

Aatomifüüsika

Aatomifüüsika moodustab viimase lõigu traditsioonilises üldfüüsika kursuses. Selle all mõistetakse kõiki protsesse, mis toimuvad keha(s) (aines) **mikrotasandil**, st. väikseimatest aineosakekestest **seespool**.

Tegelikkuses kuulub sinna terve hulk tänapäeva füüsika all-lõike -- lisaks "aatomite ehitust" käsitlevale veel **tuumafüüsika** - teadus aatomituuma ehitusest ja seal toimuvatest protsessidest; **elementaarosakeste füüsika**, mis käsitleb tuuma koostisosi; **kvantmehaanika** ja **kvantväljateooria** kui aatomisest protsesside jaoks kujundatud matemaatilist tüüpi abivahendid; ning lõpuks ka molekulide ja kristallide kujunemist ning kiirgust käsitlev, sõna-sõnalisest aatomifüüsikast hoopis suuremate objektidega tegelev füüsika osa, mille jaoks üldnimetus puudub.

Või on see juba keemia all-lõik?

Aatomite karakteristik kiirgus. Nagu kiirguse kvantteooria, sai ka aatomifüüsika alguse sajandivahetusel. Mõlemad kujunesid ühe ja sama probleemi -- valguskiirguse teke aines -- uurimise käigus. Kiirguse spektraalne uurimine näitas, et kui **pidev soojuskiirguse tüüpi spekter** on omane **kondenseeritud ainele** (vedelikud ja tahked kehad), siis gaasides lisandub sellele nn. **taust- ehk foonkiirgusele** eraldiseisvatest sagedustest koosnev **joonspekter**.

Joonspektri nimetatakse viimast aga selle pärast, et tavalistes piluspektrograafides paistab ta koosnevat üksikutest heledatest joontest tumedamal taustal. "Taust" ise kujutab endast joontest tunduvalt nõrgemat (väiksema intensiivsusega) pidevat spektrit, mille energiajaotus vastab soojuskiirguse omale. Kõige hämmastavam oli elektriliste gaaslahenduslampide spekter: madalal rõhul ning temperatuuril töötavas lambis puudus pidev spekter täielikult; peaaegu kogu valgus tuli 5 - 10, tihti 1 - 2 kitsa spektrijoonena, mis andis lampidele iseloomuliku värvuse (neoonlambi punane, naatriumlambi kollane jne. värvus).

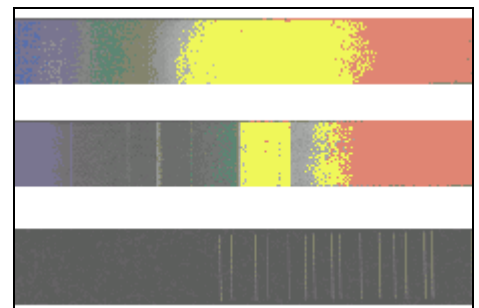
Me teame, et gaase eristab vedelikest-tahkestest molekulide (aatomite) vahelise vastasmõju puudumine. Siit kohe ka oletus, et kui pidev spekter on omane **kehale tervikuna**, siis **joonspekter iseloomustab just kehade koostisse kuuluvate aatomite kiirgust**. Seetõttu nimetataksegi joonspektrit aine **karakteristlikuks kiirguseks**.

Mida hõredam ja külmem on gaas, seda vähem kiirgab ta tervikuna ja seda suurem on kontrast atomaarse kiirgusega. Muidugi peavad aatomid saama kusaolt kiirgamiseks vajalikku energiat ja kui nad

Aatomifüüsika käsitleb keemiliste elementide algosakestes - **aatomites** toimuvaid protsesse.

Aatomifüüsika kitsamas mõttes tegeleb aatomite elektronkatete uurimisega; aatomituumas toimuvaid protsesse uurib tuumafüüsika.

Ainete kiirgusspektri kuju sõltub tihedusest: mida hõredam on aine, seda enam kerkib esile joonspekter.



Kolm spektritüüpi: tahke aine, gaas normaalrõhul ja elektriliselt ergastatud hõre gaas. "Vabade aatomite" karakteristik kiirgus on koondunud kitsastesse joontesse.

Aine karakteristik kiirgus sõltub ainult aatomisestest protsessidest.

ei saa seda soojusliikumisest, peab olema teine, näit. elektriline jõuallikas. Aga selleks võib olla ka valgus või muu elektromagnetkiirgus.

Vesinikuaatom Sageduste näiliselt regulaarne paigutus lausa meelitas otsima valemuid atomaarse kiirguse sageduste arvutamiseks. Esimese sellise valemi leidis 1885. a. J. Balmer vesiniku optilise kiirguse tarbeks.

Et spektrijooned paiknesid geomeetrilist rida meenutava, lainepikkuse lühenemise suunas tiheneva jadana, sobis hästi valem

$$\lambda_n = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 4},$$

kus n on kahest suurem täisarv ($n = 3, 4, 5, 6, \dots, \infty$), $\lambda_0 = 363.4$ nm aga empiiriline konstant. Valem kirjeldas ammendavalt kogu vesiniku spektrit, sama tüüpi seoseid õnnestus leida ka teiste ainete jaoks.

Pärast 1900 aastat läks moodi spektraalanalüüs väljaspool optilist piirkonda. 1906. a. avastas Lyman, et vesinik kiirgab ka ultravioletis, kusjuures joonte lainepikkused vastavad valemile

$$\lambda_n = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 1}, \quad n = 2, 3, 4, \dots, \quad \lambda_1 = 91.2 \text{ nm}.$$

Infrapunases piirkonnas kehtis valem

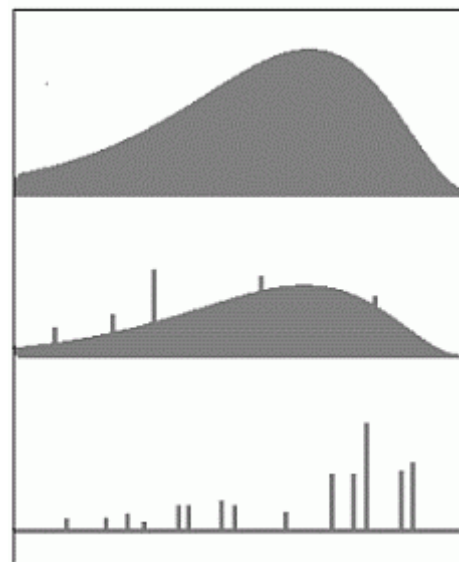
$$\lambda_n = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 9}, \quad n = 4, 5, 6, \dots, \quad \lambda_0 = 820 \text{ nm}$$

- see sai avastaja järgi nimeks Pasheni seeria.

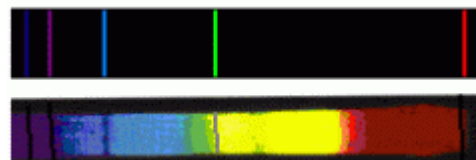
Järgnevatel aastatel lisandus veel kaks infrapunast seeriat ($n \geq 4$ ning 6) ja küllap oleks rida jätkunud, kui vahepeal teoreetikud suuri tegusid poleks teinud.

Üldistatud Balmeri valem. Aga esimene asi, mida tegid teoreetikud, oli üldistatud Balmeri valem. Nimelt märgati, et kui kirjutada Balmeri valem ümber sageduste jaoks ($\nu = c/\lambda$), saame Balmeri valemi asemel

$$\nu = \frac{c}{\lambda_0} \left(\frac{n^2 - 4}{n^2} \right) = \frac{4c}{\lambda_0} \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right).$$



Energiajaotus ülaltoodud spektrites



Balmeri seeria vesiniku spektri nähtavas osas.

- a) kiirgusspektrina vesinikulambis;
- b) neeldumisspektrina kinnistähe Veega (Lüüra alfa) spektris.

Vesiniku spektrijoonte omavahelist paigutust saab kirjeldada **täisarvulist argumenti** sisaldavate valemite abil.

Mis kõige põnevam - sellises formalismis tulid valemite kordajad $4c/\lambda_0$ kõigi seeriade jaoks ühesugused.

Nii saadigi füüsika edasist arengut suuresti mõjutanud valem

$$\nu = T_m - T_n; \quad T_n = \frac{R}{n^2}, \quad m > n.$$

$R = 3.3 \cdot 10^{15}$ Hz on nn. *Rydberg*'i konstant.

Spektraalterm. T_n kannab **spektraaltermi** nime. Niisiis on mistahes seeria mistahes spektrijoone sagedus määratud kindlate termide vahega.

Sagedust määrav spektraalterm on pöördvõrdeline täisarvulise konstandi n ruuduga.

Valem meenutab varemõpitud pöördruutsõltuvust; jätame selle meelde edaspidise tarbeks.

Et kogu see matemaatika tehti pärast Plancki valemi $E = h\nu$ avastamist, võib Balmeri valemit kirjutada ka energia jaoks, korrutades Rydbergi konstanti Plancki konstandiga h . Et kõiki neid konstante (lainepikkuse λ , nurksageduse ω , tavalise sageduse ν ja energia $E = h\nu$ jaoks kehtivaid) nimetatakse ühtviisi ja tähistatakse samuti ühesuguse R -ga, tekib parasjagu segadust. Ülesannete lahendamisel soovitan jälgida dimensioone.

Aatomimudelid.

Valguse ja aine vastasmõju uurimisel rakendasime edukalt nn. **ostsillaatoriteooriat**, mille järgi aine koosnes võnkumisvõimelistest osakestest (atomaarsed ostsillaatorid). Püüdes sama meetodiga kirjeldada atomaarset kiirgust, jõudis J. J. Thomson 1903. a. esimese aatomimudelini.

Sõnaga "**model**" tähistavad teadlased mitte harjumuspärast odavat vähendatud koopiat, vaid **originaaliga sarnaselt funktsioneerivat süsteemi**.

Tavaliselt on see nn **matemaatiline model** - valemite (arvutiprogrammide) kompleks, mille abil saab kergesti rehkendada välisfaktorite mõju uuritavasse objekti (süsteemi). Tunnetuse hõlbustamiseks (aga ka valemite tuletamiseks) tehakse sageli vaheetapina **mõtteline model**, kus uuritavat süsteemi asendab lihtsam, aga samadel põhimõtetel töötav objekt.

Aatomi- ja tuumafüüsikas, kus objektid põhimõtteliselt ei allu vahetule vaatlusele, on "modelite uurimine" ainus võimalus mõõtmistulemuste üldistamiseks.

Seega on kõik aatomimudelid kujuteldavad makroskoopilised süsteemid, mille (füüsika valemite abil arvutatud) käitumine on sarnane reaalse aine "atomaarsete suuruste" käitumisele.

"Aatomimudel" on kas valemite kompleks (matemaatiline model) või sellele vastavalt toimiv makroobjekt, mida kasutatakse teooria(te) illustreerimiseks.

