

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ**

**ХАРЬКОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени В. Н. Каразина**

**КВАНТОВАЯ РАДИОФИЗИКА**

Методические указания и задания к практическим занятиям

**Харьков 2006**

УДК 621.375.826

ББК 32.86

К 32

*Утверждено на заседании Учёного Совета радиофизического факультета Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина (протокол №5 от 19. 05.2006 г.)*

**Рецензенты:** доктор физ.-мат.наук, профессор, Заслуженный деятель науки и техники Украины, зам. директора РИ НАНУ по научной работе Чурилов В. П., доктор физ.-мат.наук, профессор ХНУ имени В. Н. Каразина Шматько А. А., канд. физ. -мат. наук, доцент ХНУ имени В. Н. Каразина Ткаченко В.М.

**Квантовая радиофизика: Методические указания и задания к практическим занятиям / составители Дюбко С. Ф., Баскаков О. И., Перепечай М. П., Тютюнник В. Б. / – Харьков: ХНУ имени В. Н. Каразина, 2006. – 44 с.**

Методические указания содержат семь разделов, которым предшествует краткое изложение теоретического материала и указания к решению задач.

Для студентов радиофизического факультета ХНУ.

УДК 621.375.826

ББК 32.86

©Харьковский национальный университет  
имени В. Н. Каразина. 2006

©Дюбко С.Ф., Баскаков О.И., Перепечай М.П.,  
Тютюнник В.Б. 2006

© Макет обложки Дончик И. Н. 2006

# 1. АТОМ ВОДОРОДА И ВОДОРОДОПОДОБНЫЕ АТОМЫ

## Основные положения теории Бора

1) Энергия электрона  $E_n$  для атома с “бесконечной” массой ядра:

$$E_n = -Z^2 \frac{me^4}{2n^2 \hbar^2} = -Z^2 \frac{e^2}{2a_0} \left( \frac{1}{n^2} \right) = -Z^2 \frac{R_\infty}{n^2},$$

где  $R_\infty = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{e^4 m}{2\hbar^2}$  - постоянная Ридберга,  $n$  - главное квантовое число,  $Ze$  - заряд ядра,  $m$  - масса электрона,  $a_0 = \hbar^2 / e^2 m$  - боровский радиус электронной орбиты.

2) Частота излучения для перехода  $n_2 \rightarrow n_1$ :

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}.$$

3) Радиусы стационарных орбит:

$$r = n^2 \frac{\hbar^2}{Z e^2 m} = n^2 \frac{a_0}{Z}.$$

4) Скорость электрона на орбите:

$$g_n = \frac{Z e^2}{n \hbar}.$$

5) Постоянная тонкой структуры (постоянная Зоммерфельда):

$$\alpha = \frac{g_1}{c} = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.03604}.$$

6) Постоянная Ридберга при учете конечности массы ядра

$$M: R = \frac{R_\infty}{(1 + m/M)} \quad (\text{для атома водорода } \frac{M}{m} = 1836.11).$$

## Примеры и задачи

1.1. Вывести выражение для уровней энергии водородоподобного атома с учетом конечности массы ядра.

1.2. Определить “размер” атома водорода при  $n = 100$ . Чему равно в этом случае мгновенное значение дипольного момента атома  $\vec{\mu} = e\vec{r}$  (в дебаях)? Тоже для  $n = 33; 40$ .

Решение. Для атома водорода “размер”, т.е. диаметр стационарной орбиты электрона, равен  $2r$ .

$$2r_{100} = 2n^2 a_0 = 2 \cdot 10^4 \cdot 0.53 \cdot 10^{-4} = 1.06 \cdot 10^{-4} \text{ (см)}$$

Видно, что “размер” сильно возбужденного атома водорода на 4 порядка превышает размер нормального атома ( $n=1$ ). Такие сильно возбужденные атомы называются гигантскими, или ридберговскими.

Величина дипольного момента  $\mu = e r = 4.8 \cdot 10^{-10} \text{ CGSE} \cdot 0.53 \cdot 10^{-4} \text{ см} = 2.54 \cdot 10^{-14} \text{ ед. CGSE} = 2.54 \cdot 10^4 \text{ D}$ , т.к.  $1\text{D} = 10^{-18} \text{ ед. CGSE}$ .

1.3. Определить величину боровского радиуса для иона бериллия  $Be^{3+}$ , с учетом массы ядра. (Для  $Be$ :  $M=9$  ат.ед.массы,  $Z=4$ ).

Ответ:  $1.32287 \cdot 10^{-9} \text{ см}$ .

1.4. При каком атомном номере  $Z$  боровский радиус оказывается меньше размеров ядра ( $r_e \sim 10^{-12} \text{ см}$ )?

Ответ:  $Z > 5000$ .

1.5. Найти скорость электрона на орбите иона неона.

1.6. При каких минимальных значениях зарядового числа ядра теория атома Бора принципиально непригодна для описания соответствующего водородоподобного иона? Почему?

1.7. а) Вычислить напряженность магнитного поля в центре атома водорода, создаваемого движением электрона в основном состоянии.

Ответ:  $1.4 \cdot 10^5 \text{ Э}$ .

Указание: Использовать формулу для напряженности магнитного поля в центре витка радиуса  $r$  кругового тока  $i$ :

$$H = 2\pi \frac{i}{cr}. \text{ Среднее значение тока определяется как } i = e \cdot \nu,$$

где  $\nu$  - частота вращения электрона, а  $r = a_0$ .

б) Вычислить напряженность электрического поля ядра на боровской орбите.

Ответ:  $5 \cdot 10^9$  В/см.

1.8. а) Вычислить частоту рекомбинационной линии водорода H28 $\alpha$ .

Указание: Рекомбинационное излучение возникает после образования атома из свободных ядра и электрона. Такой атом является сильно возбужденным ( $n$  – велико) и переход его в основное состояние осуществляется путем излучения энергии с постепенным снижением  $n$ .

Для вычисления частот рекомбинационных линий водорода или водородоподобных атомов (ионов) воспользоваться формулой Ридберга-Бальмера:

$$\nu = 3.289842 \cdot 10^{15} \left(1 - \frac{m}{M}\right) \left[ \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n + \Delta n)^2} \right] \text{ Гц.}$$

Обозначения рекомбинационных линий следующие: большая буква (H, He, C, ... и т.д.) обозначает тип атома, следующее далее число – значение  $n$  нижнего уровня, малые греческие буквы  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , ... определяют тип перехода, т.е. изменение главного квантового числа  $\Delta n$ :  $\alpha \rightarrow \Delta n = 1$ ,  $\beta \rightarrow \Delta n = 2$ ,  $\gamma \rightarrow \Delta n = 3$  и т.д.

Решение для H28 $\alpha$ :

$$\nu = 3.289842 \cdot 10^{15} \left(1 - \frac{1}{1836}\right) \left( \frac{1}{28^2} - \frac{1}{29^2} \right) = 284.25 \cdot 10^9 \text{ Гц.}$$

Соответствующая длина волны  $\lambda = \frac{c}{\nu} \sim 1 \text{ мм.}$

Таким образом, спектр рекомбинационного излучения водорода при  $n \geq 28$  лежит в мм и СВЧ диапазоне длин волн, а при  $n \leq 27$  попадает в субмиллиметровый и ИК диапазоны длин волн.

б) Вычислить частоты следующих рекомбинационных линий излучения:  $He28\alpha$  (284366.4 МГц),  $H55\alpha$  (38473.36 МГц),  $H78\alpha$  (39291.42 МГц),  $He30\alpha$ ,  $C400\alpha$ ,  $C500\beta$ ,  $He50\beta$ ,  $H50\beta$ ,  $C200\gamma$

в) Для какого рекомбинационного перехода в атоме водорода частота испускания наиболее близка к частоте вращательного перехода молекулы формальдегида ( $CH_2O$ ) – 4829.7 МГц?

г) С каким значением  $n$  рекомбинационное излучение водорода попадает в диапазон декаметрового радиотелескопа?

1.9. Частица массы  $m$  движется по круговой орбите в центрально-симметричном потенциальном поле с энергией  $U = kr^2/2$ . Найти с помощью боровского условия квантования разрешенные радиусы орбит и уровни энергии частицы.

Указание: Использовать равенство сил:  
 $m\omega^2 r = dU/dr = kr$ .

Ответ:  $r_n = \sqrt{n\hbar/m\omega}$ ;  $E_n = n\hbar\omega$ .

1.10. Показать, что частота излучения  $\omega$  для перехода электрона между соседними орбитами водородоподобного иона удовлетворяет неравенству  $\omega_n > \omega > \omega_{n+1}$ , где  $\omega_n$  и  $\omega_{n+1}$  - частоты обращения электрона на этих орбитах.

Указание: Воспользоваться формулой Ридберга и условием квантования углового момента.

1.11. В спектре некоторого водородоподобного иона наблюдаются три спектральные линии одной серии с частотами  $31146,3 \text{ см}^{-1}$ ;  $36499,6 \text{ см}^{-1}$  и  $39727,4 \text{ см}^{-1}$ ?

Определить значение нижнего квантового числа и элемент ( $Z = ?$ ).

Ответ:  $n = 3$ ,  $Z = 2$  (He).

1.12. На сколько электрон-вольт надо увеличить энергию электрона, находящегося в основном состоянии в  $He^+$ , чтобы он смог испустить фотон головной линии серии Бальмера?

Ответ:  $E_{\min} = 8/9 RZ^2 \approx 48,4$  эВ.

1.13. Определить разрешающую способность спектрометра  $\gamma = \nu / \Delta\nu$ , необходимую для наблюдения изотопического сдвига головной линии серии Бальмера водорода и дейтерия.

Ответ:  $\gamma = R_H / R_H - R_D \approx 4000$ .

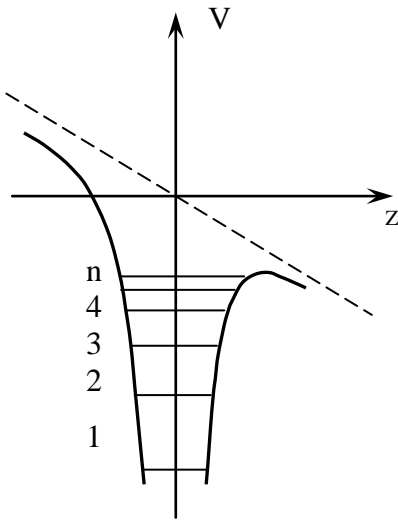
1.14. Вычислить отношение массы протона к массе электрона, если известно, что отношение постоянных Ридберга дейтерия и водорода  $\eta = 1,000272$ .

