

უკ 378.147:543.429.3

სპექტროსკოპიის საფუძვლების შესწავლისათვის ზოგადი ფიზიკის კურსში

მზევინარ მელიქია

ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ფიზიკის ფაკულტეტი, ზოგადი ფიზიკის კათედრა

ანოტაცია

ერთიანი თვალსაზრისით გაშუქებულია ოპტიკური და γ -გამოსხივების სპექტროსკოპიის საფუძვლები ზოგადი ფიზიკის ჩარჩოებში. სპექტრული ხაზის ბუნებრივი სიგანე განსაზღვრულია კვანტური ფიზიკის ფუნდამენტური ფორმულით – ჰაიზენბერგის განუსაზღვრელობათა თანაფარდობით. ოპტიკური სპექტრული ხაზის ფორმა გამოკვლეულია კლასიკურ ოსცილატორულ მოდელებზე დაყრდნობით. ნაჩვენებია, რომ შთანთქმის ხაზს რეზონანსის მახლობლად ლორენცის მრუდის ფორმა აქვს. ასეთი სახის რეზონანსული “გამომახილი” დამახასიათებელია კვანტური ფიზიკისათვის. ფოტონის გამოსხივების (შთანთქმის) პროცესისათვის ენერგიისა და იმპულსის შენახვის კანონების გამოყენებით მიღებულია სპექტრული ხაზის დოპლერული სიგანისა და წანაცვლების გამოსახულებები. რიცხვითი შეფასებების საფუძველზე მიღებულია დასკვნა იმის შესახებ, რომ გამოსხივებისა და შთანთქმის ხაზები ოპტიკურ დიაპაზონში თანხვედნილია (ოპტიკური რეზონანსული ფლუორესცენცია), ბირთვის γ -გამოსხივების დიაპაზონში – წანაცვლებულია ერთმანეთის მიმართ. მოკლედაა განხილული ბირთვული რეზონანსული ფლუორესცენციის მოვლენა (მოსბაუერის ეფექტი).

საკვანძო სიტყვები:

ფოტონი, გამოსხივება, შთანთქმა, რეზონანსული ფლუორესცენცია, სპექტრული ხაზი.

1. შესავალი

ზოგადი ფიზიკის კურსში კლასიკური ფიზიკა ორგანულადაა შერწყმული კვანტურ ფიზიკასთან. კვანტური მოვლენების თანამედროვე მათემატიკური თეორია – კვანტური მექანიკა წარმოადგენს საფუძველს, როგორც მიკროსამყაროს, ასევე მაკროსამყაროს შესაცნობად.

მიკროსისტემები (ატომები, მოლეკულები, ბირთვები) და აგრეთვე, მაკროსისტემები ექსპერიმენტულად წარმატებით შეისწავლება სპექტროსკოპიის პრეციზიული მეთოდებით რადიოსიხშირულ, ოპტიკურ, რენტგენულ და γ -გამოსხივების დიაპაზონებში. ბუნებრივია, რომ ფიზიკურ მოვლენათა ასეთი ფართო წრე განხილულია მრავალრიცხოვან სპეციალურ მონოგრაფიასა და ზოგადი ფიზიკის კურსის სხვადასხვა ნაწილის შესაბამის სახელმძღვანელოში.

შევეცდებით ჩამოვაყალიბოთ მთავარი ასპექტრები ჩვენი წარმოდგენისა იმის შესახებ, თუ როგორ შევასწავლოთ სტუდენტს სპექტროსკოპიის ფიზიკური საფუძვლები და მეთოდურად ერთიანი თვალსაზრისით გავაშუქოთ ოპტიკური და γ -გამოსხივების სპექტროსკოპიის საკითხები.

2. სპექტრული ხაზის ფორმა და ბუნებრივი სიგანე

ატომების, მოლეკულებისა და ბირთვების მახასიათებელი სპექტრების არსებობა აიხსნება დისკრეტული ენერგეტიკული დონეების არსებობით, კვანტური მექანიკის კანონების შესაბამისად.