Thomsoni aatomimudel kujutas endast sfäärilise sümmeetriaga homogeenset positiivset ruumlaengut, mille väljas liigub elektron. Elektron oli tol ajal uus asi, tema erilaengu (ning selle kaudu ka massi) oli Thomson määranud kuus aastat varem (1897). Ruumlaeng pidi olema võrdne ja vastasmärgiline elektroni omale, tema ulatuse ("aatomiradius") rehkendas Thomson võnkesagedusest.

Tulemuseks oli lihtne seos

$$\omega = 2\pi\nu = \sqrt{\frac{ke^2}{R^3}}$$

kust nähtub, et võnkesagedus on pöörvõrdeline ruutjuurega aatomi raadiuse kuubist ($\omega \sim R^{-3/2}$).

Balmeri seeria joonte sagedustele vastab $R = (1 + 3) \cdot 10^{-10}$ m, mis on enam-vähem kooskõlas teiste hinnangutega (näit. konstant b Van der Waalsi valemis).

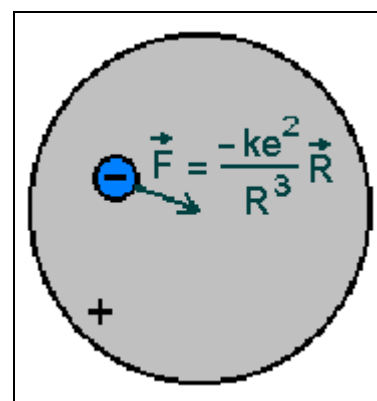
Et vesinik kiirgab väga erinevatel sagedustel, peab olema ka väga erinevate raadiustega vesinikuaatomeid. Kuna joonspektrid olid omased **kõigile ainetele**, tuli välja ülimalt kirju pilt. Asjasse selguse loomiseks alustati eksperimente, milledest edukaimaks osutus Rutherfordi oma.

Rutherfordi katse ja planetaarne mudel.

Laengute jaotumise uurimiseks on kõige lihtsam suunata ainesse laetud osakeste kimp ja jälgida nende trajektoori muutumist. Osakesed peavad olema küllalt väikesed (muidu ei kõverdu trajektor märgatavalt) ja uuritava aine kiht võimalikult õhuke (et vähendada kahe- ja rohkemakordsete hajumiste osa). Rutherford kasutas radioaktiivse preparaadi (raadüümi) poolt kiiratavaid α -kiiri ning üliõhukeseks leheks valtsitud kulda.

Arvutuste lähteandmeteks olid α -osakese erilaeng q/m ning kulla tihedus ja aatommass. α -osakeste kiiruse määras kiirendava elektrivälja potentsiaal (vaata Lorentzi jõu kohta käivaid ülesandeid elektromagnetismi osas ($\frac{mv^2}{2} = qU$), nende arvu kindlaks teha tsinksulfiidiga kaetud ekraanil ilmuvate sähvatuste järgi.

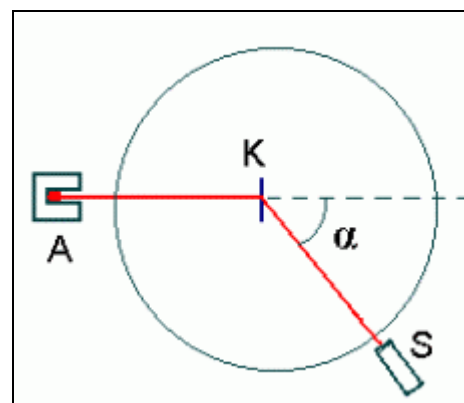
Määratavaks seoseks oli kõrvalekaldunud osakeste suhtelise arvu sõltuvus kõrvalekaldenurgast. Katse kirjelduse koos eeldatava nurkjaotuse valemiga võib leida pea kõigist füüsikaõpikutest (vt. näit. *Saveljev, Füüsika III*, lk. 227 - 232).



Thomsoni mudel - "rosinapuding".

Kas mäletate loengu "Võnkumised" juurde kuuluvat ülesannet läbi Maa puuritud tunneliga?

Thomsoni mudeli sagedusarvutus on (matemaatiliselt) täpselt sama.



Rutherfordi katse skeem.

A - osakeste allikas;
K - märklaud (kuldleht);
S - stsintilloskoop (mikroskoop, mille ette on pandud tsinksulfiidiga kaetud ekraan).
Mõõdetakse hajumisnurka α .

Hajunud osakeste tegeliku nurkjaotuse täpne vastavus punktlaengute väljast arvutatule ongi katse põhitulemus.

Seevastu sageli pakutav "aatomituuma läbimõõt" on vaid positiivse laengu maksimaalne ruumiline ulatus - energia valemist

$$U = kq^2/r = m_e v^2 / 2 = E_k \text{ leitud "ümberpööramisraadius" } r.$$

Kui panna selline $r \approx 10^{-14}$ m Thomsoni valemisse, saame võnkesagedused suurusjärgus 10^{20} Hz, mida ei saa kuidagi õigeks lugeda.

Niisiis - mudel, kus elektron võngub **tuuma sees**, pole võimalik. Järelikult peab ta võnkuma **tuuma ümber**. Mehaanika seisukohalt on seegi võimalik. Veelgi enam: uus ülesanne pole midagi muud, kui **masspunkti liikumine pöördruutsõltuvusega jõuväljas**, st. kõige enam uuritud mehaanikaülesanne.

Lihtne arvutus lähtevalemitega

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{kze^2}{r^2}, \quad \nu = \frac{1}{T} = \frac{v}{2\pi r}$$

annab vesiniku ($z = 1$) Balmeri joone $H\alpha$ ($\nu = c/\lambda = 5 \cdot 10^{14}$ Hz) korral ringorbiidi raadiuse $3 \cdot 10^{-10}$ m.

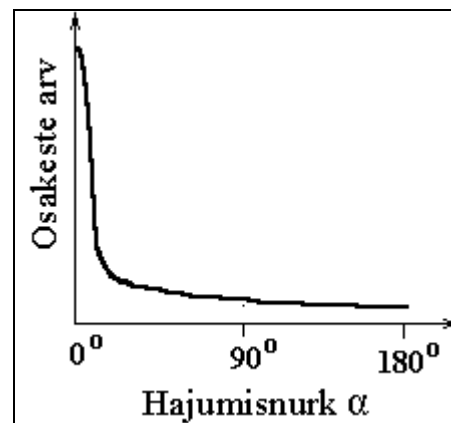
Seega sama tulemus, mis Thomsoni mudeli korral. Pole midagi üllatavat: nii väljatugevus kui võnkesagedus on ju samad!

Rutherfordi mudeli kiire populaarsuse tegelikuks põhjuseks on tema sarnasus Päikesesüsteemiga. Keskel on massiivne tuum (Päike), selle ümber tiirlevad ringikujulistel orbiitidel elektronid (planeedid). Et astronoomia on populaarne teadus, sobis selline piltlik mudel hästi inimestes kinnistunud maailmapildiga. Seda enam, et "tegelikku" aatomit nagunii keegi kunagi ei näe.

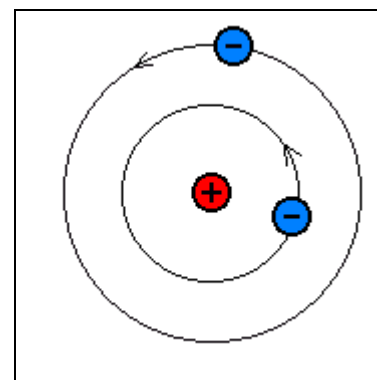
Piltidel on siiski oluline erinevus. Planeedid liiguvad maailmaruumis takistuseta ja seetõttu on Päikesesüsteem miljardite aastate jooksul püsinud muutumatuna.

Aatomis liikuv elektron seevastu **peab kiirgama elektromagnetlaineid**, st. **kaotama energiat**. Et orbiit sõltub koguenergiast ("kõrgematel" orbiitidel on see suurem, "madalamatel" väiksem), tähendab energia kiirgamine elektroni lähenemist tuumale.

Pöördruutsõltuvus $E \sim r^{-2}$ nõuab suurema tõmbejõu tasakaalustamiseks suuremat orbitaalkiirust ($a_N = v^2/r = g$), seetõttu väheneb tiirlemisperiood ja koos sellega kasvab kiiratava valguse sagedus.



Rutherfordi katse tulemus.



"Planetaarne" aatomimudel.

Planetaarse aatomimudeli suurim viga on see, et ta on õige üksnes mittekiirgava aatomi korral.

Tulemuseks on kahekordne vastuolu eksperimendiga: kõigepealt pole "planetaarne" aatom stabiilne, teiseks ei kiirga ta konstantsel sagedusel.

Bohr'i teooria. XX sajandi alguse füüsikal oli juba kogemus selliste olukordade lahendamiseks. Kui miski klassikalises füüsikas ei klapi, tuleb lihtsalt öelda välja mingi oletus (hüpotees, postulaat), mis paneb asja klappima. Esimesena kasutas seda Planck, hiljem Einstein (valguse kiiruse konstantsuse nõue).

Seetõttu pole ime, et 1913. a. Taani füüsik Niels Bohr muutis vastuolu seaduseks, sõnastades selle oma esimeses postulaadis:

Elektronid võivad aatomis liikuda ainult kindlatel statsionaarsetel orbiitidel. Sellisel orbiidil liikudes elektron ei kiirga.

Niisiis, statsionaarsel orbiidil elektron energiat ei kaota ja võib seal püsida igavesti. Edasi on lihtne: selleks, et aatom kiirgaks, peab elektron orbiiti vahetama.

Elektroni üleminekul suurema energiaga orbiidilt väiksema energiaga orbiidile aatom kiirgab kvandi, üleminekul väiksema energiaga orbiidilt suurema energiaga orbiidile aga neelab selle.

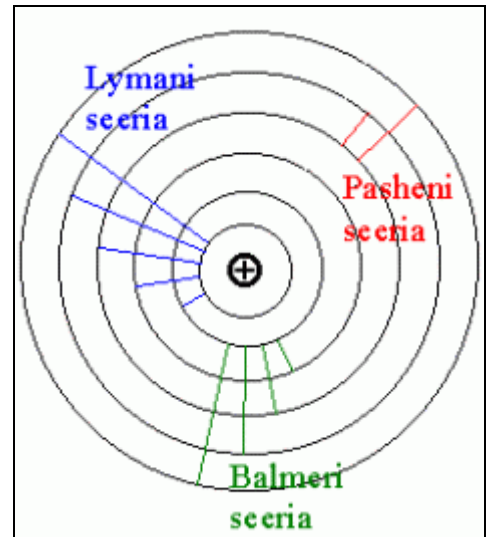
Järelikult pole kiirguse lainepikkus (sagedus) pole määratud mitte elektroni tiirlemissagedusega, vaid **statsionaarsetele orbiitidele vastavate energiatega vahega**. See on täiesti uus lähenemine - lähtumine mitte aatomi ehitusest, vaid **kiirguse olemusest**. Kuna kiirgus koosneb kvantidest, ei saa aatom kaotada energiat pidevalt, vaid **ainult terve kvant korraga**.

