Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Храмешин Сергей Николаевич
Должность: Научный руководитель
Дата подписания: 19.08.2025 14:47:23
Уникальный программный ключ:
9e604e7f43158d9188ee2ea08e15bab0641b06c9

В. К. ИВАНОВ

ФИЗИКА

ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ

Учебное пособие

ЛАНЬ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГ • МОСКВА • КРАСНОДАР
2025

УДК 539.1
ББК 22.38я73

И 20 **Иванов В. К.** Физика. Введение в квантовую физику : учебное пособие для вузов / В. К. Иванов. — Санкт-Петербург : Лань, 2025. — 256 с. : ил. — Текст : непосредственный.

ISBN 978-5-507-51582-0

Содержание предлагаемого пособия составляет пятую часть лекционного курса по общей физике для студентов третьего-четвертого семестров обучения на физических направлениях подготовки. В этом пособии излагается материал, относящийся к основным идеям квантовой физики. Последовательность изложения соответствует современным представлениям о логической структуре этого раздела физики. Помимо обнаружения и объяснения корпускулярных характеристик излучения и волновых свойств материальных частиц в пособии рассматриваются основные положения квантовой механики, простейшие задачи атомной физики и основные идеи в ядерной физике. При создании учебного пособия использован многолетний опыт чтения общего курса физики на физических факультетах в институтах Санкт-Петербургского политехнического университета.

Пособие предназначено для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению бакалавриата «Физика», «Техническая физика», «Электроника и наноэлектроника» и «Прикладная математика и физика». Пособие может быть также использовано будущими бакалаврами, обучающимися по другим физическим направлениям, в качестве дополнительного учебного пособия по физике в рамках общетехнических образовательных программ, начинающими преподавателями в системах повышения квалификации.

УДК 539.1
ББК 22.38я73

Обложка
П. И. ПОЛЯКОВА

© Издательство «Лань», 2025
© В. К. Иванов, 2025
© Издательство «Лань», художественное оформление, 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение **7**
Глава 1. Квантовые свойства излучения **10**
1.1. Тепловое излучение 10
1.1.1. Введение 10
1.1.2. Равновесное излучение и его количественные характеристики ... 11
1.1.3. Экспериментальные законы. Абсолютно черное тело 13
1.1.4. Связь между энергетической светимостью и плотностью энергии излучения 16
1.1.5. Закон Стефана — Больцмана 17
1.2. Классическое описание излучения абсолютно черного тела 20
1.2.1. Критерий и закон смещения Вина 20
1.2.2. Теория Рэлея — Джинса 23
1.2.3. Формула Вина 28
1.3. Гипотеза и формула Планка 29
1.3.1. Гипотеза квантов 29
1.3.2. Вывод формулы Планка по Эйнштейну 31
1.3.3. Свойства формулы Планка 36
1.4. Поглощение и усиление электромагнитного излучения веществом 39
1.4.1. Ослабление потока излучения. Закон Бугера — Ламберта 39
1.4.2. Принципы работы лазера 42
1.5. Корпускулярные свойства электромагнитного излучения 45
1.5.1. Фотоны 45
1.5.2. Фотоэффект 48
1.5.3. Тормозное рентгеновское излучение 55
1.5.4. Эффект Комптона 57
Глава 2. Квантовые и волновые свойства вещества **64**
2.1. Экспериментальные обоснования структуры атомов 64
2.1.1. Распределение заряда в атомах. Модель Резерфорда 64
2.1.2. Оптические спектры атомов 68
2.1.3. Боровская теория атома 69
2.1.4. Опыты Д. Франка и Г. Герца 72
2.2. Волны де Бройля 74
2.2.1. Гипотеза де Бройля 74
2.2.2. Свойства волн де Бройля 76
2.3. Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля 78
2.3.1. Длина волны электрона 78
2.3.2. Опыты Девиссона и Джермера по дифракции электронных волн 80
2.3.3. Опыты Томсона и Тартаковского 83
2.3.4. Дифракция атомов и молекул, нейтронов 84

2.4. Статистическое толкование волн де Бройля
и соотношение неопределенностей 86
2.4.1. Волны вероятности 86
2.4.2. Соотношение неопределенностей 89
2.4.3. Примеры и выводы 91
2.5. Уравнение Шредингера 94
2.5.1. Уравнение Шредингера 94
2.5.2. Уравнение Шредингера для стационарных состояний 97
2.6. Волновая функция. Интерпретация и нормировка 98
2.6.1. Интерпретация и свойства 98
2.6.2. Плотность тока вероятности 99
2.6.3. Еще раз об интерпретации волновой функции 101
Глава 3. Элементы квантовой механики 103
3.1. Операторы. Собственные функции и собственные значения 103
3.1.1. Операторы в квантовой механике 103
3.1.2. Собственные функции и собственные значения 104
3.1.3. Правила действия с операторами 105
3.2. Самосопряженные или эрмитовы операторы 107
3.2.1. Самосопряженные операторы 107
3.2.2. Собственные функции и собственные значения
самосопряженных операторов 109
3.3. Частица в потенциальной яме 113
3.3.1. Одномерная потенциальная яма
с бесконечно высокими стенками 113
3.3.2. Одномерная потенциальная яма с конечными стенками 118
3.3.2.1. Энергия частицы больше глубины ямы 118
3.3.2.2. Энергия частицы меньше высоты ямы $E < U_0$ 119
3.4. Потенциальные барьеры 125
3.4.1. Понятие потенциального барьера. Прямоугольная ступенька ... 125
3.4.2. Прямоугольный потенциальный барьер 126
3.4.3. Барьер произвольной формы 132
3.5. Физические явления, связанные с туннельным эффектом 134
3.5.1. Контактная разность потенциалов 134
3.5.2. Явление холодной эмиссии 135
3.6. Линейный гармонический осциллятор 136
3.6.1. Классический осциллятор 136
3.6.2. Квантовый осциллятор 137
3.6.3. Операторный подход к задаче о квантовом осцилляторе 145
3.7. Движение в центральном поле 147
3.7.1. Уравнение Шредингера в центральном поле 147
3.7.2. Уравнение для радиальной части 149
3.7.3. Уравнение для угловой части 149
3.8. Момент импульса в квантовой механике 150
3.8.1. Оператор момента импульса 150
3.8.2. Оператор проекции момента импульса 151

3.9. Оператор квадрата момента импульса. Сферические функции 153
3.9.1. Оператор квадрата момента импульса (МИ) 153
3.9.2. Собственные значения оператора квадрата МИ 155
3.9.3. О собственных функциях оператора квадрата МИ 158
3.9.4. Описание состояний в центрально-симметричном поле 159
Глава 4. Введение в физику атомов 165
4.1. Движение в кулоновском поле 165
4.1.1. Уравнение для радиальной части волновой функции 165
4.1.2. Радиальное уравнение для атома водорода 166
4.1.3. Асимптотические решения 167
4.1.4. Общее решение уравнения 168
4.2. Состояния атома водорода 171
4.2.1. Вырождение уровней энергии 171
4.2.2. Состояния атома водорода 172
4.3. Спин электрона 176
4.3.1. Экспериментальные факты существования спина 176
4.3.2. Описание спина электрона 179
4.4. Принцип Паули. Распределение электронов в атоме 180
4.4.1. Многоэлектронный атом 180
4.4.2. Распределение электронов в атомах 182
4.5. Сложение моментов в квантовой механике 184
4.5.1. Сложение двух моментов импульса 184
4.5.2. Полный момент импульса одного электрона 188
4.6. Сложение моментов в многоэлектронном атоме. Понятие терма ... 189
4.6.1. Нормальная *L–S* связь 189
4.6.2. *j–j* связь 193
4.7. Оптические спектры. Правила отбора оптических переходов 194
4.7.1. Правила отбора для полного момента импульса 194
4.7.2. Правила отбора для моментов *L* и *S* 195
4.7.3. Правила отбора для отдельного электрона 196
4.8. Электрон во внешнем магнитном поле. Эффект Зеемана 197
4.8.1. Электрон в магнитном поле 197
4.8.2. Простой эффект Зеемана 198
4.8.3. Сложный эффект Зеемана 201
4.9. Атом в электрическом поле. Эффект Штарка 205
4.9.1. Расщепление уровней энергии в электрическом поле 205
4.9.2. Линейный эффект Штарка 206
4.9.3. Еще об эффекте Штарка в атомах 207
Глава 5. Элементы ядерной физики 211
5.1. Атомное ядро 211
5.1.1. Состав ядра 211
5.1.2. Масса и энергия связи ядра 213
5.1.3. Модели ядер 215

5.2. Радиоактивность 216
5.2.1. Радиоактивность 216
5.2.2. α-распад 218
5.2.3. β-распад 219
5.2.4. γ-излучение 220
5.2.5. Спонтанное деление ядер 221
5.3. Ядерные реакции 223
5.3.1. Механизмы ядерных реакций 223
5.3.2. Деление ядер 225
5.3.3. Термоядерные реакции синтеза 228
5.4. Элементарные частицы 232
5.4.1. Фундаментальные взаимодействия 232
5.4.2. О систематике элементарных частиц. Стандартная модель 236
5.4.3. Переносчики взаимодействий 238
5.4.4. Лептоны 240
5.4.5. Кварки и адроны 242
Предметный указатель 250

ВВЕДЕНИЕ

Настоящее учебное пособие представляет собой пятую часть лекционного курса общей физики, читаемого студентам второго года обучения на физических и инженерно-физических направлениях подготовки политехнического университета. Пособие является продолжением четырех предыдущих частей курса физики, опубликованных ранее в 2001–2003 гг., а именно «Механика», «Молекулярная физика», «Электромагнетизм» и «Электромагнитные волны». Поэтому изложение этой части курса опирается на пройденный ранее материал и содержит соответствующие ссылки.

Пособие подготовлено с учетом методических разработок кафедры экспериментальной физики политехнического университета (СПбПУ). Основные идеи и содержание обновленного курса общей физики широко обсуждались на научно-методических семинарах под руководством профессоров кафедры экспериментальной физики. Настоящее учебное пособие «Физика. Введение в квантовую физику» построено ближе к традиционному изложению этого раздела курса физики на лекциях и практических занятиях. Однако в отличие от широко известных курсов по атомной физике в этом пособии некоторые вопросы квантовой механики рассмотрены с большей степенью подробности.

Пособие состоит из 5 глав. Первые две посвящены традиционным вопросам, обсуждаемым в атомной физике. После изучения основных свойств электромагнитных волн в предыдущем пособии в этой книге рассматриваются корпускулярные свойства электромагнитных волн и их проявления, понятие квантов электромагнитного поля. Этих вопросов в той или иной степени учащиеся касались также при изучении предыдущих частей курса физики. Однако в этой главе рассматривается последовательное появление идеи квантов света, начиная с описания спектра излучения черного тела, и ее дальнейшее развитие в объяснениях фотоэффекта, тормозного излучения, эффекта Комптона и других. В следующей главе рассматриваются волновые свойства материальных частиц, в частности, явления, связанные с дифракцией электронов, соотношением неопределенностей. Здесь же вводится понятие волновой функции микрочастицы, обсуждается ее интерпретация, записывается уравнение Шрёдингера в простейшем случае для определения волновой функции.

В последующих главах пособия рассматриваются простейшие задачи квантовой механики, связанные с квантованием уровней энергии частицы в одномерных потенциальных ямах и прохождением частиц через потенциальные барьеры, и физические явления, вытекающие из решения этих задач. Несколько подробнее, чем в традиционных учебниках по общей физике, рассматривается задача об электроне, находящемся в центрально-симметричном поле, в частности, кулоновском поле. Вводится общепринятое разделение волновой функции на радиальную и угловые части и решается за-

дача о квантовании углового момента. При этом на усмотрение преподавателя и студентов математические выводы в последних параграфах можно опустить и принимать во внимание только результативную часть.

Введение в физику атомов начинается с решения радиального уравнения Шрёдингера для электрона в кулоновском поле. Обсуждаются радиальные волновые функции электрона в кулоновском поле и квантовые числа, характеризующие энергетическое состояние электрона. Введение спина электрона и его описание, а также учет принципа Паули для электронов атома, приводят к правилам заполнения электронных оболочек в многоэлектронном атоме. Кратко поясняются правила отбора оптических переходов, оптические спектры в атоме, расщепление энергетических уровней в электрических и магнитных полях.

Последняя небольшая глава пособия посвящена основным характеристикам ядра, различным видам радиоактивности, ядерным реакциям, а также рассмотрению элементарных частиц и их систематики.

В целом пособие отражает совокупность основных тем и вопросов, которые излагаются на лекциях и проходятся на практических занятиях. Оно построено в рамках утвержденной программы по общей физике для студентов Санкт-Петербургского политехнического университета. В пособии не рассматриваются многие практические приложения, связанные с применением квантовомеханических законов к описанию атомных систем и которые обычно рассматриваются в специальных курсах по квантовой теории. Поэтому в этом смысле данная книга не является полновесным пособием по курсу квантовой механики, однако в нее включен ряд дополнительных сведений по квантовой физике, которые обычно не рассматривается в учебниках по общей физике.

При подготовке данного учебного пособия автор помимо собственных методических разработок использовал широко известные курсы по общей физике. В частности, ниже приведены основные учебники, которые рекомендованы студентам при подготовке по данному курсу «Введение в квантовую физику».

1. *Сивухин, Д. В*. Общий курс физики. Атомная и ядерная физика. — М. : Наука, Физматлит. 1986. — Часть первая и часть вторая.

2. *Иродов, И. Е*. Квантовая физика. Основные законы. — М. ; СПб. : Физматлит. Лаборатория базовых знаний, 2001.

3. *Матвеев, А. Н*. Атомная физика. — М. : Высшая школа, 1989.

4. *Савельев, И. В*. Курс общей физики. — СПб. : Лань, 2005. — Том 3.

5. *Шпольский, Э. В*. Атомная физика. — СПб. : Лань, 2021–2022. — Том 1 и 2.

С другой стороны, поскольку настоящий курс лекций является продолжением пройденного студентами ранее материала по физике и во многом опирается на уже полученные знания, то в тексте часто указываются ссылки на лекции, опубликованные в предыдущих пособиях автора по курсам «Механика» [1], «Молекулярная физика» [2], «Электромагнетизм» [3] и «Электромагнитные волны» [4].

1. Физика. Механика. — СПб. : Политех-Пресс, 2021.
2. Физика. Молекулярная физика. — СПб. : Политех-Пресс, 2021.
3. Физика. Электромагнетизм. — СПб. : Политех-Пресс, 2022.
4. Физика. Электромагнитные волны. — СПб. : Политех-Пресс, 2023.

Автор пособия признателен преподавателям и сотрудникам кафедры экспериментальной физики СПбПУ за обсуждение содержания и критику этого курса, что способствовало его формированию.

ГЛАВА 1.
КВАНТОВЫЕ СВОЙСТВА ИЗЛУЧЕНИЯ

1.1. Тепловое излучение

1.1.1. Введение

К концу XIX в. в физике сложилась ситуация кажущегося благополучия и близкого завершения физической картины мира. Напомним основные достижения в ее формировании к этому времени.

1. Классическая механика Ньютона приобрела законченный вид и хорошо описывала динамику движения частиц и материальных тел.

2. Статистические методы довершили построение теории объектов, состоящих из большого числа частиц, и успешно привели к описанию эмпирических законов термодинамики.

3. Волновая природа света «победила» и заняла приоритетное положение в описании электромагнитных явлений. С помощью волновых представлений, выраженных в системе электромагнитных уравнений Максвелла, объяснены и описаны такие явления, как интерференция, дифракция, дисперсия. В частности, опыт Фуко с определением скорости света в движущейся среде показал, что скорость света в воде определяется отношением скорости света в вакууме и показателя преломления среды, зависящего от частоты света: $v = c/n(\omega)$, как и предсказывала волновая теория. При этом измеренное значение скорости света совпало с вычисленной скоростью распространения электромагнитных волн в среде. Были объяснены и многие другие оптические явления.

Физическому сообществу казалось, что остается лишь несколько нерешенных небольших проблем, для объяснения которых надо совершить еще одно небольшое усилие, и физическая картина мира будет ясна полностью.

Какие проблемы оставались нерешенными? Приведем в пример следующие явления и факты, не имевшие в то время объяснения у физиков.

А. Явление фотоэффекта, открытое в 1887 г. Г. Герцем.

Б. Линейчатые спектры излучения атомов, обнаруженные в 1885 г. И. Бальмером и немногим позже другими экспериментаторами, а также полученные полосатые спектры молекул.

В. Тепловое излучение вещества, свойства которого изучались достаточно давно многими физиками, однако не были объяснены вплоть до начала XX в.

С обсуждения проблемы теплового излучения мы и начнем изложение в этом разделе.

Примечание 1. Генрих Рудольф Герц, немецкий физик, 1857–1894.
Иоганн Якоб Бальмер, швейцарский физик, 1825–1898.

1.1.2. Равновесное излучение и его количественные характеристики

Тепловое излучение — испускание электромагнитных волн за счет внутренней энергии тела. Оно происходит при любой конечной температуре T тела и имеет сплошной спектр, положение максимума которого зависит от температуры тела (вещества). При невысоких температурах излучаются лишь электромагнитные волны с большой длиной волны (инфракрасная область спектра). С повышением температуры возрастает общая энергия испускаемого теплового излучения, а положение максимума перемещается в область малых длин волн. Тепловое (электромагнитное) излучение испускается с поверхности любого тела, имеющего температуру выше абсолютного нуля, т. е. обладающего внутренней энергией. Наиболее ярко излучение проявляется с поверхности нагретых тел, в частности, накаленного металла, в нагретых солнцем газах и поверхностей на земле, с кожного покрова человека и т. д.

Все остальные виды излучения, возбуждаемые за счет любого другого вида энергии, кроме внутренней (например, налетающими частицами, фотонами, механическим воздействием), носят название — *люминесценции*. Важно отличать ее от теплового излучения: люминесценция всегда неравновесная, а тепловое излучение может быть равновесным.

В качестве примера равновесного теплового излучения можно рассмотреть следующую модель (см. рис. 1.1.1): имеем идеально отражающую оболочку, внутри которой находится тело при температуре T, и оно, следовательно, излучает. За счет отражения происходит обмен энергией: излучение → отражение → поглощение телом отраженного излучения → снова излучение → ... и так далее. Тело с оболочкой находятся в равновесии и характеризуются постоянной температурой.

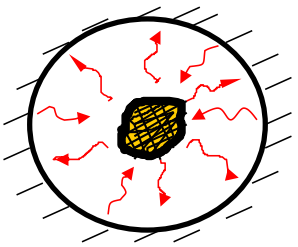


Рис. 1.1.1

Равновесное излучение — процесс, при котором распределение энергии между телом и излучением остается неизменным для каждой длины волны. Другими словами, сколько энергии излучается, столько и поглощается для данной длины волны λ. Такое состояние системы «*тело + излучение*» — равновесно, и к нему могут быть применены законы термодинамики.

Какие свойства равновесного излучения можно отметить? Экспериментально установлены следующие факты о равновесном излучении:

1) излучение не зависит от материала излучаемого тела и его формы;

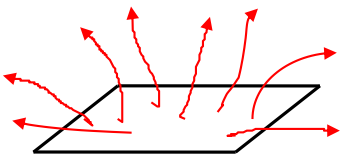
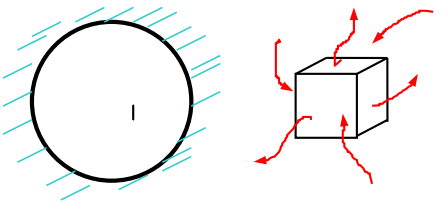
2) характеристики излучения (спектральный состав, интенсивность) зависят только от температуры;

3) излучение однородно, изотропно, не поляризовано.

Можно, вообще говоря, отделить равновесное излучение от тела, с которым оно находится в равновесии, и характеризовать его плотностью энергии излучения в пространстве.

Количественные характеристики теплового излучения аналогичны характеристикам, определяемым в фотометрии (собственно, это одно и то же): *энергетическая светимость, испускательная способность, плотность энергии излучения, поглощательная способность*.

Равновесное тепловое излучение можно характеризовать двумя способами: через равновесие среды с излучаемым телом и через наличие энергии излучения в пространстве. Введем эти характеристики.

I. Через равновесие с телом	**II. Излучение без тела**
Определяется как количество энергии, исходящее с единицы поверхности тела в единицу времени.  **Рис. 1.1.2*а***	Определяется как количество энергии, содержащееся в единице объема.  **Рис. 1.1.2б**
1. *Энергетическая светимость*. $R = R(T)$ — поток энергии, испускаемый единицей поверхности излучающего тела по всем направлениям, т. е. в телесный угол 2π. Размерность: $[R]$ = Эрг/с·см^2 или Дж/с·м^2.	1. *Плотность энергии излучения*. $U = U(T)$ — энергия излучения, приходящаяся на единицу объема пространства. Размерность: $[U]$ = Эрг/см^3 или Дж/м^3.

Выше записаны общие характеристики излучения, т. е. интегральные, просуммированные по всем частотам (или длинам) электромагнитных волн.

Спектральные характеристики теплового излучения

2. Испускательная способность тела: $$r_\omega \equiv dR_\omega / d\omega = r(\omega, T), \qquad (1.1.1)$$ где dR_ω — поток энергии, испускаемый единицей поверхности в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$. Размерность: $[r_\omega] = [d\Phi]/[ds][d\omega]$ = Эрг/см^2.	2. Спектральная плотность энергии излучения: $$u_\omega = u(\omega, T) \equiv dU_\omega / d\omega, \qquad (1.1.2)$$ где dU_ω — энергия в единице объема пространства и в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$. Размерность: $[u_\omega] = [dW]/[dV][d\omega]$ = Эрг·с/см^3.

При этом энергетическая светимость равна: $R(T)=\int_0^\infty dR_\omega(T)=\int_0^\infty r(\omega,T)\,d\omega$ (1.1.3)	При этом плотность энергии излучения равна: $U(T)=\int_0^\infty dU_\omega=\int_0^\infty u(\omega,T)\,d\omega$ (1.1.4)
3. Испускательная способность в длинах волн (или спектральная энергетическая светимость): $r_\lambda \equiv dR_\lambda/d\lambda = r(\lambda,T)$, (1.1.5) где dR_λ — поток энергии, испускаемый единицей поверхности в интервале длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$. Размерность: $[r_\lambda]$ = Эрг/с·см^3. $R(T)=\int_0^\infty dR_\lambda=\int_0^\infty r(\lambda,T)d\lambda$ (1.1.7)	3. Аналогично имеем спектральную плотность энергии излучения в длинах волн: $u_\lambda = u(\lambda,T) \equiv dU_\lambda/d\lambda$, (1.1.6) где dU_λ — энергия в единице объема пространства и в интервале частот от λ до $\lambda + d\lambda$ Размерность: $[u_\lambda]$ = Эрг/см^4. $U(T)=\int_0^\infty u(\lambda,T)\,d\lambda$ (1.1.8)

Чтобы получить связь между испускательными способностями r_ω и r_λ, воспользуемся определениями (1.1.1) и (1.1.5) для потока энергии

$$r_\omega d\omega = r_\lambda d\lambda$$

и, так как $\lambda = 2\pi c/\omega$, получаем

$$r_\omega = \frac{\lambda^2}{2\pi c} r_\lambda . \qquad (1.1.9)$$

Связь между спектральными плотностями энергии излучения u_ω и u_λ получаем аналогично (1.1.9):

$$u_\omega = \frac{\lambda^2}{2\pi c} u_\lambda . \qquad (1.1.10)$$

4. *Поглощательная способность* тела определяется:

$$a_{\omega,T} = d\Phi'_\omega / d\Phi_\omega ,$$

где $d\Phi'_\omega$ — часть потока энергии, поглощенная телом в интервале частот ($\omega/\omega+d\omega$), $d\Phi_\omega$ — падающий поток энергии в том же частотном интервале $d\omega$. Видно, что поглощательная способность $a_{\omega,T}$ — безразмерная величина. По определению $a_{\omega,T} \le 1$.

1.1.3. Экспериментальные законы. Абсолютно черное тело

В XIX в. проводились многочисленные исследования излучения нагретых тел. Эти исследования позволили установить, что между испускательной и поглощательной способностью любого тела существует определенная связь.