ყოველი სპექტრულ ხაზს შეესაბამება ენერგიის ორ დონეს შორის გადასვლა

$$\hbar \omega_0 = E_i - E_f \quad (1)$$

ენერგიის ფოტონის გამოსხივებით ($\hbar = 1.05 \times 10^{-27}$ ერგ.წმ პლანკის მუდმივა). ენერგეტიკულ დონეებს შორის $E_i - E_f$ სხვაობას შეესაბამება ω_0 სიხშირე, რომელთანაც რეზონანსშია მოცემული მიკროსისტემა (რეზონანსული ფლუორესცენცია). ენერგეტიკული დონის განმსაზღვრელი ω_0 სიხშირე შეესიტყვება რეზონანსული მრუდის მაქსიმუმს. შთანთქმის სპექტრული ხაზი სასრული სიგანისაა. ესაა ექსპერიმენტული ფაქტი, მიმანიშნებელი იმისა, რომ ძირითადი ენერგეტიკული დონის ზემოთ განლაგებულ დონეებს სასრული ΔE სიგანე აქვს. კვანტური ფიზიკის ფუნდამენტალური ფორმულის ჰაიზენბერგის განუზღვრელობების თანაფარდობის თანახმად [1]

$$\Delta E \equiv \Gamma = \frac{\hbar}{\tau} \quad (2)$$

აქ τ აღზნებული მდგომარეობის საშუალო სიცოცხლის ხანგრძლივობაა.

ოპტიკური რეზონანსული ხაზის ფორმა შეგვიძლია გამოვიკვლიოთ კლასიკურ ოსცილატორულ მოდელზე დაყრდნობით. სინათლის ელექტრულ ველში ($E = E_0 e^{-i\omega t}$) ელექტრონის მოძრაობის განტოლების ამოხსნით კომპლექსური ელექტრული ამთვისებლობისთვის შემდეგი სახის ფუნქცია მიიღება [2]:

$$\chi(\omega) = \frac{N e^2}{m} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i(\omega/\tau)} \quad (3)$$

აქ m და e , შესაბამისად, ელექტრონის მასა და მუხტის სიდიდეა, N -ატომთა რიცხვი მოცულობის ერთეულში, ω -სინათლის სიხშირე, ω_0 -ოსცილატორის საკუთარი სიხშირე და τ -ელექტრონის თავისუფალი რხევის მიღევის დრო. გამოსხივების ინტენსივობა მიიღევა ექსპონენციალურად მახასიათებელი τ დროით:

$$I = I_0 e^{-t/\tau} \quad (4)$$

$\chi(\omega)$ ამთვისებლობის რეალური $\chi'(\omega)$ ნაწილი დაკავშირებულია დისპერსიის მრუდთან (გარდატეხის მაჩვენებელი $n = \sqrt{1 + 4\pi \chi'(\omega)}$), ხოლო წარმოსახვითი $\chi''(\omega)$

ნაწილი აღწერს შთანთქმის სპექტრული ხაზის ფორმას (ადვილია ჩვენება, რომ შთანთქმის საშუალო სიმძლავრე $\langle P \rangle = \frac{1}{2} E_0^2 \omega \chi''$).

$$\chi''(\omega) = \frac{N e^2}{m} \frac{\omega/\tau}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega/\tau)^2} \cdot \quad (5)$$

ამ გამოსახულებიდან ჩანს, რომ შთანთქმის მრუდის სიგანეა (იგულისხმება, ნახევარსიმაღლეზე) $\Delta \omega_0 = 1/\tau$.