Väljend "elektroni üleminek ühelt püsiorbiidilt teisele" on selle fakti **piltlik esitus planetaarmudeli keeles**; samahästi võiks meil olla mingi teine võrdlusobjekt (ostillaator, väriseja või keskaegne "tuleaine" flogiston), mille energia "koosneb kvantidest" (kvandikott?). Ajalooliselt oleme aga kinni planetaarmudelil ja ega see väga halb mudel polegi.

Bohri kvantmudeli aluseks on spektraaltermid - kui algselt oli Rydbergi valemis $\nu = T_n - T_m$ sagedused, siis "Bohri variandis" on selleks **energiad**: $h\nu = \Delta E = E_m - E_n$.

Kui kirjeldada "energiaterme" planetaarmudeli keeles "ümber tuuma tiirleva elektroni koguenergiaga n -ndal püsiorbiidil", saame

$$E_n = \frac{kme^4 Z^2}{\pi^2 h^2} \frac{1}{n^2};$$



Koolifüüsika tavajoonis: planetaarne mudel Bohr'i orbiitidega.

Bohr'i postulaatid pole midagi muud, kui Rydberg'i spektraaltermid, kirja panduna planetaarmudeli näitel ning kiirguse kvant-teooria keeles. Lugege lõik veel kord läbi. Kas saite aru?

lisades siia veel "jõudude tasakaalu" $\frac{mv^2}{r} = \frac{kZe^2}{r^2}$, võime leida ka "orbiidi raadiuse"

$$r_n = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 k m Z e^2}$$

ning "orbiidi pikkuse" ($s = 2\pi r$) ja "elektroni kiiruse orbiidil".

Ühtki neist suurustest pole kunagi mõõdetud, ka pole nad määratavad kaudsel teel - nad on kõigest "planetaarmudeli parameetrid".

Naatriumi spekter. Füüsikaõpikute üldlevinud kontseptsiooni järgides peaksin nüüd seletama, kuidas Bohri teooria rakendamine teistele aatomitele (heelium, liitium jne) ebaõnnestus ja kordama lauset Bohri kvantteooria ebajärjekindlusest. Et ma sellest ise hästi aru ei saa, võtan vahele ühe pooleldi unustatud teooria. See on Rydbergi valem naatriumi spektrijoonte kohta, pärit 1897. aastast.

Rydberg, "üldistatud Balmeri valemi" autor, avastas nimelt analoogilise seaduspärasuse naatriumiaurude spektris. Naatrium ise oli sajandivahetuse spektraalanalüüsis levinuim lainepikkuste etalon, kuna tema tugev kollane joon asus täpselt optilise spektri keskel. Lisaks sellele on naatriumi spektris terve rida nõrgemaid jooni, mille Rydberg jagas kolmeks Balmeri-tüüpi seeriaks: terav, pea-, ja difuusne seeria.

Balmeri tüüpi valemitega saab kirjeldada ka leelismetallide spektreid.

Kõigi seeriade jaoks kehtis "parandatud" Balmeri valem

$$\nu = \frac{R}{(n+a)^2} - \frac{R}{(m+b)^2}$$

Nagu Balmeri valemis, on ka siin n , m täisarvud, kusjuures n algväärtus oli naatriumil 3, $m > n$, a ja b on mittetäisarvulised parandid. Seeriade nimed vastavad sellele, millisena Rydberg neid jooni spektrograafis nägi: terava seeria jooned on nõrgad, kuid kontrastsed, peaseeria omad kõige tugevamad, difuussel nõrgad ja laialivalguvad.

Hiljem, katseandmete kogunedes, selgus, et see valem kehtib kõigi leelismetallide jaoks. Muidugi tulevad parandusliikmed erinevad, kuid meie jaoks on oluline, et ka siin sõltuvad energiatasemed täisarvude ruutudest.

Lainemehaanika

"Kvandidud energiatasemete" e. statsionaarsete orbiitide olemasolu aatomis viib mõttele, et igasugune liikumise muutus peab olema diskreetne (hüppeline), kuna muidu kanduks energia üle pidevalt.

Et jõuväljad, kus liikumine toimub, on **pidevad** ($\vec{F} = \text{grad}U$ on pidev funktsioon), jääb üle vaid võimalus, et **hüppeliselt toimub tee valik**.

Niisugust asja kogesime me mäletatavasti optikas interferentsinähtust kirjeldades -- valguskiir suundub pärast pilu(de) läbimist sinna, kus keralainete liitumisel on võnkeamplituud maksimaalne.

Kui rääkida kvantfüüsika keeles, siis määrab valguskiire trajektoori tingimus $\Delta s = n \cdot \lambda$, mis on väga sarnane Plancki tingimusele $\Delta E = n \cdot h\nu$.

Lainehüpotees. 1923. a. avaldas **Louis de Broglie** ajakirja *Comptes Rendus* (lad. Aruanne, mõeldakse Prantsuse Akadeemia jooksvat aruannet, oli 19. saj. mandri-Euroopa tähtsaim teadusajakiri) oktoobrinumbris artikli "Fermat' printsiip mehaanikas", kus tuli välja järgmise väitega:

Mehaanika vähima mõju printsiip on ekvivalentne Fermat' printsiibiga optikas, kui keha impulss $\vec{p} = m\vec{v}$ asendada lainearvuga valemi $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ abil.

Teiste sõnadega: omistades liikuvale osakesele lainepikkuse

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

võime trajektoori leidmisel kasutada interferentsivalemeid.

Seega arvutuslikku tüüpi lihtsustus. Kui rakendada seda kinnisel orbiidil liikuvale elektronile, saame "seisva laine tingimuse" $2\pi r = n\lambda$. Ainult sellise orbiidi korral on osake "nullist erinev", ülejäänud juhtudel temale vastav laine kustutab iseenda interferentsi käigus.

Et asjasse selgust tuua, arvutame Bohri valemist elektroni impulsi ja võrdleme sellele vastavat lainepikkust orbiidi pikkusega $2\pi r$.

Kvant- ehk lainemehaanika rajaja L.deBroglie hakkas kasutama mittepidevate funktsioonide illustreerimiseks interferentsivalemeid.

Lähtume valemeist

$$v = \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 n h}; \quad r = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{\pi m Z e^2}.$$

Lähtudes impulsist $p = mv$ saame lainepikkuseks

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\epsilon_0 n h^2}{m Z e^2}.$$

Orbiidi pikkus on

$$2\pi r = \frac{2\epsilon_0 n^2 h^2}{m Z e^2} = n\lambda.$$

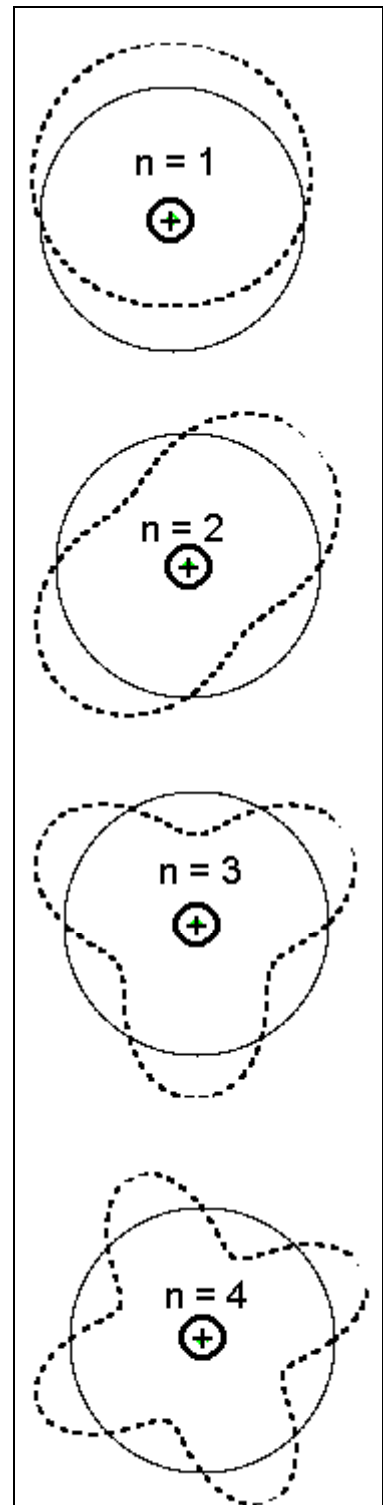
Niisiis vastab esimesele Bohri orbiidile üks, teisele kaks, jne lainepikkust. Lainepikkus ise kasvab vastavalt impulsi, seega elektroni orbitaalkiiruse vähenemisele. Et energia on võrdeline sagedusega (pöördvõrdeline lainepikkusega), väheneb samal ajal "energianivoode vaheline kaugus". Kõik täpselt nii, nagu vaja.

Muide: ka Max Planck pidas oma "energiakvante" arvutuslikku tüüpi abivahendiks. Alles Einstein hakkas rääkima "footonitest".

Igasuguse teooria mõte seisnebki selles, et lihtsustada arvutusi või midagi ennustada. "Laine" sissetoomine küll midagi lihtsamaks ei muutnud ja küllap oleks ta unustatud, kui mitte E. Schrödinger 1926. aastal poleks leidnud võrrandit, mille abil sai lainet (täpsemalt nn. **lainefunktsiooni**) arvutada teoreetilise mehaanika sümboolikast lähtudes.

Seejuures jääb lainefunktsioon ise tavaliselt leidmata (mitte et ei osata, vaid et kedagi ei huvita!), piirduakse vaid süsteemi (aatom, molekuli) nende **energiate, mille korral lahend eksisteerib, leidmisega**. Kuna kiiritava kvandi sagedus sõltub üksnes energiast, annab "lubatud energiatega" teadmine võimaluse spektrit ennustada.

Aga just see oligi füüsikute eesmärk. Ennustada sagedusi (spektrijooni), mitte aga rehkendada "elektroni liikumist aatomituuma ümber".



Bohr'i aatomimudeli statsionaarsed orbiidid, joonistatuna seisevlainete kujul.

Elektronide difraktsioon ja Davisson-Germer'i katse. Kui õpikutes räägitakse elektronide difraktsioonist, siis illustreeritakse seda tavaliselt optikakursusest tuntud Young'i katse analoogiga:

Paralleelsetele piludele (või aukude paarile) langeb elektronide juga. Et de Broglie järgi vastab see tasalainele, tekib pilude taha pandud ekraanil interferentspilt - tumedate ja heledate ribade vaheldumine. Kui sulgeda üks piludest või kiiritada neid kordamööda, tumedaid ribasid ei teki, jääb vaid tavaline hajumine.