1.15. Атомы каких химических элементов внутри Солнца полностью ионизованы, если считать его температуру равной  $T = 2 \cdot 10^7$  К?

Указание: Условие отрыва последнего электрона из основного состояния  $kT > E_{cv} = Z^2 R$  или  $Z \leq \sqrt{kT/R} \approx 11$ .

Ответ:  $Z \leq 11$  (Na).

1.16. Атом водорода, помещенный в статическое электрическое поле, величина которого достигает некоторого критического значения  $E_{кр}$ , может быть ионизирован. Значение  $E_{кр}$  быстро убывает с увеличением главного квантового числа  $n$ . Вывести зависимость  $E_{кр}$  от  $n$ .



Указание: На рисунке показан потенциал, действующий на электрон, помещенный в постоянное электрическое поле, ориентированное вдоль оси  $z$ .

$$V(z) = -e^2/z - eEz.$$

Первое слагаемое описывает кулоновское взаимодействие электрона с ядром, второе – взаимодействие электрона с внешним электрическим полем  $E$ . Критическое поле находится в предположении, что атом ионизируется, когда его энергия приближается к вершине

потенциального барьера.

Ответ:  $E_{кр} = \frac{R^2}{4n^2 e^3} = \frac{E_0}{16n^4}$ , где  $E_0 = \frac{m^2 e^5}{\hbar^4} = 5.1 \cdot 10^9$  В/см – величина внутриатомной напряженности электрического поля.

1.17. Найти величину ионизирующего поля для атома водорода в ридберговском состоянии  $n=30; 33; 40$ .

1.18. Вычислить для мезоатома водорода (в котором вместо электрона движется мезон, имеющий тот же заряд, но массу в 207 раз больше)

а) радиус боровской орбиты.

б) длину волны главной линии серии Лаймана

в) энергии связи основных состояний мезоатомов водорода и дейтерия.

Ответ:  $a_0 \approx 2,6 \cdot 10^{-11}$  см;  $\lambda \approx 6,54 \cdot 10^{-10}$  м;  $E_{св} = 2,53$  КэВ; 2,66 КэВ.

1.19. Найти уровни энергии, энергию ионизации и длину волны перехода  $n=1 \rightarrow 2$  для позитрония (связанные



вместе электрон и позитрон, вращающиеся вокруг центра масс этой системы).

Ответ:  $E_{св} = 6,8$  эВ;  $\lambda_{рез} = 243$  нм.

1.20. Определить скорость, которую приобрёл покоящийся атом водорода в результате излучения фотона при переходе из первого возбуждённого состояния в основное. На сколько процентов отличается энергия испущенного фотона от энергии данного перехода?

Указание: Использовать закон сохранения энергии

$$\left( E = \hbar\omega + \frac{MV^2}{2} \right) \text{ и импульса } \left( \frac{\hbar\omega}{c} = MV \right). \quad E = \frac{3}{4}R. \quad M \text{ и } V -$$

масса и скорость атома.

Ответ:  $V = 3,26 \frac{M}{c}$ ;  $\Delta E/E = 5,4 \cdot 10^{-7}\%$ .

## 2. КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ АТОМА ВОДОРОДА

Волновая функция электрона в атоме водорода  $\psi$  в нерелятивистском приближении дается решением уравнения Шредингера

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \text{ или } \nabla^2\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + Z \frac{e^2}{r} \right) \Psi = 0.$$

Решение ищется в сферической системе координат в виде:

$$\Psi = R(r)Q(\theta) \Phi(\varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi),$$

где  $R(r)$  – радиальная часть волновой функции,  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  – сферическая гармоника. Квадрат модуля волновой функции  $|\Psi|^2$  представляет собой вероятность нахождения электрона в заданном состоянии в определённой области пространства. Сферические гармоники удовлетворяют уравнениям:

$$L^2 Y_\ell^M(\theta, \phi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_\ell^M(\theta, \phi),$$

$$L_z Y_\ell^M(\theta, \phi) = M\hbar Y_\ell^M(\theta, \phi).$$

т.е. являются собственными функциями операторов углового момента  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$ .

Действие операторов сдвига:  $\hat{L}^+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$  и

$\hat{L}^- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$  на  $Y_\ell^M(\theta, \phi)$  дает:

$$L^+ Y_\ell^M = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - M(M+1)} Y_\ell^{M+1},$$

$$L^- Y_\ell^M = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - M(M-1)} Y_\ell^{M-1}.$$

Между компонентами оператора углового момента имеют место перестановочные соотношения:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = 0, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}^2] = 0, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0,$$

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y.$$

Электрон в атоме водорода характеризуется следующими квантовыми числами:

1)  $n = 1, 2, 3, \dots$  – главное квантовое число, определяющее энергию стационарных состояний

$$: E_n = -\frac{RZ^2}{n^2} \text{ и "радиус" орбиты, } r = a_0 \cdot n^2.$$

2)  $\ell$  – орбитальное квантовое число.  $\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$  определяет значение квадрата углового момента электрона  $L^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2$  и форму орбиталей, в обозначениях термов (состояний электрона) на величину  $\ell$  указывает соответствующая буква:

$\ell$	0	1	2	3	4
Терм	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>

3)  $M$  – магнитное квантовое число. Определяет ориентацию орбитали в пространстве. Название связано с

зависимостью поведения атома от этого числа в магнитном поле.

$$M = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, \ell - 1, \ell.$$

Из опытных данных и Дираковского решения уравнения Шредингера (с учетом релятивистских эффектов) следует наличие еще двух квантовых чисел  $S$  и  $M_s$ ;  $S$  – спин электрона, равный  $1/2$  и  $M_s$  – проекция спина на выбранную ось ( $M_s = \pm 1/2$ ).

Решение уравнения Шредингера с оператором энергии (гамильтонианом)  $\hat{H}$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r),$$

в нерелятивистском приближении и с потенциальной частью  $V(r)$ , соответствующей только кулоновскому взаимодействию точечных зарядов, даёт значения  $E$ , полностью совпадающие с величинами энергий электрона в теории Бора. Уточнения значений  $E$  с учетом релятивистской зависимости  $m$ , энергий магнитных взаимодействий, неточности ядра и т.п., проводится методами теории возмущений. В соответствии с ними добавка к энергии в первом приближении вычисляется путём усреднения дополнительных членов в операторе Гамильтона по волновым функциям задачи с кулоновским потенциалом.

## Примеры и задачи

2.1. Найти вероятность нахождения частицы в промежутке от  $r$  до  $r + \Delta r$ . используя вид волновой функции  $\Psi(r) = Ae^{-r/a_0}$ , При каком значении  $r$  частица будет находиться в состоянии с максимальной вероятностью?

Ответ:  $r = a_0$ .

2.2. Рассматривая атом как электрический диполь с моментом  $\vec{\mu} = e\vec{r}$  и используя результаты решения уравнения

Шредингера для атома водорода показать, что правила отбора для электродипольных переходов имеют вид :  $\Delta \ell = \pm 1$ ;  $\Delta M = 0, \pm 1$  или, что то же самое,  $\Delta j = 0, \pm 1$ , где  $j$  – полный момент количества движения электрона. При доказательстве учесть, что изменение электронного спина  $\Delta S$  при переходах равно 0.

2.3. Используя определение оператора углового момента  $\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}]$  вычислить коммутаторы:

$$[x, L_x], [x, L_y], [x, L_z], [\vec{r} \cdot \vec{p}, L_x], [H, L^2], [H, L_x], [H, L_z], [p_x, L_x], [p_x, L_y], [L_x, L_y], [L_z, L_x], [L_x, L^2],$$

где  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)$  и  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ .

2.4. Доказать операторное равенство  $\hat{L}^2 = L^+ L^- + L_z^2 - \hbar L_z$ .

2.5. В первом порядке теории возмущений вычислить сдвиг низшего энергетического уровня водородоподобного атома, обусловленный неточечностью ядра. Ядро считать шаром радиуса  $r_0$ , по объему которого равномерно распределен заряд  $+Ze$ . Сопоставить величину поправки с энергией электрона.

Указание: а) Потенциал поля равномерно заряженного шара имеет вид:

$$U(r) = \begin{cases} -Z \frac{e}{r}, & \text{при } r > r_0 \\ -Z \frac{e}{2r_0} (3 - r^2 / r_0^2), & \text{при } r < r_0. \end{cases}$$

б) Представить гамильтониан в виде  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ , где

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - Z \frac{e^2}{r}$$

- гамильтониан, описывающий состояния электрона в поле точечного заряда. Этот гамильтониан, для которого известны решения, берется в качестве

невозмущенного (по терминологии теории возмущений).  $\hat{H}'$  - часть полного гамильтониана, называемая возмущением, которая описывает отличие потенциала, создаваемого шаром, от потенциала точечного источника:

$$\hat{H}' = \begin{cases} 0, & \text{при } r > r_0 \\ Z \frac{e^2}{r} - Z \frac{e^2}{2r_0} (3 - r^2 / r_0^2), & \text{при } r < r_0. \end{cases}$$

в) Поправка первого порядка  $\Delta E^{(1)}$  находится путем усреднения  $\hat{H}'$  по волновым функциям невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$ :

$$\Delta E^{(1)} = \langle \Psi_0^* | \hat{H}' | \Psi_0 \rangle.$$

Для основного состояния

$$\Psi_0(r) = \left( \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \exp\left(-Z \frac{r}{a_0}\right).$$

Учитывая малость размеров ядра по сравнению с радиусом электронной орбиты, получаем:

$$\Delta E^{(1)} = 4\pi \int_0^{r_0} H' |\Psi_0(r)|^2 r^2 dr = 4\pi Z e^2 |\Psi_0(0)|^2 \int_0^{r_0} \left( \frac{1}{r} - \frac{3}{2r_0} + \frac{r^2}{2r_0^3} \right) r^2 dr.$$

Ответ:  $\frac{E^{(1)}}{E_0} = \frac{4}{5} Z^2 \left( \frac{r_0}{a_0} \right)^2.$

2.6. Вычислить в первом приближении теории возмущений изменение энергии электрона в кулоновском поле ядра  $(-Ze^2/r)$  для основного состояния при увеличении заряда ядра на единицу ( $\beta$  - распад ядра). Сравнить поправку с точным значением.