1. Пьер Прево (1809 г.) нашел правило: *если два тела поглощают различные количества энергии, то они и излучают разные количества энергии*. В труде «Теория обменов» писал: «равновесие теплоты между соседними свободными объемами состоит в равновесии обменов».

2. Густав Кирхгоф (1859 г.) использовал рассуждения Прево при доказательстве теоремы (закона Кирхгофа), доложенной Берлинской Академии в 1859 г. («О связи между испусканием и поглощением света и тепла»). *Закон Кирхгофа*: *отношение испускательной и поглощательной способностей не зависит от природы тела*, оно является для всех тел универсальной (одной и той же) функцией частоты ω (или λ) и температуры *T*.

$$\left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}}\right)_1 = \left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}}\right)_2 = \left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}}\right)_3 = \ldots\ldots = \frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} = f(\omega,T), \qquad (1.1.11)$$

где индексы 1, 2, 3, ... соответствуют разным телам, а $f(\omega,T)$ — универсальная функция. Сами величины $r_{\omega,T}$ и $a_{\omega,T}$ могут меняться очень значительно от одного тела к другому, однако их отношение оказывается одинаковым для всех тел. Другими словами, тело, сильнее поглощающее какие-либо лучи, будет их и сильнее испускать (не путать испускание с отражением).

В конце XIX в. перед физиками встала новая задача: найти универсальную функцию $f(\omega,T)$. Трудности ее решения состояли в том, что необходимо иметь дело с двумя характеристиками одновременно: испускательной $r_{\omega,T}$ и поглощательной $a_{\omega,T}$. Проблема состояла в том, чтобы избавиться от поглощательной способности $a_{\omega,T}$, отсюда возникла идея абсолютно черного тела.

3. *Абсолютно черное тело*: поглощательная способность $a_{\omega,T} = 1$, т. е. поглощается все, что падает на это тело при всех частотах излучения. Абсолютно черных тел не бывает в природе. Наиболее близко к нему приближаются: *сажа*, *платиновая чернь*, но и то лишь в некоторой области частот излучения ω.

Примечание 2. Иногда вводят понятие «серого» тела, у которого $a_{\omega,T} = \text{const} < 1$, т. е. поглощается часть падающей энергии, но одинаковая для всех частот.

Абсолютно черное тело интересно тем, что его испускательная способность равна универсальной функции $r_{\omega,T} = f(\omega,T)$ из (1.1.11). Поэтому основная идея в исследовании теплового излучения состояла в том, чтобы создать модель абсолютно черного тела и изучать его испускательную способность.

Реализация модели абсолютно черного тела (1861 г.). Другими словами, необходимо создать устройство, сколь угодно близкое по своим свойствам к модели абсолютно черного тела. Такое устройство представляет собой замкнутую полость (см. рис. 1.1.3), снабженную маленьким отверстием, стенки которой поддерживаются при определенной температуре *T*. Излучение, попадающее через отверстие в полость, может долго находиться внутри нее, испытывая отражение от стенок, поглощаясь ими, переизлучаясь и вновь поглощаясь. Этот непрерывный процесс со временем становится стационарным — происходит так называемая термолизация излучения. При этом

важно, что для маленького отверстия поглощательная способность $a_{\omega,T} \approx$ ≈ 1 — иначе, все, что попадает внутрь объема, в нем практически и остается.

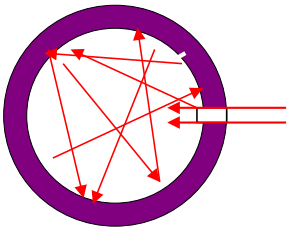


Рис. 1.1.3

Пример. Если в яркий солнечный день рассматривать внутренность комнаты через открытое окно, то комната кажется темной.

В полости находится практически равновесное излучение, которое, претерпев многократные отражения, будет выходить из отверстия. Таким образом, если стенки полости поддерживать при некоторой постоянной температуре T, то из отверстия выходит излучение, весьма близкое по спектральному составу к излучению абсолютно черного тела при той же температуре T. Разлагая это излучение с помощью дифракционной решетки или системы зеркал в спектр и измеряя интенсивность различных участков спектра, можно экспериментально получить универсальную функцию (1.1.11) $r_{\omega,T} \approx f(\omega,T)$.

Опытным путем было найдено, что энергетическая светимость абсолютно черного тела сильно возрастает с температурой. На рисунке 1.1.4 показаны экспериментальные зависимости энергетической светимости от частоты излучения (*А*) и длины волны (*Б*) при разных температурах. Видно, что максимум испускательной способности с увеличением температуры сдвигается в коротковолновую область спектра, а интегральная интенсивность (площадь под кривой) быстро возрастает.

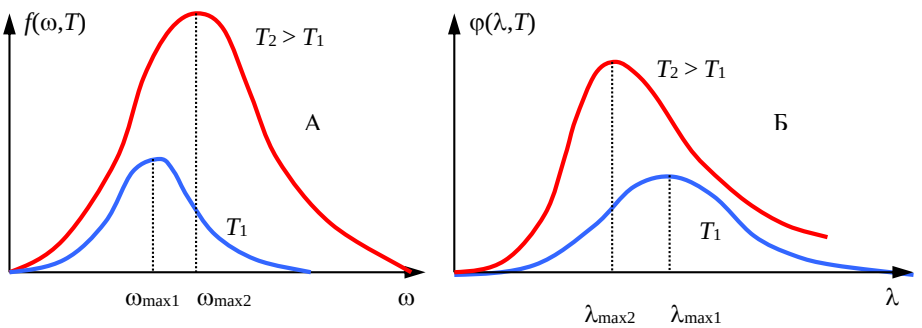


Рис. 1.1.4

В экспериментальных исследованиях удобнее пользоваться функцией длины волны $\varphi(\lambda,T)$. В теоретических работах, как правило, используют

функцию частоты $f(\omega,T)$. Между этими функциями существует следующая связь в соответствии с (1.1.9):

$$\varphi(\lambda,T)=\frac{\omega^2}{2\pi c}f(\omega,T); \qquad f(\omega,T)=\frac{\lambda^2}{2\pi c}\varphi(\lambda,T). \tag{1.1.12}$$

Для абсолютно черного тела интегральная испускательная способность, или, иначе, энергетическая светимость, равна площади под кривой:

$$R(T)=\int_0^\infty r(\omega,T)d\omega=\int_0^\infty f(\omega,T)d\omega=\int_0^\infty \varphi(\lambda,T)d\lambda\,. \tag{1.1.13}$$

Примечание 3. Пьер Прево, швейцарский физик, 1751–1839.
Густав Роберт Кирхгоф, немецкий физик, 1824–1887.

1.1.4. Связь между энергетической светимостью и плотностью энергии излучения

Для абсолютно черного тела легко найти связь между энергетической светимостью $R(T)$ и плотностью энергии излучения $U(T)$, или между спектральными характеристиками $r(\omega,T)=f(\omega,T)$ и $u(\omega,T)$.

Пусть имеется полость с абсолютно черными стенками, которые поддерживаются при постоянной температуре T. Внутри полости через любую точку во всех направлениях проходит поток энергии одинаковой плотности $u(\omega,T)$ [или $U(T)$]. Далее запишем долю объемной плотности энергии, которая распространяется в телесном угле $d\Omega$:

$$du=du_\theta=u\frac{d\Omega}{4\pi}=u\frac{\sin\theta\, d\theta\, d\varphi}{4\pi}. \tag{1.1.14}$$

Тогда на площадку Δs под углом θ за время Δt попадет энергия (см. рис. 1.1.5)

$$dW=du\cdot\Delta V=u\frac{d\Omega}{4\pi}c\,\Delta t\,\Delta s\cos\theta. \tag{1.1.15}$$

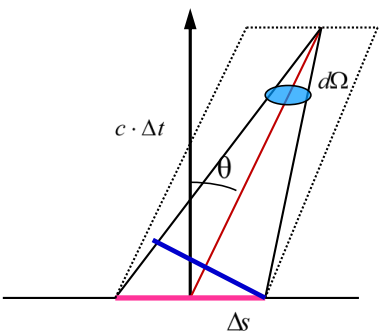


Рис. 1.1.5

Полная энергия, прошедшая через площадку Δs за время Δt (излучение падает со всех сторон, телесный угол полупространства $\Omega = 2\pi$), равна

$$\Delta W = \frac{uc\Delta t\Delta s}{4\pi}\int_0^{\pi/2}\cos\theta\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi = \frac{c}{4}u\Delta t\Delta s. \qquad (1.1.16)$$

Плотность потока энергии через (или на) единичную площадку равна

$$\Delta\Phi = \frac{\Delta W}{\Delta t\cdot\Delta s} = \frac{c}{4}u. \qquad (1.1.17)$$

Поток энергии, испускаемый единицей поверхности, также определяется соотношением

$$R = \frac{\Delta W}{\Delta s\cdot\Delta t}. \qquad (1.1.18)$$

Так как в равновесии исходящий и приходящий потоки энергии равны, то

$$R(T) = \frac{c}{4}U(T), \qquad (1.1.19)$$

или для спектральных характеристик имеем

$$r(\omega,T) = f(\omega,T) = \frac{c}{4}u(\omega,T). \qquad (1.1.20)$$

Соотношения (1.1.19) и (1.1.20) и дают связь между энергетической светимостью и плотностью излучения.

1.1.5. Закон Стефана — Больцмана

Долгое время попытки теоретически получить вид функции $f(\omega,T)$ не приводили к успеху. В 1879 г. Й. Стефан, анализируя экспериментальные данные, пришел к выводу, что энергетическая светимость тел пропорциональна четвертой степени термодинамической температуры: $R(T) \sim T^4$. Стефан считал, что этот закон справедлив для интегральной светимости всех тел. Однако оказалось, что он строго выполняется только для абсолютно черного тела. Это показал в 1884 г. Л. Больцман, исходя из законов классической термодинамики и используя результаты теории электромагнетизма Максвелла.

$$R^{\text{АЧТ}} = \int_0^{\infty} f(\omega,T)d\omega = \sigma T^4. \qquad (1.1.21)$$

Приведенное соотношение между энергетической светимостью абсолютно черного тела и его термодинамической температурой получило название *закона Стефана — Больцмана*. Соотношение означает, что площадь под кривой $f(\omega,T)$ растет пропорционально четвертой степени температуры $\sim T^4$. Константу σ называют *постоянной Стефана — Больцмана*. Ее экспериментальное значение равно:

$$\sigma = 5{,}6696\cdot10^{-8}\ \text{Вт/м}^2\cdot\text{К}^4.$$

Из термодинамических соотношений зависимость $R \sim T^4$ можно получить, если использовать одну из общих термодинамических формул (см. Приложение 1 в конце параграфа):

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V - P, \qquad (1.1.22)$$

где P — давление, V — объем, U — внутренняя энергия газа.

Для газа молекул и, аналогично, для излучения получаем, что внутренняя энергия U аддитивна:

$$U = V \cdot u(T), \qquad (1.1.23)$$

где $u(T)$ — объемная плотность энергии излучения. Давление света согласно максвелловской теории равно (вывод см. в Приложении 2 в конце параграфа):

$$P = \frac{1}{3}u(T). \qquad (1.1.24)$$

Подставляя (1.1.23) и (1.1.24) в (1.1.22), получаем для производной по объему:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = \frac{\partial}{\partial V}\left(V \cdot u(T)\right)_T = u(T)$$

и далее получаем следующее уравнение:

$$u(T) = T\frac{1}{3}\frac{du(T)}{dT} - \frac{1}{3}u(T);$$

$$\frac{4}{3}u(T) = \frac{1}{3}T\frac{du(T)}{dT}. \qquad (1.1.25)$$

Решая это дифференциальное уравнение путем разделения переменных, имеем

$$4\frac{dT}{T} = \frac{du(T)}{u(T)} \quad \text{и далее} \quad 4\ln T = \ln u(T) + \ln A.$$

Откуда получаем закон Стефана — Больцмана:

$$u(T) = AT^4. \qquad (1.1.26)$$

Аналогичный результат для плотности энергии излучения можно получить также с помощью рассмотрения цикла Карно.

Приведем несколько примеров, как с помощью закона Стефана — Больцмана можно провести оценки энергии излучения.

1. При температуре T = 300 К абсолютно черное тело с 1 м^2 поверхности излучает

$$R(300K) = 5{,}67 \cdot 10^{-8} \cdot 3^4 \cdot 10^8 = 5{,}67 \cdot 81 \cong 460 \text{ Вт} \cong 0{,}5 \text{ кВт}.$$

2. Пусть абсолютно черное тело с температурой T_1 находится в среде с температурой T_2, причем $T_2 < T_1$. Количество энергии, уходящей с поверхности тела, определяется

$$W = \sigma\left(T_1^4 - T_2^4\right)s \approx 4s\sigma \cdot T^3 \Delta T ,$$

при $T_1, T_2 >> \Delta T = T_1 - T_2$.

А. Если в комнате теплее, чем на улице (среда), на ΔT = 20°С и температура наружного воздуха T = 300 К, то уходящее из помещения через окно (рассматривая его как черное тело) излучение уносит энергию:

$$W/S = 4 \cdot 5{,}7 \cdot 10^{-8} \cdot 3^3 \cdot 10^6 \cdot 20 \cong 123\,\text{Вт/м}^2 \approx 0{,}1\,\text{кВт/м}^2 .$$

Б. У змей высокая чувствительность к тепловому излучению. Кобра улавливает тепловое излучение тел, температура которых отличается от температуры среды на $10^{-1}...10^{-2}$ К, что соответствует потоку энергии с единицы (1 м^2) поверхности тела приблизительно 0,10–0,06 Вт.

В. Высокочувствительные люди — экстрасенсы. Их чувствительность в инфракрасной (ИК) области очень высока, но зависит не только от интегральной интенсивности, но и от положения максимума энергетической светимости.

3. Следует отметить, что для нечерных тел закон Стефана — Больцмана не выполняется. Однако в некоторых случаях удовлетворительно выполняется соотношение $R = \gamma\sigma T^4$, если:

а) ввести коэффициент серости $\gamma < 1$;

б) изменить показатель степени, сделав его больше или меньше 4;

в) существуют селективные излучатели, испускающее тепловое излучение лишь в определенном частотном интервале.

Примечание 4. Йозеф Стефан, австрийский физик, 1835–1893.
Людвиг Больцман, выдающийся австрийский физик-теоретик, 1844–1906.

Приложение 1. Вспомним, как получается приведенная выше формула (1.1.22).

1. Первое начало термодинамики:

$$dQ = dU + PdV; \qquad dQ = TdS; \qquad dU = TdS - PdV.$$

делим на элемент объема dV при постоянной температуре T (напомним, что здесь S — энтропия):

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T - P .$$

2. Свободная энергия $F = F(V,T)$ определяется:

$$F = U - TS; \qquad dF = dU - TdS - SdT = -PdV - SdT .$$

При этом

$$\left.\begin{array}{l} \underbrace{S=-\left(\dfrac{\partial F}{\partial T}\right)_V}_{\substack{\text{дифференцируем}\\ \text{по } V}} \\ \\ \underbrace{P=-\left(\dfrac{\partial F}{\partial V}\right)_T}_{\substack{\text{дифференцируем}\\ \text{по } T}} \end{array}\right\} \Rightarrow \left.\begin{array}{l} \left(\dfrac{\partial S}{\partial V}\right)_T=-\dfrac{\partial}{\partial V}\dfrac{\partial F}{\partial T} \\ \\ \left(\dfrac{\partial P}{\partial T}\right)_V=-\dfrac{\partial}{\partial T}\dfrac{\partial F}{\partial V} \end{array}\right\} \Rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T=\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$$

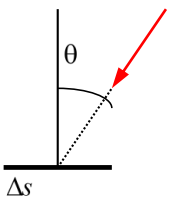
Таким образом, получаем соотношение (1.1.22).

Приложение 2. Поток энергии равен:

$$\vec{S}=\frac{c}{4\pi}\left[\vec{E},\vec{H}\right] \quad \text{или иначе:} \quad \left|\vec{S}\right|=c\cdot u(T).$$

Здесь $\vec{S}$ — вектор Пойнтинга. Поглощаемое площадкой Δs излучение, падающее под углом θ, передает за время dt импульс:

$$dp_\perp=\frac{1}{c}dW\cdot\cos\theta=\frac{1}{c}\cdot u(T)\cdot\frac{d\Omega}{4\pi}\cdot c\cdot dt\cdot\Delta s\cdot\cos^2\theta.$$



Давление этой компоненты излучения определяется импульсом, переданным в единицу времени:

$$dP=\frac{dp_\perp}{dt\cdot\Delta s}=u(T)\cdot\cos^2\theta\frac{\sin\theta\cdot d\theta\cdot d\phi}{4\pi}.$$

Полное давление, оказываемое на стенку поглощаемым излучением, равно

$$P=\frac{u(T)}{4\pi}\int_0^{\pi/2}\cos^2\theta\cdot\sin\theta\cdot d\theta\int_0^{2\pi}d\phi=\frac{1}{6}u(T).$$

Если стенка излучает столько же, сколько поглощает, то $dp_{0\perp}=2dp_\perp$, и давление на стенку, обусловленное поглощением и излучением равных порций излучения, определяется формулой (1.1.24).

1.2. Классическое описание излучения абсолютно черного тела

1.2.1. Критерий и закон смещения Вина

К концу XIX в. было много попыток объяснения излучения абсолютно черного тела в рамках классической физики. Из самых общих законов термодинамики и максвелловской электромагнитной теории Вильгельм Вин

(1893 г.) сформулировал общий критерий или условие для поведения универсальной функции $f(\omega,T)$ (о выводе формулы см., например, том IV Сивухина, § 116):

$$f(\omega,T)=\omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right). \qquad (1.2.1)$$

Явный вид функции $F(\omega/T)$ не ясен, так как для этого необходимо знание физического механизма излучения. Однако с помощью критерия Вина можно было сделать некоторые выводы и получить результаты. Так, получается, что из полной функции $f(\omega,T)$ выделена частота ω, а функция $F(\omega/T)$ является лишь функцией одной переменной — отношения (ω/T). Таким образом, был сформулирован критерий Вина (1.2.1).

Критерий Вина: любая предлагаемая формула для универсальной функции $f(\omega,T)$ не должна противоречить формуле Вина, поскольку последняя получена из общих соображений. Критерий Вина можно записать через переменные λ и T:

$$\varphi(\lambda,T)=\frac{2\pi c}{\lambda^2}\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^3 F\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right)=\frac{1}{\lambda^5}\Psi(\lambda T). \qquad (1.2.2)$$

С помощью критерия Вина можно получить следующие важные соотношения.

1. *Закон Стефана — Больцмана*. Полная энергетическая светимость определяется

$$R(T)=\int_0^\infty \varphi(\lambda,T)d\lambda=\int_0^\infty \Psi(\lambda T)\frac{d\lambda}{\lambda^5}. \qquad (1.2.3)$$

Делая замену переменных $x=\lambda T$ и $d\lambda=dx/T$, получаем

$$R(T)=T^4\int_0^\infty \Psi(x)\frac{dx}{x^5}=\sigma T^4, \qquad (1.2.4)$$

где введенное (размерное) число σ есть постоянная Стефана — Больцмана, равная

$$\sigma=\int_0^\infty \Psi(x)\frac{dx}{x^5}=\int_0^\infty y^3 F(y)dy. \qquad (1.2.5)$$

Здесь введена переменная y, определяемая отношением $y=\omega/T$. Таким образом, получаем, что площадь под кривой $f(\omega,T)$, или $\varphi(\lambda,T)$, растет с температурой пропорционально четвертой степени температуры (рис. 1.2.1).

2. *Закон смещения Вина*. Найдем максимум функции распределения $f(\omega,T)$:

$$\left[\omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right)\right]'_\omega=0=3\omega^2 F\left(\frac{\omega}{T}\right)+\omega^3\frac{1}{T}F'\left(\frac{\omega}{T}\right). \qquad (1.2.6)$$

Корень этого уравнения ω = 0 соответствует минимуму функции, равному нулю, поэтому сократим на ω и снова введем обозначение $y = \omega/T$. Тогда уравнение (1.2.6) приобретает вид

$$3F(y) + yF'(y) = 0. \qquad (1.2.7)$$

Пусть мы нашли решение этого уравнения y_0, соответствующее максимуму функции распределения, при этом получаем

$$y = y_0 = \frac{\omega_{\max}}{T}. \qquad (1.2.8)$$

Таким образом, автоматически получаем *закон смещения Вина* (1896 г.) (см. рис. 1.2.1*А*):

$$\frac{\omega_{\max}}{T} = \text{const} = 0{,}37 \cdot 10^{12} \ \left(\text{К}^{-1}\text{с}^{-1}\right). \qquad (1.2.9)$$

Итак, положение максимума функции распределения в зависимости от частоты прямо пропорционально температуре. Можно это условие положения максимума функции распределения записать также через длины волн:

$$\lambda_{\max} T = b. \qquad (1.2.10)$$

Закон смещения Вина утверждает, что длина волны $\lambda_{\max}$, на которую приходится максимум энергии в спектре равновесного излучения, обратно пропорциональна температуре излучающего тела (см. рис. 1.2.1*Б*). Этот закон является следствием формулы Вина. Постоянная *b* носит название *постоянной Вина*.

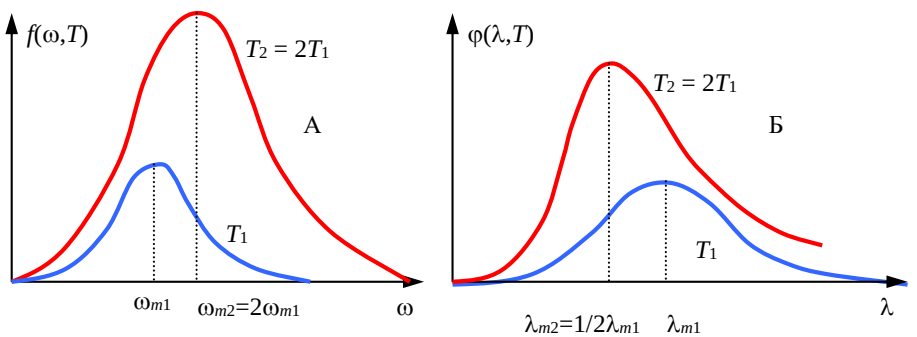


Рис. 1.2.1

О. Луммер и Э. Прингсгейм в 1897 г. экспериментально подтвердили справедливость закона смещения Вина, получив при этом значение $b = 2{,}898 \cdot 10^{-3}$ м · К.

Рассмотрим несколько примеров, когда с помощью закона смещения Вина можно провести оценки интенсивности излучения.

1. Если человека рассматривать как абсолютно черное тело, то при температуре T = 300 К максимум его светимости находится при длине волны $\lambda \approx 10$ мкм, т. е. лежит в инфракрасном (ИК) диапазоне спектра.

2. Проведем оценку интенсивности излучения, испускаемой человеком в среду. Пусть средняя площадь поверхности человека ~ 1 м^2, разность температур тела и среды $\Delta T \sim 10$ К, тогда мощность излучения составляет

$$W = 4S \cdot \sigma T^3 \Delta T \approx 4 \cdot 1 \cdot 5{,}710^{-8} \cdot 27 \cdot 10^6 \cdot 10 \cong 60 \text{ Вт},$$

т. е. по интегральной мощности человек «светит», как 60-ваттная лампочка, но в основном в ИК-диапазоне. На основе инфракрасного излучения создаются приборы ночного видения.

Примечание 5. Вильгельм Вин, немецкий физик, 1864–1928, Нобелевская премия 1911 г. за законы излучения черного тела.

Отто Рихард Луммер (Люммер), немецкий физик, 1860–1925.

Эрнст Прингсгейм, немецкий физик, 1859–1917.

1.2.2. Теория Рэлея — Джинса

Термодинамика не в состоянии определить вид универсальной функции $f(\omega,T)$ или $F(\omega/T)$. Для определения универсальной функции оказалось необходимым привлечь статистические методы.