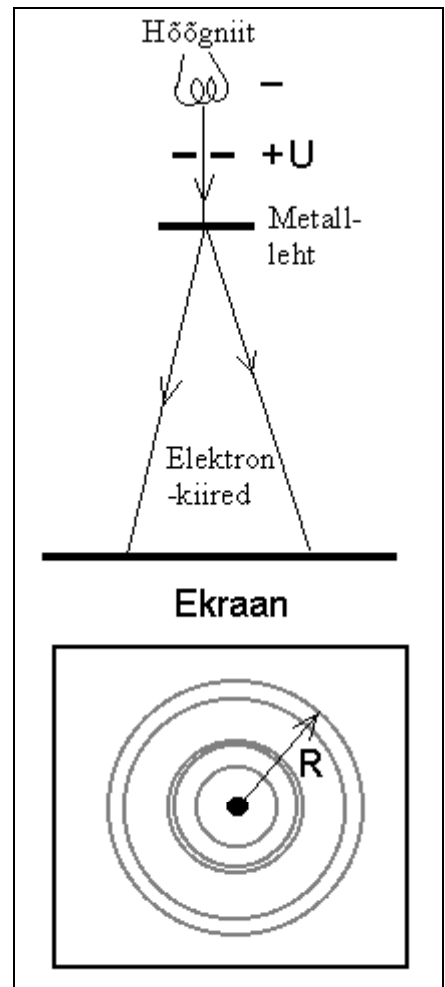
Õige ta on, aga ärge võtke seda tõestusena. Niisugust katset pole keegi kunagi teinud ega saagi tegema. Juba nähtava valguse korral on Young'i katse eksperimenditehnika piiril, koolilaboris pole teda tavaliselt võimalik läbi viia (kasutatakse kaksikpeeglit või kaksikprismat). Elektroni "lainepikkus" on nähtava valguse omast **tuhat korda väiksem** (kiirusel 10^7 m/s, mis vastab elektronikiiretorudes tavalisele pingele 1000 V, on lainepikkus $\lambda \approx 10^{-10}$ meetrit e. 0.1 nm) - sellise "laiusega" pilu pole võimalik teha juba aine atomaarse ehituse pärast. Niisiis on tegu mitte eksperimendi, vaid illustratsiooniga.

Katse, mis kinnitas (vähemalt arvab nii valdav enamik füüsikuid) elektronikiire laineiseloomu, tehti tolsamal 1924. aastal C. J. Davissoni ja L. H. Germeri poolt nende röntgenstruktuuranalüüsi laboris (muide, selliste asjadega tegeldi ka instituudis, kus töötas de Broglie!). Elektronikiir suunati kristallpreparaadile, mida eelnevalt oli vaadeldud röntgenikiirtes; elektrone kiirendav pinge valiti aga selline, et nende lainepikkus oleks võrdne varem kasutatud röntgenikiirte omaga. Piltide identsus pluss selle muutumine pingel kinnitas lainehüpoteesi ja de Broglie valemi õigsust.

Lainemehaanika klassikalise demonstratsioonikatse mõtles välja esimese aatomimudeli autori J.J. Thomsoni poeg George Paget Thomson. See on Rutherfordi katse analoog, kus α -osakeste asemel kasutatakse elektrone. Pärast metall-lehe läbimist hajub elektronikiir, aga mitte ühtlaselt, nagu Rutherfordil, vaid rõngastena, nagu hajuvad valguskiired väikeselt avalt. Lihtne katse, aga keeruline teooria. Klassikalise füüsikaga pole siin midagi teha.

Proovime korraks piltlikult ette kujutada seda õnnetut elektroni, mis füüsiku tahtel läbi ava, pilu või metall-lehe lendab.

Me tunnustame Rutherfordi-Bohri-de Broglie aatomimudelit. Niisiis ei kohta elektron mingeid "pilu servi", mida me tavaliselt paberile joonistame. Tema ees on peaaegu kosmiline tühjus, kus jõudude tasakaalul põhineva korrapära järgi paiknevad aatomituumad - kaduvväikeste mõõtmetega laengud, elektrostaatilise välja allikad. Nende ümber tiirlev-võnkuv "elektronpilv" moonutab seda jõuvälja, pealegi asub kusagil ka elektron ise, samuti ülitugeva välja allikas.



G.P.Thomsoni katse
Kiirendava pingel U muutmisel muutuvad difraktsioonirõngaste läbimõõdud.

Küsimus: Kas suuremale pingele vastavad suuremad või väiksemad rõngad? Vihje: mõelge lainepikkusele!

Kuidas meie elektron selles väljade müriaadis oma tee leiab, ei saa me kunagi teada. Samuti ei tea me, mida ta tegelikult kujutab. Nagu ütles üks marksismi klassikutest, on see probleem ammendamatu. Aga me oskame rehkendada **elektronide kogumi** - elektronikiire käitumist; ja seda tehes konstrueerida elektronlampe, kineskoope, elektronmikroskoope jms.

Arvutamisel kasutame **lainemehaanikat** kui mugavat ning enam-vähem mõistetavale "klassikalisele" analoogile tuginevat algoritmi.

Lainefunktsioon ja Schrödingeri võrrand. Leppinud sellega, et elektron on laine, paneme kirja **lainevõrrandi**:

$$\Psi = \Psi_0 \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r}).$$

Selline nägi välja ruumis leviva tasalaine võrrand.

Mäletatavasti oli ta lahendiks teist järku diferentsiaalvõrrandile

$$\Delta\Psi = \frac{1}{v_\Psi^2} \frac{d^2\Psi}{dt^2}.$$

Meile selline võrrand midagi ei anna, kuna tema lahend on juba kirjas.

Proovime leida "oma võrrandit" mehaanikast tuntud seosest

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}, \quad (*)$$

mis oleks laine kiirust $v_\Psi = \lambda\nu$ "asendav" seos.

Kirjutame kõigepealt lainevõrrandi "kvantmehaaniliseks". Asendame

- $\omega = E/\hbar$ (Planck'i valemist $E = \hbar\omega$,
- lainevektori $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ (de Broglie valemist $\vec{p} = \hbar\vec{k}$)
- ning läheme üle eksponentkujule:

$$\Psi = \Psi_0 e^{-i(\frac{Et}{\hbar} - \frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar})}.$$

Kujutame (lihtsuse mõttes), et laine levib x -telje suunas. Sel juhul

- $r = x$,
- $p = p_x$,
- $\Delta\Psi = d^2\Psi/dx^2$.

"Laineteooria" pole elektroni kui objekti kirjeldus, vaid klassikalisel füüsikal põhinev arvutusalgoritmi illustratsioon.

Schrödingeri võrrandi tuletuskäik on illustratiivne ega kuulu kohustusliku materjali hulka.

Aga ta on Teie matemaatilise lugemisoskuse proovikivi.

Lainevõrrand

Laine diferentsiaalvõrrand

Energia avaldatakse impulsi kaudu

"Kvant-teoreetiline" lainevõrrand eksponentkujul

Et saada laine Ψ diferentsiaalvõrrandit, mis rahuldab seost (*), tuleb avaldada osakese energia E ja impulss p Ψ tuletiste kaudu.

E saame, diferentseerides lainevõrrandit t järgi:

$$\frac{d\Psi}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi_0 e^{-i(\frac{Et}{\hbar} - \frac{px}{\hbar})} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi$$

millest

$$E = -\frac{\hbar}{i\Psi} \frac{d\Psi}{dt} = \frac{i\hbar}{\Psi} \frac{d\Psi}{dt}.$$

Energia avaldatakse lainevõrrandi ajalise tuletisena

Viimane teisendus tähendab lugeja ja nimetaja i -ga korrutamist: i tuleb lugejasse, nimetajasse jääb $i^2 = -1$.

Analoogiliselt leiame p , võttes teise tuletise x järgi:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \left(\frac{i}{\hbar} p\right)^2 \Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi,$$

millest

$$p^2 = -\frac{\hbar^2}{\Psi} \frac{d^2\Psi}{dx^2}.$$

Impulsi ruut avaldatakse lainevõrrandi ruumtuletisena

Jääb veel saadud võrrand $2m$ -ga läbi jagada ning eelmisega võrduma panna:

$$-\frac{\hbar^2}{2m\Psi} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{i\hbar}{\Psi} \frac{d\Psi}{dt}.$$

Leitud suurused pannakse Newtoni mehaanika kineetilise energia avaldisse - saadakse **vaba osakese võrrand**.

Kui Ψ nimetajast ära kaotada (st. võrduse mõlemat poolt Ψ -ga korrutada), on meil käes **Schrödingeri võrrand vaba osakese jaoks**.

Kui osake liigub konservatiivses jõuväljas, tuleb kineetilisele energiale E lisada potentsiaalset energiat väljendav liige U .

Asendades teist järku tuletise x järgi Laplace'i operaatoriga $\Delta\Psi = \text{div grad}\Psi$, saame kokku

$$-\frac{\hbar^2}{2m\Psi} \Delta\Psi + U = \frac{i\hbar}{\Psi} \frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

ning pärast Ψ -ga korrutamist

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + U\Psi = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t},$$

mis ongi **Schrödingeri võrrandi** üldkuju.

Kui lisada kineetilisele ka potentsiaalne energia, saadakse **osakese liikkumisvõrrand jõuväljas**.

Peame kohe ütlema, et mingeid üldiseid meetodeid selle võrrandi lahendamiseks pole. Lihtsamail juhtudel (välisjõudude puudumine, ajas muutumatu väli) saab lahendeid muidugi leida.

Õnneks pole meil lainefunktsiooni endaga midagi peale hakata. Asi, mis meid huvitab, on **interferentspildi ajalis-ruumiline käik**, st. **lainefunktsiooni amplituudi muutumine**.

Kompleksmuutuja teoriast on teada, et amplituudi määrab $\Psi\Psi^*$ ($(a + bi)(a - bi) = a^2 - i^2b^2 = a^2 + b^2 = r^2$, kus r on kompleksarvu moodul geomeetrisest kujust); laine "sagedus" pole üldse oluline.

Niisiis oleks hea ajas muutuvast osast vabaneda. Kirjutame lainevõrrandi ümber:

$$\Psi = \Psi_0 e^{-i(\frac{m\mathbf{r}}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar})} = \Psi_0 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{i\frac{m\mathbf{r}}{\hbar}} = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \psi(\mathbf{r}).$$

See, mida otsime, on **ruumiline seisevlaine** $\psi(\mathbf{r})$, mille **amplituudi maksimum** $\psi\psi^*$ näitab meile osakese asukohta. Proovime eraldada lainevõrrandist võnkumise ajalise komponendi ja seejärel uurida amplituudi väärtust ruumifunktsioonina.

Pannes kaheosalise lainefunktsiooni Schrödingeri võrrandisse ja eeldades, et ψ ajaline tuletis on null, saame

$$-\frac{\hbar}{2m} \Delta \psi e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + U \psi e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = i\hbar \left(-i\frac{E}{\hbar}\right) \psi e^{-i\frac{E}{\hbar}t}.$$

Viimase teguri kordaja $i\hbar(-i\frac{E}{\hbar}) = E$ ning koondades võrrandist ajas muutuva eksponendi, saame **statsionaarse oleku võrrandi**

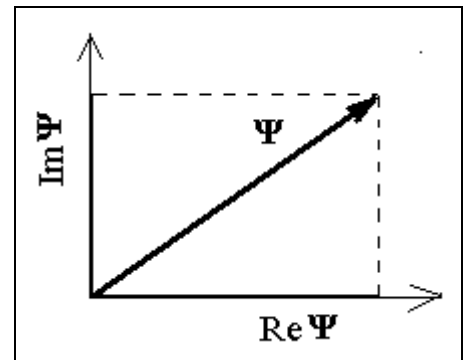
$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0.$$

$E - U = L$ on meile mehaanikast tuttav **Lagrange'i funktsioon**.