Указание:  $\Delta E_{\text{точн}} = E(Z+1) - E(Z).$

2.7. Найти поправку к уровню энергии водородоподобного атома за счет релятивистской

зависимости массы электрона от скорости в первом порядке теории возмущений.

Указание: Воспользоваться выражением для кинетической энергии частицы в релятивистском случае:

$$W = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2 .$$

Здесь  $p$  – импульс электрона,  $m_0$  – масса покоя.

Разложение  $W$  в ряд по малому параметру (при скоростях электрона значительно меньших скорости света)  $p^2/m_0^2 c^2$  приводит к выражению:

$$W = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_0} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m_0^3 c^2} + \dots$$

Если второе слагаемое  $\hat{H}' = -\hat{p}^4 / 8m_0^3 c^2$  считать поправкой к

невозмущенному гамильтониану  $\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m_0} - \frac{Ze^2}{r}$ , то

$$\hat{H}' = -\frac{1}{2mc^2} \left( \hat{H}_0 + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 .$$

При проведении вычислений учесть,

что отдельные матричные элементы равны следующим выражениям :

$$\langle \Psi_0 | r^{-1} | \Psi_0 \rangle = \left( \frac{Z}{a_0} \right) \frac{1}{n^2}, \quad \langle \Psi_0 | r^{-2} | \Psi_0 \rangle = \left( \frac{Z}{a_0} \right)^2 \frac{1}{n^3 \left( \ell + \frac{1}{2} \right)},$$

$$\langle \Psi_0 | H_0 | \Psi_0 \rangle = E_n; \quad \langle \Psi_0 | H_0^2 | \Psi_0 \rangle = E_n^2;$$

$$\langle \Psi_0 | H_0 V(r) | \Psi_0 \rangle = E_n \langle \Psi_0 | V(r) | \Psi_0 \rangle .$$

Ответ:

$$\frac{E^{(1)}}{E_0} = \left( \frac{Ze^2}{\hbar c} \right)^2 \left( -\frac{3}{4n^2} + \frac{2}{(2\ell+1)n} \right) \approx \left( \frac{Z}{137} \right)^2 \left( -\frac{3}{4n^2} + \frac{2}{(2\ell+1)n} \right).$$

2.8. Построить диаграмму Гротриана для атома  $H$  с учетом тонкой структуры термов. Объяснить, почему

состояние  $2S_{1/2}$  является метастабильным. С учетом правил отбора, полученных в пункте 2.2., указать на диаграмме стрелками разрешенные переходы между подуровнями  $2p \leftrightarrow 3d$  и  $3s \leftrightarrow 2p$ .

2.9. Объясните, почему основным термом атома натрия является  $3S_{1/2}$ , а не  $1S_{1/2}$ , как у атома водорода?

2.10. Сколько спектральных линий, разрешенных правилами отбора, возникает при переходе атомов лития в основное состояние из состояния а)  $4s$ ; б)  $4p$ ?

Ответ: а) 6; б) 10.

2.11. Разрешающая способность спектрометра  $\Delta\nu = 0,1 \text{ см}^{-1}$ . До каких значений  $n$  в линиях атомов  $H$  серии Бальмера ( $n \rightarrow 2$ ), где  $n = 3, 4, 5, \dots$ , может наблюдаться тонкая структура, обусловленная  $\bar{\ell s}$  расщеплением верхних уровней энергии?

Указание: Воспользоваться формулой Ланде для разности энергий компонент тонкой структуры:

$$\Delta E = R \frac{\alpha^2 Z^4}{n^3 \ell(\ell+1)}$$

и считать, что наблюдаются переходы типа

$$nP_{1/2,3/2} \rightarrow 2S_{1/2}.$$

2.12. Определить зависимость квантового дефекта  $\sigma$  от орбитального квантового числа  $\ell$  для высоковозбужденного атома.

Указание: Представить энергию взаимодействия высоковозбужденного электрона с ядром и другими электронами в виде ряда:

$$U = -\frac{e^2}{r} - C_1 \frac{e^2}{r^2} - C_2 \frac{e^2}{r^3} - \dots,$$

ограничение которого только учетом дипольного взаимодействия дает поправку к гамильтониану

одноэлектронного атома  $H' = -C_1 \frac{e^2}{r^2}$ . Учесть эту поправку в

первом порядке теории возмущений. Сравнить полученный матричный элемент с выражением

$$\frac{1}{(n + \sigma)^2} \approx \frac{1}{n^2} \left( 1 - \frac{2\sigma}{n} \right).$$

Ответ: 
$$\sigma = -\frac{C_1}{a_0 \left( \ell + \frac{1}{2} \right)} = -\frac{C_1 m e^2}{\hbar^2 \left( \ell + \frac{1}{2} \right)}.$$

2.13. Вычислить минимальную относительную скорость сближения двух атомов водорода в состояниях  $2s$  и  $10p$ , при которой после неупругого столкновения может ионизироваться а) первый атом; б) второй атом. Сравнить полученный результат со среднетепловой скоростью  $\sqrt{2kT/m}$ . Определить температуру газа, при которой начнется заметная ионизация за счет столкновений атомарного водорода, находящегося в основном состоянии.

2.14. Оценить энергию спин-орбитального расщепления  $\Delta E_{\bar{L}\bar{S}}$  для иона  $He^+$  в состоянии  $3p$ , если для атома водорода, находящегося в том же состоянии, она равна 3.25 ГГц.

2.15. Найти величину  $LS$  - расщепления термина  $3D_{3/2,5/2}$ ,  $9D_{3/2,5/2}$ ,  $12D_{3/2,5/2}$  атома водорода.

2.16. Расщепление основного термина атома водорода – 1420 МГц. Вычислить  $IJ$  -расщепление термина  $5S_{1/2}$ ;  $20S_{1/2}$  атома водорода.

### 3. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

#### Примеры и задачи

3.1. Запишите термы для следующих квантовых чисел электронных конфигураций:

а)  $S=1/2$ ,  $L=2$ ;



- 3 б)  $S=1$ ,  $L=1$ ;  
 в)  $S=3/2$ ,  $L=1$ .

2. Расшифруйте следующие термы многоэлектронных атомов:  
 $2P_{1/2}$ ,  $2D_{5/2}$ ,  $2F_{7/2}$

3.3. Расшифруйте следующий терм многоэлектронного атома:  $15^4G_{11/2}$ . Допишите недостающие  $G$ -термы.

3.4. Расшифруйте следующий терм многоэлектронного атома:  $15^4H_{13/2}$ . Допишите недостающие  $H$ -термы.

3.5. Объясните, почему атом гелия в состоянии  $2^3S_1$  является парамагнетиком, а в состоянии  $2^1S_0$  - нет?

3.6. Объясните, почему время жизни атома гелия в метастабильном состоянии  $2^3S_1$  намного больше времени жизни того же атома в метастабильном состоянии  $2^1S_0$ ?

3.7. Объясните противоречивость следующих обозначений термов:

$${}^4S_1, \quad {}^2D_{7/2}, \quad {}^0P_1.$$

3.8. Нарисуйте и объясните спектр перехода  ${}^3P \leftrightarrow {}^3D$  атома гелия с учетом правил отбора  $\Delta J = 0, \pm 1$ .

3.9. Некоторое атомное состояние имеет терм  ${}^4D_{5/2}$ . Каковы величины  $L$ ,  $S$  и  $J$  для этого состояния? При каком минимальном числе электронов может возникнуть такое состояние? Укажите возможную электронную конфигурацию.

3.10. Атом фтора имеет 9 электронов. Изобразите его электронную структуру и запишите электронную конфигурацию.

3.11. Определить возможные термы атомов, имеющих следующие электронные конфигурации:  $3s^2$ ,  $2p^23s$ ,  $3p^3$ ,  $3s^23p^2$

3.12. Рассчитать в первом порядке теории возмущений энергию  $E_{\text{ион}}$ , необходимую для однократной ионизации атома гелия.

Указание:  $E_{\text{ион}} = E_1 - E$ , где  $E_1$  – энергия однократно ионизованного атома гелия (т.е. водородноподобного атома),  $E$  – энергия атома гелия в основном состоянии ( $n_1 = n_2 = 1$ ). Эту энергию можно выразить как  $E = 2E_1 + I + K$ . Энергия обменного взаимодействия  $K = 0$ , так как при  $n_1 = n_2 = 1$  функции  $\Psi_a(1)\Psi_b(2)$  и  $\Psi_b(1)\Psi_a(2)$  тождественны. Кулоновский интеграл  $I$  равен:

$$I = \int \Psi_a^2(1)\Psi_b^2(2) \frac{e^2}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2,$$

$$\text{где } d\tau_i = r_i^2 dr_i \sin\theta d\theta d\varphi,$$

$$\Psi_a(r_i) = \Psi_b(r_i) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{Zr_i}{a_0} \right),$$

$$r_{12} = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta},$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin\theta d\theta}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta}} = \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x}} = \begin{cases} \frac{2}{r_2}, & \text{при } r_1 < r_2 \\ \frac{2}{r_1}, & \text{при } r_1 > r_2. \end{cases}$$

$$\text{Ответ: } E_{\text{ион}} = 0,75 \frac{e^2}{a_0} \approx 20,4 \text{ эВ. ( } E_{\text{экснер}} = 24,5 \text{ эВ).}$$

3.13. Найти максимальное число электронов, имеющих в атоме одинаковые квантовые числа: а) „ $n$ ” и „ $\ell$ ”; б) „ $n$ ”

Ответ: а)  $2(2\ell + 1)$ ; б)  $2n^2$ .