გამოსხივების პროცესის τ ხანგრძლივობისთვის დასაშვებია შემდეგი ინტერპრეტაცია: ესაა ატომის აღზნებული მდგომარეობის საშუალო სიცოცხლის ხანგრძლივობა, რომელიც განისაზღვრება ჰაიზენბერგის განუზღვრელობათა (2) თანაფარდობით (დაშლათა უმეტესი ნაწილი ხორციელდება τ შუალედის რიგის დროში).

მაშასადამე,

$$\Delta \omega_0 = \frac{1}{\tau} = \frac{\Gamma}{\hbar} \cdot \quad (6)$$

თუ გავზომავთ შთანთქმის ხაზის ბუნებრივ $\Delta \omega_0$ სიგანეს (ნახევარსიმაღლეზე), $\tau = 1/\Delta \omega_0$ თანაფარდობით განვსაზღვრავთ აღზნებულ მდგომარეობაში ატომის ყოფნის საშუალო τ ხანგრძლივობას.

რეზონანსის მახლობლად (5) ფუნქცია შემდეგი სახით შეგვიძლია ჩავწეროთ:

$$\chi''(\omega) = \chi''(\omega_0) \frac{1/2\tau}{(\omega_0 - \omega)^2 + (1/2\tau)^2} \cdot \quad (7)$$

ასეთი ტიპის - ლორენცის მრუდის ფორმის რეზონანსული "გამომახილი" დამახასიათებელია კვანტური ფიზიკისთვის - კვანტურმექანიკური სისტემის კვაზისტაბილური ენერგეტიკული დონე სწორედ ამ აზრით "არსებობს" (ბირთვულ ფიზიკაში შესაბამის ფორმულას ეწოდება ბრეიტ-ვიგნერის რეზონანსული ფორმულა).

3. სპექტრული ხაზის დოპლერული სიგანე და წანაცვლება

ექსპერიმენტული მონაცემების თანახმად, სპექტრული ხაზის სიგანე ბევრად აღემატება ბუნებრივ სიგანეს. სითბური მოძრაობა იწვევს დამატებით - დოპლერულ გაგანიერებას (დაჯახებით გამოწვეული გაგანიერება დაბალი წნევის დროს შეგვიძლია უგულებელვყოთ).

ენერგიისა და იმპულსის შენახვის კანონების ერთობლივი მოქმედება ატომის (ბირთვის) მიერ ფოტონის გამოსხივების (შთანთქმის) პროცესისთვის განაპირობებს გამოსხივებისა და შთანთქმის ხაზების ერთმანეთის მიმართ წანაცვლებას [3].

უძრავი გამომსხივებელი ატომისთვის

$$\hbar \omega = \hbar \omega_0 - R \cdot \quad (8)$$

უძრავი მშთანქმელი ატომისთვის

$$\hbar \omega = \hbar \omega_0 + R. \quad (9)$$

აქ $\hbar \omega_0 = E_i - E_f$ გადასვლის ენერგიაა E_i ენერგეტიკული დონიდან E_f ენერგეტიკულ დონეზე გადასვლისას, ხოლო R არის ამ გადასვლით გამოწვეული ატომის უკუცემის კინეტიკური ენერგია:

$$R = \frac{(\hbar \omega)^2}{2M c^2}. \quad (10)$$

ატომის უკუცემის გამო გამოსხივების ფოტონის λ ტალღის სიგრძის, ω სიხშირისა და ε ენერგიის ფარდობითი წანაცვლებები შემდეგნაირად შეგვიძლია ჩავწეროთ:

$$\frac{\Delta \lambda_R}{\lambda} = \frac{\Delta \omega_R}{\omega} = \frac{\Delta \varepsilon_R}{\varepsilon} \equiv \frac{R}{\varepsilon} = \frac{R}{\hbar \omega} = \frac{\hbar \omega}{2M c^2}. \quad (11)$$

ატომების სითბური მოძრაობის გამო სპექტრული ხაზის ფარდობით დოპლერულ სიგანეს შემდეგი სახე აქვს:

$$\frac{\Delta \lambda_D}{\lambda} = \frac{\Delta \omega_D}{\omega} = \frac{\Delta \varepsilon_D}{\varepsilon} \equiv \frac{2D}{\varepsilon} = 2 \frac{v}{c}. \quad (12)$$

სპექტრული ხაზის რეალური სიგანე შედგება დოპლერული და ბუნებრივი სიგანეებისაგან.