Saadud võrrandil on kaks võimalikku lahendit:

- eksponentfunktsioon, kui ψ kordaja on negatiivne ja
- **ruumis harmooniliselt muutuv funktsioon (siinus, koosinus), kui kordaja on positiivne.**

Et otsime **lainefunktsiooni** siis kõlbab meile vaid teine võimalus



Faasidiagramm *phasor* komplekstasandil. Mooduli ruut (laine amplituud) on $\psi\psi^*$

See on lainefunktsiooni hetkväärtuse valem.

Hetkväärtuse tuletis aja järgi

Statsionaarse oleku võrrand

Selleks peab olema $E > U$, mis tähendab vaba osakest, millel on piisavalt energiat jõuväljast väljumiseks.

Kui $E < U$, on enamikel juhtudel lainefunktsioon määratu.

Erandi moodustavad kindlad energiatasemed, kus lainefunktsioon on võimalik **nullist erineva amplituudiga seisevlainena**.

Energia selliseid väärtusi nimetatakse **võrrandi omaväärtusteks** ja vastavaid lainefunktsioone omafunktsioonideks.

Omväärtuste ja -funktsioonide leidmise näiteid vt. *Saveljev, Füüsika III*, lk 247 - 254.

Ühe-elektroni-üleminekud. Tuleme tagasi oma põhiprobleemi - aatomi kiirgusspektri juurde. Nüüd teame, et pannes Schrödingeri võrrandisse elektroni potentsiaalse energia aatomituumaga väljas, saame omaväärtustena energiatasemed.

Et väli on tsentraalsümmeetriline, on otstarbekas kasutada sfäärilisi koordinaate. Laplace'i operaator Δ koosneb nagu kolmruumile kohane kolmest liikmest, mistõttu kogu võrrand saab kuju

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0.$$

Omväärtusprobleemi lahend sõltub nüüd välja sümmeetriast. Üldjuhul peaks kvant-tingimus $\psi(x) = \psi(x + n\lambda)$ kehtima kõigi kolme vabadusastme (r, ϑ, φ) korral.

Seega tuleb meil mängu koguni **kolm kvantarvu**;

aatomifüüsikas tähistatakse neid tähtedega n, l, m ja nimetatakse vastavalt

- **peakvantarvuks** (n),
- **orbitaalseks kvantarvuks** (l) ja
- **magnetiliseks kvantarvuks** (m).

Iseasi, kas neile ka energianivoosid vastab.

- Kui $n = 1$ ("orbiidil üks lainepikkus"), ei anna "laine pööramine" ϑ või φ sihis midagi;
- $n \geq 2$ puhul aga saame juurde täiendava laine.

Seotud elektroni lainevõrrand omab lahendit vaid kindlate energiatega korral

Kas saite jagu?

Punktlaengute tsentraalsümmeetrilise välja korral kasutab nii tavaline kui kvantmehaanika **sfäärilisi koordinaate**.

Perioodilisust märkivad **täisarvulised** kordajad kannavad lainemehaanikas **kvant-arvude** nime.

Piltlikustamise eesmärgil loetakse orbitaalset (mõnikord nimetatakse ka asimuutaalseks, kuna θ on asimuutnurk) kvantarvu elektroni impulssmomenti (pöörlemishulga) kirjeldajaks. Seega on ka impulssmoment kvanditud, ning samuti tema projektsioonid etteantud teljele - viimaseid mõõdab siis magnetiline (polaarne?) kvantarv m . Kokku on statsionaarne olek määratud siiski energiaga ja tsentraalsümmeetrilise välja korral sõltub see vaid peakvantarvust n . Nii on lood vesinikuaatomis.

Leelismetallide korral on pilt erinev. Ka siin toimuvad üleminekud üheainsa (valents)elektroni orbiidi muutuste kaudu. Et aga erinevalt vesinikust on väli mõjutatud ka teiste, "sisemiste" elektronide poolt, pole energiatasemed orbitaalse kvantarvu l eri väärtustel enam samad.

Seda näitavadki parandid Rydbergi valemites. Magnetiline kvantarv m aga jääb varjatuks seni, kuni ruumiteljed on energeetiliselt samaväärsed.

Tarvitseb meil aga "sisse lülitada" väline (makroskoopiline) elektrivõi magnetväli, kui asi muutub. Tekib elektroni "orbiidi pretsessioon" (jälle klassikalise füüsika keeles!), salvestub täiendav energia ja energianivood lõhestuvadki vastavalt magnetkvantarvule.

Vastavat muutust spektris nim. Starki (elektriväli) või Zeemani (magnetväli) efektiks.

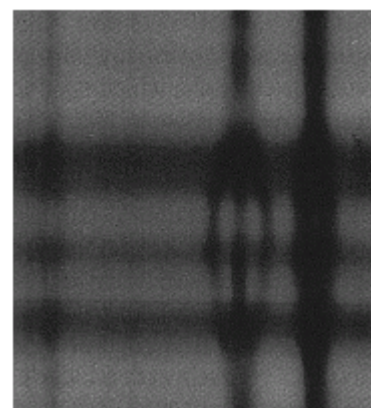
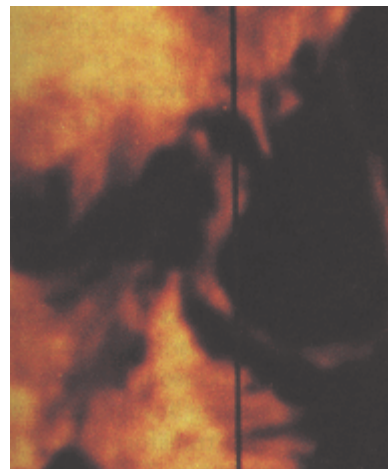
Neljas kvantarv - spin. Kui spektrograafide lahutusvõime jõudis kümnendiku nanomeetrini, selgus, et enamik jooni koosneb mitmest lähestikku asuvast komponendist. Seega peab eksisteerima veel üks energia salvestamise võimalus.

1925. a. esitasid S. Goudsmit ja G. Uhlenbeck hüpoteesi, et ka elektronil on pöörlemisenergia. Kui elektroni omaimpulssmoment ühtib tema orbitaalse liikumise impulssmomentiga, on energia suurem kui juhul, kus momendid on vastassuunalised.

Omaimpulssmomenti nimetati **spin**'iks ja see oli juba olemuselt kvanditud (kas üht või teistpidi).

Talle omistati kvantarv s , mis erinevalt teistest omas murdväärtust $\pm \frac{1}{2}$.

Schrödingeri võrrandist, kus Laplace'i operaator koosneb kolmest liikmest, pole neljandat kvantarvu kusagilt võtta. Aga 1920-datel aastatel oli hästi teada, et harjumuspärane eukleidiline kolmruum pole suunoi ainus (aga iseoi mitte narim) võimalus füüsikaliste



Zeemanni efekt.
Päikeselaigu magnetväli (ülemisel pildil) lõhub spektrijoone kolmeks eri lainepikkusega komponendiks.

Elektroni pöörlemis-suund annab neljanda kvantarvu - **spinni** (ingl. *spin* - pöörlema, ka värten).

Spinni lisamine muudab pildi neljamõõtmeliseks ("aegruumiliseks").

nähtuste kirjeldamiseks.

Elektrodünaamika ja relatiivsusteooria **neljamõõtmeline aegruum**, kus kolmele ruumikoordinaadile lisandub $x_4 = ict$ (t on tavaline ajakoordinaat), saab lainevõrrand kuju

$$(\square - \kappa^2)\psi = 0,$$

kus \square on Laplace'i operaatori Δ 4-mõõtmeline analoog, κ vastab lainearvule ja avaldub $\kappa = mc/\hbar$, mass m on relativistlik, st. sisaldab lisaks "tavalisele" seisumassile ka koguenergia.

Et \square koosneb **neljast liikmest**, on ka omaväärtuste komplekte neli ja spinkvantarv s sobib hästi Schrödingeri kolmiku täienduseks.

Kokkuvõttes saame tuuma ümber tiirlevast **üksikust** elektronist järgneva pildi:

- Sümmeetrilises väljas määrab energiataseme paar n_s ,
- ebasümmeetrilises kolmik nls ja
- välise (magnet)välja olemasolul kogu nelik n_lms .

Vastavalt energiatasemetele kujunevad ka üleminekud; spekter tuleb seda keerukam, mida rohkem on tasemeid. Et jooni siiski lõplik arv on, seda tingivad mõned lainekontseptsioonist tulenevad **jäävusseadused**.

Määramatuse relatsioon. Elektronile lainepikkuse omistamine ja tema asukoha sidumine seisvlaine maksimumidega tähendab, et **asukoht on määratav lainepikkuse täpsuseni**. Samasuguse tõlgenduse võib anda ka Planck'i energiakvandile: ülekantav energiahulk määrab minimaalse ajavahemiku (perioodi), mille vältel on ülekande võimalik.

1927. aastal andis saksa füüsik Werner Heisenberg neile valemitele kuju, mis on tänapäeval tuntud määramatuse relatsiooni nime all:

$$\Delta x = \lambda = \frac{h}{p} \implies \Delta x \Delta p \geq h,$$

$$\Delta E = h\nu = \frac{h}{T} \implies \Delta E \Delta t \geq h.$$

Suurusi Δx , Δp , ΔE ja Δt võib käsitleda kui tavalisi mõõtmisvigu. Määramatuse printsiip ütleb, et teatud väikesed vead on looduseadustesse "sisse kirjutatud", nad on **omiette looduseadus**. Filosoofilistes tõlgendustes räägitaksegi tavaliselt

Heisenbergi määramatuse printsiip (relatsioon) seob osakese asukoha ruumis tema kiirusega, ajamomendi aga energiaga. Mõlema täpsusele paneb piiri kvanttingimus.

"mõõtmistäpsusest".

Tavaväide on järgmine: mida täpsemalt püüame määrata impulssi (energiat), seda ebatäpsemaks muutub asukoht (aeg).

Kvanditud faasiruum. Füüsikud ise suhtuvad määramatuse relatsiooni kui võimalusse tuua lisaks Newtoni "pidevale ruumile" valemeisse "tükiline" **kvantruum**, kus asukoht-impulss on määratud kvantarvudega. Aga - see on teostatav ainult sellises (matemaatilises) ruumis, kus **niisugused asukoht kui impulss on võrdõigused ruumikoordinaadid.**

Teoreetilises mehaanikas nimetatakse selliseid ruume **faasiruumideks**. Omal ajal olid nad kasutusel kui arvutuslik abivahend - nende abil sai liikumist kirja panna lineaarsete diferentsiaalvõrrandite abil, kasutamata teist järku tuletisi.

Kui klassikalise mehaanika faasiruum oli pidev, siis kvantfüüsikas koosneb see ühesuguse servapikkusega "kastikestest". Iga sellise kuubikujulise kasti sisse võib panna ühe või mitu osakest, mis kvantmehaanika koha pealt omaksid ühesuguseid (faasi)ruumi koordinaate.