#### 4. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ

В молекуле из  $N$  атомов ( $3N-6$ ) колебательных

степеней свободы (для линейной молекулы  $(3N-5)$ ). Энергия каждого нормального гармонического колебания  $E_{g_i} = \hbar\omega_i(\mathcal{G}_i + 1/2)$ , где  $\mathcal{G}_i$  - колебательное квантовое число, принимающее значения  $0, 1, 2, \dots$ , а полная колебательная энергия молекулы  $E_g = \sum_{i=0}^{3N-6} E_{g_i}$ .

$E_r = BhJ(J+1)$  - энергия вращения жесткой линейной молекулы ( $J=0, 1, 2, \dots$  - вращательное квантовое число,  $B = h/8\pi^2I$  - вращательная постоянная,  $I$  - момент инерции). В случае нежесткой молекулы появляется необходимость введения центробежных поправок в значение вращательной энергии  $E_r = BhJ(J+1) - DhJ^2(J+1)^2$ , где  $D$  - т.н. центробежная постоянная.

Населённость энергетических уровней молекулы при равновесном состоянии:

$$N(E_e, E_v, E_r) \sim g_e g_v g_r \cdot e^{-\frac{(E_e + E_v + E_r)}{kT}},$$

где  $g$  - кратность вырождения уровня (для вращательного движения  $g_r = 2J + 1$ ).

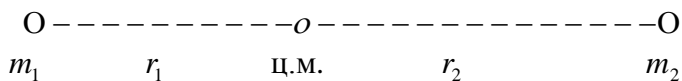
### Примеры и задачи

4.1. Расшифруйте смысл символов для термов молекул  $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ ,  $CO(X^1\Sigma_g^+)$ ,  $O_2(X^3\Sigma_g^-)$  и  $V^1\Sigma_g^+$ ; объясните, в каком состоянии молекула парамагнитна и почему?

4.2. Объясните, почему основным состоянием молекулы водорода  $H_2$  является  $X^1\Sigma_g^+$ , а основным

состоянием иона водорода  $H_2^+$  - состояние  $X^2\Sigma_g^+$ ?

4.3. Задачи по расчету структуры и спектра двухатомных молекул:



$$B = \frac{h}{8 \cdot \pi^2 I_b}; \text{ где } I_b = r_0^2 \frac{m_2}{\left(1 + \frac{m_2}{m_1}\right)}; \quad r_0 = r_1 + r_2; \quad m_1 r_1 = m_2 r_2.$$

Рассчитать вращательную постоянную и межъядерное расстояние для изотопических разновидностей молекулы:  
 $^{115}\text{In}^{35}\text{Cl}$ ,  $^{115}\text{In}^{19}\text{F}$ ,  $^{69}\text{Ga}^{35}\text{Cl}$ ,  $^{71}\text{Ga}^{19}\text{F}$ ,  $^{27}\text{Al}^{79}\text{Br}$ ,  $^{11}\text{B}^{19}\text{F}$ ,  
 $^{10}\text{B}^{19}\text{F}$ ,  $^{88}\text{Sr}^{16}\text{O}$ ,  $^{133}\text{Cs}^{37}\text{Cl}$ ,  $^{65}\text{Cu}^{19}\text{F}$ ,  $^{41}\text{K}^{35}\text{Cl}$ .

4.4. Объясните, почему молекулы  $\text{OH}$  и  $\text{OD}$  имеют различный вращательный спектр, но одинаковую длину?

4.5. Согласно измерениям вращательная постоянная молекулы  $\text{H}^{35}\text{Cl}$   $B=0,5909$  см. Чему равно  $B$  для изотопических разновидностей хлористого водорода  $\text{H}^{37}\text{Cl}$  и  $\text{D}^{35}\text{Cl}$ ?

4.6. Расстояние между ядрами в молекуле водорода  $\text{H}_2$   
 $r_0 = 74.1 \cdot 10^{-12}$  м. Найти:

1) энергию, необходимую для возбуждения молекулы на первый вращательный уровень ( $J = 1$ );

2) угловую скорость вращения в состоянии с  $J = 1$ ;

3) температуру, при которой средняя кинетическая энергия поступательного движения равна вращательной энергии при  $J = 1$ ;

4) отношение количеств молекул  $\text{H}_2$ , находящихся в чисто вращательных состояниях с  $J = 1$  и  $J = 2$  при  $T = 300$  К с учётом кратности вырождения;

5) то же для состояний  $\mathcal{J} = 1, J = 0$  и  $\mathcal{J} = 0, J = 5$  при  $T = 1500$  К с учётом того, что  $\omega = 8.3 \cdot 10^{14}$  с.

Ответ: 15 мэВ;  $3.3 \cdot 10^{13}$  рад/с; 118 К; 1.95; 0.01

4.7. Вращательный спектр молекулы  $^{79}\text{Br}^{19}\text{F}$  состоит из серии почти эквидистантных линий, расположенных на расстоянии  $0.71433 \text{ см}^{-1}$  друг от друга. Вычислить:

- а) вращательную постоянную  $B$ ;
- б) момент инерции  $I$ ;
- в) длину связи  $\text{Br} - \text{F}$ ;
- г) частоту перехода  $J = 9 \rightarrow J = 10$ ;

Ответ:  $B = 0.357143 \text{ см}^{-1}$ ,  $I = 47.21 \text{ ат. ед. м}$ ,  $r_0 = 1.759 \text{ \AA}$ .

4.8. Для молекулы  $\text{HCl}$  найти квантовые числа  $J$  двух соседних вращательных уровней, разность энергий которых 7.86 мэВ ( $r_0 = 1.275 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ ).

Ответ:  $J = 2; 3$ .

4.9. Для 2-х атомной молекулы известны интервалы между тремя последовательными вращательными уровнями:  $\Delta E_1 = 0.2 \text{ мэВ}$  и  $\Delta E_2 = 0.3 \text{ мэВ}$ . Найти вращательную энергию среднего уровня.

Ответ: 0.3 мэВ.

4.10. Принимая во внимание наличие вырождения (по проекции углового момента) найти для молекулы  $\text{O}_2$  число  $J$  уровня, имеющего наибольшую заселённость при  $T = 300 \text{ К}$  ( $r_0 = 1.207 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ ).

Ответ:  $J = 8$ .

4.11. Определить температуру, при которой средняя кинетическая энергия молекул  $\text{Cl}_2$  ( $r_0 = 2 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ ) равна энергии, достаточной для возбуждения первого колебательного уровня (частота колебаний  $\omega = 1.06 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ ).

Ответ: 534 К.

4.12. Найти разность энергий состояний с квантовыми числами  $\mathcal{J} = 1, J = 0$  и  $\mathcal{J} = 0, J = 5$  у радикала  $\text{OH}$

( $r_0 = 1 \cdot 10^{-12}$  м, частота колебаний  $\omega = 7.04 \cdot 10^{14}$  с $^{-1}$ ).

Ответ: 0.37 мэВ.

4.13. Для молекулы  $HF$   $r_0 = 0.92 \cdot 10^{-10}$  м,  $\omega = 7.8 \cdot 10^{14}$  с $^{-1}$ . Вычислить число вращательных уровней, расположенных между основным и первым возбуждённым колебательными уровнями, пренебрегая центробежным растяжением связи.

Ответ: 13.

4.14. Найти отношение количеств молекул  $HBr$  ( $r_0 = 1.41 \cdot 10^{-10}$  м,  $\omega = 5 \cdot 10^{14}$  с $^{-1}$ ), находящихся в чисто колебательных состояниях (без вращения) с квантовыми числами  $\mathcal{G} = 2$  и  $\mathcal{G} = 1$  при  $T = 910$  К. При какой температуре это отношение станет равным 1:10?

Ответ: 0.02; 1600 К.

4.14а. Оценить частоту излучения, соответствующую переходу между двумя уровнями, если известно, что в состоянии термодинамического равновесия при температуре  $T=300$  К отношение их заселенностей  $N_2/N_1=1/e$ .

Ответ: Частота  $\nu = 208$  см $^{-1}$  или длина волны  $\lambda = 48$  мкм - средний ИК диапазон.

4.15. Три последовательные линии вращательного спектра  $H^{79}Br$  наблюдаются на частотах 84.544 см $^{-1}$ , 101.355 см $^{-1}$  и 118.112 см $^{-1}$ . Определить каким переходам они соответствуют. Вычислить величины  $B$  и  $D$ .

Указание: Воспользоваться тем фактом, что  $D \ll B$ .

4.16. Найти такое значение  $J$  для молекулы  $CO$  в основном колебательном состоянии ( $\mathcal{G} = 0$ ), когда  $E_r \approx E_g$  при  $\mathcal{G} = 1$  и  $J = 0$ . Для молекулы  $CO$   $\omega = 2300$  см $^{-1}$ ,  $B = 2$  см $^{-1}$ .

Ответ:  $J = 41$ .

4.17. Для радикала  $OH$  константа  $\Lambda$  - удвоения равна 1159 МГц. В спектре поглощения этих молекул

обнаружена линия с частотой 127,5 ГГц. Идентифицируйте этот переход по вращательному квантовому числу  $J$ .

Ответ:  $J = 10$ .

4.18. Рабочий диапазон радиоспектрметра 30-45 ГГц. Для каких  $J$  переходы между компонентами  $\Lambda$ -дублетов радикала  $OH$  могут быть измерены?

Указание:  $g_{\Lambda}(OH) = 1.16$  ГГц

Ответ:  $J = 5; 6..$

4.19. В молекуле  $CO_2$ , находящейся в тепловом равновесии ( $T = 400$  К), максимум населенности на уровне 001 соответствует вращательному подуровню с  $J = 21$ . Найти  $B = ?$

Указание:  $N(E_e, E_v, E_r) \sim g_e g_v g_r \cdot e^{-\frac{(E_e + E_v + E_r)}{kT}} \sim (2J + 1)e^{-\frac{E_r}{kT}}$ .

Ответ:  $B \approx 9$  ГГц.