Д. Релей (1905) и Д. Джинс определяли $f(\omega,T)$, исходя из классических представлений и основываясь на известном законе о равномерном распределении энергии по степеням свободы. В равновесии существующее электромагнитное поле (излучение) можно разложить по стоячим волнам, как в ряд Фурье. При этом на каждую стоячую волну приходится средняя энергия равная $2\cdot(\kappa T/2)$, так как электромагнитная волна имеет две степени свободы, соответствующие электрическому E и магнитному H полю:

$$w = \frac{1}{8\pi}\left(E^2 + H^2\right). \qquad (1.2.11)$$

Сосчитаем число стоячих волн, приходящихся на единицу интервала частот.

1. Одномерный случай.

Стоячая волна представляет собой сумму двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях — вдоль и против оси x:

$$\begin{aligned} E &= E_0 \cos\left(\omega t - kx\right); \\ E &= E_0 \cos\left(\omega t + kx + \alpha\right). \end{aligned} \qquad (1.2.12)$$

Если одномерная область ограничена ($0 \le x \le a$), то на границах области проявляются либо *узлы* (пример из механики: закрепленная на краях струна), либо *пучности* (стержень, закрепленный посередине).

А. Если $\alpha = 0$, то в точке $x = 0$ будет пучность и сумма двух волн дает:

$$E = 2E_0 \cos kx \cos \omega t, \qquad (1.2.13)$$

(при $x = 0$ имеем $E = 2E_0\cdot\cos\omega t$).

Б. Если $\alpha = \pi$, то в точке $x = 0$ имеем узел:

$$E = 2E_0 \cos\left(kx + \pi/2\right)\cos\left(\omega t + \pi/2\right) = 2E_0 \sin kx \sin\omega t, \qquad (1.2.14)$$

(при $x = 0$ получаем $E = 0$).

Пусть для определенности имеем на границах области узлы (те же результаты могут быть получены для пучностей на границах области), тогда на правой границе $x = a$ тоже узел, т. е. фаза, входящая в $\sin kx$, должна быть равна:

$$ka = n\pi, \quad (n = 1, 2, 3, ...). \qquad (1.2.15)$$

Пусть имеется 2 стоячих волны с разными волновыми числами: $k_1 = (\pi/a)n_1$ и $k_2 = (\pi/a)n_2$. Разность чисел (n_2 - n_1) определяет число стоячих волн ΔN, модули векторов которых лежат в интервале волновых чисел $\Delta k = k_2 - k_1$:

$$\Delta N_k = \frac{a}{\pi}\Delta k. \qquad (1.2.16)$$

Перейдем к непрерывной последовательности, считая, что Δk между соседними стоячими волнами маленькая величина:

$$dN = \frac{a}{\pi}dk, \quad k = \frac{\omega}{c}, \quad dk = \frac{1}{c}d\omega.$$

Тогда число стоячих волн, частоты которых лежат в диапазоне ω–($\omega + d\omega$), определяется:

$$dN = \frac{2a}{\pi c}d\omega, \qquad (1.2.17)$$

где множитель 2 появился из-за того, что возможны два типа поляризации э/м волн. Отношение $dN/d\omega$ называют плотностью состояний.

2. Трехмерный случай.

Рассмотрим трехмерный ящик с размерами a, b, c (рис. 1.2.2*А*). При рассмотрении этого случая учтем, что при отражении от стенки проекция вектора $\vec{k}$ на направление, перпендикулярное к стенке, т. е. например k_x меняется на «$-k_x$» при отражении, как показано на рисунке 1.2.2*Б*. Итак, стоячая волна в прямоугольном ящике возникает при наложении восьми бегущих волн, отличающихся знаками проекций вектора $\vec{k}$:

1) (k_x, k_y, k_z);

2) $(k_x, -k_y, k_z)$;

3) $(k_x, k_y, -k_z)$;

4) $(k_x, -k_y, -k_z)$;

5) $(-k_x, k_y, k_z)$;

6) $(-k_x, -k_y, k_z)$;

7) $(-k_x, k_y, -k_z)$;

8) $(-k_x, -k_y, -k_z)$.

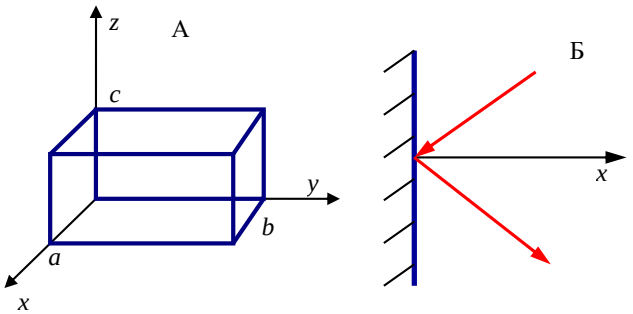


Рис. 1.2.2

Пусть для определенности имеем на стенках при $x = 0$, $y = 0$, $z = 0$ узлы, тогда уравнение стоячей волны приобретает вид

$$E = 8E_o \sin k_x x \cdot \sin k_y y \cdot \sin k_z z \cdot \sin \omega t\,. \qquad (1.2.18)$$

Для того чтобы узлы стоячей волны наблюдались также на стенках $x = a$, $y = b$, $z = c$ (т. е. во всех восьми вершинах рассматриваемой области), необходимо выполнение условия:

$$k_x = \frac{\pi}{a} n_x; \quad k_y = \frac{\pi}{b} n_y; \quad k_z = \frac{\pi}{c} n_z, \qquad (1.2.19)$$

где $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \ldots$ В k-пространстве с осями k_x, k_y, k_z каждой стоячей волне отвечает точка, положение которой задается проекцией волнового вектора на координатные оси (см. рис. 1.2.3). На долю каждой точки приходится объем $\frac{\pi^3}{abc} = \frac{\pi^3}{V}$, где V — объем пространственной области (ящика). Следовательно, плотность точек равна V/π^3. Объем бесконечно малого кубика в k-пространстве, показанного на рисунке 1.2.3, будет равен

$$dk_x dk_y dk_z = \frac{\pi^3}{abc} dn_x dn_y dn_z\,. \qquad (1.2.20)$$

Тогда число стоячих волн, заключенных в этом кубике, определяется выражением

$$dN = dn_x dn_y dn_z = \frac{abc}{\pi^3}\, dk_x dk_y dk_z\,. \qquad (1.2.21)$$

Поскольку именно модуль волнового вектора $\vec{k}$ определяет частоту (или длину) волны излучения ($k = \omega/c$), будем рассматривать объем фазового пространства, соответствующий только его изменению. Число стоячих волн, у которых модуль волнового вектора лежит в пределах от k до k–

($k + dk$), равно количеству точек, попадающих в пределы $1/8$ части шарового слоя радиуса k и толщины dk.

$$dN = \frac{V}{8\pi^3} 4\pi k^2 dk = V\frac{k^2 dk}{2\pi^2} = V\frac{\omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3}. \qquad (1.2.22)$$

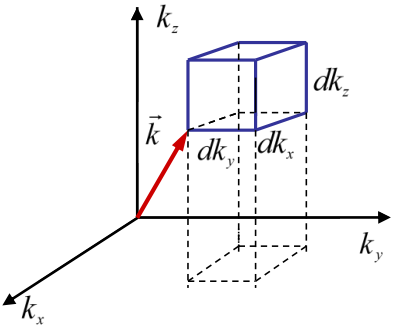


Рис. 1.2.3

Множитель $1/8$ появляется из-за того, что при сложении бегущих электромагнитных волн уже учтены проекции волнового вектора обоих знаков. Поэтому здесь берутся только положительные значения компонент волнового вектора: $k_x, k_y, k_z > 0$.

Полученное выражение необходимо умножить на 2, поскольку вдоль заданного направления могут распространяться 2 электромагнитные волны одинаковой частоты, отличающиеся направлением поляризации (поляризованные во взаимно перпендикулярных направлениях). Таким образом, число стоячих волн, приходящихся на единицу объема, в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$ равно

$$dn_\omega = \frac{2dN}{V} = \frac{2\omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3};$$

$$dn_\omega = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}. \qquad (1.2.23)$$

Итак, плотность стоячих волн, приходящаяся на единицу частоты, или, иначе, плотность состояний, пропорциональна квадрату частоты. Мы получили *важный результат, справедливый как в классической, так и в квантовой физике, и используемый при решении различных задач, где требуется вычислить плотность состояний.*

Плотность энергии для электромагнитного поля, как известно, равна

$$w = \frac{1}{8\pi}\left(E^2 + H^2\right).$$

Из статистических соображений Рэлей и Джинс предположили, что на каждую стоячую волну будет приходиться в среднем энергия, равная величине $2 \cdot \frac{1}{2} kT$, то есть по одной половинке энергии kT на электрическую и

магнитную компоненты электромагнитной волны. Тогда плотность энергии электромагнитного поля, приходящаяся на интервал частот $d\omega$, равна:

$$u(\omega,T)d\omega = \langle\varepsilon\rangle dn_\omega = 2\frac{kT}{2}\frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}. \qquad (1.2.24)$$

Отсюда спектральная плотность излучения получается равной:

$$u(\omega,T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}kT \qquad (1.2.25)$$

и испускательная способность абсолютно черного тела:

$$f(\omega,T) = \frac{c}{4}u(\omega,T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2}kT. \qquad (1.2.26)$$

Формулы (1.2.25) и (1.2.26) — *закон или формулы Рэлея — Джинса*.

Перечислим основные свойства соотношений (1.2.25) и (1.2.26).

А. Формула (1.2.26) удовлетворяет критерию Вина (1.2.1):

$$f(\omega,T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2}kT = \frac{k}{4\pi^2 c^2}\omega^3\left(\frac{T}{\omega}\right) = \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right), \qquad (1.2.27)$$

или

$$\varphi(\lambda,T) = \frac{2\pi c}{\lambda^2}\frac{kT}{4\pi^2 c^2}\frac{(2\pi c)^2}{\lambda^2} = \frac{2\pi c}{\lambda^5}k\lambda T = \frac{2\pi c}{\lambda^5}\psi(\lambda T). \qquad (1.2.28)$$

Б. Сравнение с экспериментом показано на рисунке 1.2.4: формула Рэлея — Джинса хорошо описывает экспериментальную кривую только в длинноволновой области спектра ($\lambda > 7\cdot 10^3$ нм), или при низких частотах, и резко расходится с опытом для малых длин волн. Более того, при расчете энергетической светимости (интегральной испускательной способности) интегрирование формулы Рэлея — Джинса дает расходящееся выражение:

$$R(T) = \int_0^\infty A\omega^2 T d\omega = AT\int_0^\infty \omega^2 d\omega = \frac{AT}{3}\omega^3\Big|_0^\infty \to \infty \qquad (1.2.29)$$

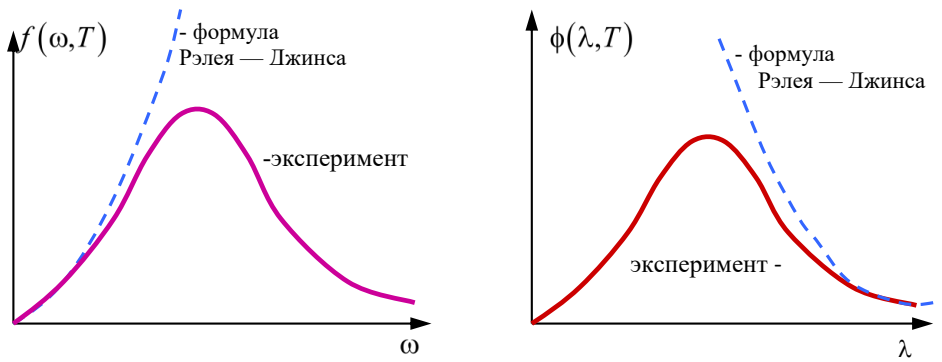


Рис. 1.2.4

Итак, из этой теории получаем, что при любой температуре энергетическая светимость бесконечна. Причем с ростом частоты электромагнитных волн плотность энергии излучения возрастает. Эта нефизическая расходимость получила название *ультрафиолетовой катастрофы*. Опыт показывает, что равновесие между излучением и излучающим телом устанавливается при конечных значениях энергетической светимости или плотности энергии излучения $U(T)$.

Примечание 6. Вильгельм Вин, немецкий физик, 1864–1928, Нобелевская премия 1911 г. за законы излучения черного тела.
Отто Рихард Луммер (Люммер), немецкий физик, 1860–1925.
Эрнст Прингсгейм, немецкий физик, 1859–1917.

1.2.3. Формула Вина

В. Вин в 1896 г. предложил конкретный вид для функции $F(\omega/T)$. Он рассмотрел хаотическое движение атомов как квазипериодический процесс, и средней энергии этого квазипериодического движения сопоставил определенную частоту ω: $\langle\varepsilon\rangle \sim \langle v^2\rangle \sim \omega$. При этом, как рассуждал Вин, каждая мода колебаний является носителем энергии $\varepsilon(\omega)$, но не все моды данной частоты возбуждены. Относительное число $\Delta N/N$ возбужденных мод задается распределением Больцмана:

$$\frac{\Delta N}{N} = e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}, \tag{1.2.30}$$

и тогда для средней энергии, приходящейся на возбужденные моды с частотой ω, имеем

$$\langle\varepsilon\rangle = \varepsilon(\omega)\frac{\Delta N}{N} = \varepsilon(\omega)e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}. \tag{1.2.31}$$

Если $e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \sim e^{-\frac{m\langle v^2\rangle}{2kT}} \sim e^{-\frac{B\omega}{T}}$ и, по предположению Вина, $\langle\varepsilon(\omega)\rangle \sim \omega$, то, используя полученное выше выражение для плотности состояний (1.2.23), получаем следующую формулу:

$$u(\omega,T)d\omega = C_1\omega\frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}e^{-\frac{B\omega}{T}} = A\omega^3 e^{-\frac{B\omega}{T}}d\omega.$$

Итак, формула Вина для универсальной функции (1.2.1) равна:

$$u(\omega,T) = A\omega^3 e^{-\frac{B\omega}{T}}. \tag{1.2.32}$$

Здесь A и B — постоянные коэффициенты. Эта формула позволила описать эксперимент в коротковолновой (при больших частотах) области и довольно близка к общей экспериментальной зависимости (рис. 1.2.5).

Однако она противоречит эксперименту Луммера и Прингсгейма (1899 г.) в области низких частот ($\omega < 10^{14}$ с$^{-1}$ или $\lambda > 10^4$ нм): при частоте,

стремящейся к нулю, т. е. в инфракрасной области спектра, эксперимент дает другую зависимость от частоты:

$$u(\omega,T)/\omega^2 \to \text{const}.$$

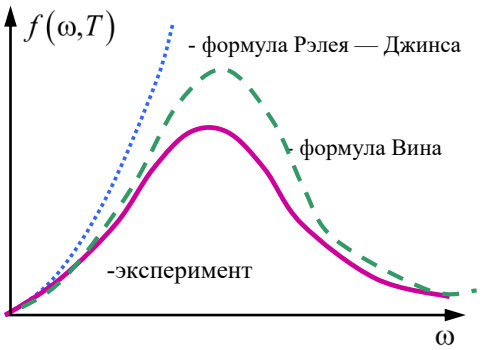


Рис. 1.2.5

Таким образом, по-прежнему не удается добиться согласия теории с опытом, особенно в «промежуточной» области спектра.

1.3. Гипотеза и формула Планка

1.3.1. Гипотеза квантов

С классической точки зрения вывод формулы Рэлея — Джинса является безупречным. Поэтому расхождение этой формулы с опытом указывало на существование неизвестных закономерностей, несовместимых с представлениями классической физики.

В октябре 1900 г. немецкий физик М. Планк сначала эмпирически, а затем теоретически (обосновав вывод через 2 месяца) записал формулу для спектральной плотности излучения черного тела. Универсальная функция $f(\omega,T)$ равна:

$$f(\omega,T)=\frac{A\omega^3}{\exp\left(\frac{B\omega}{T}\right)-1}=\frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2c^2}\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)-1}. \qquad (1.3.1)$$

Или плотность энергии излучения $u(\omega,T)$ имеет вид

$$u(\omega,T)=\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)-1}, \qquad (1.3.2)$$

где $\hbar$ — коэффициент пропорциональности между энергией и циклической частотой, получивший название *постоянной Планка*.

Численное значение постоянной Планка

$$\hbar=1{,}054\cdot10^{-34}\ \text{Дж}\cdot\text{с}$$

было определено из опыта. Сначала эту формулу Планк получил просто интерполяционным путем, скомбинировав закон Рэлея — Джинса и формулу Вина. Далее уже при теоретическом выводе ему пришлось ввести *гипотезу квантов*.

Через 8 недель после полуэмпирического открытия своей формулы (1.3.1) Планк представил её теоретический вывод на заседании Немецкого физического общества. Это случилось 14 декабря 1900 г., и этот день стал днем рождения ***квантовой физики***. При выводе формулы Планк выдвинул гипотезу, в корне противоречащую всему построению классической физики: *излучение* (позже и поглощение) *происходит не непрерывно, а конечными порциями — квантами света или квантами энергии.*

Основной вопрос — что излучает? Осцилляторы! Осцилляторы (атомы, молекулы (рис. 1.3.1)) могут находиться только в некоторых избранных стационарных состояниях, в которых их энергия является целым кратным некоторого наименьшего количества энергии ε_0:

$$\varepsilon_0, 2\varepsilon_0, 3\varepsilon_0, ..., n\varepsilon_0 .$$

То есть энергия микроскопических систем может принимать только дискретные, строго определенные значения.

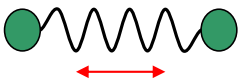


Рис. 1.3.1

Переход из одного стационарного состояния в другое может происходить скачком в результате излучения (поглощения) осциллятором такого же кратного количества энергии: $\varepsilon_0, 2\varepsilon_0, 3\varepsilon_0, ..., n\varepsilon_0$, где $\varepsilon_0 = \hbar\omega$ (или $\varepsilon_0 = h\nu_0, \hbar = h/2\pi$) — отдельная порция излучения, пропорциональная частоте излучения, а n — количество таких порций, испускаемых осциллятором на частоте ω.

Динамическое равновесие в системе осуществляется посредством постоянного обмена квантами между полем излучения и телом — осциллятором. При данной температуре T возбуждены все энергетические уровни, но с разными вероятностями. Поэтому требуется вычислить среднюю энергию осциллятора $\langle\varepsilon\rangle$ в этом состоянии статистического равновесия.

Постоянная Планка $\hbar$ имеет размерность «энергия × время». Поэтому её иногда называют *квантом действия* по аналогии с величиной той же размерности в классической механике.

Из доклада М. Планка на заседании 14 декабря 1900 г.: «*Квант действия <…> либо фиктивная величина, и тогда вывод закона излучения был в принципе ложным и представлял собой всего лишь пустую игру в формулы, лишенную смысла, либо же вывод закона излучения опирается на некую физическую реальность, и тогда квант действия должен приобрести фундаментальное значение в физике и означает нечто совершенно новое и неслыханное, что должно произвести переворот в физике*…».

Однако такие откровения даются не просто, и сам Планк вплоть до 1911 г. пытался примирить гипотезу о квантах с классической физикой. Вывод закона излучения по методу Планка в какой-то мере неудовлетворителен, поскольку он во многом основан на законах классической физики и лишь частично использует квантовые представления. Поглощение и испускание света осциллятором рассчитывалось с помощью классической электродинамики, в то время как при нахождении средней энергии осциллятора использовалась квантовая гипотеза о его дискретных энергетических уровнях. Успех такой эклектической теории связан со спецификой выбранной модели: для осциллятора классическое и квантовомеханическое рассмотрение процессов поглощения и испускания приводит к одинаковым результатам.

1.3.2. Вывод формулы Планка по Эйнштейну

В 1916 г. А. Эйнштейн дал сравнительно простой вывод формулы Планка, используя для моделирования механизма излучения переходы в двухуровневой системе и применив к описанию процессов излучения вероятностный подход.

Пусть $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \ldots$ — значения энергий, которые характеризуют состояние рассматриваемой системы (атом, молекула и т. д.). Рассмотрим систему атомов (молекул и т. д.), описываемую дискретным энергетическим спектром, совокупность значений которого исчерпывается двумя величинами ε_m и ε_n. В ε-пространстве этим значениям энергий можно сопоставить энергетические уровни ε_m и ε_n, а состояние системы описывать заданием положения этих уровней. Такая система называется *двухуровневой*.

Процесс излучения (рис. 1.3.2) можно рассматривать как переход системы из состояния, характеризуемого верхним энергетическим уровнем в состояние, которому соответствует нижний энергетический уровень или, как принято говорить, переход с верхнего уровня на нижний уровень. При этом энергия излучения равна:

$$\hbar\omega_{nm} = \varepsilon_n - \varepsilon_m. \qquad (1.3.3)$$

То есть для такого элементарного процесса выполняется закон сохранения энергии: энергия испускаемого или поглощаемого фотона равна разности энергий соответствующих стационарных состояний.

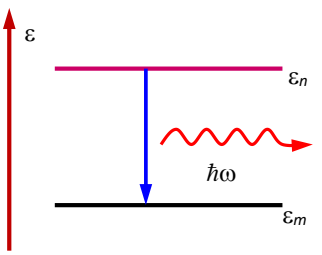


Рис. 1.3.2

Эйнштейн ввел в рассмотрение два типа переходов, сопровождаемых излучением, и переход, связанный с поглощением кванта.

1. *Спонтанное излучение* — самопроизвольный переход с верхнего уровня ε_n на уровень ε_m, который происходит без участия внешних полей, носит статистический характер (рис. 1.3.3). Предсказать, в какой именно момент произойдет этот переход, невозможно. Момент испускания фотона есть величина случайная, т. е. мы не можем с достоверностью предсказать, произойдет или нет в данном атоме переход в течение промежутка времени dt, следующего за моментом t, но можем только указать его вероятность.

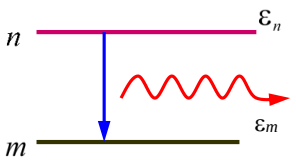


Рис. 1.3.3

Пусть в момент времени $t = \tau$ в состоянии n находилось N_n атомов, а через промежуток времени dt часть атомов перешла в состояние m, а часть осталась в состоянии n. Тогда за время dt число переходов $n \to m$ пропорционально числу атомов на верхнем уровне N_n. Если *вероятность спонтанных переходов* обозначить A_{nm}, то среднее число таких переходов можно записать:

$$dN_{nm}^{\text{сп}} = A_{nm} N_n dt. \qquad (1.3.4)$$

Статистический характер процессов спонтанного излучения приводит к тому, что фазы, направления распространения и состояния поляризации световых волн, испускаемых отдельными атомами, не согласованы друг с другом. Это означает, что спонтанное излучение *некогерентно*.

2. В электромагнитном поле будут происходить *процессы поглощения*. Это — процессы возбуждения атомов, а именно, переходы атомов из основного состояния в возбужденное за счет поглощения фотонов. Переход из нижнего энергетического состояния в верхнее соответствует *поглощению энергии* (см. рис. 1.3.4). Этот переход всегда *вынужденный*. Он описывает резонансный процесс, в котором система, переходя из состояния с энергией ε_m в состояние, характеризуемое уровнем ε_n, поглощает квант энергии, следуя (1.3.3):

$$\hbar\omega_{nm} = \varepsilon_n - \varepsilon_m.$$

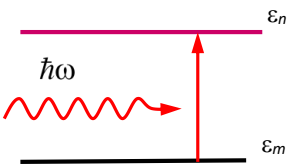


Рис. 1.3.4

Вероятность такого процесса в единицу времени пропорциональна плотности энергии электромагнитного поля $u(\omega,T)$ и некоторому коэффициенту B_{mn}, характеризующему *вероятность возбуждения атома*. Среднее число переходов $dN_{mn}^{вын}$ из основного состояния в возбужденное за промежуток времени от t до $t+dt$ пропорционально также числу N_m атомов в основном состоянии, поэтому можно записать:

$$dN_{mn}^{вын} = B_{mn} N_m u(\omega,T)dt. \qquad (1.3.5)$$

3. Допустим, что атомы находятся в термодинамическом равновесии с веществом. Тогда на основании *принципа детального равновесия* число переходов с испусканием и поглощением фотонов должно быть одинаково. Однако, приравняв правые части (1.3.4) и (1.3.5), мы получим не формулу Планка, а её предельный случай при $\hbar\omega/kT >> 1$, т. е. формулу Вина. Чтобы таким путем получить согласующуюся с опытом формулу Планка, необходимо, как впервые показал Эйнштейн, предположить, что электромагнитное поле вызывает не только переходы из основного состояния в возбужденное, но вынуждает совершать и обратные переходы — из возбужденного состояния в основное, сопровождающиеся испусканием фотонов. Такие переходы под действием внешнего поля в отличие от спонтанных получили название *индуцированного* или *вынужденного* (стимулированного) излучения.