Kui võtta ruumikoordinaatidele lisaks ka aeg, saame klassikalises füüsikas nn. **aegruumi** - mille neljandaks koordinaadiks on ajavahemiku Δt jooksul valguse poolt läbitud vahemaa $c\Delta t$. Ka faasiruumis on ajakoordinaat olemas, energia $E = pc = mc^2$ kujul. Valemit

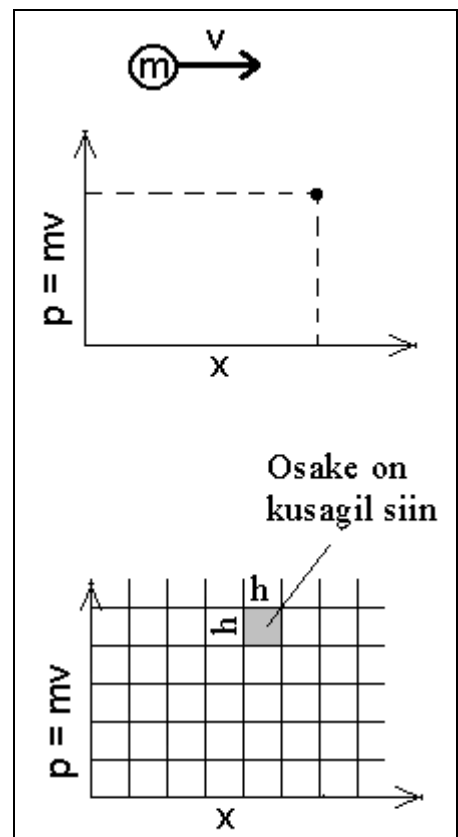
$$E = mc^2$$

seostatakse tavaliselt Einsteini relatiivsusteooriaga ja nimetatakse **massi ning energia ekvivalentsuse seaduseks**. Kui aga käsitleda energialiiget faasiruumi täiendava (nüüd juba kaheksanda!) koordinaadina, saame kokku kaheksamõõtmelistest kastikestest koosneva diskreetse (mitte pideva) matemaatilise ruumi

See ongi uue ajastu füüsikute matemaatiline mängumaa. Kohe näete, mida tema abiga korda võib saata.

Pauli keeld ja kvantstatistika Naatriumi spektri kirjeldamisel jätsime põhjendamata spektraaltermide lähtumise peakvantarvu väärtusest 3. See, et tegu on ühe elektroniga paljudest - valentselektroniga - sai ära öeldud; põhjus, miks ei või $n = 1$ või 2, jäi selgusetuks.

Mendelejevi tabel. Keemiliste elementide perioodilisuse süsteemi avastas D Mendelejev 1869 a 1920-ndateks aastateks oli keemias



X-telge pidi liikuva osalese asukoht faasiruumis klassikalise (ülal) ja kvantmehaanika (all) tõlgenduses.

välja kujunenud elektroonne valentsiteooria, mille järgi omaduste perioodilisuse põhjuseks oli "maagiline arv" kaheksa (rühmade arv perioodis). Kui Goudsmit ja Uhlenbeck tulid välja neljanda kvantarvuga, selgus, et perioodide teket saab kirja panna kolme lihtsa reeglga:

1. Elektroni põhiseisundiks aatomis on minimaalse energiaga seisund (potentsiaalse energia miinimumi lause)
2. Elektroni energia on seda suurem, mida suurem on kvantarvude summa $n + l$; kui need on võrdsed, vastab suurem energia n suuremale väärtusele (Kletškovski reegel).
3. Aatomis ei saa olla kaht elektroni, millel oleks samasugune kvantarvude nelik (Pauli keeluprintsiip).

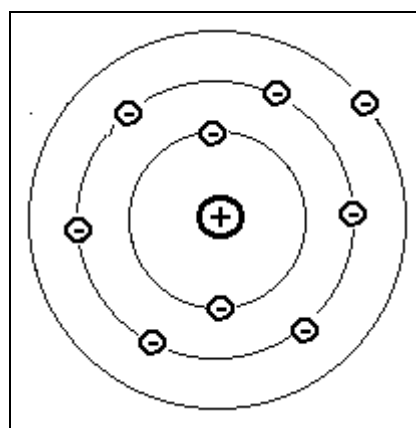
Lihtsuses peitub ilu, ja nende reeglite vastavus tegelikkusele on vapustav. Aatomi elektronkate on **kihilise ehitusega**: kvantarvude paarile nl vastavad **allkihid** täituvad kindlas järjekorras; orbitaalse kvantarvu l väärtustele **0** ja **1** vastavad allkihid, sisaldades kokku alati **8** või vähem elektroni, **määravad elemendi rühma**, koos sellega ka valentsi. **Perioodi** määrab **välimise katte peakvantarv** n ; elementide arvu perioodis aga pärast peakvantarvu suurenemist lisandunud elektronide arv.

n	n+l	allkihi elektrone kokku		valents- elektrone	
		smbol	kihis elektrone		
1	1	1s	2	2	kuni 2
2	2	2s	2	4	kuni 2
	3	2p	6	10	3 kuni 8
3	3	3s	2	12	kuni 2
	4	3p	6	18	3 kuni 8
4	4	4s	2	20	kuni 2
	5	3d	10	30	2
5	5	4p	6	36	3 kuni 8
	5	5s	2	38	kuni 2
6	6	4d	10	48	2
	6	5p	6	54	3 kuni 8
7	7	6s	2	56	kuni 2
	7	4f	14	70	2
8	7	5d	10	80	2
	7	6p	6	86	3 kuni 8
9	7	7s	2	88	kuni 2
	8	5f	14	102	2
10	8	6d	10	112	2
	8	7p	6	118	3 kuni 8
11	8	8s	2	120	kuni 2
	9	4g	18	138	2

Keerulisemates aatomites jagunevad elektronid sama peakvantarvuga kihtidesse - elektronkatetesse.

Elemendi keemilised omadused (valentsi) määrab välimise kihi täidetud.

Elektronkatete täitumise järjekorra määravad potentsiaalse energia miinimumi lause, Kletškovski reegel ja Pauli keeluprintsiip.



Naatriumi aatomi skeem: kaks alumist kihti ($n = 1$ ja $n = 2$) on täidetud, kihis $n = 3$ on üks elektron.

Joone kohal Mendelejevi tabel katkeb: raskeim looduslik element uraan sisaldab 92 elektroni. Tuumareaktorite ning kiirendite abiga on "juurde tehtud" veel 22 tehiselementi, millede tuumad on paraku liig lühikese elueaga (sellest järgmises loengus), et nendega keemilisi reaktsioone läbi viia.

Et kõrgemad energianivood eksisteerivad, seda näitab vastavate spektrijoonte olemasolu. Ainult et sinna ei jätku elektrone.

Pauli printsiibi põhjenduse saame lainefüüsikast. Tegelik teooria on meile matemaatiliselt kättesaamatu, kuid R. Feynmann on andnud ilusa piltliku seletuse, mis üsna hästi haakub E. Fermi ja P. Dirac'i poolt 1940. a. tehtuga.

Kujutame "kahe osakese kohtumist". Kui nad on harjumuspärased makrokehad, võime nad enda jaoks ära märkida (värvida, nummerdada, nimetada) ning pärast kohtumist teame täpselt, milline osake kuhu läks. Kui on aga tegemist lainefunktsiooniga, ei saa me sarnaste osakeste korral öelda, millisele nimelt vastab vaadeldav laine(funktsiooni) amplituud. Seega on osakesed **eristamatud** ja piltide a) ja b) vahel pole võimalik vahet teha.

Lainemehaanika keeles on a) ja b) **võrdtõenäosused sündmused** ja nende lainefunktsioonidel peab olema sama amplituud. Tähistades esimese osakese sattumise ülemisele positsioonile lainefunktsiooniga ψ_1 ja teise sattumise samasse kohta ψ_2 , võime seega öelda, et $|\psi_1|^2 = |\psi_2|^2$. Kui lähtuda lainefunktsiooni standardkujust

$$\psi = e^{-\frac{i}{\hbar}(\omega t - \vec{k}\vec{r}) + i\varphi},$$

kus φ on **faasinurk**, tähendab ψ_1 ja ψ_2 keskväärtuste võrdsus amplituudide võrdsust, millele osakeste eristamatus lisab veel laineparameetrite ω , \vec{k} võrdsuse. Ainus asi, mis pole fikseeritud, on faasinurk ja seetõttu saavad meie kaks lainefunktsiooni erineda vaid nn. faasikordaja

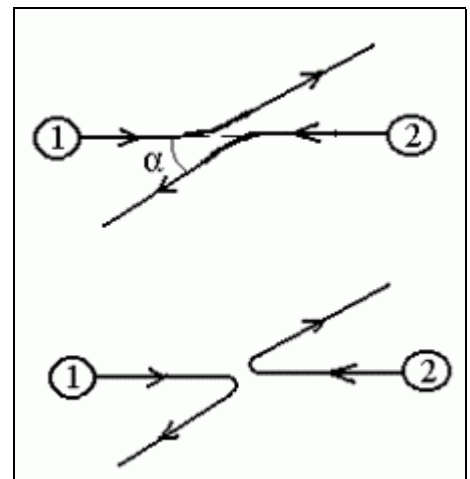
$$\kappa = e^{-i(\varphi_1 - \varphi_2)}$$

võrra:

$$\varphi_2 = \kappa\varphi_1.$$

Faasikordaja leidmiseks kujutame nüüd eelmisel joonisel olevat protsessi kahekordsena.

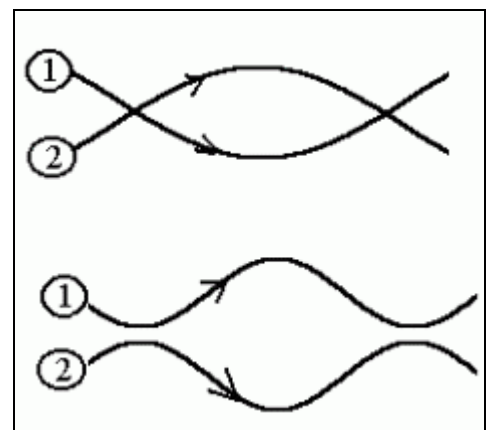
Ülemisel joonisel on põrked toimunud osakeste vahetusega,



Elektronide põrge Feynmanni järgi.

Ülemisel graafikul on hajumisnurk α , alumisel $180^\circ + \alpha$.

Kvantteooria järgi on neid kahte võimatu eristada.



Kaksikpõrge.

Alg- ja lõppseisundid on mõlemal juhul ekvivalentsed, ülemisel joonisel toimub vahepeal osakeste vahetus.

Faasiteguri väärtus $+1$ tähendab lainefunktsioonide liitumist samas faasis (bosonid)

alumisel toimub vahetus mõlemal pörkel. Tulemus on ekvivalentne, seega on nüüd protsesside lainefunktsioon sama. See tähendab, et

$$\psi_2 = \kappa^2 \psi_1 \text{ (sama faasitegur!) } \equiv \psi_1,$$

millest $\kappa = \pm 1$.