4.20. Вычислить относительную заселенность колебательного состояния молекул при  $T=300$  К с известными частотами  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$  фундаментальных мод (в  $cm^{-1}$ )

$MnBr_2$	$\nu_1 = 184$	$\nu_2 = 36(2)$	$\nu_3 = 365$
$XeF_2$	$\nu_1 = 515$	$\nu_2 = 213(2)$	$\nu_3 = 558$
$CoI_2$	$\nu_1 = 150$	$\nu_2 = 35(2)$	$\nu_3 = 396$
$FO_2$	$\nu_1 = 586$	$\nu_2 = 376$	$\nu_3 = 1500$
$SCL_2$	$\nu_1 = 525$	$\nu_2 = 208$	$\nu_3 = 535$
$NiCl_2$	$\nu_1 = 346$	$\nu_2 = 51(2)$	$\nu_3 = 521$
$CoF_2$	$\nu_1 = 550$	$\nu_2 = 71(2)$	$\nu_3 = 707$
$KrF_2$	$\nu_1 = 449$	$\nu_2 = 232(2)$	$\nu_3 = 588$
$MnF_2$	$\nu_1 = 535$	$\nu_2 = 70(2)$	$\nu_3 = 696$
$Cl_2O$	$\nu_1 = 640$	$\nu_2 = 296$	$\nu_3 = 690$

4.21. Вычислить значения вращательного квантового числа  $J$ , при которых достигается максимальная

заселенность вращательных состояний молекул  $CO$  ( $B=57,6$  ГГц) для температур газа  $T=100$  К и  $T=1000$  К.

Ответ:  $J=4, 13$ .

4.22. Решить ту же задачу для молекулы  $OCS$  ( $B=6,081$  ГГц).

Ответ:  $J=12, 41$ .

4.23. Решить ту же задачу для молекулы  $HCN$  ( $B=44.315$  ГГц).

Ответ:  $J=4, 15$ .

4.24. Длины связей в линейной молекуле  $H - C \equiv N$  имеют следующие значения:  $CH = 0.106317$  нм,  $CN = 0.115535$  нм. Вычислить  $I$  и  $B$  для молекул  $HCN$  и  $DCN$ , а также значения частот перехода  $J = 1 \rightarrow J = 2$  для этих молекул.

4.25. Определить частоту вращательного перехода  $J = 0 \rightarrow J = 1$ ,  $\Delta K=0$  молекулы  $NH_3$ . Молекула аммиака имеет пирамидальную структуру. Геометрические параметры следующие:  $r(N - H) = 1.0173 \text{ \AA}$ ,  $\angle HNH = 107^\circ 78'$ .

Указание: Ось симметрии молекулы  $NH_3$  проходит через атом азота и центр равностороннего треугольника, образованного атомами водорода. Дипольный момент направлен вдоль оси симметрии. Вращательный спектр при  $K = 0$  обусловлен лишь вращением молекулы относительно оси, перпендикулярной оси симметрии.

4.26. Дайте оценку величины инверсионного расщепления вращательных термов молекул тяжелого аммиака -  $ND_3$  в основном колебательном состоянии, если известно, что для обычного аммиака эта величина составляет примерно  $24$  ГГц. Поясните, как получен результат.

Ответ:  $1.6$  ГГц.



4.27. Во втором порядке теории возмущений найти выражение для энергии двухатомной молекулы с колебательно-вращательным гамильтонианом:

$$H = H_0 + H',$$

где  $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} K(r - r_e)^2$  - часть гамильтониана, описывающая колебания молекулы в гармоническом приближении,

$H' = -\frac{\hbar^2 J(J+1)}{2Mz^2} + \frac{1}{6} K'(r - r_e)^3$  - часть гамильтониана, описывающая вращение и кубическую добавку к гармоническому силовому полю.

В выражениях  $M$  – приведенная масса молекулы, равная  $-\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ ;  $r_e$  – равновесное расстояние между ядрами, соответствующее минимуму потенциальной энергии;  $r$  – текущее межъядерное расстояние;  $K$  и  $K'$  – гармоническая и кубическая силовые постоянные.

Указание: Считать, что  $H_0$  представляет собой невозмущенный гамильтониан, а  $H'$  – возмущение. Влияние  $H'$  на спектр учесть с помощью теории возмущений второго порядка. Для облегчения решения принять версию о малости амплитуд колебаний ядер по сравнению с  $r_e$ , т.е. считать, что

$$\frac{|r - r_e|}{r_e} \ll 1. \text{ Разложить множитель } \frac{1}{r^2} \text{ в } H' \text{ по степеням}$$

$$\frac{r - r_e}{r_e} \text{ и ограничиться в разложении четвертой степенью.}$$

## 5. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПОЛЯ С ВЕЩЕСТВОМ

Коэффициент Эйнштейна для спонтанного перехода

$$A_{mn} = \frac{64\pi^4 \nu_{mn}^3 \langle \mu_{mn} \rangle^2}{3hc^3} \text{ определяет естественное время жизни}$$

частицы на верхнем уровне  $\tau_c = \frac{1}{A_{21}}$ . С учётом безизлучательной релаксации полное время жизни  $\tau^{-1} = \tau_c^{-1} + \tau_{\bar{0}}^{-1}$ .

Квантовый выход люминесценции  $\Phi$  - отношение числа излучённых фотонов к полному числу атомов, первоначально переведённых на верхний уровень:  $\Phi = \frac{\tau}{\tau_c}$ .

Нормированная функция для спектрального контура естественно – уширенной линии (лоренцевой)

$$g_L(\nu) = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{\Delta\nu}{(\nu_{mn} - \nu)^2 + \Delta\nu^2},$$

где  $\Delta\nu$  - полуширина линии; в центре контура  $g_L(0) = \frac{2}{\pi\Delta\nu}$ .

Для доплеровски уширенной линий

$$\Delta\nu_{\delta} = \frac{\nu_{mn} \sqrt{\frac{2kT \ln 2}{m}}}{c} \approx 7.163 \cdot 10^{-7} \sqrt{\frac{T}{A}} \nu_{mn},$$

где  $A$  - масса атома (молекулы) в а.е.м.  $g_{\delta}(0) = \frac{0.939}{\Delta\nu_{\delta}}$ .

При столкновительном уширении  $\Delta\nu_{cm} = \alpha_{cm}P$ ;  $\alpha_{cm}$  - параметр столкновительного уширения,  $P$  - давление газа.

Коэффициент поглощения в случае однородно уширенной линии  $\alpha(\nu) = \sigma\Delta n$ ;  $\sigma = \sigma_0 g_L(\nu)$  - сечение

поглощения:  $\sigma_0 = \frac{8\pi^2 \langle \mu_{12} \rangle^2 \nu}{3ch\Delta\nu}$ ;  $\sigma = \frac{\lambda_0^2 g_L(\nu)}{8\pi\tau_c}$ ;  $\Delta n = (n_2 - \frac{g_2 n_1}{g_1})$

- разность населённостей уровней.

В случае насыщения  $\Delta n_{нас} = \frac{n_1^0 - n_2^0}{1+G}$ ;  $G = G_0 g_1(\nu)$ ;

$$G_0 = \frac{I}{I_{нас}} = \left( \frac{\langle \mu_{12} \rangle E}{2\hbar\Gamma} \right)^2 - \text{параметр насыщения,}$$

$$I_{нас} = \frac{3ch\Delta\nu^2}{8\pi\nu\langle \mu_{12} \rangle^2} = \frac{h\nu}{2\sigma\tau} \text{ насыщающая интенсивность.}$$

Восприимчивость двухуровневой среды

$$\chi(\omega) = \chi'(\omega) - i\chi''(\omega),$$

$$\text{где } \chi''(\omega) = \frac{\langle \mu_{12} \rangle^2 \Delta n^0}{\hbar} \cdot \frac{\Gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2(1+G)},$$

$$\chi'(\omega) = \frac{\langle \mu_{12} \rangle \Delta n^0}{\hbar} \cdot \frac{(\omega - \omega_0)}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2(1+G)}.$$

Коэффициент поглощения  $\alpha(\omega)$  и показатель преломления  $n(\omega)$  среды выражаются через  $\chi$ :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi\omega\chi''}{c}; \quad n(\omega) - 1 = 2\pi\chi'(\omega).$$

### Примеры и задачи

5.1. Найдите соотношение заселенностей компонентов сверхтонкой структуры  $1S_{1/2}$  терма атома водорода (с учётом статистических весов уровней) при  $T=300$  К.

5.2. Матричный элемент дипольного момента перехода  $1s-2p$  атома водорода имеет порядок  $1D=10^{-18}$  СГСЕ. Оценить естественное время жизни уровня  $2p$ . Ответ:  $\tau_c = 5.7 \cdot 10^{-9}$  с.

5.3 Оценить естественное время жизни возбужденного состояния атома натрия  $^3P_{3/2}$ . Справка: длина волны излучения при переходе в основное состояние составляет 589 нм.

5.4. Оцените соотношение вероятностей спонтанных и вынужденных переходов молекул в условиях термостата при  $T=300$  К в диапазоне сантиметровых и оптических длин волн.

5.5. Определить отношение числа атомов газообразного лития в состоянии  $2p$  к числу атомов в основном состоянии при  $T = 3000$  К. Длина волны резонансной линии ( $2p-2s$ )  $\lambda = 670.8$  нм.

Указание:  $\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-\frac{h\nu}{kT}}$ , где  $g_1 = 2$ ,  $g_2 = 4 + 2$ .

Ответ:  $2.3 \cdot 10^{-3}$ .

5.6. Пусть два возбуждённых уровня находятся в термодинамическом равновесии. Найти (без учёта кратности вырождения) относительную населённость верхнего уровня при температурах 300, 77 и 4.2 К для:

а) лазера с частотой перехода 24 ГГц,

б)  $CO_2$ -лазера ( $\lambda = 10.6$  мкм),

в) аргонового лазера ( $\lambda = 0.488$  мкм).

5.7. Вычислить однородную ширину перехода с  $\lambda = 0,6328$  мкм в  $Ne$ , если известно, что естественное уширение этого перехода равно 20 МГц, а столкновительное – 64 МГц. Какую форму имеет результирующая линия?

Ответ: Лоренцев профиль с полушириной равной 42 МГц.

5.8. Определить температуру атомарного газа водорода, при которой доплеровская ширина линии перехода  $1s-2p$  совпала бы с естественной шириной.

Ответ:  $T \approx 2.3 \cdot 10^{-4}$  К.