Вынужденное (индуцированное) излучение — излучение, появляющееся под действием или влиянием внешнего электромагнитного поля, частота которого близка или равна частоте квантового перехода ω_{nm} (см. рис. 1.3.5). Иногда его называют *отрицательным поглощением*.

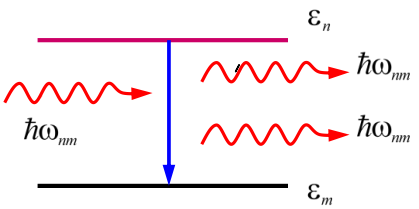


Рис. 1.3.5

Вынужденное излучение обладает замечательными свойствами, на что впервые обратил внимание П. Дирак в 1927 г. В каждом акте вынужденного испускания происходит увеличение на единицу числа фотонов в той моде излучения, под действием которой произошел переход. Все фотоны одной моды тождественны. Это означает, что новый фотон неотличим от фотонов, вызывающих его испускание. Частота, фаза, направление распространения и поляризация волн, испущенных при вынужденных переходах, точно такие же, как у излучения, вызвавшего переходы. То есть эти излучения *когерентны*.

Для описания индуцированного излучения, как и спонтанного, существует классическая аналогия: классический осциллятор в поле световой волны будет совершать вынужденные колебания. В неустановившемся состоянии вблизи резонанса в зависимости от соотношения фаз между колебаниями осциллятора и внешнего поля энергия поля может переходить как от поля к осциллятору (поглощение), так и от осциллятора к полю (вынужденное испускание).

Число вынужденно испущенных фотонов за промежуток времени от t до $t+dt$ пропорционально заселенности верхнего энергетического уровня N_n, спектральной плотности излучения $u(\omega,T)$ и вероятности вынужденных переходов из возбужденного состояния в основное B_{nm}:

$$dN_{nm}^{\text{вын}} = B_{nm} N_n u(\omega,T)\,dt. \tag{1.3.6}$$

Полное число переходов за время dt из возбужденного состояния в основное будет определяться совокупностью спонтанного и вынужденного излучения.

Пусть состояние системы равновесно, тогда имеет место *детальное равновесие*:

$$dN_{nm}^{\text{сп}} + dN_{nm}^{\text{вын}} = dN_{mn}^{\text{вын}}, \tag{1.3.7}$$

или подробнее с учетом (1.3.4)–(1.3.6):

$$A_{nm} N_n + B_{nm} N_n u(\omega_{nm}) = B_{mn} N_m u(\omega_{nm}). \tag{1.3.8}$$

Таким образом, в состоянии равновесия имеем для отношения «заселенностей» состояний n и m:

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{B_{mn} u(\omega_{nm})}{A_{nm} + B_{nm} u(\omega_{nm})}. \tag{1.3.9}$$

Величины A_{nm}, B_{nm} и B_{mn} называются *коэффициентами Эйнштейна*. Они являются характеристиками только самой системы (атома, молекулы) и могут зависеть лишь от частоты ω_{nm}, которая связана с выбранными энергетическими состояниями ε_n и ε_m, и не зависят от спектральной плотности энергии поля.

Рассмотрим следующие случаи для выбранных уровней.

1. Энергетические уровни *m*, *n* — простые, иначе говоря, невырожденные или не кратные. Тогда для данной пары уровней коэффициенты Эйнштейна B_{nm} и B_{mn} равны друг другу. Действительно, поскольку вынужденные переходы пропорциональны $u(\omega,T)$, то при очень высокой температуре плотность энергии $u(\omega,T)$ становится настолько большой, что спонтанным излучением можно пренебречь по сравнению с индуцированными переходами. Тогда имеем $B_{nm} N_n = B_{mn} N_m$. Но в равновесии при $\hbar\omega/kT \to \infty$ населенности уровней выравниваются ($N_n = N_m$), поэтому получаем

$$B_{nm} = B_{mn}. \tag{1.3.10}$$

Равенство $B_{nm} = B_{mn}$, полученное для предельного случая $T \to \infty$, справедливо всегда, в том числе и в отсутствие теплового равновесия, так как коэффициенты B_{nm} и B_{mn} зависят только от свойств атомов и не зависят от внешних условий, в которых происходят переходы.

2. Уровни энергии m, n — вырожденные (кратные). В квантовой физике вырождение заключается в том, что некоторая физическая величина, характеризующая данную систему (атом, молекулу и т. д.), имеет одинаковое значение для различных состояний системы. Число таких различных состояний (способов реализации), которым отвечает одно и то же значение данной физической величины, называется *кратностью вырождения* этой величины. При этом уровни m,n могут иметь разный статистический вес. Пусть g_m — статистический вес уровня с энергией ε_m, а g_n — статистический вес уровня с энергией ε_n. Тогда при $T \to \infty$ получаем следующее равенство:

$$g_m B_{mn} = g_n B_{nm}. \tag{1.3.11}$$

Если система атомов находится в равновесии, то атомы населяют энергетические уровни так, как это следует из распределения Больцмана. Тогда вероятность заселения уровня с энергией ε_m равна

$$W_m = C g_m \exp\left(-\frac{\varepsilon_m}{kT}\right), \tag{1.3.12}$$

и аналогично для уровня с энергией ε_n:

$$W_n = C g_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{kT}\right). \tag{1.3.13}$$

Далее для (1.3.9) имеем

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{g_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{kT}\right)}{g_m \exp\left(-\frac{\varepsilon_m}{kT}\right)} = \frac{g_n}{g_m} \exp\left(-\frac{\varepsilon_n - \varepsilon_m}{kT}\right) = \frac{B_{mn} u(\omega,T)}{A_{nm} + B_{nm} u(\omega,T)}. \tag{1.3.14}$$

Из последнего равенства выражаем спектральную плотность излучения:

$$u(\omega,T) = \frac{g_n A_{nm}}{g_m B_{mn} \exp\left(\frac{\varepsilon_n - \varepsilon_m}{kT}\right) - g_n B_{nm}}. \tag{1.3.15}$$

Теперь, устремляя $T \to \infty$ и помня, что $\hbar\omega_{nm} = \varepsilon_n - \varepsilon_m$, получаем $\exp(\hbar\omega/kT) \to 1$ и $u(\omega,T) \to \infty$. Это возможно получить только при выполнении условия (1.3.11), как обсуждали ранее. Тогда, упрощая выражение (1.3.15), можем записать

$$u(\omega,T) = \frac{A_{nm} g_n}{g_n B_{nm}\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1\right]} = \frac{A_{nm}}{B_{nm}\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1\right]}. \tag{1.3.16}$$

Чтобы определить отношение A_{nm}/B_{nm}, не производя дополнительных вычислений, воспользуемся формулой Рэлея — Джинса, которая справедлива в пределе $\omega \to 0$ или $\hbar\omega << kT$. Если $\hbar\omega/kT << 1$, то, раскладывая (1.3.16) в ряд, имеем

$$\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{kT}, \tag{1.3.17}$$

тогда

$$u(\omega,T) \approx \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega}{kT} - 1} = \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \frac{kT}{\hbar\omega}. \tag{1.3.18}$$

С другой стороны, формула Рэлея — Джинса в рассматриваемом пределе дает:

$$u(\omega,T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT. \tag{1.3.19}$$

Приравнивая правые части (1.3.18) и (1.3.19), получаем для отношения вероятностей переходов

$$\frac{A_{nm}}{B_{nm}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}. \tag{1.3.20}$$

Таким образом, опуская индексы n и m, можем записать формулу Планка, определяющую плотность энергии равновесного излучения (1.3.2):

$$u(\omega,T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}$$

или испускательную способность абсолютно черного тела (1.3.1):

$$f(\omega,T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}.$$

Примечание 7. Макс Карл Эрнст Людвиг Планк, немецкий физик-теоретик, 1858–1947, Нобелевская премия 1918 г. за открытие кванта действия.

Альберт Эйнштейн, немецкий физик-теоретик, 1879–1955, Нобелевская премия 1921 г. за объяснение законов фотоэффекта.

Поль Андриен Морис Дирак, английский физик-теоретик, 1902–1974, Нобелевская премия 1933 г. за создание квантовой механики.

1.3.3. Свойства формулы Планка

Рассмотрим основные свойства формулы Планка, а также как она согласуется с прежними результатами.

1. Формула Планка согласуется с экспериментом при всех значениях частоты ω или длины волны λ.

2. Удовлетворяет критерию Вина $f(\omega,T)=A\omega^3F\left(\frac{\omega}{T}\right)$.

3. В предельном случае больших частот излучения ($\omega\to\infty$, малые длины волн λ): $\hbar\omega>>kT$, $\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)>>1$, переходит в формулу Вина:

$$f(\omega,T)=\frac{\hbar}{4\pi^2c^2}\omega^3\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right). \qquad (1.3.21)$$

4. В предельном случае малых частот (при $\omega\to 0$ или при больших длинах волн λ) получаем $\hbar\omega<<kT$, $\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\approx 1+\frac{\hbar\omega}{kT}$, и формула Планка переходит в формулу Рэлея — Джинса:

$$f(\omega,T)=\frac{\omega^2}{4\pi^2c^2}kT\,. \qquad (1.3.22)$$

5. Интегрируя по всем частотам излучения, получаем закон Стефана — Больцмана:

$$R(T)=\int_0^\infty f(\omega,T)d\omega=\sigma T^4, \qquad (1.3.23)$$

где $\sigma=\frac{\pi^2k^4}{60c^2\hbar^3}$ — постоянная Стефана — Больцмана.

6. Запишем «по Планку» испускательную способность абсолютно черного тела, перейдя от частоты ω к длине волны λ:

$$\lambda=\frac{2\pi c}{\omega};$$

$$\varphi(\lambda,T)=f(\omega,T)\frac{d\omega}{d\lambda},$$

получаем

$$\varphi(\lambda,T)=\frac{\hbar(2\pi c)^3}{4\pi^2c^2\lambda^3}\frac{2\pi c/\lambda^2}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right)-1}=\frac{4\pi^2\hbar c^2}{\lambda^5}\frac{1}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right)-1}. \qquad (1.3.24)$$

7. Получаем закон смещения Вина из (1.3.24): $T\lambda_{\max}=b$. Положение максимума определяется:

$$\frac{d\varphi(\lambda,T)}{d\lambda}=0=4\pi^2\hbar c^2\left[\frac{1}{\lambda^5\left(\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right)-1\right)}\right]'_\lambda=$$

$$=\frac{-5\lambda^{-6}}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right)-1}+\frac{\lambda^{-5}\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right)\cdot\frac{2\pi\hbar c}{kT}\lambda^{-2}}{\left[\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right)-1\right]^2}.$$

Очевидные корни этого уравнения $\lambda = 0$ и $\lambda = \infty$ дают минимум функции $\varphi(\lambda, T)$. Далее, вводя обозначение $\frac{2\pi\hbar c}{kT\lambda_{\max}} = x$, получаем трансцендентное уравнение для нахождения x:

$$-5 + \frac{xe^x}{e^x - 1} = 0 \quad \text{и} \quad xe^x - 5(e^x - 1) = 0.$$

Его решение: $x_0 = \frac{2\pi\hbar c}{kT\lambda_{\max}} = 4{,}965$ и получаем закон смещения Вина:

$$T\lambda_{\max} = b = \frac{2\pi\hbar c}{4.965 \cdot k}. \qquad (1.3.25)$$

Приложение 1. Биографическая справка. Max Karl Ernst Ludwig Plank (1858–1947). Из семьи юриста. Обучался в Мюнхенском и Берлинском университетах (Кирхгоф, Гельмгольц). С 1895 г. — профессор в Киле, с 1889 г. — в Берлине. В 1930–1937 гг. — президент общества Кайзера Вильгельма за развитие науки. Почетный член АН СССР с 1926 г. Член Лондонского Королевского Общества с 1926 г. Нобелевская премия 1918 г. — «За открытие кванта действия». Первый сын погиб в Первой мировой войне, второй казнен в 1945 г. как участник движения Сопротивления.

Приложение 2. Приведем другой вывод формулы Планка, исходя из предположения, что энергетический спектр осциллятора дискретный, эквидистантный, а расстояние между соседними уровнями равно $\hbar\omega$.

При конечной температуре T вероятность того, что осциллятор имеет энергию $n\hbar\omega$ (где $n = 1, 2, 3, \ldots$), определяется распределением Больцмана:

$$P(n\hbar\omega) = Ae^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}.$$

Тогда можно сосчитать среднее значение энергии осциллятора при конечной температуре:

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n\hbar\omega e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}} = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n\hbar\omega e^{-n\hbar\omega x}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\hbar\omega x}} = \frac{-\frac{\partial}{\partial x}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\hbar\omega x}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\hbar\omega x}}.$$

Для упрощения введем $x = 1/kT$ и просуммируем геометрическую прогрессию:

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\hbar\omega x} = 1 + e^{-\hbar\omega x} + e^{-2\hbar\omega x} + \ldots = \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega x}}.$$

Представляя сумму в числителе в виде

$$\sum_{n=1}^{\infty} n\hbar\omega e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}} = -\frac{\partial}{\partial x}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}},$$

получаем

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{-\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega x}}}{\frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega x}}} = \frac{\frac{\partial}{\partial x}\left(1 - e^{-\hbar\omega x}\right)}{1 - e^{-\hbar\omega x}} = \frac{\hbar\omega e^{-\hbar\omega x}}{1 - e^{-\hbar\omega x}} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega x} - 1}.$$

Средняя энергия должна быть умножена на статистический вес этого состояния в единице объема, т. е. на плотность состояний. Вспоминая, что плотность состояний (1.2.23) ω^2/π^2c^3, получаем формулу Планка для спектральной плотности энергии излучения

$$u(\omega,T)=\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}-1\right)}.$$

1.4. Поглощение и усиление электромагнитного излучения веществом

1.4.1. Ослабление потока излучения. Закон Бугера — Ламберта

Взаимодействие света (и в целом электромагнитного излучения) с веществом определяется индуцированными, или вынужденными, переходами и вообще сводится к двум процессам:

1) поглощение света невозбужденными частицами (атомами или молекулами), что приводит к ослаблению пучка;

2) преобразование внутренней энергии (избыточной) частиц в энергию электромагнитного излучения и колебания.

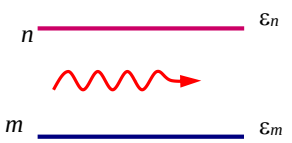


Рис. 1.4.1

Рассмотрим для простоты однородную среду и из всех энергетических уровней среды выделим 2 уровня с энергиями ε_n и ε_m (рис. 1.4.1). Пусть заселенности этих уровней в единице объема равны: N_n — число атомов в состоянии с энергией ε_n, N_m — число атомов в состоянии с энергией ε_m. Пусть через среду в направлении оси x проходит электромагнитное излучение частоты

$$\omega = (\varepsilon_n - \varepsilon_m)/\hbar = \omega_{mn}.$$

Благодаря индуцированным переходам по мере прохождения излучения через среду его мощность будет меняться, т. е. будет меняться плотность потока энергии I_ω [Вт/м^2]. Ослабление плотности потока «$-dI_\omega$» на участке (x, $x + dx$) пропорционально самой плотности потока I_ω и расстоянию dx (см. рис. 1.4.2):

$$dI_\omega = -\alpha_\omega I_\omega dx, \qquad (1.4.1)$$

где α_ω — *коэффициент поглощения*. Получаем закон ослабления плотности потока излучения — *закон Бугера — Ламберта*:

$$I_\omega(x) = I_\omega^0 \cdot \exp(-\alpha_\omega x), \qquad (1.4.2)$$

где I_ω^0 — плотность потока излучения при $x = 0$. Отметим, что для излучения можно написать, что плотность потока энергии равна

$$I_\omega = c \cdot u(\omega, T).$$

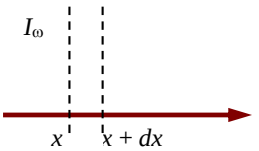


Рис. 1.4.2

Как связан коэффициент поглощения α_ω с характеристиками вынужденного излучения и поглощения, которые были введены в предыдущем параграфе? Рассмотрим эти процессы, подключив равновесную плотность излучения $u(\omega, T)$. Величина $-dI_\omega$ определяется поглощением и индуцированным излучением атомных частиц среды, находящихся в объеме dV, имеющем площадь основания S = 1 см^2 и длиной dx (см. рис. 1.4.3). Тогда мощность, поглощаемая частицами объема dV, равна произведению числа поглощенных квантов на энергию кванта (см. (1.3.5)–(1.3.6)):

$$dP_{abs} = N_m dV \cdot u(\omega, T) B_{mn} \cdot \hbar\omega. \qquad (1.4.3)$$

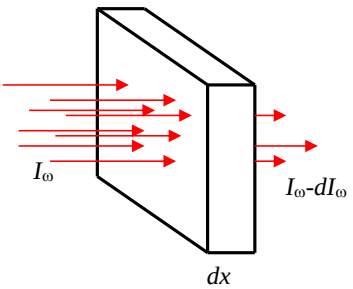


Рис. 1.4.3

Мощность, получаемая за счет вынужденного (стимулированного) излучения частиц, находящихся в объеме dV, равна:

$$dP_{rad} = N_n dV \cdot u(\omega, T) B_{nm} \cdot \hbar\omega. \qquad (1.4.4)$$

Поскольку для элемента объема можно записать $dV = S \cdot dx$, а площадь площадки положить равной S = 1 (или иначе, можно выражение разделить на S), получаем выражение для изменения интенсивности:

$$-dI_\omega = N_m dx \cdot u(\omega, T) B_{mn} \hbar\omega - N_n dx \cdot u(\omega, T) B_{nm} \hbar\omega. \qquad (1.4.5)$$

Так как $u(\omega, T) = I_\omega / c$, из формулы (1.3.11) имеем $g_m B_{mn} = g_n B_{nm}$, где g_m, g_n — статистические веса уровней, тогда получаем

$$-dI_\omega = \frac{I_\omega}{c}\left(\frac{N_m}{g_m} - \frac{N_n}{g_n}\right) B_{mn} g_m \hbar\omega \cdot dx. \qquad (1.4.6)$$

Интегрируя, в результате вновь получаем закон Бугера — Ламберта:

$$I_\omega = I_\omega^0 \cdot \exp(-\alpha_\omega x), \qquad (1.4.7)$$

где коэффициент поглощения выражается через коэффициенты Эйнштейна и заселенности уровней:

$$\alpha_\omega = \frac{\hbar\omega}{c} g_m B_{mn}\left(\frac{N_m}{g_m} - \frac{N_n}{g_n}\right). \qquad (1.4.8)$$

Если статистические веса (или кратности вырождения) уровней одинаковы $g_m = g_n$, то получаем

$$\alpha_\omega = \frac{\hbar\omega}{c} B_{mn}(N_m - N_n). \qquad (1.4.9)$$

Рассмотрим 2 случая.

1. В естественных условиях, или просто в равновесии при $\varepsilon_n > \varepsilon_m$, имеем

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{g_n}{g_m}\exp\left[-\frac{\varepsilon_n - \varepsilon_m}{kT}\right], \qquad (1.4.10)$$

то есть $N_n < N_m$ и коэффициент поглощения $\alpha_\omega > 0$. Иначе говоря, происходит поглощение мощности электромагнитного излучения. Качественно зависимость интенсивности света от длины прохождения показана на рисунке 1.4.4*А*.

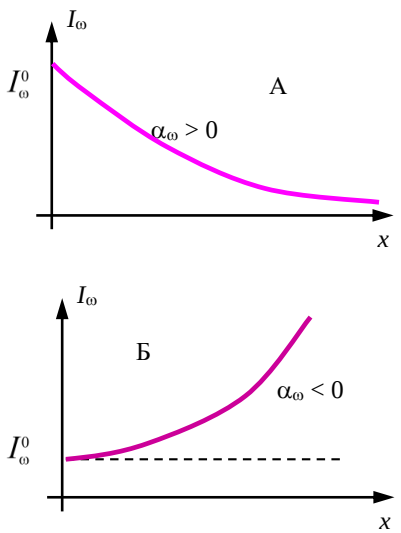


Рис. 1.4.4

2. Если бы удалось создать *инверсную заселенность*, то есть выполнялось бы условие

$$\frac{N_m}{g_m} < \frac{N_n}{g_n},$$

или $N_m < N_n$ (когда $g_m = g_n$), тогда бы $\alpha_\omega < 0$ и в результате получили бы усиление мощности излучения при его прохождении через среду (см. рис. 1.4.4*Б*). На основе идеи создания инверсной заселенности в 1953 г. были сформулированы основные принципы мазеров и лазеров.

Главная задача, которую было необходимо решить для усиления мощности излучения, — это создание инверсной заселенности.

Примечание 8. Пьер Бугер, французский физик, 1698–1758.
Иоганн Генрих Ламберт, немецкий физик, 1728–1777.

1.4.2. Принципы работы лазера

Создание лазеров стало возможным лишь после того, как нашли способ осуществления инверсной заселенности. Основные принципы работы микроволновых и оптических усилителей были сформулированы А. М. Прохоровым, Н. Г. Басовым и Ч. Х. Таунсом в 1953 г.

В 1954 г. были созданы *мазеры* — усилители микроволн. Позже были созданы *лазеры* — оптические квантовые генераторы — *Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*. Создание лазеров стало возможным после осуществления и создания инверсной заселенности.

Наиболее простая схема создания инверсной заселенности — это использование трехуровневых систем с определенными свойствами. Накачкой, которая создается с помощью дополнительного излучения большой мощности, разрядов, столкновений и того подобного, создается возбуждение системы — переход из основного состояния 1 в состояние 3 (см. рис. 1.4.5). Уровень 3 подбирается таким, чтобы он имел большую энергетическую ширину, т. е. имел бы малое время жизни и быстро распадался. При этом возбужденная система спонтанно переходит на уровень 1 (обратно в основное состояние) и на другой возбужденный уровень 2. Причем система подобрана таким образом, чтобы вероятность A_{32} перехода на уровень 2 была достаточно большая. Уровень 2 подбирается долгоживущим, так что за время накачки на нем накапливается значительное число возбуждений и его заселенность становится выше заселенности основного состояния. Так создается инверсная заселенность.

Среда с инверсной заселенностью, способная усиливать проходящий через нее световой поток, называется *активной*. Активная среда помещается между двумя зеркалами, чтобы обеспечить многократное прохождение излучения через активную среду. Причем с одной стороны стоит зеркало с максимально возможным коэффициентом отражения, другое зеркало подбирается полупрозрачным, но так, чтобы с одной стороны обеспечить выход лазерного излучения, а с другой — продолжить прохождение излучения в среде для усиления индуцированного излучения. Важно соблюдение точной пропорции между пройденным и отраженным излучением для поддержания

генерации. Такая система называется открытым резонатором (напоминает интерферометр Фабри — Перо). Такой резонатор не только усиливает, но также *коллимирует* и *монохроматизирует излучение*. Коллимация происходит за счет усиления лучей, распространяющихся вдоль оси лазера. Лучи других направлений уходят или поглощаются боковыми стенками в результате отражений. Иногда для уменьшения потерь в лазерах ставят длиннофокусные сферические зеркала.