Toodud kaalutus, ehkki "mittematemaatiline", näitab, et **osakese faasikordaja võib omada väärtusi ± 1** .

- Esimene võimalus ($\kappa = 1$) vastab faasinurgale $\varphi = 2n\pi$, kus $n=0, 1, 2, \dots$ - osakeste lainefunktsioonid on samas faasis.
- Teisel juhul $\varphi = (2n + 1)\pi$ ja me võime öelda, et osakesed "liituvad vastasfaasis".

Kvantstatistika. Fermi ja Dirac väitsid, et faasikordaja tüüp sõltub osake tüübist. Nii saame **footonite liitmisel** seda intensiivsema spektrijoone, mida rohkem meil on **samade parameetritega footoneid** - niisiis on footon **esimest tüüpi osake**. Teame, et footonite tasakaaluline statistiline jaotus on Plancki "musta keha valem", seega vastab neile jaotus

$$n(E) = \frac{1}{e^{\frac{E}{kT}} - 1}.$$

Seda jaotust nimetatakse kvantstatistikas **Bose-Einsteini jaotuseks** ning sellele alluvaid osakesi **bosoniteks**.

Liites teist tüüpi osakesi, märkame, et samade parameetritega lainefunktsioonid kustutavad teineteist. Seetõttu polegi võimalik rohkem kui ühe samade parameetritega (asukoht, impulss, energia) osakeste üheaegne eksisteerimine.

Et näiteks asukoht ja impulss on Heisenbergi määramatuse relatsiooni järgi määratud vaid Plancki konstandi täpsusega, ei saa neid lõpmata tihedalt pakkida - igaljuhul on $\Delta p \Delta x \geq h$, seega võtab ta faasiruumis \vec{p} , \vec{r} enda alla "kuubi" ruumalaga $V_6 = p^3 x^3$. (Indeks "6" tähendab, et faasiruum on kuuemõõtmeline.)

See muudab ka statistilise jaotuse:

$$n(E) = \frac{1}{e^{\frac{E}{kT}} + 1},$$

mis kannab nime **Fermi-Dirac'i jaotus**.

Osakesi, mis alluvad Pauli keelule, nimetatakse **fermionideks**.

-1 tähendab liitumist vastasfaasis (fermionid).

Fermionide korral kustutab juurdetulev lainefunktsioon eelmise (kui see on olemas). See tähendab, et faasiruumi rakus ei saa olla rohkem kui üks osake.

Võrdleme saadud jaotusfunktsioone klassikalisest füüsikast tuntud Boltzmanni jaotusega:

$$n(E) = n_0 e^{-\frac{E}{kT}}.$$

Näeme, et see vastab mõlema ülaltoodud jaotuse piirjuhule

- $E \gg kT$ - siis ei oma liidetav ± 1 nimetajas enam tähtsust.
- Vastupidisel juhul, kus $E/kT \rightarrow 0$, on antud energiaga bosonite arv kuitahes suur ($n \rightarrow \infty$), fermionide oma aga piiratud.

Vabade osakeste korral määrab see osakeste maksimaalse ruumtiheduse antud temperatuuril; aatomis, kus energiatasemed on diskreetsed, aga elektronide maksimaalse lubatud arvu vaadeldavas kihis.

Muide, asjaolu, et elektronid ei allu klassikalisest mehaanikast tuletatud Maxwelli jaotusele, on ka metallide elektrijuhtivuse klassikalise elektronteooria puuduste põhjuseks. Kvantparandi sisseviimine kõrvaldab näiteks vastuolu eritakistuse sõltuvuses temperatuurist ($\rho \sim \sqrt{T}$ klassikalises teoorias *pro* $\rho \sim T$ empiirilises valemis).

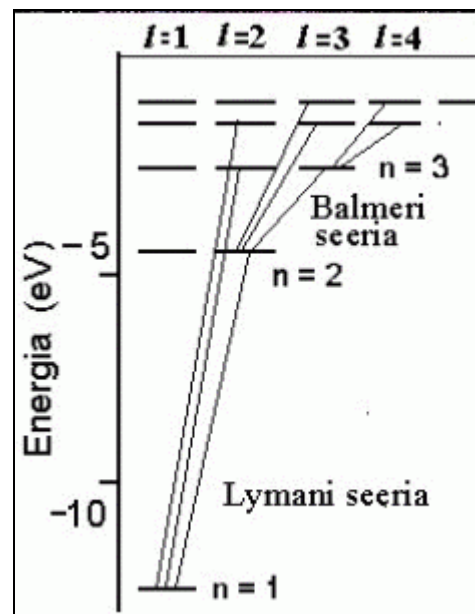
Elektronikihi energiatasemed. Mitme elektroni samaaegne asumine ühel ja samal energianivool muudab ka spektraaltermi mõtet. Kuna me nagunii ei tea, millise elektroniga toimub muutus, on mõttekam jälgida mitte igat üksikut elektroni, vaid kogu aatomi energeetilisi parameetreid.

Tavaliselt piirdub üleminek küll ainult valentskihi muutusega; vähemalt rakendatakse seda eeldust **optiliste spektrite** korral. (Röntgenijooned seevastu tekivad just üleminekul alumistes kihtides ja neid nimetataksegi vastava kihi järgi, näiteks K-joon jne.) Et valentselektronidel on sama peakvantarv, lähtutakse termi kirjapanekul ülejäänust - orbitaalsest ja spinkvantarvust.

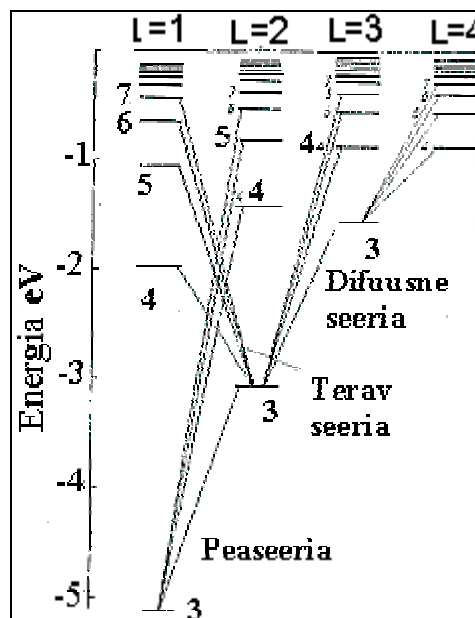
Liitmise vektormetodil. Oletame, et orbitaalne kvantarv vastab elektroni orbitaalsele impulssmomentile. Et viimane on vektor, tuleb elektronikihi kogumomendi leidmiseks summeerida vektorid; seejuures peab summaks saadav kvantarv olema positiivne täisarv.

Kuna vektorite suunad on erinevad, saame summeerimisel kõik täisarvud minimaalse absoluutväärtusega kombinatsioonist (kahe elektroni korral $|l_1 - l_2|$, kolme või enama puhul tuleb kombineerida) kuni summani $l_1 + l_2 + \dots + l_n$.

Need on kihi orbitaalkvantarvu **võimalikud** väärtused; **tegelikud** saame pärast Pauli keeluga keelustatud kombinatsioonide kõrvaldamist.



Energianivood vesinikuaatomis. Kuna elektroni energia sõltub vaid peakvantarvust n , tekivad lihtsad, tihenevate joontega seeriad.



Naatriumi aatom. Energianivood on lõhustunud vastavalt orbitaal-kvantarvu väärtusele. Spektrijooned on koondunud rühmadesse.

Sama meetodit kasutame spinide liitmisel. Et spini väärtus on $\pm\frac{1}{2}$, on siin asi lihtsam:

- paarisarv elektroni korral on $\vec{S} = \sum \vec{s}_j$ ja $S = 0, 1, 2, \dots, \frac{n}{2}$ - kõik täisarvud;
- paaritu arvu korral aga $S = \frac{1}{2}, \dots, \frac{n}{2}$ - kõik poolarvud.

Jääb üle liita vektorid \vec{L} ja \vec{S} . Et ka see summa peab olema täisarvuline, saame siingi reegli

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S.$$

Termi tähis. Et orbitaalne impulssmoment on võrratult suurem spinorbitaalsest, määrab energiataseme eelkõige L . See valitaksegi termi tähiseks; kasutatakse nagu ühe elektroni korral ajaloolisi tähtsümboleid s(harp), p(rincipal) jne. selle vahega, et **elektronikihi summaarset orbitaalkvantarvu tähistab suur täht** (S, P, D, \dots).

Indeksiteks on spinkvantarvust S sõltuv **multiplertsus** $\kappa = 2S + 1$ ja alamtasel väljendav kvantarv J .

Nii saame kahe elektroni $l = 1, l = 2$ liitumisel kuus võimalikku termi:

$^1P, ^1D, ^1F$, kui s_1, s_2 on vastasmärgilised;

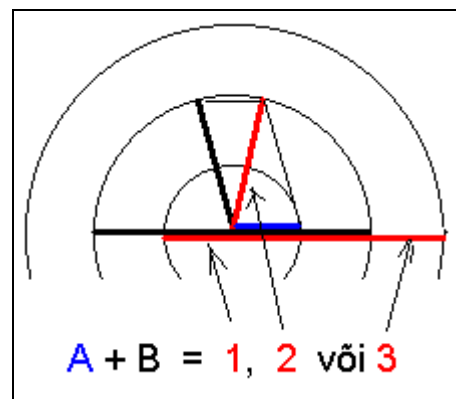
$^3P, ^3D, ^3F$, kui s_1, s_2 on samamärgilised.

Ülemise rea korral asi sellega piirdub, alumise rea termid jagunevad veel **kolmeks tasemeks** (tasemete arv vastab κ väärtusele). Seega on meil esimese rea viimane liige **singletne term** 1F_3 , alumises reas aga **tripletne term** tasemetega $^3F_2, ^3F_3, ^3F_4$.

Aga vast aitab. Kui näete kusagil selliste tähistega valemeid, siis teate, kuhu olete sattunud.

Molekulide ja kristallide spektrid. Et enamus ainetest ei koosne mitte aatomitest, vaid molekulidest, peab seegi leidma oma kajastuse kvantteoorias. Nii ka on, ainult et **molekuli** lainefunktsiooni pole seni keegi välja arvutanud.

Kiirgusspektri omadused on seevastu hästi teada ja vastavalt sellele on tehtud ka ligikaudsed teooriad:



Kahe valentselektroniga aatomi energianivoode leidmiseks liidetakse orbitaal-kvantarvud vektormeetodi järgi.

NB! Summa peab olema kvanditud, st. täisarvuline.

Aatomikoosluste (molekulid, kristallid) energiaseisundite arvutamisel kasutatakse häiritusarvutust.

- a. Molekuli komponente (tuumad, ionid) vaadeldakse kui iseseisvaid aatomeid naaberiooni(de) väljas. Tulemuseks on **häiritud atomaarspekter**, mis päris hästi vaadeldavaga kokku langeb.
- b. Molekuli vaadeldakse kui kahest või mitmest ionist koosnevat vibraatorit, kus ionide vastasmõju energianivood liituvad atomaarsetele termidele. Sellest variandist tuleneb lõhestunud atomaarsete nivooide nimetamine **pöörlemis-** ja **võnkenivooideks**. Tüüpiline energiate vahe pöörlemisspektris on 10^{-3} eV, st. umbes 10000 korda väiksem elektroonsete termide omast; võnkespekter (0.1 eV) asub vahepeal.