5.9. Вычислить доплеровскую ширину линии перехода молекулы  $CO_2$  ( $\lambda = 10.6$  мкм,  $T = 400$  К). При каком давлении газа такой же вклад в уширение линии внесёт столкновительный механизм ( $\alpha_{cm} = 5$  МГц/мм.рт.ст.)?

Ответ:  $P \approx 12$  мм.рт.ст.

5.10. При каком давлении рабочей смеси  $CO_2$  - лазера соседние линии генерации перекрываются на уровне половины интенсивности?

Справка: параметр столкновительного уширения  $\alpha = 5$  МГц/мм рт. ст., а вращательная постоянная молекул  $CO_2$  - 9 ГГц.

5.11. Линия перехода рубинового лазера ( $\lambda = 0.694$  мкм) хорошо описывается лоренцевой кривой с  $\Delta\nu_L = 330$  ГГц. Вычислить излучательное время жизни и  $\Phi$ , если при комнатной температуре наблюдаемое время жизни  $\tau = 3$  мс. Принять, что для рассматриваемого лазера  $\sigma_0 = 2.5 \cdot 10^{-20}$  см<sup>2</sup>,  $n = 1.76$ .

Ответ:  $\tau \approx 4.8$  с,  $\Phi = 0.63$

5.12. Для неодимового лазера с  $\lambda = 1.06$  мкм,  $\Delta\nu_L = 195$  ГГц,  $\tau = 0.23$  мс,  $\Phi = 0.42$ . Найти  $\sigma_0$ .

Ответ:  $\sigma_0 \approx 2 \cdot 10^{-18}$  см<sup>2</sup>

5.13. Квантовый выход перехода  $S_1 \rightarrow S_0$  в красителе (родамин 6 Ж) равен 0.87, а время жизни  $\tau \sim 5$  нс. Вычислить  $\tau_c$  и  $\tau_\sigma$ .

Ответ:  $\tau_c = 5.75$  нс;  $\tau_\sigma = 38.3$  нс

5.14. Предложите процедуру измерения параметра насыщения активной среды. Обоснуйте идеологию и выбор схемы эксперимента. (Построить установку, позволяющую записывать контур усиления активной среды при различных уровнях мощности входного сигнала).

5.15. Лазер на  $Nd:YAG$  (задача 5.12.). Вычислить интенсивность насыщения усиления.

Ответ:  $0.2$  кВт/см<sup>2</sup>.

5.16. Оценить время жизни верхнего рабочего уровня рубинового лазера, если при эффективном сечении генерационного перехода  $2.5 \cdot 10^{-20}$  см<sup>2</sup> интенсивность насыщения составляет  $2$  кВт/см<sup>2</sup>

Ответ:  $\tau = 3$  мс.

5.17. Найти коэффициент поглощения излучения в

слое газа толщиной  $L=1$  м на частоте 300 ГГц, если  $\sigma_0 = 10^{-15}$  см<sup>2</sup>, а населённость нижнего уровня  $N_1 = 10^{13}$  см<sup>-3</sup> при  $T = 300$  К.

Ответ: 5%.

5.18. Найти след матрицы двухуровневой системы  $Sp(\rho \cdot \mu)$ . Распишите, как получен результат.

5.19. Найдите сечение поглощения ионов  $Cr^{3+}$  в рубине с концентрацией  $5 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup>, если на длине волны 0.54 мкм интенсивность света, прошедшего сквозь пластину толщиной 0.5 см падает в  $2.2 \cdot 10^4$  раз.

Ответ:  $\sigma = 4 \cdot 10^{-18}$  см<sup>2</sup>.

5.20. Лазер с оптической накачкой (излучением  $CO_2$ -лазера) на молекулах  $CH_3J$  работает на волне 390 мкм (переход по  $J$  и  $K$  соответственно: 54;10 –53; 10).

Вычислить «отрицательную» температуру рабочей среды при условии, что отношение населенностей инвертированных рабочих уровней равно 3.

Ответ:  $\frac{769 \cdot 10^9 \cdot 6.62 \cdot 10^{-27}}{\left(1.38 \cdot 10^{-16} \cdot \ln \left[ \frac{1}{3} \right] \right)} = -33.578$  К.

5.21. Приписать абсолютную отрицательную температуру среде рубинового лазера, работающего на волне 0,694 мкм, если известно, что населенность верхнего уровня в условиях накачки равна  $n_E = 7.3 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup>, а нижнего  $n_A = 4.6 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup>. Рабочие уровни вырождены:  $A$  –четырекратно, а  $E$  –двукратно.

Ответ:  $T = -0.85 \cdot 10^5$  К.

5.22. Лазерный резонатор состоит из двух зеркал с коэффициентами отражения  $R_1 = 1.0$ ;  $R_2 = 0.5$ . Длина активной среды  $\ell = 7.5$  см, а сечение перехода

$\sigma = 3.5 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2$ . Вычислить пороговую инверсию населённости.

Указание: Пороговое условие -

$$R_1 R_2 \exp[2\sigma(N_2 - N_1)\ell] = 1.$$

Ответ:  $\Delta N = 1.3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ .

5.23. Вычислить интенсивность вращательного перехода  $5_3 \rightarrow 6_3$  молекул ацетонитрила ( $CH_3CN$ ) при давлении газа 1 мм.рт.ст и  $T = 300 \text{ К}$  в отсутствие насыщения. Дополнительные сведения: вращательные постоянные -  $A = 150 \text{ ГГц}$ ;  $B = C = 9.1989 \text{ ГГц}$ . Дипольный момент  $\mu_0 = 3,92 \text{ Д}$ , параметр столкновительного уширения  $\alpha = 45 \text{ МГц/мм.рт.ст}$ . Низшие колебательные частоты -  $\nu_8^{(2)} = 378 \text{ см}^{-1}$ ;  $\nu_4 = 919 \text{ см}^{-1}$ ;  $\nu_7^{(2)} = 1059 \text{ см}^{-1}$ .

Указание: Величина  $\langle \mu_{12} \rangle^2$  для перехода  $J_k \rightarrow (J+1)_k$  симметричных волчков вычисляется по

$$\text{формуле: } \langle \mu_{12} \rangle^2 = \frac{1}{3} \mu_0^2 \frac{(J+1)^2 - K^2}{J(J+1)}.$$

Населённость  $i$ -го состояния  $n_i = N \cdot f_g \cdot f_{JK}$ , где  $N = 9.68 \cdot 10^{18} \cdot 1/T$  - число молекул в  $1 \text{ см}^3$  при давлении 1 мм.рт.ст. и температуре  $T$ .

$$f_g = e^{-\varepsilon_{кол}/KT} \prod_n (1 - e^{-h\omega_n/KT})^{d_n}, \text{ где } \varepsilon_{кол} = h\omega_i(g+1/2);$$

$d_n$  - степень вырождения колебания с частотой  $\omega_n$ ;

$$\prod_n = (1 - e^{-h\omega_1/KT})^{d_1} (1 - e^{-h\omega_2/KT})^{d_2} \dots \text{ для всех возможных}$$

колебаний.

$$f_{JK} \approx (2J+1) \sqrt{\frac{AB^2 h^3}{\pi(KT)^3}} e^{-\frac{h}{KT}[B(J+1)J+(A-B)K^2]}.$$

5.24. Вычислить интенсивность перехода  $2_2 \rightarrow 3_2$  молекулы  $CF_3H$  при  $p = 1$  мм.рт.ст. и  $T = 300$  К. Исходные данные:  $A = 10.3487$  ГГц;  $B = 5.6$  ГГц;  $\mu_0 = 1.64$  D;  $\Delta\nu = 18$  МГц/мм.рт.ст.;  $f_g = 0.8$ .

5.25. Определить энергию излучения, которая может быть поглощена ансамблем из  $N_0$  двухуровневых атомов с учетом их столкновений.

Указание: При равновероятном во времени процессе столкновений ( $a = \text{const}$  – вероятность столкновений в 1 с.), число атомов в момент  $t$  взаимодействующих с полем  $N(t) = N_0 e^{-at}$ .

$$\text{Тогда } W_{\text{ногл}} = N_0 (\varepsilon_m - \varepsilon_n) \int_0^{\infty} e^{-at} \frac{d}{dt} |C_m(t)|^2 dt,$$

где  $|C_m(t)|^2$  – вероятность нахождения атома на верхнем уровне, определяется из системы двух уравнений:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{dC_m}{dt} = H_{mn} C_n e^{-i\omega_{mn}t} \\ i\hbar \frac{dC_n}{dt} = H_{nm} C_m e^{i\omega_{mn}t}, \end{cases}$$

в которой  $H_{mn} = \left( -\frac{\mu_{mn} E}{2} \right) (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$ ,  $E$  – напряженность внешнего поля,  $\omega$  – его частота,  $\omega_{mn} = (\varepsilon_m - \varepsilon_n) / \hbar$  – частота перехода. При начальных условиях  $C_m(0) = 0$  и  $C_n(0) = 1$  и пренебрегая быстро осциллирующими слагаемыми, содержащими  $e^{\pm i(\omega + \omega_{mn})t}$ , получаем:

$$|C_m(t)|^2 = \left( \frac{\mu_{mn} E}{2\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2 \sqrt{\Delta\omega^2 + \left( \frac{\mu_{mn} E}{\hbar} \right)^2} t / 2}{(\Delta\omega^2 + \left( \frac{\mu_{mn} E}{\hbar} \right)^2) / 4}, \text{ где } \Delta\omega = \omega_{mn} - \omega.$$



Ответ:  $W_{\text{нога}} = \frac{2N_0 \hbar \omega_{mn} (\mu_{mn} E / 2\hbar)^2}{a^2 + \Delta\omega^2 + (\mu_{mn} E / \hbar)^2}$ .

## 6. ОТКРЫТЫЕ РЕЗОНАТОРЫ

Добротность резонатора

$$Q = 2\pi \frac{d}{\lambda \delta_{\Sigma}},$$

где  $d$  – длина резонатора;  $\lambda$  – длина волны;  $\delta_{\Sigma} = \delta_{\text{дифф}} + \delta_{\text{мелл}} + \delta_{\text{св}} + \dots$  – суммарные относительные потери мощности волны при проходе от зеркала к зеркалу.