ფარდობითი ბუნებრივი სიგანე, (6) თანაფარდობის თანახმად, შემდეგნაირად გამოისახება:

$$\frac{\Delta \lambda_0}{\lambda} = \frac{\Delta \omega_0}{\omega} = \frac{\Delta \varepsilon_0}{\varepsilon} \equiv \frac{\Gamma}{\varepsilon} = \frac{\Gamma}{\hbar \omega} = \frac{1}{\omega \tau}. \quad (13)$$

გამოსხივებისა და მთანქმის რეზონანსულ სპექტრულ ხაზებს შორის წანაცვლება, (8) და (9) თანაფარდობების თანახმად, ენერგეტიკულ ერთეულებში არის $2R$, სადაც R გამოისახება (10) ფორმულით.

4. რიცხვითი შეფასებები ოპტიკური და γ -გამოსხივების სპექტრული ხაზებისთვის

(11), (12) და (13) თანაფარდობებით შეგვიძლია შევაფასოთ რიგით ჯერ ფარდობითი, შემდეგ კი აბსოლუტური სიდიდეები სპექტრული ხაზის სიგანისა და წანაცვლებისა.

ატომის ოპტიკური გამოსხივებისთვის ($\lambda \sim 10^3 \text{ \AA}, \omega \sim 10^{15} \text{ წმ}^{-1}, \varepsilon = \hbar \omega \sim 10 \text{ ევ}$) მივიღებთ:

$$\frac{\Delta\lambda_R}{\lambda} \sim 10^{-8}, \Delta\lambda_R \sim 10^{-5} \text{ \AA}, (Mc^2 \sim 10^9 \text{ ევ})$$

$$\frac{\Delta\lambda_D}{\lambda} \sim 10^{-5}, \Delta\lambda_D \sim 10^{-2} \text{ \AA}, (T \sim 10^3 \text{ K}, v \sim 10^3 \text{ მ/წმ})$$

$$\frac{\Delta\lambda_O}{\lambda} \sim 10^{-7}, \Delta\lambda_O \sim 10^{-4} \text{ \AA}. (\tau \sim 10^{-8} \text{ წმ})$$

როგორც ვხედავთ, ოპტიკური სპექტრული ხაზისთვის

$$\Delta\lambda_D \gg \Delta\lambda_O \gg \Delta\lambda_R. \quad (14)$$

ეს იმას ნიშნავს, რომ ოპტიკური სპექტრული ხაზის სიგანე რამდენიმე რიგით აღემატება გამოსხივებისა და შთანთქმის ხაზებს შორის წანაცვლებას.

ამრიგად, ოპტიკურ სპექტროსკოპიაში გამოსხივებისა და შთანთქმის ხაზები ერთმანეთის თანხვედნილია. სწორედ ამოტომაა დაკვირვებადი ოპტიკური რეზონანსული ფლუორესცენცია (ოპტიკური ფოტონების რეზონანსული შთანთქმა), რაც 1904 წელს ექსპერიმენტულად დაადასტურა ვუდმა ნატრიუმის ყვითელი ხაზის მაგალითზე.