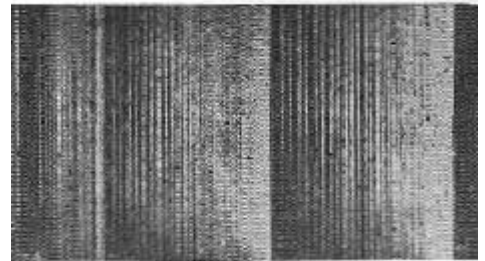
Pöörlemis- ja võnkenivooide tõttu on molekuli spektris atomaarse joone asemel **riba**, mis omakorda koosneb võnkeenergianivooide poolt eraldatud pöörlemisjoonte gruppidest. Madala lahutusvõimega spektraalriistas paistab see joonte müriaad ühtlase ribana, mistõttu teda algselt nimetatigi **ribaspektriks**.

Arusaadavalt käib see juttu hõreda mitmeaatomilise gaasi kohta; vedelates ja tahketes kehaes tulevad mängu veel täiendavad vastasmõju liigid.

Kondenseerunud aine. Spektrist pole siin midagi uut rääkida - see on kiirgusoptikast hästi tuntud Planck'i musta keha kiirgus. Siiski mitte alati: ärge unustage luminesentsi! Mida ütleb selle kohta kvantfüüsika?

Kui ka siin rakendada häiritusarvutust, saame eelnevale punktile sarnase tulemuse. Ainult et häirituse allikas pole nüüd kindlal kaugusel asuv naabertuum, vaid kõigi naaberaatomite ja -molekulide kogum. Seetõttu ei jagune atomaarne nivoo mitte kümneks-viieteistkümneks, vaid tuhandeteks ja miljoniteks alamnivooideks, mis kõik asuvad kindlas, lähimate naabrite kaugustega määratud ribas.

Sellist laiaksvenitatud energianivood nimetatakse tahkisefüüsikas **tsooniks**; tsooni **laius** vastab siis häirituse tugevusele ning tsoonide **vahekaugus** atomaarsete nivooide vahelisele kaugusele. Kui häiritus on tugev ja energianivooide vahe väike, võivad tsoonid kattuda; tavaliselt tekib siiski igast nivooist oma tsoon, mida eraldab naabertsoonidest "keelatud energiate piirkond" - **keelutsoon**. Keelutsooni laius ja tsoonide täidetatus elektronidega määrabki aine makrofüüsikalised parameetrid, nagu elektri- ja soojajuhtivus.



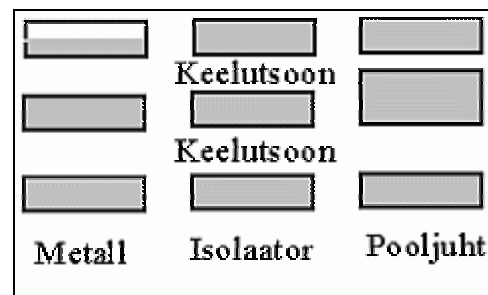
Lämmastiku ribaspekter.

Elektrijuhtivuse kvantteooria. Normaalolekus on aatomite alumised elektronkatted täidetud ning täitmata kihi elektronid põhiseisundis. Nii tekib aine omadustest sõltuv tsoonide jaotus, kus madala energiaga **täidetud tsoonidele** järgneb pärast keelutsooni vaid osaliselt elektronidega täidetud **valentstsoon**. Valentstsooni elektronid, olles aatomitega nõrgalt seotud, moodustavad kogu kristallile (vedelikule) ühise **elektrongaasi**, mis võib ainetüki piires suhteliselt vabalt liikuda ning, kandes elektrilaengut, muuta aine elektrit juhtivaks. Vabad elektronid kannavad ka kineetilist energiat, põhjustades näiteks metallide hea soojusjuhtivuse.

Kui täidetud on **kõik elektronkatted** (näiteks liitainetes), pole valentstsooni elektrone üldse olemas. Sellistes ainetes on kõik elektronid aatomitega seotud ja ehkki ka täidetud tsoonid võivad olla küllalt laiad, ei pääse elektronid liikuma. Nii tekivad elektrit (ja soojust) mittejuhtivad ained - dielektrikud. Tihti on ka selliste ainete kiirgus mittetasakaaluline, kuna elektronide ergastamine täidetud tsoonist on seotud küllalt suurte energiatega. Paljudes luminofoorides tekibki ergastus vaid väga suure energiaga kvantide või osakest mõjul.

Kõige huvitavam on juhtum, kus elektron saab suhteliselt kitsast (vastab väikesele energiatega vahele) keelutsooni ületada juba üsna väikese lisaenergia olemasolu korral. Et molekulide tasakaaluline kiiruste jaotus katab üsna suure kiiruste vahemiku, võib mõni kiirem elektron vabalt "keelu" ületada ja sattuda (tühja) valentstsooni. Seal muutub ta otsemaid "vabaks elektroniks", mis käitub analoogiliselt elektrijuhtide valentstsooni elektronidega. Veelgi enam - täidetud tsoonist "ärakadunud" elektron jätab järele laengu puudujäägi - nn. **augu** millesse võivad liikuda naaberelektronid. Kui selline pooljuht asub elektriväljas, tekib lisaks liikuvatele elektronidele ka aukude suunatud triiv, mida võib samuti käsitleda elektrivooluna.

Et pooljuhtide elektrijuhtivus sõltub vabade elektronide arvust, viimane omakorda paljudest välisteguritest, on just pooljuhtidel tänapäeva tehnoloogias määratu tähtsus. Pooljuhtseadmed lubavad mõõta paljusid suurusi (temperatuur, valgustatus) elektriliselt, mõõtes uuritavasse keskkonda pandud pooljuhi takistust. Veelgi enam: pooljuhtide omadused lubavad neid kasutada elektroonikas elektrivoolu parameetrite suunamiseks. Võrreldes vaakumtehnikaga on pooljuhtseadmed tuhandeid kordi väiksemad, nende voolutarve on minimaalne ja töökindlus praktiliselt piiramatult.



Kristalli elektrilised omadused (tsooniteooria kohaselt):

osaliselt täidetud valentstsoon kindlustab elektronjuhtivuse (metallid), täidetud tsooni korral sõltub juhtivus keelutsooni laiusest (isolaator või pooljuht).

Kvantgeneraator. Lõpetame atomaarse kiirguse jutu väikese mõistatusega. See, et aatom, neelanud kvandi energiaga $h\omega$, läheb üle suurema energiaga nivoole $E_2 = E_1 + h\omega$, on arusaadav. Lisaks sellele võib aga toimuda protsess

$$E_2 + h\omega \rightarrow E_1 + 2h\omega,$$

kus juba varem ergastatud aatom pealangeva kvandi mõjul kiirgab samasuguse, neelatuga **identse** kvandi.

Sellist protsessi nimetatakse **indutseeritud kiirguseks** ja ta avastati sajandivahetuse spektraaluuringute käigus. Tavalises olukorras on indutseeritud üleminekute arv väike (aatomid on valdavalt põhiseisundis) ning kiirguse võimendumine tühine. Asi muutus, kui avastati nn. **metastabiilsed seisundid**, kus aatomite üleminek ergastatud seisundist põhiseisundisse on blokeeritud mingi valikureegli tõttu.

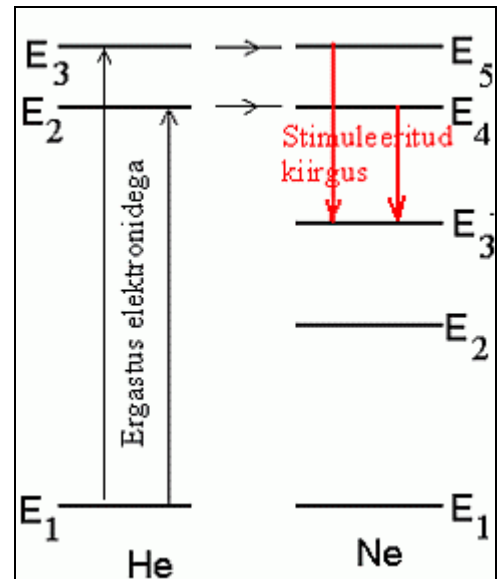
Metastabiilses ergastatud seisundis võib aatom olla suhteliselt kaua (kosmilistes gaasududes, kus hõreda aine tõttu mõjustusi vähe, isegi aastaid); aga üleminek toimub alati, kui ergastatud aatom kohtub tema energiavahele vastava kvandiga. See kätkeb endas valguse võimendamise võimalust, mis 1953. a. ka realiseeriti.

Kuidas? Tuli kasutada kaudset ergastust: gaas või kristall paigutati lühemalainelise kiirguse välja nii, et osa ergastatud aatomeid sattusid pärast väikese energiaga kvandi kiirgamist metastabiilsele energianivoole. Kui nüüd lasta sellisele gaasile üks "õige" foton, algabki indutseeritud kiirgus, mis kestab seni, kuni energianivoode normaalne asustatus on taastatud. Et genereeritavad fotonid on identsed (samasuunalised ja samas faasis algfootoniga), tekib raadiolaine sarnane teravalt suunatud ja rangelt koherentne (mida tähendab?) kiirgus.

Sellist valgusallikat nimetatakse **kvantgeneraatoriks**; vastavalt genereeritavale lainepikkusele nimetatakse neid inglisekeelsete lühenditega **LASER** (*Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*, valguse võimendi stimuleeritud kiirguse emisioonil) või **MASER** (*Microwave Amplification ...*, mikrolaine võimendi).

Laseri näol on tehnikas nüüd siis olemas ka koherentse valguse tekitamise vahend. See viis optika uuele tasemele, tänu laseritele on tahkisefüüsikas ja spektraalanalüüsis võimalik uurida üksikuid energianivoosid; laseri ülimalt kontsentreeritud kiires leiavad aset seni saavutamatud protsessid, nagu mitmefootoniline ergastus ja ionisatsioon. Laiatarbetehnikas on tuntuim informatsiooni optiline salvestamine laserikiirguse abil (nn. CD-tehnika) ning ruumiline fotograafia - **holograafia**.

Laseriga teeme tutvust laboris. Huvilistele võin aga soovitada Henn Käämbre "Laseriraamat"ut, üht parimat kodumaist pop-füüsika alast teost.



Heelium-neonlaseri kiirgusmehhanism: hõrendatud heeliumis tekitatud elektrilahendusel tekkiv kiirgus on resonantsis (sama sagedusega) kiirgustoru neooni energianivoodele E_4 ja E_5 üleminekuks vajaliku energiaga. Tekib pöördhõive, mis on eelduseks stimuleeritud kiirgusele.

Stimuleeritud kiirgust iseloomustab võnkumiste korrastatus; kiir on monokromaatne, koherentne ja lineaarselt polariseeritud.

Küsimus: Mida need kolm omadust tähendavad?