Условие резонанса:

$$2(kd - \varphi_{mn}) = 2\pi q,$$

где  $\varphi_{mn}$  – дополнительный к геометрическому фазовый набег для резонансной моды  $\text{TEM}_{mnq}$ ,  $k$  – волновое число,  $q$  – продольное, а  $m, n$  – поперечные числа моды.

Спектр конфокального резонатора со сферическими зеркалами, обладающими одинаковой кривизной  $b$ , определяется из выражения:

$$\nu_{mnq} = \frac{c}{2d} \left[ q + \frac{1}{\pi} (m + 2n + 1) \arccos g \right],$$

где  $g = 1 - \frac{d}{b}$ ,  $m$  – количество вариаций поля вдоль радиуса зеркала,  $n$  – по угловой координате,

Дифракционные потери моды  $\text{TEM}_{mn}$  для резонатора с круглыми плоскими зеркалами:

$$\delta_{mn} = 0.0523 \left( \lambda_n^{(m+1)} \right)^2 N^{\frac{3}{2}},$$

где  $\lambda_n^{(m+1)}$  –  $(m+1)$  корень функции Бесселя  $J_n$ .  $\lambda_0^{(1)} = 2.4$ ,  $\lambda_1^{(1)} = 3.83$  и т.д.

$N = \frac{a^2}{d\lambda}$  – число Френеля,  $2a$  – диаметр зеркала.

### Примеры и задачи

6.1. Резонатор лазера имеет длину  $15\text{ см}$  и два зеркала с коэффициентами отражения  $R=1$  и  $R=0,5$ . Сечение излучения рабочего перехода лазера  $\sigma = 3,5 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2$ . Найти разность населенностей рабочих уровней на пороге генерации.

Ответ:  $4,9 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ .

6.2. Вычислить число мод в полости объемом  $1\text{ см}^3$  в диапазоне длин волн  $\lambda = 0,6 \text{ мкм}$  (красный свет) в пределах полосы длин волн равной  $100 \text{ \AA}$ .

Ответ:  $n = 1,9 \cdot 10^{12}$  мод.

6.3. Сколько мод могут существовать в  $1\text{ см}^3$  рабочей среды рубинового лазера ( $\lambda = 0,694 \text{ мкм}$ ) в пределах ширины линии люминесценции  $\sim 330 \text{ ГГц}$ ?

6.4. Сколько продольных мод лежит в пределах ширины линии усиления атомов неона в *He-Ne* лазере ( $\lambda = 0,6328 \text{ мкм}$ ) с длиной резонатора  $1 \text{ м}$ . Линию считать доплеровски уширенной.

Ответ: Примерно - 9 мод.

6.5.  $\text{CO}_2$  - лазер низкого давления имеет на волне  $\lambda = 10,6 \text{ мкм}$  доплеровски уширенную линию усиления. Выбрать максимальную длину резонатора лазера так, чтобы генерация была возможна только на одной продольной моде.

Ответ: Примерно 3 м.

6.6. Вычислить добротность основной моды пустого открытого резонатора длиной  $100 \text{ см}$  и диаметром плоских медных зеркал  $60 \text{ мм}$  на волне  $1 \text{ мм}$ ., если потери мощности в отверстии связи в одном из зеркал равны  $0,01$ . Справка: потери мощности на отражение в этом диапазоне частот -  $0,0015$ .

6.7. Определить разность резонансных частот мод  $TEM_{00}$  и  $TEM_{10}$  открытого резонатора длиной  $d = 50$  см с круглыми зеркалами кривизной  $b = 10d$ .

6.8. Вычислить и сравнить дифракционные потери  $\delta_{дифр}$  мод  $TEM_{00}$  и  $TEM_{10}$  для резонатора с плоскими круглыми зеркалами на волне  $\lambda = 1$  мм. Длина резонатора  $d = 100$  мм, диаметр зеркал  $2a = 63.2$  мм.

Ответ:  $\delta_{дифр} = 0.01$  для моды  $TEM_{00}$ ,

$$\delta_{дифр} = 0.022 \text{ для моды } TEM_{10},$$

б) Вычислить добротность резонансов на модах  $TEM_{00}$  и  $TEM_{10}$  с учетом тепловых потерь (в меди на длине волны  $\lambda = 1$  мм  $\delta_{тепл} = 0.0015$ ).

в) Вычислить добротность резонансов на модах  $TEM_{00}$  и  $TEM_{10}$  того же резонатора, но с кривизной зеркал ( $g = 0.95$ ). Объяснить, почему здесь добротности обоих резонаторов одинаковы?

6.9. Резонансная частота моды  $TEM_{00q}$  ( $q = 1000$ ) резонатора с круглыми зеркалами и радиусом кривизны  $b=1$  м равна 300 ГГц. Определить длину резонатора  $d$ , а также ее уменьшение при переходе на моду  $TEM_{00q}$  с продольным числом  $q=999$  и той же резонансной частотой.

6.10. Определить длину резонатора газового лазера с диаметром выходного пучка 4 мм, дифракционные потери в резонаторе которого на основной моде составляют 1% при генерации на длине волны 1 мкм.

6.11. Открытый резонатор для лазера длиной 1 м образован плоскими зеркалами с коэффициентами отражения  $R=1$  и  $R=0.9$  и диаметром 1 см. Найти добротность, межмодовый частотный интервал (для основной моды) и время жизни фотона на волне 0.5 мкм. (Дифракцией на краях зеркал пренебречь).

6.12. В  $He-Ne$  лазере, работающем на длине волны  $\lambda = 0,6328$  мкм, используется конфокальный резонатор

длиной 1 м. Найти размер пятна поля на зеркалах и в центре резонатора.

Ответ: 0,449 мм и 0,317 мм соответственно.

6.13. Вычислить размер пятна поля на обоих зеркалах полуконфокального резонатора  $CO_2$ -лазера длиной 2 м на волне  $\lambda=10.6$  мкм.

6.14. Найти добротность резонатора и время жизни фотона  $\tau_p$  в резонаторе с плоскими зеркалами, расположенными на расстоянии 1 м. В резонаторе возбуждается основной тип колебаний  $TEM_{00q}$ , длина волны излучения  $\lambda = 0.6$  мкм. Коэффициент поглощения в среде равен  $0.001 \text{ см}^{-1}$ . Коэффициент отражения зеркал  $r_1 = r_2 = 95\%$ .

Указание: Предполагается, что основные потери резонатора - на связь. Поэтому, при вычислениях дифракционными потерями пренебречь. Время жизни фотона связано с добротностью резонатора соотношением:  $Q = 2\pi\nu\tau_p$ .

6.15. В  $He-Ne$  лазере ( $\lambda = 0.63$  мкм) усиление за проход составляет 0,02,  $d = 1$  м,  $b = 10$  м. Выбрать размер диафрагмы в резонаторе, чтобы подавить генерацию на  $TEM_{10}$ , сохранив её на  $TEM_{00}$ .

Ответ:  $2a = 2.5$  мм.

## 7. РАСЧЕТ ХАРАКТЕРИСТИК ЛАЗЕРОВ

### Примеры и задачи

7.1. Луч красного света ( $\lambda = 0.694$  мкм) при помощи телескопа с диаметром зеркала 2 м посылается на Луну. Найти диаметр освещенного пятна на Луне (расстояние 384000 км).

7.2. Пучок света, излучаемый неодимовым лазером ( $\lambda=1.06$  мкм), имеет диаметр 6 мм, равномерное распределение интенсивности в поперечном сечении и угол расходимости  $\alpha = 3$  мрад. Покажите, что пучок не является дифракционно-ограниченным.

7.3. Предложите способ измерения расходимости лазерного пучка. Обоснуйте его.

7.4. Линзой фокусируется лазерный пучок с плоским волновым фронтом, круговым поперечным сечением и однородным распределением интенсивности. Во сколько раз увеличится интенсивность в фокусе линзы по сравнению с интенсивностью падающей волны?

7.5. Найти выражение для выходной мощности ( $P_{\text{вых}}$ ), частоты генерации, полосы перестройки и оптимального пропускания выходного зеркала резонатора лазера при следующих условиях:

а) Действует какой-то механизм накачки, обеспечивающий стационарную инверсную разность населенностей рабочих уровней 1 и 2 -  $\Delta N_0$ .

б) Скорость релаксации обоих уровней активной среды -  $\Gamma$ , центральная частота перехода -  $\omega_0$ .

в) Характеристики резонатора:

$\omega_p$  - частота на рабочей моде ТЕМ<sub>00</sub> ( $\omega_p \approx \omega_0$ ).

Потери в резонаторе:  $\delta_\Sigma = \delta_{\text{дифр}} + \delta_m + \delta_{\text{св}} = \delta_0 + \delta_{\text{св}}$ , где  $\delta_{\text{св}}$  - потери на связь, которые считать равномерно распределенными по поверхности выходного зеркала (полупрозрачное зеркало).

Решение. Для одномодового лазера в стационарном режиме справедливы соотношения (см. лэмбовскую теорию лазера)

$$\chi''(\omega) = \frac{1}{4\pi Q_p} ; \chi'(\omega) = \frac{\omega_p - \omega}{2\pi\omega} ,$$

где  $\omega$  - частота генерации.

Используя выражение для  $\chi''(\omega)$  (см. раздел 5), имеем:

$$\frac{\langle \mu_{12} \rangle^2 \Delta N_0}{\hbar} \frac{\Gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma^2 (1 + G)} = \frac{1}{4\pi Q_p} .$$

Параметр насыщения может быть представлен в виде:

$$G = \frac{I}{I_{нас}} = 2I\sigma_0 \frac{1}{\Gamma},$$

где  $I$  – интенсивность одной из бегущих волн в резонаторе;  
 $I_{нас}$  – насыщающая интенсивность  $I_{нас} = \frac{\Gamma}{2\sigma_0}$ ;

$$\sigma_0 = 4\pi k \frac{\langle \mu_{12} \rangle^2}{\Gamma \hbar} - \text{резонансное сечение поглощения.}$$

При резонансе ( $\omega = \omega_0$ ) интенсивность одной из волн в резонаторе  $I = I_{нас} \frac{1}{\delta_\Sigma} [\sigma_0 \Delta N_0 d - \delta_\Sigma]$ .