γ -გამოსხივების დიაპაზონში ($\varepsilon = \hbar\omega \sim 10^5$ ევ, $\omega \sim 10^{20}$ წმ⁻¹)

$$\frac{\Delta\varepsilon_R}{\varepsilon} = \frac{R}{\varepsilon} \sim 10^{-6}, \Delta\varepsilon_R \equiv R \sim 10^{-6} \varepsilon = 10^{-6} \cdot 10^5 \text{ ევ} = 0,1 \text{ ევ}; (Mc^2 \sim 10^{11} \text{ ევ})$$

$$\frac{\Delta\varepsilon_D}{\varepsilon} = \frac{2D}{\varepsilon} \sim 10^{-6}, \Delta\varepsilon_D \equiv 2D \sim 10^{-6} \varepsilon = 10^{-6} \cdot 10^5 \text{ ევ} = 0,1 \text{ ევ}; (T \sim 300\text{K}, v \sim 10^2 \text{ მ/წმ})$$

$$\frac{\Delta\varepsilon_O}{\varepsilon} = \frac{\Gamma}{\varepsilon} \sim 10^{-8}, \Delta\varepsilon_O \equiv \Gamma \sim 10^{-8} \varepsilon = 10^{-8} \cdot 10^5 \text{ ევ} = 10^{-3} \text{ ევ}; (\tau \sim 10^{-12} \text{ წმ})$$

როგორც ვხედავთ, $2D \gg \Gamma$ (მაღალ ტემპერატურებზე, კერძოდ, ოთახის ტემპერატურაზე სპექტრული ხაზი დოპლერული გაგანიერებით ხასიათდება).

რიცხვითი შეფასებებიდან ჩანს არსებითი შედეგი:

$$2R \sim 2D. \quad (15)$$

γ -ფოტონების მხოლოდ უმნიშვნელო ნაწილისთვის (რაც შეესაბამება ენერგეტიკულ ერთეულებში $2R$ სიდიდით ერთმანეთის მიმართ წანაცვლებულ გამოსხივებისა და შთანთქმის ხაზების ურთიერთგადაფარვის მცირე არეს) არის შესაძლებელი მცირე ალბათობით რეზონანსული შთანთქმა.

5. მოსბაუერის ეფექტი

1958 წელს მოსბაუერმა აღმოაჩინა ბირთვის γ -გამოსხივების ფოტონების რეზონანსული შთანთქმა (ბირთვული რეზონანსული ფლუორესცენცია) ირიდიუმის კრისტალზე ($_{77}\text{Ir}^{191}$; $\Delta E = \hbar\omega_0 = 129$ კევ; $R = 0,05$ ევ; $2D \approx 0,1$ ევ, თუ $T \approx 300\text{K}$) დაბალ

ტემპერატურებზე. მოსბაუერის ეფექტს თან ახლავს ბირთვის შინაგანი ენერჯის – გადასვლის $\Delta E = E_i - E_f = \hbar\omega_o$ ენერჯის გამოსხივება. შემდგომში მოსბაუერის ეფექტი აღმოაჩინეს რკინის იზოტოპზე (${}_{26}Fe^{57}$) ოთახის ტემპერატურაზე.

მოსბაუერის გადასვლა ხორციელდება მაშინ, თუ არ შეიცვლება კრისტალური მესრის რხევითი მდგომარეობა (არ გამოსხივდება ფონონი) და უკუცემის ენერჯიას შეიძენს კრისტალი, როგორც მთლიანი სხეული (შესაბამისი კინეტიკური ენერჯია $P_\gamma^2 / 2M$ კრისტ, ცხადია, მიისწრაფის ნულისკენ).

მოსბაუერის ეფექტის ალბათობა

$$w = e^{-3R / 2k_B\theta} \quad (16)$$

აქ $k_B = 1,38 \cdot 10^{-16}$ ერჯი/ K ბოლცმანის მუდმივაა, θ -ე.წ. დებაის ტემპერატურა. $k_B\theta = \hbar\omega_{\max}$, სადაც ω_{\max} არის უაღმათესი ფონონის სიხშირე, მას შეესაბამება მინიმალური ტალღის სიგრძე ($\lambda_{\min} \approx 2d \sim 10^{-8}$ სმ).

თუ $R > k_B\theta$, $w \rightarrow 0$ (არ არის ეფექტი).

