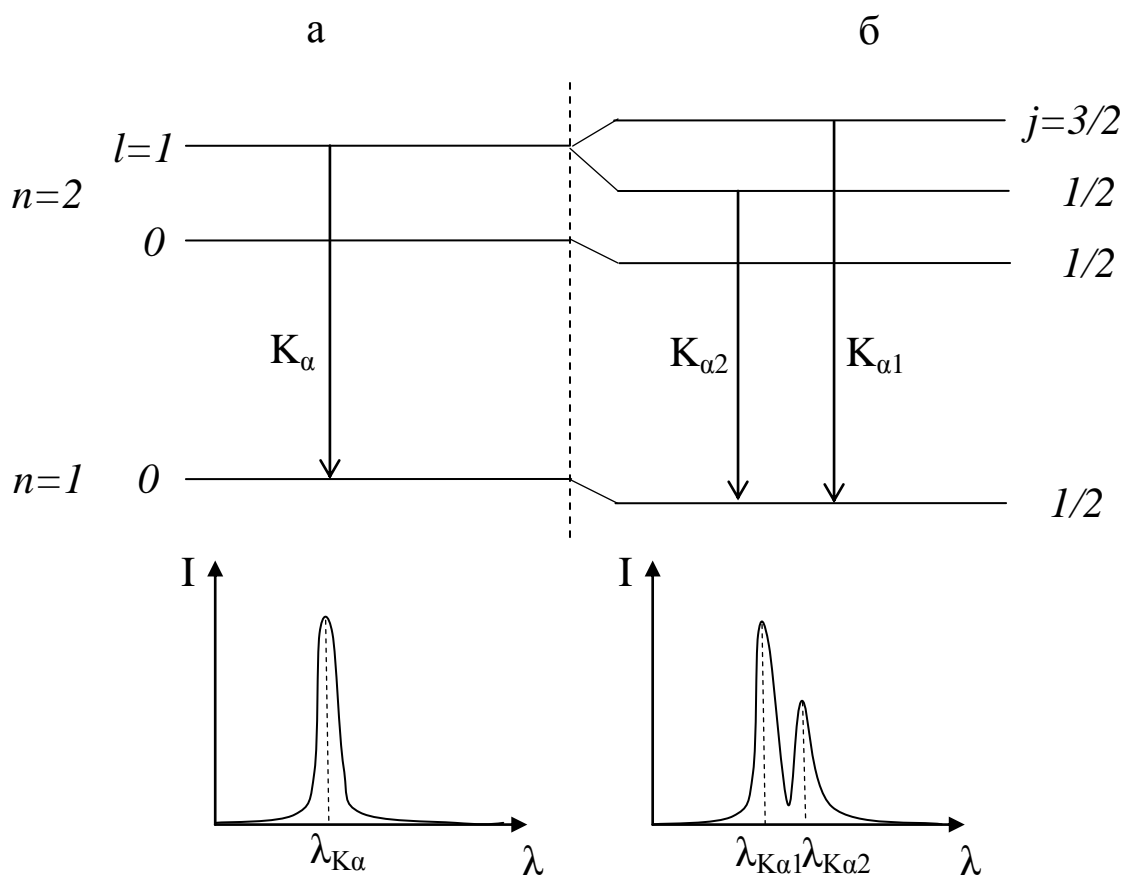


Рис. 8. Уровни энергии электрона и соответствующий вид К-линии рентгеновского спектра многоэлектронного атома: а – без учета релятивистского приближения, б – с учетом тонкой структуры

Длины волн дублета $\lambda_{\alpha 1}$ и $\lambda_{\alpha 2}$ могут быть определены экспериментально, а через них можно вычислить и энергии переходов, равные соответственно $hc/\lambda_{\alpha 1}$ и $hc/\lambda_{\alpha 2}$. Тогда энергия спин-орбитального взаимодействия может быть экспериментально определена по формуле

$$E_{ls} = \frac{ch}{2} \left(\frac{\lambda_{\alpha 1} - \lambda_{\alpha 2}}{\lambda_{\alpha 1} \cdot \lambda_{\alpha 2}} \right). \quad (30)$$