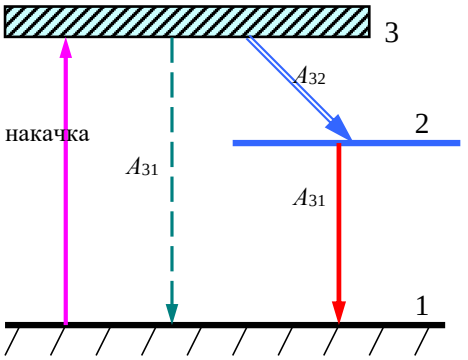


Рис. 1.4.5

Накачка лазера бывает различной как по механизму, так и по длительности. По длительности она подразделяется на *непрерывную* и *импульсную*, отсюда и излучение лазера бывает непрерывным и импульсным. В импульсном режиме можно создать большие мощности излучения.

Перечислим основные свойства лазерного излучения.

1. Высокая монохроматичность (ширина линии $\Delta\lambda \leq 0{,}1$ Å).
2. Высокая временная и пространственная когерентность.
3. Высокая плотность излучения (интенсивность).
4. Малая расходимость пучка.
5. Высокая степень поляризации пучка.

В настоящее время имеется громадное разнообразие лазеров, которые отличаются активными средами, мощностями, режимами работы, накачкой и т. д. Рассмотрим некоторые типы лазеров.

1. Рубиновые лазеры (1960 г.). В качестве рабочего вещества — рубин ($Al_2O_3 + Cr_2O_3$). Красноватый цвет рубина из-за ионов хрома, которые замещают в решетке ионы алюминия. Схема задействованных уровней аналогична трехуровневой системе (см. рис. 1.4.6), однако при этом используются две полосы поглощения: зеленая и голубая. Наряду с ними имеются 2 узких уровня, при переходе с которых испускается красный свет с длинами волн $\lambda = 694{,}3$ нм и $\lambda = 692{,}8$ нм. Более интенсивная линия с длиной волны $\lambda = 694{,}3$ нм, которая и обычно и усиливается при работе лазера. Однако генерация возможна на обоих переходах и излучение лазера зависит от выбранных зеркал.

Накачка осуществляется при вспышке неоновой лампы при прохождении через нее импульса тока, нагревающего газ до ≥ 1000 К. Непрерывная

накачка в этом случае не проходит, поэтому рубиновый лазер — импульсный лазер.

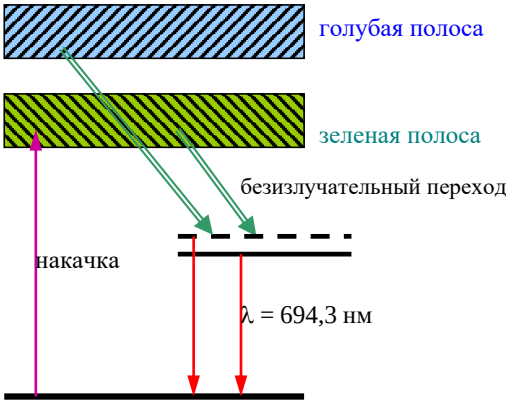


Рис. 1.4.6

Кристалл рубина вырезается цилиндрической формы определенного размера: длиной 5 см и диаметром 1 см (см. рис. 1.4.7). С одной стороны кристалла устанавливается зеркало или срез для обеспечения полного внутреннего отражения.

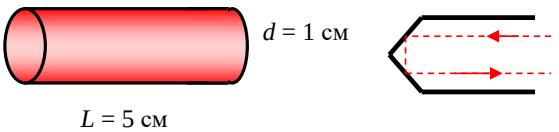


Рис. 1.4.7

2. Гелий-неоновый лазер. Активная среда — газовая смесь гелия He и неона Ne. Генерация осуществляется за счет переходов между энергетическими уровнями Ne. Гелий играет роль посредника, через атомы которого энергия передается атомам Ne для создания инверсной заселенности. Ток пропускается через Ne — He смесь (см. рис. 1.4.8), при этом атомы He возбуждаются в метастабильные (долгоживущие) состояния 2^3S и 2^2S. В результате столкновений с атомами Ne они передают им энергию и возбуждают ^3S и ^2S уровни, откуда происходит генерация излучения. Неон может давать 130 переходов, наиболее интенсивные переходы дают инфракрасную линию и линию в видимом диапазоне. Это лазеры непрерывного действия.

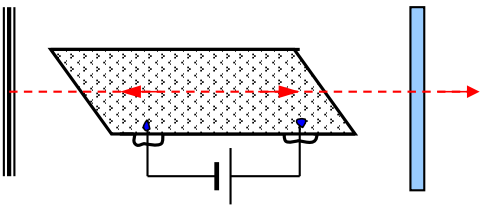


Рис. 1.4.8

3. Лазеры на красителях. Активная среда — сложные молекулы с сильно выраженными колебательными уровнями энергии. При этом эти энергетические уровни очень широкие, поэтому энергию можно менять почти непрерывно в пределах энергетической полосы (рис. 1.4.9). Накачка происходит с помощью газоразрядной лампы.

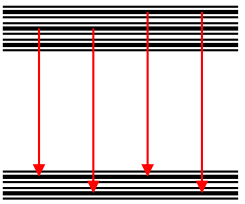


Рис. 1.4.9

4. Твердотельные лазеры, в частности *полупроводниковые*. Создаются на люминесцирующих средах (рубины, стекла, активированные Nd) и гетероструктурах. Гетеролазеры работают в импульсном и непрерывном режимах. Накачка происходит с помощью инжекции электронов через гетеропереход или электронным пучком.

5. Лазеры на свободных электронах. Активная среда — поток релятивистских электронов, колеблющихся под действием внешнего электрического или магнитного поля.

Лазеры в рентгеновском и гамма диапазонах широко обсуждаются в научной литературе.

Примечание 9. Александр Михайлович Прохоров, советский физик, 1916–2004, окончил Ленинградский университет.

Николай Геннадиевич Басов, советский физик, 1922–2001.

Чарльз Хард Таунс, американский физик, 1915–2015.

Все получили Нобелевскую премию за фундаментальные исследования в области кантовой радиофизики в 1964 г.

1.5. Корпускулярные свойства электромагнитного излучения

1.5.1. Фотоны

М. Планк выдвинул идею квантов, что излучение происходит порциями энергии — *квантами*. Впоследствии было отмечено, что не только излучение, но и поглощение происходит также квантами. Революционные идеи Планка были по достоинству оценены и получили дальнейшее развитие, прежде всего, в работах А. Эйнштейна.

В 1905 г. А. Эйнштейн выдвинул гипотезу световых квантов. Он предположил, что дискретный характер присущ не только процессам испускания и поглощения света, но и самому свету, т. е. что свет распространяется в виде дискретных частиц-квантов — *фотонов*. Эта гипотеза не получала должного признания в течение 15–17 лет, несмотря на то, что с её помощью

удалось объяснить за это время экспериментальные результаты (фотоэффект, границу тормозного рентгеновского излучения). В 1916 г. Эйнштейн выпускает работу «К квантовой теории излучения», где он ввел понятие спонтанного и индуцированного излучений. Однако сам Эйнштейн до конца своей жизни считал вероятностное описание недостатком теории.

Так, рекомендация, данная в 1913 г. Планком и рядом других физиков Эйнштейну при выдвижении последнего в члены Прусской Академии наук, содержала такие любопытные слова: «В целом можно сказать, что вряд ли найдется какая-нибудь из важных проблем современной физики, в решение которой Эйнштейн не внес бы замечательного вклада. То, что он иногда не попадает в цель, как, например, в случае гипотезы световых квантов, нельзя считать отрицательным аргументом, поскольку невозможно выдвинуть новую идею, даже в наиболее точной науке, без некоторой доли риска».

Отрицательное отношение физиков к гипотезе световых квантов сказалось даже в формулировке Нобелевского комитета, когда в 1921 г. Эйнштейну присудили Нобелевскую премию: «*За вклад в теоретическую физику и, особенно, за открытие законов фотоэффекта*». Об открытии квантов электромагнитного поля в формулировке — ни слова.

Действительно, представление о свете как о потоке классических корпускул несовместимо с эмпирически совершенно явными волновыми свойствами света. Эйнштейн пришел к заключению, что «природа излучения должна быть не такой, какой мы её считаем в настоящее время». За этими словами скрывается то, что теперь принято называть *двойственной природой света*, или *корпускулярно-волновым дуализмом*. Корпускулярный аспект излучения проявляется наиболее отчетливо в коротковолновой части спектра, где для спектральной плотности $u(\omega,T)$ справедлива формула Вина, а волновой аспект — в длинноволновой, где применима формула Рэлея — Джинса. Ни один из этих аспектов не дает полного представления об излучении, ибо для полного объяснения наблюдаемых явлений необходимо их сочетание. Закон излучения Планка, который содержит в себе предельные случаи, соответствующие корпускулярному и волновому аспектам, представляет собой диалектический синтез двух, казалось бы, несовместимых теорий и снимает противоречие между ними.

Только в 1923–1924 гг. после исследований А. Комптона, открывшего эффект, названный его именем, кванты электромагнитного поля перестали быть для физиков гипотетическими частицами. Сам термин *фотон* введен Дж. Льюисом в 1926 г.

Ранее в курсе релятивистской механики мы уже рассматривали элементы фотонной теории света (глава 2 в [1]). Здесь напомним основные положения *фотонной теории электромагнитного излучения*.

1. Масса покоя фотона $m_0 = 0$.

2. Энергия фотона $\varepsilon = \hbar\omega = h\nu$. Напомним, что часто энергии микрочастиц измеряют в электронвольтах (эВ). Один эВ — энергия, которую приобретает электрон при прохождении разности потенциалов в 1 Вольт.

Например, для зеленого света энергия кванта $\hbar\omega = 2{,}5$ эВ и длина волны $\lambda = 5000$ Å.

3. Скорость фотона всегда есть скорость света c. Фотоны движутся со скоростью c не только в вакууме, но и в веществе. «Замедление» света в веществе обусловлено тем, что фотоны поглощаются атомами и затем испускаются вновь. Между актами поглощения и испускания проходит некоторое время, вследствие чего средняя скорость фотонов в веществе оказывается меньше c.

4. Масса фотона как ультрарелятивистской частицы определяется

$$m_{\text{ф}} = \frac{\varepsilon}{c^2} = \frac{\hbar\omega}{c^2}.$$

5. Импульс фотона $p = \dfrac{\varepsilon}{c} = \dfrac{\hbar\omega}{c}$.

Напомним, что согласно классической электромагнитной теории, бегущая электромагнитная волна обладает импульсом $\vec{p}$, направленным вдоль волнового вектора $\vec{k}$ и пропорциональным энергии волны: $p = \varepsilon/c$. Такое соотношение между энергией и импульсом выполняется и для элементарного кванта излучения — фотона: $p = \varepsilon/c = \hbar\omega/c$. Учитывая, что отношение ω/c равно волновому числу k, запишем

$$\varepsilon = \hbar\omega, \qquad \vec{p} = \hbar\vec{k}. \tag{1.5.1}$$

Частота ω и волновой вектор $\vec{k}$ характеризуют *волновые свойства* монохроматического излучения, а энергия ε и импульс $\vec{p}$ — *корпускулярные*.

Соотношение, связывающее импульс фотона с волновым вектором, неизбежно следует из первого уравнения (1.5.1), связывающего энергию с частотой, если обратиться к равноправию всех инерциальных систем отсчета, т. е. к принципу относительности. Действительно, отношение энергии к скорости света ε/c и импульс частицы образуют четырехмерный вектор $\{\varepsilon/c, \vec{p}\}$, а отношение частоты к скорости света c и волновой вектор образуют четырехмерный волновой вектор $\left\{\omega/c, \vec{k}\right\}$ монохроматической волны. При переходе от одной ИСО к другой пространственные и временные компоненты 4-векторов в соответствии с преобразованиями Лоренца перемешиваются друг с другом. Фундаментальное соотношение $\varepsilon = \hbar\omega$ между временными компонентами этих 4-векторов будет удовлетворять требованию релятивистской инвариантности, т. е. выполняться одновременно во всех системах отсчета, тогда и только тогда, когда такое же соотношение $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ имеет место и между их пространственными компонентами.

Запишем инвариант энергии-импульса как разность квадратов временной и пространственной компонент:

$$\left(\frac{\varepsilon}{c}\right)^2 - p^2 = m_0^2 c^2.$$

Эта величина, которая дает квадрат длины 4-х вектора энергии — импульса, одинакова во всех ИСО, то есть является релятивистским инвариантом. Из инварианта, учитывая, что для фотона $p = \varepsilon/c$, получаем, что масса покоя фотона $m_0 = 0$. Этот результат, если рассматривать фотон как частицу, говорит лишь о том, что фотон похож на обыкновенную частицу не во всех отношениях: он в любой системе отсчета имеет скорость c, и не существует такой системы отсчета, в которой бы он покоился. Равенство нулю массы покоя означает, что фотон в состоянии покоя — лишенное смысла понятие.

Рассмотрим ниже корпускулярные свойства фотонов (света).

Примечание 10. Артур Холли Комптон, американский физик, 1892–1962, Нобелевская премия 1927 г. за эффект, названный его именем.

Гилберт Ньютон Льюис, американский физико-химик, 1875–1946.

1.5.2. Фотоэффект

Корпускулярные свойства излучения наиболее отчетливо обнаруживаются в явлениях освобождения электронов из вещества под действием света, получившем название *фотоэффекта.* Влияние света на электрические процессы было открыто Г. Герцем (1887), заметившим, что проскакивание искры между находящимися под напряжением цинковыми электродами облегчается при освещении их ультрафиолетовым излучением. Другие исследователи этого явления В. Гальвакс, А. Риги, А. Г. Столетов также внесли существенный вклад в установление физических закономерностей фотоэффекта.

Первое обстоятельное исследование фотоэффекта было выполнено в 1888–1890 гг. А. Г. Столетовым. С помощью установки для измерения тока через гальванометр, схема которой представлена на рисунке 1.5.1, им было установлено следующее:

1) под действием света, т. е. при освещении ультрафиолетовыми лучами, металлическое тело теряет отрицательный заряд (испускаемые заряды отрицательны);

2) действие света на вещество пропорционально световому потоку, причем фототок сначала растет с увеличением разности потенциалов, а затем насыщается и остается неизменным — ток насыщения;

3) эффект вызывается преимущественно ультрафиолетовыми лучами;

4) явление протекает практически безынерционно.

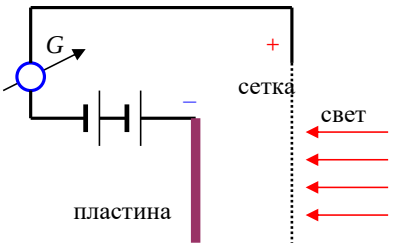


Рис. 1.5.1

В 1897 г. Дж. Дж. Томсон открыл электрон. Затем он же и Ф. Леннард в 1898 г., наблюдая отклонение испускаемых частиц в электрическом и магнитном полях, измерили отношение заряда этих частиц к массе. Измерения показали, что под действием света освобождаются электроны.

Для исследования закономерностей фотоэффекта используют установку, схематически показанную на рисунке 1.5.2. В сосуде поддерживается высокий вакуум. При освещении металлической пластины *K* через кварцевое окно в цепи возникает ток (фототок), измеряемый гальванометром G. Явление в сильной степени зависит от чистоты освещаемой поверхности, поэтому в точных опытах используют срезы или поверхности, напыленные в вакууме.

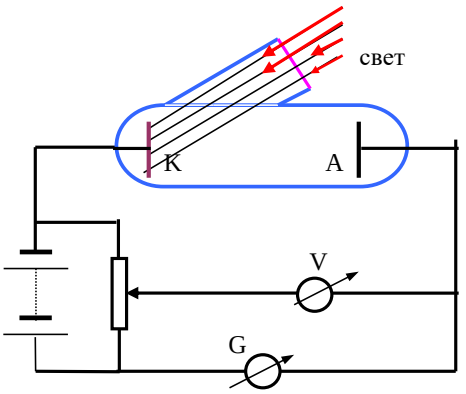


Рис. 1.5.2

Примерная зависимость силы фототока от приложенного напряжения *U*, измеряемого вольтметром V, изображена на рисунке 1.5.3. При неизменном световом потоке характерно существование участка тока насыщения $I_н$, когда все освобождаемые светом электроны (фотоэлектроны) достигают анода, и участка нарастания, начинающегося при некотором значении задерживающего напряжения $U_З$. По измерениям $U_З$ можно определить максимальную скорость *v* фотоэлектронов с помощью соотношения $eU_З = \frac{1}{2}mv^2$. Многочисленными экспериментами установлены следующие основные законы фотоэффекта.

1. Сила тока насыщения прямо пропорциональна падающему световому потоку при его неизменном спектральном составе. Этот закон проверен для очень широкого интервала интенсивностей. Отсюда следует, что число электронов, освобождаемых светом в единицу времени, пропорционально мощности падающего излучения.

2. Для каждого металла существует максимальная длина волны (минимальная частота) света, при которой еще происходит освобождение электронов, так называемая *красная граница фотоэффекта.* Если длина волны падающего света превышает эту границу, то эмиссия электронов отсутствует даже при сравнительно большой интенсивности освещения.

3. Максимальная энергия фотоэлектронов линейно зависит от частоты ω падающего света и не зависит от его интенсивности.

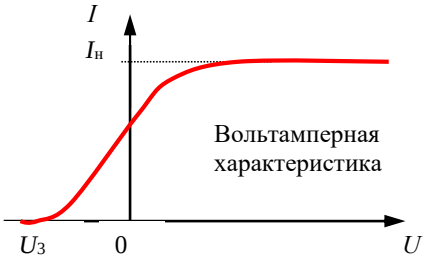


Рис. 1.5.3

С точки зрения классических волновых представлений о природе излучения сам факт освобождения электрона из металла неудивителен, так как падающая на поверхность электромагнитная волна вызывает вынужденные колебания электронов в металле. Поглощая энергию волны, электрон может накопить её в количестве, достаточном для преодоления потенциального барьера, удерживающего электрон в металле (т. е. для совершения работы выхода). Если эта картина верна, то энергия фотоэлектрона должна находиться в прямой связи с интенсивностью падающего света. Но опыт показывает, что энергия фотоэлектронов совершенно не зависит от интенсивности освещения образца. Увеличение интенсивности приводит лишь к пропорциональному увеличению числа фотоэлектронов. Энергия же отдельного фотоэлектрона зависит только от частоты падающего света.

Более того, даже при очень малой интенсивности фотоэлектроны появляются практически сразу после начала освещения (безынерционность фотоэффекта), хотя, по классическим представлениям, в таких случаях требуется конечное, экспериментально регистрируемое время, чтобы электрон мог накопить необходимую энергию.

В 1905 г. Эйнштейн объяснил экспериментальные закономерности фотоэффекта на основе гипотезы световых квантов. Качественная картина с этой точки зрения выглядит следующим образом. Падающее монохроматическое излучение рассматривается как поток фотонов, энергия которых связана с частотой соотношением $\varepsilon = \hbar\omega$. При поглощении фотона его энергия целиком передается одному электрону, и если эта энергия достаточна для того, чтобы освободить от удерживающих его связей, то он может выйти за пределы поверхности металла. Вероятность одновременного поглощения двух фотонов одним электроном мала, поэтому каждый фотоэлектрон получает энергию от одного фотона. Вообще говоря, не каждый поглощенный фотон приводит к освобождению электрона. *Квантовый выход*, определяемый отношением числа фотоэлектронов к числу поглощенных фотонов

$$\eta = \frac{n_e}{n_{\text{фот}}}, \qquad (1.5.2)$$

обычно заметно меньше единицы: $\eta \sim 10^{-5}..10^{-3}$, для фотокатодов со специальным пленочным покрытием $\eta \sim 10^{-2}..10^{-1}$. По квантовым представлениям полное число освобожденных электронов пропорционально числу поглощенных фотонов, т. е. сила тока насыщения пропорциональна интенсивности. Но энергия отдельного фотоэлектрона определяется энергией поглощенного фотона $\varepsilon = \hbar\omega$.

Приобретаемая электроном энергия $\varepsilon = \hbar\omega$ может лишь частично затрачиваться на освобождение из металла. Её излишек остается в форме кинетической энергии фотоэлектрона. Минимальную энергию A, необходимую для освобождения электрона из металла, называют *работой выхода*. Таким образом, для фотоэлектронов, имеющих *максимальную* скорость v и массу покоя m, закон сохранения энергии в элементарном акте поглощения фотона можно записать в виде

$$\hbar\omega = \frac{1}{2}mv^2 + A. \qquad (1.5.3)$$

Это уравнение и есть *уравнение Эйнштейна* для объяснения фотоэффекта.

Качественно физическую картину на границе металл — вакуум можно представить следующим образом (см. рис. 1.5.4). Потенциальная яма, в которой находятся электроны, подчиняющиеся статистике Ферми — Дирака, с концентрацией $\sim 10^{22}$ см$^{-3}$. При абсолютном нуле $(T = 0\,\text{К})$ работа выхода (A) и значение энергии Ферми (ε_F) совпадают. Из уравнения Эйнштейна следует наличие *красной границы фотоэффекта*, т. е. существование некоторой минимальной частоты излучения $\omega_{\min} = A/\hbar$, при которой ещё возможен фотоэффект. При меньших частотах $\omega < \omega_{\min}$ фотоэффект не наблюдается.

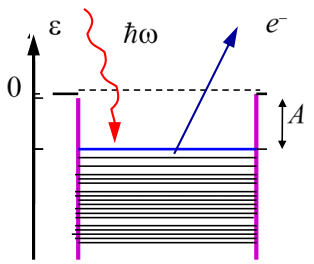


Рис. 1.5.4

Для различных металлов работа выхода и, следовательно, граничная частота имеют различные значения. Кроме того, на работу выхода существенное влияние оказывают состояние и чистота поверхности металла, в особенности наличие пленки адсорбированного газа. Для большинства металлов красная граница фотоэффекта приходится на ультрафиолетовую область спектра (в опытах Столетова с освещением цинковой пластинки фотоэффект пропадал при переходе от ультрафиолетовых к видимым лучам).

Только у щелочных металлов красная граница попадает в область видимого света.

Опытные проверки теории Эйнштейна осуществлялись многими физиками: В. Ричардсоном и К. Комптоном в 1912 г., а также Р. Милликеном в 1916 г. В частности, Р. Милликен получил численное значение постоянной Планка.

Весьма чистые измерения были проведены П. И. Лукирским и С. С. Прилежаевым в 1926 г. Лукирский и Прилежаев использовали сферический конденсатор (рис. 1.5.5), внутри которого создавался вакуум. Внутренняя обкладка состояла из объекта, из которого вылетали фотоэлектроны. Наружная сферическая обкладка была покрыта серебром. Измерялся фототок через конденсатор для разных частот падающего излучения. Строился график (см. рис. 1.5.6*А*) зависимости фототока от напряжения на конденсаторе при различных частотах излучения, и определялись потенциалы запирания U_1, U_2, U_3, ..., т. е. красные границы фотоэффекта.

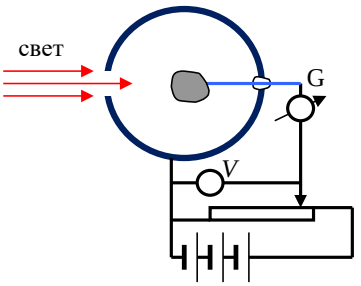


Рис. 1.5.5

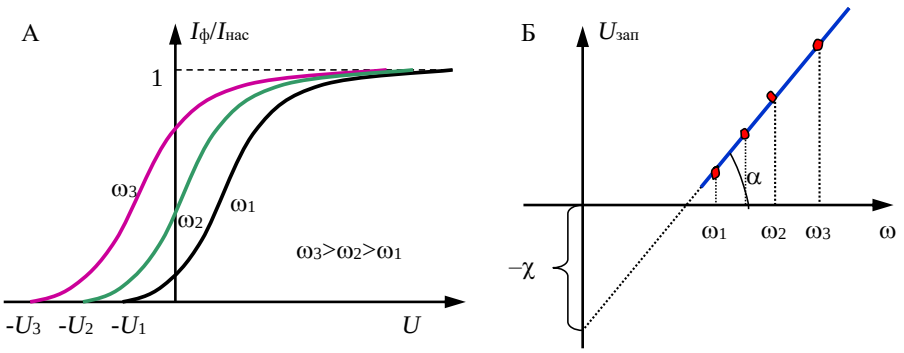


Рис. 1.5.6

Эти измерения позволяли получать потенциалы выхода χ и отношение постоянной Планка к заряду электрона. В самом деле, исходя из уравнения Эйнштейна (1.5.3) $\hbar\omega = e\chi + eU_{зап}$ строилась прямая зависимость (рис. 1.5.6*Б*) потенциалов запирания от частоты фотонов:

$$U_{зап} = \frac{\hbar}{e}\omega - \chi \qquad (1.5.4)$$

и при дальнейшей экстраполяции определялись угол наклона прямой к оси абсцисс α и отрезок отсечения от оси ординат. Тангенс угла наклона

$\mathrm{tg}\alpha = \hbar/e$ позволял определять отношение постоянной Планка к заряду электрона, отрезок отсечения давал потенциал выхода «–χ».