Так как доля выходной энергии из резонатора  $\sim \delta_{св}$ , то интенсивность выводимого через полупрозрачное зеркало луча лазера  $I_{вых} = I_{нас} \frac{\delta_{св}}{\delta_\Sigma} [\sigma_0 \Delta N_0 d - \delta_\Sigma]$ .

Выходная мощность  $P_{вых} = I_{вых} S_{пучка}^{\circ}$ ,

где  $S_{пучка}^{\circ}$  – эффективное сечение пучка лазера;  $S_{пучка}^{\circ} = \pi W_9^2$ ,  
 где  $W_9$  – радиус пятна поля моды ТЕМ<sub>00</sub>.

$$\text{Следовательно } P_{вых} = I_{нас} \frac{\delta_{св}}{\delta_\Sigma} \pi W_9^2 d \left[ \sigma_0 \Delta N_0 - \frac{\delta_\Sigma}{d} \right].$$

Если объем моды резонатора, заполненного активной средой, обозначить как  $V_M = \pi W_e^2 d$ , то

$$P_{вых} = I_{нас} V_M \frac{\delta_{св}}{\delta_\Sigma} \left[ \sigma_0 \Delta N_0 - \frac{\delta_\Sigma}{d} \right].$$

Из формулы хорошо просматривается условие самовозбуждения лазера  $\sigma_0 \Delta N_0 = \delta_\Sigma / d$ , когда усиление на единицу длины активной среды компенсирует полные потери в резонаторе, приведенные тоже к единице длины -  $\delta = \frac{\delta_\Sigma}{d}$ .

Существует оптимальное значение величины  $\delta_{св}$ , которое соответствует максимальной выходной мощности и

находится из условия  $\frac{\partial P_{вых}}{\partial \delta_{св}} = 0$ .

Покажите, что  $(\delta_{св})_{opt} = \left( \sqrt{\frac{\sigma_0 \Delta N_0 d}{\delta_0}} - 1 \right) \delta_0$ .

Воспользовавшись выражением для  $\chi'$  и  $\chi''$ , выведите формулу для частоты генерации:  $\omega = \omega_p \frac{Q_p}{Q_p + Q_l} + \omega_0 \frac{Q_l}{Q_p + Q_l}$ .

Здесь  $Q_l = \frac{\omega_0}{2\Gamma}$  - добротность линии. Напишите выражение для частоты генерации, если  $Q_l \gg Q_p$  и  $Q_p \gg Q_l$ . Проанализируйте результаты.

Величина полосы перестройки лазера определяется из выражения для  $\chi''$  как разность частот расстройки, при которых срывается генерация [ $2\Delta\omega = 2(\omega - \omega_0)$ ]. Покажите,

что  $2\Delta\omega = 2\Gamma \sqrt{\frac{\sigma_0 \Delta N_0}{\delta_\Sigma / d}} - 1$ .

Указание: Так как вблизи границы срыва колебаний мощность в резонаторе не велика, можно считать, что  $G = 0$ .

7.6. Ширина молекулярного резонанса мазера на молекулах  $NH_3$ , работающего на частоте 23870 МГц, составляет 1000 Гц, а добротность мазерного резонатора - 2000. Вычислить относительный сдвиг частоты генерации мазера при изменении температуры резонатора на 3 градуса. Резонатор выполнен из инвара с температурным коэффициентом линейного расширения  $10^{-6}$  град $^{-1}$ .

7.7. Стержень из неодимового стекла длиной 7.5 см и диаметром 6.3 мм накачивается вспышкой света. Сечение лазерного перехода на волне генерации  $\lambda = 1.06$  мкм

составляет  $\sigma = 3,3 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2$ . Найти ненасыщенный коэффициент усиления и инверсию (разность населенностей), соответствующую пороговой генерации в предположении, что прозрачность одного из зеркал – 10%, а второе зеркало – идеальный отражатель.

Ответ: Усиление -  $6,67 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ , а критическая инверсия -  $1,9 \cdot 10^{16} \text{ см}^3$ .

7.8. Аргоновый лазер генерирует зеленую линию ( $\lambda = 514 \text{ нм}$ ) с неоднородной шириной равной 3.5 ГГц. Вычислить длительность импульса излучения этого лазера в режиме синхронизации мод акустооптическим модулятором.

Ответ:  $\tau_i = 126 \text{ пс}$ .

7.9. Оценить минимальную мощность лампы накачки твердотельного лазера, необходимую для создания инверсии. Концентрация ионов  $Nd$  в кристалле  $10^{19} \text{ ион/см}^3$ , объем кристалла  $10 \text{ см}^3$ . Время жизни на верхнем лазерном уровне  $\tau = 3 \cdot 10^{-3} \text{ с}$ . Середина полосы поглощения накачки  $\nu = 6 \cdot 10^{14} \text{ Гц}$ . КПД лампы накачки 50%.

7.10. Объяснить, почему в водородном стандарте частоты уходы частоты резонатора слабо влияют на  $\omega$ .

7.11. Вычислить квантовый КПД  $He-Ne$  лазера на  $\lambda = 3.39 \text{ мкм}$  (справка: энергия терма гелия  $2^1S_0 - 15 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ ).

7.12. Найти значение предельного КПД  $CO_2$  лазера ( $\lambda = 10.6 \text{ мкм}$ ), если известно, что частота колебаний уровня  $00^0_1 - 2300 \text{ см}^{-1}$ .

7.13. Лазер на красителе с длиной резонатора 10 см перестраивается в диапазоне  $\lambda = 0.5 \div 0.6 \text{ мкм}$ . Определить число мод  $N$  и длительность импульса в режиме синхронизации мод.

7.14.  $CO_2$  - лазер работает в режиме модуляции добротности за счет вращения зеркала. Определить минимальное число оборотов зеркала (в 1 минуту) при



котором еще не падает импульсная мощность, если известно, что время жизни уровня  $00^01 - 2$  мс.

7.15. Оценить длительность импульса в режиме синхронизации мод *He-Ne* лазера с доплеровской шириной 1500 МГц при длине резонатора  $d = 1$  м.

## ФИЗИЧЕСКИЕ КОНСТАНТЫ

Постоянная Планка, $h$	$6,6256 \cdot 10^{-34}$ Дж·с
Постоянная Планка, $\hbar$	$1,054 \cdot 10^{-34}$ Дж·с
Атомная единица массы, а.е.м.	$1,66057 \cdot 10^{-27}$ кг
Заряд электрона, $e$	$1,6021 \cdot 10^{-19}$ Кл
Масса электрона, $m_e$	$9,1091 \cdot 10^{-31}$ кг
Масса протона, $m_p$	$1,67252 \cdot 10^{-27}$ кг
Отношение $m_p/m_e$	1836,13
Скорость света в вакууме, $c_0$	$2,997925 \cdot 10^8$ м/с
Постоянная Больцмана, $k$	$1,38054 \cdot 10^{-23}$ Дж/К
Постоянная Ридберга, $R_\infty$	$0,218 \cdot 10^{-17}$ Дж
Радиус первой боровской орбиты, $a_0$	$0,529175 \cdot 10^{-10}$ м
Диэлектрическая проницаемость вакуума $\epsilon_0$	$8,854 \cdot 10^{-12}$ Ф/м
Частота, соответствующая энергии $kT$ (T=300 К)	$208,5$ см <sup>-1</sup>
Энергия фотона с $\lambda=0,5$ мкм	$3,973 \cdot 10^{-19}$ Дж

## РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Соколов А.А., Тернов И.М. Квантовая механика и атомная физика. – М.: Просвещение, 1970. – 423 с.
2. Маркузе Д. Оптические волноводы. – М.: Мир, 1974. – 576 с.
3. Тарасов Л.В. Физика процессов в генераторах когерентного оптического излучения. – М.: Радио и связь, 1981. – 439 с.
4. Смирнов Б.М. Физика атома и иона. - .:Энергоатомиздат, 1986. – 215 с.
5. Браун П.А., Киселёв А.А. Введение в теорию молекулярных спектров. – Л.: Изд – во Ленинградского ун-та, 1983. – 232 с.
6. Карлов Н.В. Лекции по квантовой электронике. – М.: Наука, 1988. – 336 с.
7. Ярив А. Квантовая электроника.-М.: Сов. радио, 1980. - 488 с.
8. О. Звелто Физика лазеров. – М.: Мир, 1979. – 374 с
9. О. Звелто Принципы лазеров. – М.: Мир, 1990. – 560 с.
10. Григоруk В. І., Коротков П. А., Хижняк А. І. Лазерна фізика. 2-е вид. – К.: «М.П. Леся», 1999.- 528 с.

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Атом водорода и водородоподобные атомы.....	3
2. Квантовомеханическая теория атома водорода.....	9
3. Многоэлектронные атомы.....	16
4. Стационарные состояния молекул.....	19
5. Взаимодействие поля с веществом.....	25
6. Открытые резонаторы.....	33
7. Расчёт характеристик лазеров.....	36
8. Физические константы.....	41
9. Рекомендуемая литература.....	42

Навчальне видання

**Дюбко Станіслав Пилипович  
Баскаков Олег Ігорович  
Перепечай Михайло Павлович  
Тютюнник Віталій Борисович**

## **КВАНТОВА РАДІОФІЗИКА**

Методичні вказівки та завдання до практичних занять

Редактор І. Ю. Агаркова  
Комп'ютерна верстка О. О. Бондаренко  
Коректор О. В. Плахоніна  
Макет обкладинки І. М. Дончик

61077, Харків, майдан Свободи, 4, Харківський національний  
університет імені В. Н. Каразіна, організаційно-видавничий відділ НМЦ.

Підписано до друку 25.06.2006. Формат 60x84/16.  
Папір офсетний. Друк ризографічний.  
Обл.-вид. арк. . Умов.-друк. арк. .  
Наклад 150 прим. Ціна договірна.

Надруковано ФОП «Петрова І. В.»  
61144, Харків-144, вул. Гв. Широнінців 79<sup>В</sup>, к. 137

Свідоцтво про державну реєстрацію ВОО № 948011 від 03.01.03