С другой стороны, можно теоретически рассчитать энергию спин-орбитального взаимодействия, основываясь на приведенной выше релятивистской формуле (29) для уровней энергии атома:

$$E_{ls} = \frac{1}{2} \left(\epsilon_{2,1,3/2} - \epsilon_{2,1,1/2} \right). \quad (31)$$

Заметим, что для теоретического расчета необходимо знать константу внутреннего экранирования σ^{**} . Её величину можно взять из справочной литературы или воспользоваться результатами предыдущей лабораторной работы.

Порядок выполнения работы

1. Познакомиться с устройством и работой рентгеновского дифрактометра.
2. Зная среднюю длину волны K_α излучения меди $\lambda_\alpha = 1,541 \cdot 10^{-8}$ см и используя справочные данные об образце, играющем роль дифракционной решетки, выбрать плоскость с таким межплоскостным расстоянием d , чтобы измерения длин волн были наиболее точными, а линии достаточно интенсивными.
3. Из условия Вульфа–Брегга рассчитать угол θ , при котором ожидается возникновение дифракционного максимума.
4. Снять в непрерывном режиме дифрактограмму, установив интервал углов в окрестности рассчитанного угла θ .
5. Измерить положение линий дублета, $\theta_{\alpha 1}$ и $\theta_{\alpha 2}$.
6. Рассчитать длины волн $\lambda_{\alpha 1}$ и $\lambda_{\alpha 2}$.
7. Рассчитать по формуле (30) экспериментальное значение энергии спин-орбитального взаимодействия.
8. Оценить погрешность измерения энергии спин-орбитального взаимодействия по формуле

$$\frac{\Delta E_{ls}}{E_{ls}} = \frac{\sqrt{2} \cdot \Delta \lambda}{(\lambda_{\alpha 1} - \lambda_{\alpha 2})},$$

где $\Delta \lambda$ – погрешность определения длины волны, которую можно рассчитать для одной из волн дублета по формуле

$$\Delta \lambda = \lambda \cdot \sqrt{\left(\frac{\Delta d}{d}\right)^2 + \operatorname{ctg}^2 \theta \cdot \Delta \theta^2}.$$

9. Записать экспериментальный результат с учетом погрешности.
10. Вычислить теоретическое значение энергии спин-орбитального взаимодействия (31), подставив константу внутреннего экранирования σ_L^{**} .
11. Сравнить полученные результаты и сделать вывод.

Контрольные вопросы

1. Особенности и отличия спектров водородоподобных ионов и многоэлектронных атомов.
2. Спин электрона. Природа спин-орбитального взаимодействия.
3. Энергия магнитного момента в магнитном поле.
4. Как выглядит K-серия меди без учета и с учетом тонкой структуры?
5. Как квантуются состояния электрона в многоэлектронном атоме?
6. Как получить формулу для теоретического расчета энергии спин-орбитального взаимодействия?
7. Что используется в качестве дифракционной решетки для разложения в спектр излучения, возникающего в рентгеновской трубке?
8. В каких углах предпочтительней снимать дифрактограмму для экспериментального определения энергии спин-орбитального взаимодействия?

Рекомендуемый учебник: Шпольский Э. В. Атомная физика. В 2 т. М. : Наука, 1974. Т1–575с. Т2–447 с.

Учебное издание

РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ

Составители: **Штольц** Аэлита Константиновна
Денисова Ольга Владимировна
Чукин Андрей Владимирович

Редактор *Т.Н. Газитарова*

Подписано в печать 10.10.2010. Формат 60×84 1/16.
Бумага типографская. Плоская печать. Усл. печ. л. 1,33.
Уч.- изд. л. 1,0. Тираж 50 экз. Заказ

Редакционно-издательский отдел УрФУ
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19
rio@mail.ustu.ru

Ризография НИЧ УрФУ
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19