Примечание 11. Строго говоря, вывод о существовании красной границы фотоэффекта имеет смысл только для однофотонных процессов. Необходимо отметить, что при очень высоких интенсивностях возможен многофотонный (нелинейный) эффект. Вероятность поглощения в элементарном акте двух или большего числа фотонов пропорциональна произведению интенсивностей соответствующего числа пучков. В экспериментах со сфокусированным лазерным излучением достигаются столь высокие плотности световой энергии, что становятся доступными наблюдению процессы, в которых атом одновременно поглощает до 7–8 фотонов. В результате может произойти фотоионизация атома светом малой частоты, т. е. в интенсивных световых пучках *исчезает красная граница фотоэффекта*. Интересно, что Эйнштейн в работе 1905 г., содержащей вывод основного уравнения фотоэффекта, не исключал принципиальной возможности процессов с участием более чем одного фотона.

В настоящее время понятие фотоэффекта существенно расширилось.

А. *Внутренний фотоэффект* (см. рис. 1.5.7) — наблюдаемый в полупроводниках межзонный переход, связанный с «забросом» электрона из валентной зоны ε_v через запрещенную зону в зону проводимости ε_c при поглощении светового кванта.

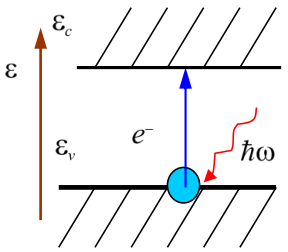


Рис. 1.5.7

Б. *Атомный фотоэффект* (молекулярный, кластерный). Фотоэффект, наблюдаемый при поглощении электронами, находящимися на определенных уровнях энергии (оболочках) атома, характеризуемых потенциалом ионизации и резонансными частотами. В объектах с большим количеством электронов наблюдаются многоэлектронные, коллективные эффекты, в частности, вырывание двух электронов одним фотоном и многие другие.

В. *Многофотонные* (нелинейные) эффекты. Наблюдаются в экспериментах с фокусированными (импульсными) лазерными пучками, т. е. при создании достаточно сильных электромагнитных полей.

Г. *Селективный фотоэффект*. Волновые свойства при фотоэффекте наблюдаются в тех случаях, когда поляризованное излучение падает на поверхность металла под некоторым углом к нормали.

Д. Фотоэффект на *свободном электроне не наблюдается*. В самом деле, возможность поглощения свободным электроном фотона противоречит законам сохранения энергии и импульса:

$$\left.\begin{aligned}&\hbar\omega + mc^2 = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}\\&\hbar\omega/c = p\end{aligned}\right\} \Rightarrow (\hbar\omega)^2 + m^2c^4 + 2mc^2\hbar\omega = \hbar^2\omega^2 + m^2c^4.$$

Сокращая подобные слагаемые, отсюда получаем, что либо $\hbar\omega = 0$, либо $mc^2 = 0$. Таким образом, свободный электрон не может поглотить квант света.

Электромагнитная теория, рассматривающая свет как классические электромагнитные волны (т. е. как возможные решения уравнений Максвелла), исчерпывающе описывает распространение света в пустоте, интерференцию и дифракцию. Будучи дополненной электронной теорией, она оказывается в состоянии охватить и широкий круг вопросов, относящихся к взаимодействию света с веществом, таких как рассеяние, поглощение, преломление, дисперсия. Но применимость классической теории в вопросах взаимодействия света с веществом все же имеет предел. Так, например, в фотоэффекте проявляется внезапная пространственная локализация конечной порции энергии света на одном электроне. Такое поведение несовместимо с классической волновой картиной, но получает естественное объяснение в корпускулярной картине, трактующей свет как поток фотонов. Ведь именно частица может доставить конечную порцию энергии в определенную точку.

Локализация кванта энергии излучения особенно ярко проявляется в фотоэффекте на отдельных атомах или молекулах (фотоионизация). В классической электромагнитной волне энергия непрерывно распределена по всему волновому фронту. Исходя из известного значения площади эффективного сечения, можно оценить, сколько времени должно пройти с момента начала облучения для того, чтобы атом мог накопить достаточную для вырывания электрона (ионизации) энергию ε_i. В условиях реального эксперимента это могут быть недели или месяцы. Однако тот же эксперимент показывает, что фотоэлектроны с энергией $\hbar\omega - \varepsilon_i$ появляются практически сразу после начала облучения. Значит, классическое непрерывное распределение энергии по фронту волны характеризует перенос энергии излучения только в среднем, но не для элементарных актов взаимодействия излучения с веществом, свидетельствующих о пространственной локализации переносимой энергии, что характерно для потока частиц.

Волновой и корпускулярный аспекты излучения связаны друг с другом: атрибут волновой картины частота ω входит в соотношение $\varepsilon = \hbar\omega$, определяющее энергию световой частицы — фотона. В опытах по фотоэффекту это соотношение проверяется измерением энергии фотоэлектронов, образуемых фотонами монохроматического излучения известной частоты. Другое подтверждение ему дает обратный процесс — испускание фотонов быстрыми электронами при торможении.

Примечание 12. Генрих Рудольф Герц, немецкий физик, 1857–1894.

Вильгельм Людвиг Франц Гальвакс, немецкий физик, 1859–1922.

Аугусто Риги (Ричи), итальянский физик, 1850–1921.

Александр Григорьевич Столетов, русский физик, 1839–1896.

Джозеф Джон Томсон, английский физик, 1856–1940, Нобелевская премия 1906 г. за открытие электрона.

Филипп Эдуард Антон Леннард, немецкий физик, 1862–1947, Нобелевская премия в 1905 г. «За исследование катодных лучей».

Оуэн Вильямс Ричардсон, английский физик,1879–1959, Нобелевская премия 1928 г. за исследования термоэлетронной эмиссии.

Роберт Эндрюс Милликен, американский физик, 1868–1953, Нобелевская премия 1923 г. за работы в области элементарных зарядов и фотоэлектрического эффекта.

Энрике Ферми, итальянский и американский физик-теоретик, 1901–1954, Нобелевская премия по физике (1938) за доказательство существования новых радиоактивных элементов.

Петр Иванович Лукирский, советский физик, 1894–1954, академик, работал в Физико-техническом институте и заведовал кафедрой в ЛПИ.

Сергей Сергеевич Прилежаев, советский физик, 1903–1979.

1.5.3. Тормозное рентгеновское излучение

Испускание фотонов наблюдается при торможении быстрых электронов в веществе. В 1895 г. В. Рентген обнаружил электромагнитное излучение, возникающее при бомбардировке стекла и металлов быстрыми электронами. Это излучение с длиной волны $\lambda \sim 10^{-5}..10^{2}$ нм позднее получило название *рентгеновских лучей*. В устройстве, имеющем название рентгеновской трубки и изображенном на рисунке 1.5.8, для получения тормозного рентгеновского излучения электроны, испускаемые катодом в результате термоэлектронной эмиссии, фокусируются цилиндрическим электродом и ускоряются высоким напряжением, создаваемым между катодом и анодом (антикатодом). Мишенью для электронного пучка служит антикатод. Почти вся энергия электронов пучка выделяется в антикатоде в виде тепла. На долю рентгеновского излучения приходится всего (1–3)% энергии, запасенной в пучке. При достаточно высокой скорости электронов помимо тормозного рентгеновского излучения наблюдается также *характеристическое излучение*, вызванное возбуждением внутренних электронных оболочек атомов антикатода.

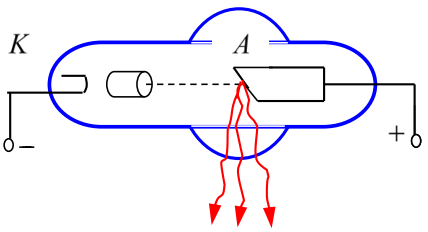


Рис. 1.5.8

Согласно классической электродинамике при торможении электрона должно возникать излучение с длинами волн от нуля до бесконечности — сплошной спектр излучения. Излучение происходит при ускоренном движении электронов, при этом мощность излучения пропорциональна квадрату ускорения $\ddot{x}^2$:

$$I = \frac{dW}{dt} = \frac{2e^2}{3c^3}\ddot{x}^2 \sim e^2\ddot{x}^2 . \qquad (1.5.5)$$

Тогда полная энергия излучения пропорциональна:

$$W \sim I\tau \sim e^2\ddot{x}^2\tau = \frac{e^2 v_0^2}{\tau}, \qquad (1.5.6)$$

где τ — время торможения, v_0 — начальная скорость электрона. Чем выше начальная скорость электрона и чем меньше время торможения, тем больше энергии переходит в излучение. При этом длина волны, на которую попадает максимум интенсивности излучения, должна уменьшаться по мере увеличения скорости электронов, т. е. повышения ускоряющего напряжения. Выводы классической теории в основном подтверждаются на опыте.

Однако опыт показывает одно принципиальное отличие от классического описания. А именно, при фиксированном ускоряющем напряжении U в рентгеновском сплошном спектре отсутствует излучение с длинами волн, меньшими некоторого значения λ_{min}, т. е. возникает *коротковолновая граница в сплошном рентгеновском спектре* (см. рис. 1.5.9). При этом коротковолновая граница тормозного излучения λ_{min} определяется только ускоряющим напряжением U и не зависит от материала мишени.

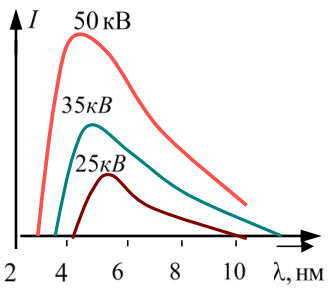


Рис. 1.5.9

В целом процесс излучения при торможении электрона в электрических полях, создаваемых атомами мишени, весьма сложен, но наличие коротковолновой границы в корпускулярной картине получает очень простое объяснение. Как и в уравнении Эйнштейна для фотоэффекта, можно записать закон сохранения энергии в элементарном акте испускания кванта излучения. Фотон получает наибольшую энергию в том случае, когда электрон полностью останавливается при столкновении с ядром атома мишени. Из-за большой массы ядра такой процесс не противоречит закону сохранения импульса. Тогда максимальная энергия испускаемых фотонов $\hbar\omega_{max}$ равна кинетической энергии электронов:

$$\frac{1}{2}mv^2 = eU = \hbar\omega_{max}; \qquad (1.5.7)$$

$$\omega_{max} = \frac{eU}{\hbar} = \frac{2\pi c}{\lambda_{min}} \quad \text{или} \quad \lambda_{min} = \frac{2\pi c\hbar}{eU} = \frac{ch}{eU}. \qquad (1.5.8)$$

Если длину волны мерить в Ангстремах, а разность потенциалов в Вольтах, то (1.5.8) записывается:

$$\lambda_{min} = \frac{12390}{U}.$$

Существование граничной длины волны λ_{min}, или максимальной частоты ω_{max}, демонстрирует квантовый характер испускания рентгеновского излучения. По измерению её зависимости от ускоряющего напряжения можно с высокой точностью определить значение постоянной Планка.

Несколько слов о современном состоянии физики тормозного излучения. Подробно исследуется тормозное излучение при переходе заряженных частиц через границу двух сред. Это так называемое *переходное тормозное излучение*. Наблюдается тормозное излучение при рассеянии этих частиц на атомах и атомных системах. При этом помимо обычного тормозного излучения рассматривается *поляризационное тормозное излучение*, когда налетающая частица поляризует частицу мишени и при этом испускается фотон. Обнаружено большое усиление тормозного излучения при частотах, совпадающих с энергиями переходов между дискретными состояниями атома. Большой интерес вызывает излучение заряженных частиц, распространяющихся внутри кристаллов, в процессе «каналирования» этих частиц.

В рассмотренных явлениях фотоэффекта и тормозного излучения мы учитывали только закон сохранения энергии при испускании или поглощении фотона, так как массивный катод мог, не участвуя в энергетическом балансе, «принять на себя» любой импульс и этим обеспечить выполнение закона его сохранения. Но существуют явления, в которых импульс фотона обнаруживает себя явно и соотношение $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ допускает экспериментальную проверку. В качестве примера рассмотрим рассеяние рентгеновского излучения свободными или слабо связанными электронами, впервые количественно исследованное А. Комптоном в 1922 г.

Примечание 13. Вильгельм Конрад Рентген, немецкий физик, 1845–1923, первый из физиков получил Нобелевскую премию в 1901 г.

1.5.4. Эффект Комптона

Опыты Комптона показали, что при рассеянии пучка монохроматических рентгеновских лучей на мишени из вещества с небольшим атомным номером в рассеянном излучении наряду с неизменной длиной волны появляется спектральная компонента, *смещенная в сторону длинных волн.*

Комптон-эффект наблюдается при рассеянии излучения малых длин волн — рентгеновского и γ-излучения. Рентгеновское излучение от рентгеновской трубки падало на мишень, а рассеянные кванты регистрировались под углом θ (см. рис. 1.5.10). Наблюдаемое изменение длины волны $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ не зависит от длины волны падающего света, а определяется лишь углом θ между направлением падающего пучка и направлением рассеянного излучения. Графики интенсивностей падающего и рассеянного излучения изображены на рисунке 1.5.11. С увеличением угла θ интенсивность несмещенной компоненты падает, а смещенной — растет.

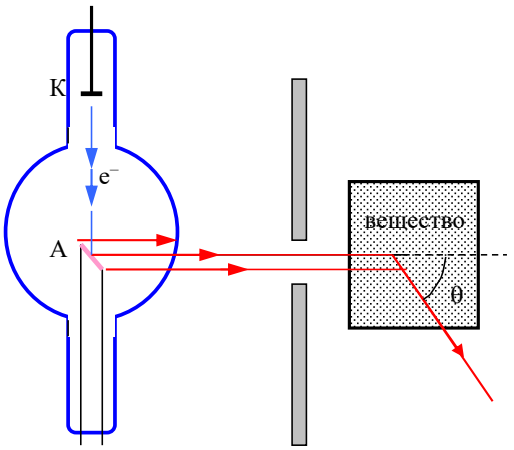


Рис. 1.5.10

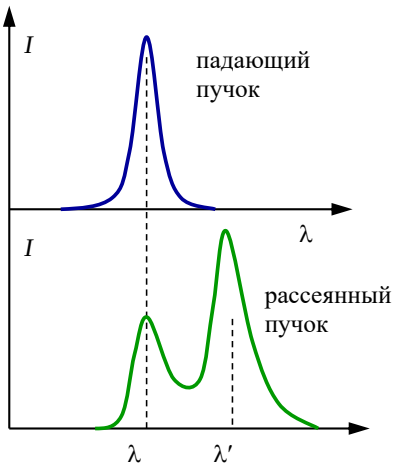


Рис. 1.5.11

Принято считать, что в Комптон-эффекте впервые во всей полноте проявились корпускулярные свойства электромагнитного излучения (в частности, света). Согласно классической теории рассеяния света, развитой Дж. Томсоном, длина световой волны при рассеянии не должна меняться:

под действием периодического электрического поля световой волны электрон колеблется с частотой поля и поэтому излучает вторичные (рассеянные) волны той же частоты.

В квантовой теории эффект Комптона выглядит как упругое столкновение двух частиц — налетающего фотона и покоящегося электрона. В каждом акте столкновения соблюдаются законы сохранения энергии и импульса. Фотон передает часть своей энергии и импульса электрону и изменяет направление движения — рассеивается. *Уменьшение энергии фотона и означает увеличение длины волны рассеиваемого света.* Электрон, получивший от фотона энергию и импульс, приходит в движение — испытывает отдачу. Направления движения частиц после столкновения и их энергии определяются законами сохранения энергии и импульса. Так как при рассеянии фотонов высокой энергии электрон отдачи может приобрести значительную скорость, необходимо использовать релятивистские соотношения.

В атомах легких элементов энергия связи электрона (энергия ионизации) порядка 10 эВ, что примерно в тысячу раз меньше энергии рентгеновского фотона ($\hbar\omega \approx 10$ кэВ). Поэтому электроны мишени в этих опытах можно считать практически свободными.

Запишем законы сохранения энергии и импульса, считая электрон покоящимся в начальном состоянии:

$$\hbar\omega + mc^2 = \hbar\omega' + \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \qquad (1.5.9)$$

$$\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \vec{p},$$

где m — масса покоя электрона; $\hbar\omega$ — энергия фотона; $\hbar\vec{k}$ — импульс фотона. Сначала преобразуем первое из уравнений (1.5.9). Для этого представим разность энергий фотона в виде

$$\hbar\omega - \hbar\omega' = \hbar c\left(k - k'\right)$$

и, выделив квадратный корень, возведём первое уравнение в квадрат:

$$m^2c^2 + p^2 = \hbar^2\left(k - k'\right)^2 + 2mc\hbar\left(k - k'\right) + m^2c^2$$

$$p^2 = \hbar^2(k - k')^2 + 2m\hbar c(k - k'). \qquad (1.5.10)$$

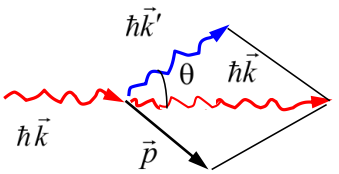


Рис. 1.5.12

Теперь возводим в квадрат второе уравнение в (1.5.9):

$$\hbar^2(\vec{k} - \vec{k}')^2 = (\vec{p})^2;$$

$$\hbar^2\left(k^2+k'^2-2kk'\cos\theta\right)=p^2. \qquad (1.5.11)$$

Сравнивая (1.5.10) и (1.5.11), можем записать

$$mc\left(k-k'\right)=\hbar kk'\left(1-\cos\theta\right).$$

Умножая последнее равенство на дробь $2\pi/mckk'$ и учитывая, что $\lambda=2\pi/k$, получаем

$$\lambda'-\lambda=\Delta\lambda=\lambda_c\left(1-\cos\theta\right); \qquad (1.5.12)$$

$$\lambda_c=\frac{2\pi\hbar}{mc}, \qquad (1.5.13)$$

где λ_c — *комптоновская длина волны электрона*, численное значение которой равно $\lambda_c=0{,}0243$ Å.

Рассмотрим физические следствия из такого рассмотрения и объяснение полученных результатов.

1. Происхождение несмещенной компоненты в спектре рассеянного излучения обусловлено взаимодействием рентгеновских лучей с внутренними электронами и ядрами атомов мишени. Их энергия связи, особенно в тяжелых атомах, сравнима с энергией рентгеновских фотонов, и, следовательно, такие электроны уже нельзя рассматривать как свободные. Поэтому в акте рассеяния фотон обменивается энергией и импульсом с атомом в целом. Так как масса атома велика, то из закона сохранения импульса следует, что фотон практически не передает ему своей энергии. Фотоны, рассеянные внутренними электронами, и образуют несмещенную компоненту (это рассеяние когерентно). Поэтому в спектре излучения, рассеянного на тяжелых атомах присутствует как смещенная, *комптоновская*, линия от рассеяния на периферийных электронах таких атомов, так и несмещенная линия от рассеяния на атоме в целом.

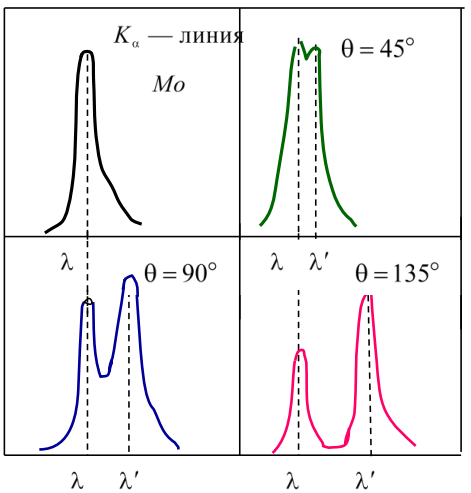


Рис. 1.5.13

2. Из соотношения (1.5.12) видно, что чем больше угол рассеяния θ, тем больше смещение рассеянной волны. Более того, при увеличении угла рассеяния увеличивается относительная доля «свободных» электронов, т. е. увеличивается отношение интенсивностей смещенной и несмещенной компонент.

3. С ростом атомного номера вещества рассеивателя относительное число связанных электронов увеличивается и отсюда при фиксированном угле рассеяния θ при переходе к более тяжелым элементам растет интенсивность несмещенной линии.

4. При рассеянии фотона часть его энергии передается электрону. Электроны отдачи играют важную роль в процессе ионизации газов рентгеновским излучением. Их энергия также зависит от угла рассеяния фотонов и определяется простым соотношением:

$$E_e = \hbar(\omega - \omega') = 2\pi\hbar c\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right). \qquad (1.5.14)$$

Используя камеру Вильсона, помещенную в магнитное поле, можно найти энергию и импульс электронов отдачи, что позволяет еще более полно проверить выполнение законов сохранения. Измерения показали, что в каждом элементарном акте рассеяния электрон приобретает как раз такие импульс и энергию, какие теряет фотон.

Из приведенных выше рассуждений ясно, почему эффект Комптона нельзя наблюдать в видимой области спектра. Энергия фотона видимого света составляет лишь несколько электрон-вольт. При этом даже внешние электроны нельзя считать свободными.

Рассмотренная упрощенная теория Комптон-эффекта не позволяет вычислить все характеристики комптоновского рассеяния, в частности, интенсивность рассеяния фотонов под разными углами. Полную теорию эффекта Комптона дает *квантовая электродинамика*.

Примечание 14. Интенсивность комптоновского рассеяния зависит как от угла рассеяния, так и от длины волны падающего излучения. В угловом распределении рассеянных фотонов наблюдается асимметрия: больше фотонов рассеивается вперед, причем эта асимметрия увеличивается с ростом энергии фотона ε. Полная интенсивность, или сечение σ, комптоновского рассеяния падает с ростом ε. Зависимость σ от ε дается формулой Клейна — Нишины, представляющей собой результат расчетов, отвечающих диаграммам Фейнмана.

Существует также обратный эффект Комптона. Если электроны, на которых упруго рассеивается электромагнитное излучение, релятивистские, то энергия (и импульс) фотонов будет увеличиваться за счет энергии (и импульса) электронов, т. е. длина волны фотона при рассеянии будет уменьшаться. Это явление называют *обратным комптон-эффектом*.

Опыты Комптона ярко продемонстрировали, что энергия и импульс фотона действительно выражаются формулами $\varepsilon = \hbar\omega$ и $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ и что законы сохранения энергии и импульса выполняются в элементарных актах рассеяния.

Таким образом, опытные факты говорят о том, что в ряде явлений свет обнаруживает корпускулярные свойства: взаимодействие излучения с веществом имеет характер дискретных процессов, в которых поглощается, испускается или рассеивается целый квант. Но представление о свете как о потоке классических корпускул несовместимо с классической картиной электромагнитных волн, которая, в свою очередь, находит опытное подтверждение в явлениях интерференции и дифракции.

Впрочем, вопрос о природе света не всегда стоит так категорично: или частицы, или волны. Существует ряд явлений, допускающих корректное объяснение с любой из этих точек зрения. В качестве примеров можно привести эффект Допплера и давление света.