თუ $R \ll k_B\theta$, $w \rightarrow 1$ (მაგ. Fe^{57} -თვის $\theta \approx 1000 K$) ოთახის ტემპერატურაზე.

თუ $R \ll k_B\theta$, (მაგ. Ir^{191} -თვის $\theta \approx 500 K \sim 500 \cdot 10^{-4}$ ევ=0,05 ევ= R), ეფექტი დაკვირვებადია კრისტალის ტემპერატურის შემცირების შედეგად.

1960 წელს პაუნდმა და რებკამ შეძლეს დედამიწის პირობებში ძალიან ფაქიზი ეფექტის ($\Delta\omega / \omega \sim 10^{-15}$) - გრავიტაციული წანაცვლების ექსპერიმენტული დადასტურება Fe^{57} იზოტოპის გამოყენებით [4]. მოსბაუერის ეფექტის საშუალებით რამდენიმე კვირაში გადაწყდა პრობლემა, რომელზეც მუშაობდნენ ასტროფიზიკოსები და სპექტროსკოპისტები 45 წლის განმავლობაში.

მოსბაუერის ეფექტი უნიკალურია იმიტომ, რომ მისი საშუალებით ენერჯის გაზომვა შესაძლებელია 15-17 რიგის სიზუსტით.

მოსბაუერის ეფექტის შესაბამისი სპექტრული ხაზი შესამჩნევად წანაცვლებს და იცვლის სიგანეს ერთი ქიმიური შენაერთიდან მეორეზე გადასვლისას, კრისტალური მესრის სტრუქტურის ცვლილებისას, ტემპერატურის ცვლილებისას და სხვ. სწორედ ამიტომ მოსბაუერის ეფექტი ფართოდ გამოიყენება მყარი სხეულის ფიზიკაში.

6. დასკვნა

მიკროსისტემები (ატომები, ბირთვები) ექსპერიმენტულად წარმატებით შეისწავლება სპექტროსკოპიის პრეციზიული მეთოდებით. მიკროსისტემის ენერჯეტიკულ დონეებს შორის $E_i - E_f$ სხვაობას შეესაბამება ω_o რეზონანსული სიხშირე. შთანთქმის სპექტრული ხაზი სასრული სიგანისაა. რეზონანსის მახლობლად კვანტური ფიზიკისთვის დამახასიათებელია ლორენცის მრუდის ფორმის რეზონანსული “გამოძახილი”. ენერჯისა და იმპულსის შენახვის კანონების ერთობლივი მოქმედება განაპირობებს გამოსხივებისა და შთანთქმის ხაზების ერთმანეთის მიმართ წანაცვლებას. რიცხვითი შეფასებებით მიიღება დასკვნა იმის შესახებ, რომ ოპტიკურ დიაპაზონში სპექტრული ხაზის დოპლერული სიგანე ბევრად მეტია ბუნებრივ სიგანეზე, რომელიც, თავის მხრივ, მეტია ხაზის წანაცვლებაზე, ხოლო γ -გამოსხივების დიაპაზონში დოპლერული სიგანე წანაცვლების რიგისაა.

ამრიგად, დამზერადია ოპტიკური რეზონანსული ფლუორესცენცია (1904წ., ვუდი). ბირთვული რეზონანსული ფლუორესცენცია აღმოაჩინა მოსბაუერმა (1958წ.) ირიდიუმის კრისტალზე. ამ უნიკალური ეფექტით შესაძლებელია ენერგიის გაზომვა კოლოსალური სიზუსტით.

გამოყენებული ლიტერატურა

1. У. Фано, Л. Фано "Физика Атомов и молекул", М.1980
2. Крауфорд Ф. "Волны", М.1984
3. Савельев И.В. "Курс общей физика", т.3, М.1987
4. Шпольский Э.В. "Атомная физика", т. I, 1982

მიღებულია:13.11.2003