Итак, что же такое свет — частица или волна? Квантовая теория отвечает на этот вопрос так: ни то, ни другое. Когда мы описываем поведение фотона как поведение частицы или волны, мы навязываем классическое описание этому объекту, имеющему существенно неклассическую природу. Свет может характеризоваться только с той его стороны (корпускулярной или волновой), проявление которой определяется внешними условиями, создаваемыми экспериментальными *средствами наблюдения*. Такая постановка вопроса позволяет рассматривать и тот случай, когда один и тот же исследуемый объект (свет) обладает не совместимыми по классическим представлениям корпускулярными и волновыми свойствами. В квантовой теории эти свойства не исключают, а дополняют друг друга, так как в «чистом» виде они могут проявиться лишь в разных опытах, производимых при взаимоисключающих условиях. Этим и объясняется отсутствие логического противоречия в понятии «корпускулярно-волновой дуализм». Действительно, нет необходимости пытаться представить себе, как это фотон может быть сразу и волной, и частицей. Свет обладает *потенциальной возможностью* проявлять и волновые, и корпускулярные свойства, но эти дополняющие друг друга свойства в чистом виде проявляются лишь при взаимоисключающих условиях эксперимента. Адекватный способ описания света определяется выбранным способом наблюдения, а вопрос о том, что же существует «на самом деле» — волна или частица, — лишен содержания.

Корпускулярно-волновой дуализм присущ не только фотонам, но и любым другим микрообъектам — электронам, протонам, нейтронам и т. п.

Другие эксперименты, которые подтверждали квантовую природу света, проводились многими известными физиками. В частности, опыты А. Ф. Иоффе и Н. И. Добронравова в 1925 г. подтвердили квантовую картину фотоэффекта. С. И. Вавилов наблюдал флуктуации слабых световых потоков. В. Боте (1924) проводил известные эксперименты по совпадению рассеянного фотона и выбитого электрона.

Примечание 15. Сергей Иванович Вавилов, советский физик, 1891–1951, академик, Президент АН СССР (1945–1951).

Вальтер Вильгельм Георг Боте, немецкий физик, 1891–1957, лауреат Нобелевской премии по физике за 1954 г.

Абра́м Фёдорович Иоффе, советский физик, 1880–1960, академик, вице-президент АН СССР, директор Физико-технического института, завкафедрой физики в ЛПИ.

Николай Иванович Добронравов, советский физик, 1891–1949, работал в ФТИ, ЛПИ, ЛГУ.

ГЛАВА 2. КВАНТОВЫЕ И ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВА

2.1. Экспериментальные обоснования структуры атомов

Атом — наименьшая часть химического элемента, являющаяся носителем его свойств. Само слово «атом» произошло от греческого слова *atomos* — неделимый.

Заслуга введения в теорию вещества идеи атомов принадлежит греческим философам (Демокрит, Эпикур). Нелегко понять, что подразумевали древние под термином «атом», но основной проблемой, интересовавшей их, был вопрос о том, бесконечна ли делимость вещества. Греческие атомисты верили, что любое вещество построено из «атомов» и, вероятно, чувствовали, что бесконечное многообразие свойств вещества должно быть объяснено конфигурацией и движением атомов. Эти идеи довольно близки современным, но различия между нашими количественными теориями, основанными на опыте, и туманными размышлениями древних столь же огромны, как и отличие их «атомов» от того понимания, которое вкладывают в этот термин физики.

Постепенно само существование атомов и молекул, которое долгое время рассматривалось только как удобная рабочая гипотеза, было осознано как объективная реальность. В начале XIX в. в результате установления основных химических законов и законов идеального газа сложились представления об атоме как о мельчайшей частице химического элемента. Вклад в развитие этих представлений внесли Дж. Дальтон, А. Авогадро, Я. Берцелиус. В середине XIX в. была проведена четкая граница между атомом и молекулой. Важнейшее значение имело открытие в 1869 г. Д. И. Менделеевым *периодической системы элементов*.

Кратко перечислим великие открытия конца XIX в. В 1895 г. В. Рентген открыл *рентгеновские лучи*, в 1896 г. А. Беккерель открыл *явление радиоактивности*. На следующий год (1897 г.) Дж. Томсон открыл *электрон*, а П. и М. Кюри представили результаты по исследованию радиоактивности. Эти открытия окончательно разрушили представление о неизменности и неделимости атома. Стало очевидным, что атом имеет сложное строение.

2.1.1. Распределение заряда в атомах. Модель Резерфорда

В 1903 г. Дж. Томсон предложил модель, согласно которой атом представляет собой положительно заряженную сферу (или равномерно заряженный шар), внутрь которой «вкраплены» электроны. Положительный суммарный заряд сферы равен заряду электронов, т. е. атом в целом электронейтрален. Испускание света таким атомом — это следствие колебания

электронов около положения равновесия. Однако эта модель потерпела неудачу в объяснении опытов по рассеянию частиц на атоме.

Первую попытку изучения строения атома на опытах по рассеянию пучков заряженных частиц предпринял Э. Леннард с сотрудниками, используя катодные лучи. Оказалось, что быстрые электроны почти совершенно не тормозятся атомом, хотя в результате столкновений с «массивными шариками» размера с атом и соответствующей потери энергии электроны неизбежно должны бы были «остановиться».

В 1911 г. Э. Резерфорд поставил опыты по изучению рассеяния положительно заряженных α-частиц (заряд $Z_\alpha = +2|e|$) при прохождении через тонкую металлическую фольгу (рис. 2.1.1). Резерфорд выбрал для своих экспериментов значительно более массивные α-частицы, а не сравнительно легкие электроны, в силу того, что α-частицы не отклоняются сколько-нибудь заметным образом при столкновениях с электронами атома и поэтому будут реагировать только на столкновения с более тяжелыми частицами. Разница в проникающих способностях электрона и α-частицы сравнима с разницей между легкой ружейной пулей и тяжелым снарядом. α-частицы испускались в результате радиоактивного распада ядер и имели скорость порядка 10^7 м/с.

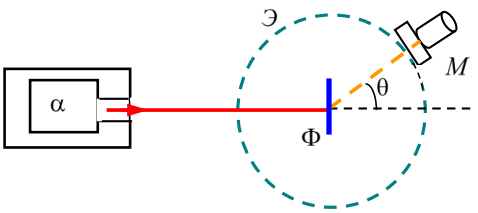


Рис. 2.1.1

Узкий пучок α-частиц направлялся на мишень (Ф) из тонкой фольги. Рассеянные α-частицы регистрировались визуально — удар α-частицы об экран (Э) из сернистого цинка, окружавший мишень, вызывал сцинтилляцию (вспышку света), наблюдаемую в микроскоп (М). Весь прибор помещался в вакуумированную оболочку. Подавляющее число α-частиц рассеивалось на малые углы (1–3)° (рис. 2.1.2), однако некоторое количество α-частиц отклонялось на очень большие углы (до 180°). Например, на платиновой фольге из 8000 падающих α-частиц 1 (одна) рассеивалась на угол больше 90°.

Анализируя результаты опыта, Резерфорд пришел к выводу, что столь сильное отклонение α-частиц вызывается чрезвычайно сильным электрическим полем, которое создается зарядом, обладающим большой массой и сконцентрированным в очень малом объеме. Остальное внутриатомное пространство практически ничем не заполнено — результат, уже полученный ранее Леннардом. В отличие от Томсона, который отклонение на большие углы пытался объяснить множественными актами рассеяния, Резерфорд

объяснил этот эффект однократным актом рассеяния на массивном положительном заряде и получил согласие с экспериментом.

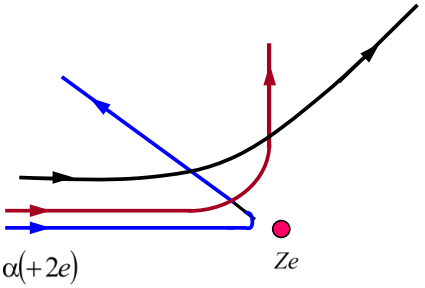


Рис. 2.1.2

На основе объяснения полученных результатов рождается планетарная модель атома (1911 г., рис. 2.1.3). В центре атома находится *заряженное ядро* с зарядом Ze, имеющее размеры < 10^{-12} см. Вокруг ядра распределены Z электронов, размер области распределения электронов ~ 10^{-8} см. Масса атома практически вся сосредоточена в ядре.

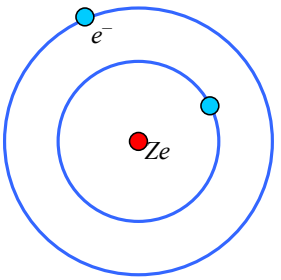


Рис. 2.1.3

Примечание 16. «Опыт Резерфорда» был поставлен в 1909 г. Х. Гейгером и Э. Марсденом, сотрудниками лаборатории Резерфорда. Они выполнили экспериментальное исследование прохождения α-частиц через тонкие пластинки из золота и других металлов.

Примечание 17. Планетарная модель впервые была выдвинута в 1901 г. в лекции Ж. Перрена в Сорбонне положительно заряженная частица, окруженная некоторым количеством электронов (наподобие маленьких планет), компенсирующих заряд центральной частицы. Перрен предполагал, что под действием электромагнитных сил образуется динамически устойчивая система, периоды вращения в которой соответствуют частотам линий спектра атома.

Поскольку α-частицы, по Резерфорду, заметно отклоняются лишь ядром, можно вывести закон рассеяния из распределения α-частиц, отклоненных от первоначального направления пучка тонкой пленкой изучаемого образца. Тонкая пленка практически обеспечивала однократное рассеяние частиц на ядре. Таким путем получается однозначный вывод — эффективная рассеивающая сила представляет собой кулоновскую силу:

$$2Ze^2/r^2,$$

где $2e$ — заряд α-частицы, а Ze — заряд ядра.

Траектории α-частиц имеют вид гипербол, в фокусе которых расположено ядро (см. рис. 1.4). Эту задачу рассеяния при заданном прицельном параметре ρ ранее мы рассматривали в курсе классической механики (см. [1], п. 1.15). Там же в пункте 1.15.4 было рассмотрено сечение рассеяния на кулоновском центре и получена формула Резерфорда (1.15.21) для дифференциального сечения рассеяния частиц под углом θ:

$$d\sigma = \left(\frac{Ze^2}{mv^2}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4\theta/2}, \qquad (2.1.1)$$

где m и v — масса и скорость налетающей α-частицы. Формула (2.1.1) справедлива для любого телесного угла $d\Omega$, в который рассеиваются частицы (а не только для «кольца», как было рассмотрено при выводе формулы для сечения в п. 1.15 [1]).

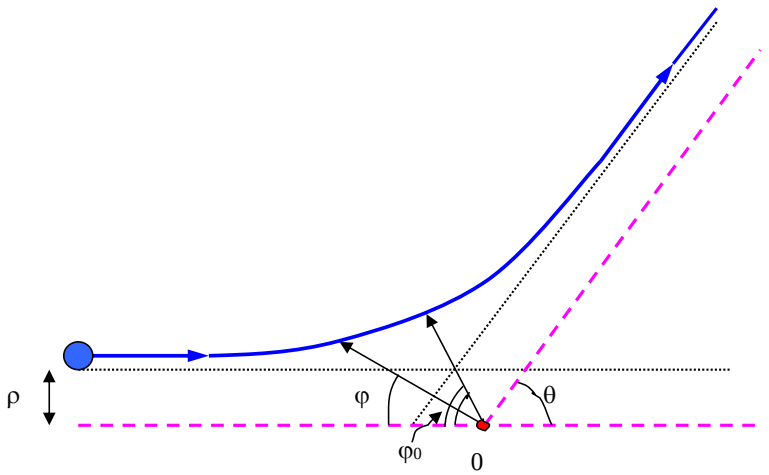


Рис. 2.1.4

Примечание 18. Полное сечение рассеяния равно бесконечности, так как интеграл $\int d\sigma \Rightarrow \infty$, взятый по всем углам рассеяния, расходится. Формула Резерфорда неприменима при малых углах рассеяния.

С экспериментом сравнивалась немного измененная формула (2.1.1). Пусть I — интенсивность пучка α-частиц, т. е. число частиц, проходящих через единичную площадку в единицу времени. Будем считать, что акты рассеяния различными атомами независимы и n — число рассеивателей в единицу объема, а V — рассеивающий объем. Тогда число α-частиц, рассеянных в единицу времени в телесный угол $d\Omega$, равно:

$$dN_\alpha = VnI \cdot d\sigma = VnI\left(\frac{Ze^2}{mv^2}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4\theta/2}. \qquad (2.1.2)$$

Реально вычислялась и сравнивалась с экспериментом следующая величина

$$\frac{dN_\alpha}{d\Omega}\sin^4\frac{\theta}{2} = \text{const}.$$

Эта закономерность была подтверждена в результате анализа измерений.

Отсюда и получила свое обоснование ядерная модель атома Резерфорда. Однако в предложенной модели появились противоречия с классической физикой (электродинамикой), а именно:

1) если система зарядов, состоящая из электронов и ядра, неподвижна, то такая система неустойчива, на что указывала теорема Ирншоу;

2) если заряды движутся в ограниченной размерами атома области, то тогда энергия тратится на излучение и электроны, теряя энергию, должны упасть на ядро.

Эти противоречия указывали на то, что в рамках классической физики такая модель не имеет места.

2.1.2. Оптические спектры атомов

Накаленные твердые тела испускают *сплошные* спектры излучения. У газов наряду со сплошными спектрами наблюдались *линейчатые* и *полосатые* спектры. К 1900 г. было в основном выяснено, что полосатые спектры происходят от излучения молекул, а линейчатые — от атомов и ионов.

Оказалось, что в атомных спектрах линии спектра расположены не хаотически, а в определенной закономерности, они объединялись в группы. Наилучшим образом эти закономерности прослеживались для атома водорода H и в меньшей степени для атомов щелочных металлов. Впервые спектр атома водорода в видимой области был измерен еще в 1862 г. А. Ангстремом. Более детально изучал спектр атома водорода И. Бальмер в 1885 г. и эмпирически записал простую зависимость для определения всех длин волн водородной серии (см. рис. 2.1.5):

$$\lambda = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 4}, \qquad (2.1.3)$$

где λ_0 — некоторая постоянная длина волны, а параметр n принимает следующие целочисленные значения n = 3, 4, 5, ... Можно переписать эту формулу не для длин волн, а для частот линий, пользуясь соотношением $\omega = 2\pi c/\lambda$:

$$\omega = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right). \qquad (2.1.4)$$

Здесь n = 3,4,5,..., а R — постоянная И. Ридберга, которая равна

$$R = 2{,}07\cdot 10^{16} \text{ рад/с}.$$

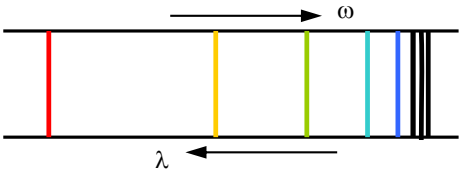


Рис. 2.1.5

Примечание 19. Иногда вводят простую частоту, которую в спектроскопии часто измеряют в обратных сантиметрах:

$$\nu = \frac{1}{\lambda} = R_{\text{Н}}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right),$$

и при этом

$$R_{\text{Н}} = \frac{R}{2\pi c} = 109678.76 \text{ см}^{-1}.$$

Формулы (2.1.3)–(2.1.4) определяют в спектре так называемую серию линий И. Бальмера. В последующие годы в спектре атома водорода были найдены другие серии. Если расположить эти серии в порядке уменьшения частоты, то получим следующую последовательность.

Серия Т. Лаймана (1906 г.):

$$\omega = R\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right), \tag{2.1.5}$$

где n = 2, 3, 4, 5, ...

Серия И. Бальмера (1885 г.):

$$\omega = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right), \tag{2.1.6}$$

где n = 3, 4, 5, ...

Серия Ф. Пашена (1908 г.):

$$\omega = R\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right), \tag{2.1.7}$$

где n = 4, 5, 6, ...

Исходя из этих серий в 1908 г. В. Ритц записал обобщенную формулу Бальмера:

$$\omega = R\left(\frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n^2}\right), \tag{2.1.8}$$

где $n = n_0 + 1$, $n_0 + 2$, $n_0 + 3$, ...

Позже экспериментально были получены также последующие серии спектра атома водорода: серия Брэккета — $n_0 = 4$ (1922 г.), серия А. Пфунда — $n_0 = 5$ (1924 г.).

2.1.3. Боровская теория атома

В 1913 г. Нильс Бор сформулировал постулаты, с помощью которых он определил радиусы орбит и энергии электронных состояний в атоме водо-

рода. Эти постулаты позволили объяснить наблюдаемые оптические спектры, энергетические уровни и стабильность атомов.

1. Электроны движутся в атоме по определенным стационарным орбитам, которые удовлетворяют определенным квантовым условиям. Электрон на этих орбитах не излучает и имеет дискретные значения энергии E_1, E_2, E_3, ... Это *стационарные орбиты*.

2. При переходе из одного стационарного состояния в другое атомы испускают или поглощают излучение строго определенной частоты: $\hbar\omega = E_m - E_n$. Это так называемое *правило частот Бора*.

Бором были предложены правила квантования момента импульса. Для одномерного движения имеем следующее правило квантования:

$$\oint p dq = 2\pi\hbar n, \tag{2.1.9}$$

где n = 1, 2, 3, ...; p — обобщенный импульс; q — обобщенная координата, а интегрирование проводится по всей замкнутой орбите движения.

Яркий пример замкнутого одномерного движения — движение по круговой орбите в центральном поле. Для такого движения обобщенной координатой является угол φ, а обобщенным импульсом p — момент импульса:

$$p_\varphi = mr^2\dot{\varphi} = mvr = \text{const},$$

поскольку при движении в центральном поле сохраняется момент импульса. Тогда из (2.1.9) имеем:

$$\oint p_\varphi d\varphi = mvr \cdot 2\pi = 2\pi\hbar n$$

$$mvr_n = n\hbar. \tag{2.1.10}$$

Это правило квантования круговых орбит, радиус орбиты меняется с изменением целого числа n. Для того чтобы определить радиусы орбит электронов в поле ядра, необходимо добавить к условию квантования (2.1.10) второй закон Ньютона, описывающий движение электрона в поле заряда Ze, т. е. решить систему уравнений:

$$\begin{cases} mvr_n = n\hbar \\ m\dfrac{v^2}{r} = \dfrac{Ze^2}{r^2} \end{cases}. \tag{2.1.11}$$

Решая систему уравнений, получаем радиусы круговых (Боровских) орбит:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2}\frac{n^2}{Z}. \tag{2.1.12}$$

Для атома водорода (Z = 1) радиус 1-й Боровской орбиты определяется (n = 1):

$$r_1 = a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0{,}529\ \text{Å} = 0{,}529 \cdot 10^{-8}\ \text{см}. \tag{2.1.13}$$

Определим энергию электрона в атоме. Полная энергия электрона равна сумме кинетической и потенциальной энергий:

$$E = K + U = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r}. \qquad (2.1.14)$$

Из второго уравнения в системе (2.1.11) выражаем кинетическую энергию $mv^2/2 = Ze^2/2r$, подставляем ее и радиус из (2.1.12) и тогда получаем набор дискретных уровней энергий:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{Z^2}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, ...). \qquad (2.1.15)$$

Отрицательные значения энергии говорят о связанном состоянии электрона в атоме (положительном ионе).

Для атома водорода набор уровней энергии определяется:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \qquad (2.1.16)$$

Итак, получаем бесконечное число дискретных уровней, сгущающихся к значению энергии $E = 0$ (см. рис. 2.1.6).

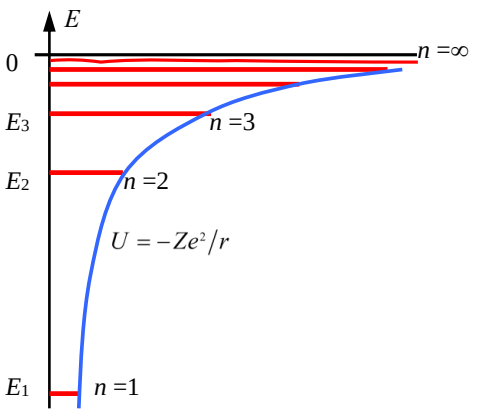


Рис. 2.1.6

Излучение и поглощение света сопровождается переходом электрона с одного уровня на другой (рис. 2.1.7). Энергия излученного кванта определяется разностью энергий этих уровней:

$$\hbar\omega = E_n - E_m. \qquad (2.1.17)$$

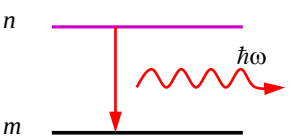


Рис. 2.1.7

При этом частота излучения не связана с частотой обращения электрона вокруг орбиты, как предполагалось ранее. Пользуясь (2.1.16), для частоты излучения получаем обобщенную формулу Бальмера (2.1.8):

$$\omega = \frac{me^4}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n^2}\right),$$

где постоянная Ридберга определяется через мировые константы:

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^3}. \qquad (2.1.18)$$

Можно определить скорость движения электрона по орбите:

$$v_n = \frac{e^2}{\hbar n} = \alpha\frac{c}{n}, \qquad (2.1.19)$$

где $\alpha = e^2/c\hbar \approx 1/137$ — постоянная тонкой структуры.

2.1.4. Опыты Д. Франка и Г. Герца

Эти эксперименты были начаты Дж. Франком и Г. Герцем до выдвижения теории Бора с целью получить потенциал ионизации атомов, однако именно они привели к подтверждению постулатов Н. Бора.

Схема эксперимента представлена на рисунке 2.1.8. Франк и Герц рассматривали прохождение ускоренных электронов через пары ртути (плотностью 1 мм рт. ст.). Ускоряющая разность потенциалов U_{CK} прикладывалась между катодом (К) и сеткой (С), которая менялась и измерялась вольтметром (V). Разность потенциалов между сеткой и анодом (А) — задерживающая, но малая по величине U_{AC} = –0,5 В.

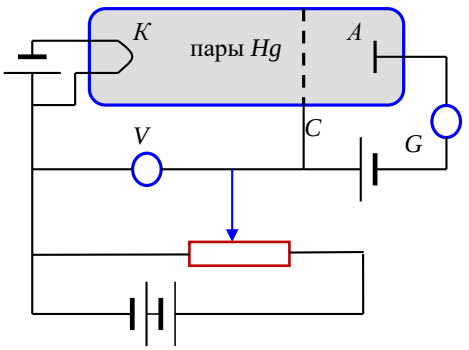


Рис. 2.1.8

Быстрые электроны преодолевают задерживающий потенциал и попадают на анод и дают вклад в электронный ток (измеряемый гальванометром G). Электроны малых энергий задерживаются и не попадают на анод.

Если бы в баллоне был вакуум, то вольтамперная характеристика имела бы вид, изображенный на рисунке 2.1.9. Закон $U^{3/2}$ на начальном этапе зависимости возникает из-за пространственного заряда вблизи катода.

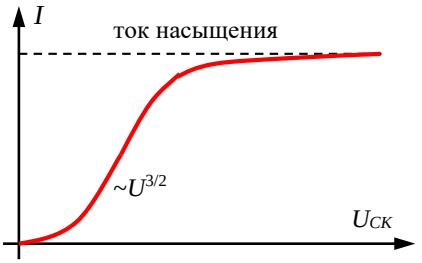


Рис. 2.1.9

При наличии ртутных паров на эксперименте были получены резкие максимумы и минимумы. Примерная экспериментальная картина для зависимости тока от разности потенциалов изображена на рисунке 2.1.10. Объяснение такой зависимости следующее: начальный рост кривой объясняется тем, что с ростом потенциала U_{CK} все большее число электронов достигает анода, и при этом они испытывают только упругие столкновения с атомами ртути, поскольку им не хватает кинетической энергии на возбуждение атомов ртути. При достижения электронами энергии E = 4,9 эВ появляется возможность неупругого соударения с одновременным возбуждением атомов ртути. При потере этой энергии на возбуждение атомов электроны не в состоянии преодолеть задерживающий потенциал и ток падает. Дальнейший рост тока объясняется тем, что при достаточном увеличении ускоряющего потенциала электроны могут после первого неупругого столкновения и потери энергии набрать достаточную энергию, чтобы преодолеть задерживающий потенциал. Ток снова падает, когда электрон вторично набирает энергию в 4.9 эВ и снова испытывает неупругое столкновение с потерей кинетической энергии.

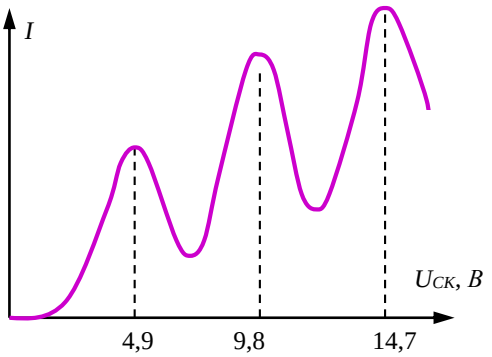


Рис. 2.1.10

Эти эксперименты показали, что атомы имеют дискретную энергетическую структуру, т. е. не могут принять любую энергию, а только ту, которая соответствует разности энергетических уровней.

Примечание 20. Список имен упомянутых в этом пункте физиков, внесших огромный вклад в развитие физики XIX–XX вв.

Джон Дальтон, английский физик и химик, 1766–1844.

Амедео Авогадро, итальянский физик и химик, 1776–1856.

Йенс Якоб Берцелиус, шведский химик, 1779–1848.

Дмитрий Иванович Менделеев, русский ученый, 1834–1907, профессор Петербургского университета.

Вильгельм Конрад Рентген, немецкий физик, 1845–1923, первая Нобелевская премия в 1901 г. за открытие X-лучей.

Антуан Анри Беккерель, французский физик, 1852–1908, Нобелевская премия 1903 г. за открытие явления естественной радиоактивности урана.

Джозеф Джон Томсон, английский физик, 1856–1940, Нобелевская премия 1906 г. за открытие электрона.

Пьер Кюри, французский физик, 1859–1906, Нобелевская премия 1903 г. за исследования радиоактивности и открытие радия.

Эрнест Резерфорд, английский физик, 1871–1937, Нобелевская премия по химии 1908 г. за исследования по превращению элементов.

Мария Склодовская-Кюри, польский и французский физик и химик, 1867–1934, Нобелевская премия 1903 г. за исследования радиоактивности и открытие радия и 1911 г. по химии за получение радия в металлическом состоянии.

Филипп Эдуард Антон Леннард, немецкий физик, 1862–1947, Нобелевская премия 1905 г. за исследование катодных лучей.

Жан Батист Перрен, французский физик, 1870–1942, Нобелевская премия в 1926 г.

Нильс Хендрик Давид Бор, датский физик-теоретик, 1885–1962, Нобелевская премия 1922 г. за создание квантовой теории планетарного атома.

Ханс Вильгельм Гейгер, немецкий физик, 1882–1945.

Эрнест Марсден, новозеландский физик, 1889–1970.

Джеймс Франк, немецкий физик, 1882–1964, Нобелевская премия 1925 г. за установление закономерностей в столкновениях электронов с атомами.

Густав Людвиг Герц, немецкий физик, 1887–1975, Нобелевская премия 1925 г. за установление закономерностей в столкновениях электронов с атомами.

О физиках-оптиках:

Андерс Ионас Ангстрем, шведский физик, 1814–1874.

Иоганн Якоб Бальмер, швейцарский физик, 1825–1898.

Иоганнес Роберт Ридберг, шведский физик, 1854–1919.

Теодор Лайман, американский физик, 1874–1954.

Фридрих Пашен, немецкий физик, 1865–1947.

Вальтер Ритц, швейцарский физик-теоретик, 1878–1909.

Август Герман Пфунд, американский физик, 1879–1949.

2.2. Волны де Бройля

2.2.1. Гипотеза де Бройля

В главе 1 мы рассматривали корпускулярные свойства излучения, или, иначе, как называли ранее, *дуализм* электромагнитных волн: «волна — частица». В 1924 г. Луи де Бройль выдвинул гипотезу, что *корпускулярно-волновой дуализм* не является особенностью только оптических явлений (т. е. электромагнитных волн), а носит универсальный характер. Он предположил, что материальные частицы должны проявлять волновые свойства.

К этой гипотезе его привела аналогия между геометрической оптикой и механикой Ньютона, которая еще ранее была замечена У. Гамильтоном. В самом деле, их основные законы математически представляются в одинаковой форме: движение частицы в поле с потенциалом $V(x,y,z)$ можно представить как движение световых лучей в среде с соответственно выбранным показателем преломления $n(x,y,z)$. Однако геометрическая оптика описывает далеко не все оптические явления, также как механика Ньютона — не все механические явления. Идея Луи де Бройля состояла в следующем: следует расширить аналогию механики и оптики, а именно волновой оптике сопоставить волновую механику.

Луи де Бройль перенес правила перехода от корпускулярной картины света к волновой и на частицы. Запишем эти правила перехода для волн и частиц.

Свет (электромагнитная волна)	**Частицы (например, электроны)**
Частота ω	Энергия E
Волновой вектор $\vec{k}$	Импульс $\vec{p} = m\vec{v}$
Длина волны $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi c}{\omega}$	
Переход к фотонам	**Переход к волнам**
Энергия $E = \hbar\omega$	Частота $\omega = E/\hbar$
Импульс $\vec{p} = \hbar\vec{k} = \left(\frac{\vec{\hbar\omega}}{c}\right)$	Длина волны $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mv}$
	Волновой вектор $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$

Итак, в рамках этой гипотезы движению частицы массы m со скоростью v можно сопоставить волновой процесс с длиной волны λ, равной

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{2\pi\hbar}{p}, \tag{2.2.1}$$

где импульс p — релятивистский импульс:

$$\vec{p} = \frac{m_0\vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \tag{2.2.2}$$

Здесь m_0 — масса покоя, а $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$ — релятивистская масса. Длина волны, определяемая из (2.2.1), — это *длина волны де Бройля*.

Далее продолжая сопоставление волн и частиц, можно получить волновой вектор для частицы:

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}. \qquad (2.2.3)$$

Более того, функцию, определяющую распространение свободных монохроматических волн и движение свободных частиц можно записать аналогичным образом. Для описания монохроматической электромагнитной волны имеем следующую математическую запись

$$\psi = A\cos\left(\omega t - \vec{k}\vec{r}\right)$$

или в комплексной форме

$$\psi\left(\vec{r},t\right) = Ae^{-i\left(\omega t - \vec{k}\vec{r}\right)},$$

где $\psi\left(\vec{r},t\right)$ означает либо напряженность электрического поля, либо напряженность магнитного поля.

Для свободной частицы записываем по аналогии

$$\psi = Ae^{-i\left(\omega t - \vec{k}\vec{r}\right)} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}\left(Et - \vec{p}\vec{r}\right)}. \qquad (2.2.4)$$

Проводя такую аналогию, необходимо теперь понять, каково физическое содержание функции $\psi\left(\vec{r},t\right)$ из (2.2.4) и что она дает для описания частицы.

2.2.2. Свойства волн де Бройля

Определим основные свойства волн де Бройля, исходя из соотношений для обычных волн.

1. Фазовая скорость волн де Бройля определяется как обычно:

$$v_{\text{ф}} = \frac{\omega}{k}.$$

Для электромагнитных волн мы получали: $v_{\text{э/м}} = c$ или $v_{\text{э/м}} = c/\sqrt{\varepsilon\mu} = c/n$. Для частиц поступаем аналогично:

$$v_{\text{ф}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{m_0c^2}{m_0v} = \frac{c^2}{v}, \qquad (2.2.5)$$

где v — скорость частицы. Поскольку скорость частицы всегда меньше скорости света, то *фазовая скорость волн де Бройля всегда больше скорости света*:

$$v_{\text{ф}} = \frac{c^2}{v} > c.$$

Это не противоречит физическому смыслу, поскольку фазовая скорость не определяет скорость распространения материального объекта (вспомним рассуждения в разделе СТО [1]).

2. Групповая скорость волн де Бройля определяется также аналогично групповой скорости электромагнитных волн. Она получалась из условия постоянства фазы амплитуды огибающей при сложении двух волн с близкими частотами и определялась из соотношения

$$v_{\text{гр}} = d\omega / dk .$$

Для частиц получаем

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = v, \qquad (2.2.6)$$

что *групповая скорость волн де Бройля совпадает со скоростью самой частицы*. В самом деле, вспомним, что производная энергии по импульсу определяет скорость частицы:

$$\frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp}\sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} = \frac{pc^2}{\sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2}} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{mc^2} = \frac{p}{m} = v .$$

Или это же можно получить иначе:

$$\frac{dE}{dp} = \frac{Fds}{dp} = \frac{\frac{dp}{dt}ds}{dp} = \frac{ds}{dt} = v .$$

Произведение фазовой скорости (2.2.5) на групповую скорость (2.2.6) дает квадрат скорости света:

$$v_{\text{гр}} v_{\text{ф}} = c^2. \qquad (2.2.7)$$

Отметим, что физический смысл волн де Бройля был понят не сразу. На основании факта, что групповая скорость равна скорости частицы, некоторое время частицу считали образованием волн де Бройля. Иначе говоря, считали, что волны первичны, а частицы представляют собой их образования — пакеты волн. Однако оказалось, что не так все просто: при такой интерпретации и подобном описании появляются явные противоречия. Приведем некоторые противоречия и следствия из такой интерпретации.

А. Фазовая скорость волн де Бройля зависит от скорости частицы v, т. е. зависит от волнового числа k или длины волны λ. Поскольку пакет волн — это суперпозиция монохроматических волн с различными λ, то волны де Бройля испытывают дисперсию в пустоте. Из-за этого пакет волн де Бройля расплывается с течением времени. Однако мы знаем из опыта, что частицы живут весьма долго, не расплываются и детектируются на эксперименте как частицы определенных размеров. Позже к дисперсии волн де Бройля мы вернемся позже, когда будем говорить о соотношении неопределенностей.

Б. Если считать частицы волнами де Бройля, то тогда они должны испытывать дифракцию. Их можно пустить на дифракционную решетку (или

кристалл) и разложить волновой пакет на составляющие его волны, что приводит к уничтожению частицы. Это также противоречит опыту.

В дальнейшем обсудим интерпретацию и смысл волн де Бройля и разрешим эти противоречия.

3. Интересна связь между волнами де Бройля и стационарными орбитами. Из условия квантования Бора для круговых орбит (2.1.10) можно найти связь между стационарными орбитами и длинами волн де Бройля. В самом деле, имеем:

$$r = \frac{n\hbar}{mv} = \frac{n}{2\pi}\frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{n}{2\pi}\lambda\,,$$

$$2\pi r = n\lambda\,. \qquad (2.2.8)$$

Последнее равенство означает, что на длине окружности орбиты укладывается целое число длин волн де Бройля, т. е. получаем стоячую волну на электронной орбите, которая не переносит и не излучает энергию. Таким образом, получаем красивую интерпретацию стационарных состояний в атомах: им соответствует образование стоячих волн де Бройля, в которых, как известно, энергия не излучается.

Примечание 21. Луи де Бройль, французский физик-теоретик, 1892–1987, Нобелевская премия 1929 г. за открытие волновой природы электрона.

Уильям Роуан Гамильтон, ирландский физик и математик, 1805–1865.

2.3. Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля

2.3.1. Длина волны электрона

Все, о чем говорилось в предыдущем параграфе, остается только предположениями, поскольку доказательством существования таких волн может служить только эксперимент. Самые яркие явления, характеризующие существование и распространение волны, — это явления интерференции и дифракции, в которых наблюдаемой величиной по сути дела является длина волны λ. Впервые такие эксперименты по исследованию волновых свойств частиц были поставлены с электронами, а позже и для других, более тяжелых частиц.

Оценим возможные значения длины волн де Бройля в реальных условиях. Пусть электроны разгоняются в вакуумной трубке и проходят некоторую разность потенциалов U, причем ограничимся нерелятивистским случаем. Тогда кинетическая энергия электрона равна $E = eU = \frac{1}{2}mv^2$, а импульс — $p = \sqrt{2meU}$. Такой электрон обладает длиной волны де Бройля равной:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}}\,. \qquad (2.3.1)$$

Если длину волны измерять в Ангстремах, а разность потенциалов в Вольтах, то формула (2.3.1) приобретает вид

$$\lambda = \frac{12,25}{\sqrt{U}}. \qquad (2.3.2)$$

Итак, если электрон прошел разность потенциалов U = 10 В, то его длина волны $\lambda \approx 3,9$ Å. Если U = 100 В, то $\lambda \approx 1,2$ Å, и если U = 200 В, то $\lambda \approx 0,86$ Å. При таких условиях длины волн электронов примерно такие же, как длины волн рентгеновского излучения. Поэтому эксперимент по дифракции таких электронов можно ставить в тех же условиях, как для рентгеновских лучей, и использовать в качестве дифракционной решетки — кристалл.

Учитывать релятивистский характер движения электронов необходимо, начиная с разности потенциалов $U = 10^5$–10^6 Вольт. В самом деле, при этом длина волны де Бройля определяется

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{m_0 v}\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}, \qquad (2.3.3)$$

а кинетическая энергия электрона равна

$$eU = m_0c^2\left(\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}-1\right) = \left(\sqrt{p^2c^2+m_0^2c^4}-m_0c^2\right).$$

Из этих соотношений можно получить точную формулу для длины волны де Бройля:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0eU\left(1+eU/2m_0c^2\right)}}, \qquad (2.3.4)$$

а затем и приближенную формулу для определения длины волны (U в Вольтах, λ в Ангстремах):

$$\lambda = \frac{12,25}{\sqrt{U}}\left(1-0,489\cdot 10^{-6}U\right).$$

В таблице сравниваются длины волн электрона, полученные в нерелятивистском и релятивистском приближениях для различных ускоряющих разностей потенциалов U.

U (Вольт)	1	100	10^3	$4\cdot10^4$	10^5	10^6
λ (нерел.) (Å)	12,25	1,225	0,39	0,061	0,039	0,012
λ (рел.) (Å)			0,39	0,059	0,037	0,008

Из этой таблицы видно, при каких ускоряющих потенциалах для электронов необходимо учитывать релятивистские эффекты.

2.3.2. Опыты Девиссона и Джермера по дифракции электронных волн

Еще в 1921–1923 гг. К. Дэвиссон наблюдал при рассеянии пучка электронов на различные углы явление похожее на дифракцию, но тогда эти особенности не получили должного внимания и объяснения. Позже К. Дэвиссон и Л. Джермер использовали метод Вульфа — Брэгга для исследования *дифракции электронов*.

Примерная схема эксперимента изображена на рисунке 2.3.1.

Параллельный пучок электронов одинаковой скорости направлялся на монокристалл никеля Ni, а рассеянные электроны фиксировались коллектором (цилиндр Фарадея) под разными углами. Фиксировались в основном упруго отраженные электроны, неупруго рассеянные отсекались слабо отрицательным задерживающим потенциалом.

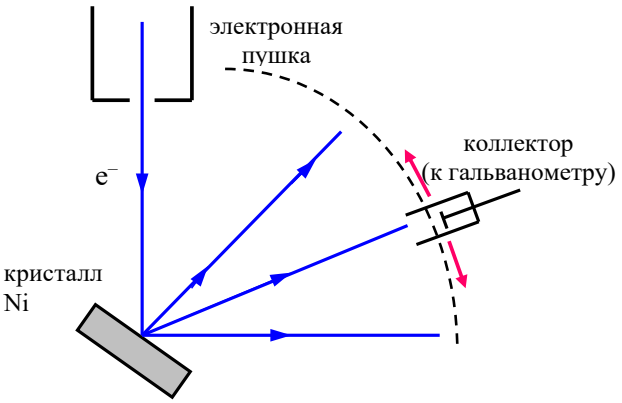


Рис. 2.3.1

При разных ускоряющих потенциалах U были получены угловые зависимости — полярные диаграммы (см. рис. 2.3.2). На этих диаграммах сила тока в гальванометре пропорциональна отрезку прямой, соединяющей в диаграмме начало координат и точку на измеренной кривой. Наблюдалось различное количество рассеянных электронов в зависимости от угла рассеяния θ и от ускоряющей разности потенциалов U. При этом при определенном угле появлялся максимум в угловом распределении, величина которого менялась с изменением U, т. е. с длиной волны де Бройля.

Монокристалл никеля — это кристалл кубической системы, он был отшлифован вдоль плоскости с миллеровскими индексами (111). Пучок электронов падал перпендикулярно к этой плоскости, однако в методе Вульфа — Брэгга используется отражение от различных слоев кристалла. Так, в объеме кристалла никеля находились отражающие слои на расстоянии d = 0,215 нм друг от друга (см. рис. 2.3.3). Максимум отражения электронов наблюдался под углом 50° (наиболее сильно выражено при ускоряющем потенциале U = 54 В). Условие появления этого максимума определяется формулой Вульфа — Брэгга:

$$2d\sin\varphi = m\lambda, \quad (m = 1,2,3,...), \qquad (2.3.5)$$

где φ — угол скольжения пучка. Так как длина волны де Бройля определяется из формулы (2.3.2), то, подставляя ее в (2.3.5), получаем соотношение (где d и λ в Ангстремах, U в Вольтах):

$$\sqrt{U} = m\frac{12{,}25}{2d\sin\varphi}. \qquad (2.3.6)$$

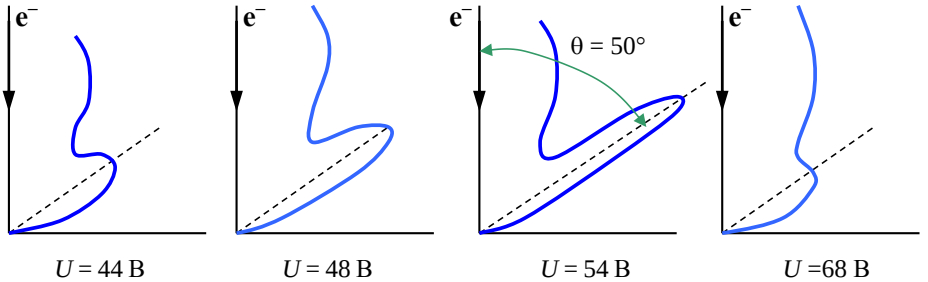


Рис. 2.3.2

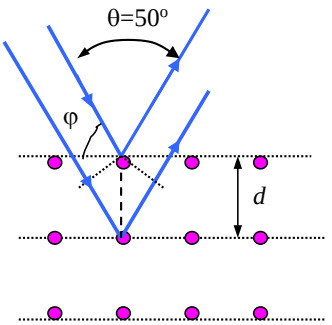


Рис. 2.3.3

Из этого соотношения видно, что дифракцию электронов можно наблюдать двумя способами.

<u>Способ (**1**)</u>: ускоряющую разность потенциалов U и длину волны λ держать постоянными, а менять угол φ, поворачивая кристалл или коллектор.

<u>Способ (**2**)</u>: держать постоянным угол скольжения φ, а менять разность потенциалов U или, что то же, длину волны де Бройля λ.

Во втором случае полученные кривые имеют несколько максимумов, которые соответствуют различным значениям m в формуле Вульфа — Брэгга (см. рис. 2.3.4). Теория дает равноотстоящие максимумы, что следует из формулы (2.3.6). Если на этом же рисунке 2.3.4 отложить вычисленные по формуле (2.3.6) значения числа m, то для малых величин m получаются систематические отклонения расчетных значений m от экспериментальных положений максимумов.

Причина этого отклонения была объяснена и затем устранена Г. Бете. Для согласования с экспериментом электронным волнам необходимо приписать показатель преломления, как и в интерференции световых волн:

$$n = \frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{v_ф}{v'_ф} = \frac{\cos\varphi}{\cos\varphi'}, \qquad (2.3.7)$$

где λ, λ' и $v_ф$, $v'_ф$ — длины волн и фазовая скорость в вакууме и внутри кристалла, соответственно. Фазовая скорость в вакууме определяется:

$$v_ф = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2mE_k}}. \qquad (2.3.8)$$

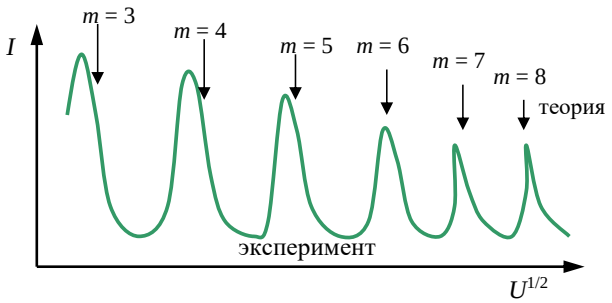


Рис. 2.3.4

Здесь рассматриваем нерелятивистский случай $E_k = \frac{1}{2}mv^2$.

Энергетическая диаграмма при прохождении электрона в металле представлена на рисунке 2.3.5, где E_F — энергия Ферми, A — работа выхода, W_0 — глубина потенциальной ямы ($W_0 < 0$). Откуда фазовая скорость в металле определяется из соотношения:

$$v'_ф = \frac{E}{\sqrt{2m(E_k - W_0)}}. \qquad (2.3.9)$$

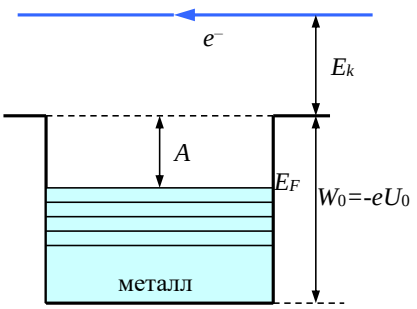


Рис. 2.3.5

Тогда коэффициент преломления равен:

$$n = \frac{v_ф}{v'_ф} = \sqrt{1 - \frac{W_0}{E_k}}. \qquad (2.3.10)$$

Если ввести внутренний потенциал металла U_0 как

$$U_0 = -W_0/e,$$

а кинетическую энергию записать через ускоряющую разность потенциалов $E_k = eU$, то для относительного показателя преломления получаем

$$n = \sqrt{1 + \frac{U_0}{U}}\,. \qquad (2.3.11)$$

Показатель больше единицы ($n > 1$). Тогда разность хода, определяемая условием Вульфа — Брэгга, становится аналогичной разности хода оптического луча для тонкой пленки $2d\sqrt{n^2 - \sin^2\theta} = m\lambda$, где θ — угол падения луча (см. рис. 2.3.6). В самом деле, подставляя угол скольжения, имеем

$$2d\sqrt{n^2 - \cos^2\varphi} = m\lambda. \qquad (2.3.12)$$

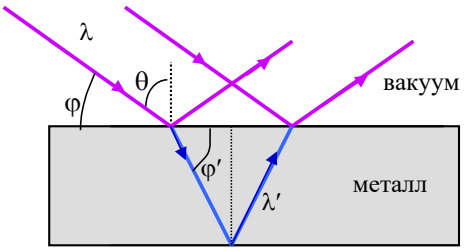


Рис. 2.3.6

После учета показателя преломления в среде для волн де Бройля было получено полное согласие с экспериментом. Из экспериментов по дифракции электронов можно получить внутренний потенциал металлов U_0.

2.3.3. Опыты Томсона и Тартаковского

Начиная с 1928 г. Д. П. Томсоном и независимо П. С. Тартаковским проводились измерения дифракции электронов методом Дебая — Шерера. Ранее П. Дебай и П. Шеррер разработали методику для получения дифракции рентгеновских лучей.

В методе Дебая — Шерера Томсон использовал поликристаллические пленки (толщиной 10^{-5}...10^{-6} см) или порошки. Монохроматический пучок электронов создавался при ускорении электростатическим потенциалом $U \sim 17{,}5$–$56{,}5$ кВ, при этом соответствующие длины волн де Бройля находятся в диапазоне $\lambda \sim 0{,}092$–$0{,}052$ нм. Электроны проходили через пленку, рассеивались и попадали на фотопластинку (рис. 2.3.7). Поликристалл — множество беспорядочно ориентированных кристалликов. При фиксированной длине волны λ среди множества кристалликов находятся такие, при отражении от которых выполняется условие Вульфа — Брэгга:

$$2d\sin\varphi = m\lambda\,.$$

Здесь, как и ранее, φ — угол скольжения пучка. Совокупность малых кристалликов с определенной ориентировкой симметрична относительно направления падающего пучка, вследствие этого на экране наблюдаются кольца. Зная диаметр колец D и расстояние до экрана L можно найти расстояние между слоями кристаллической решетки d:

$$d \cdot \frac{D}{2L} = m\lambda . \qquad (2.3.13)$$

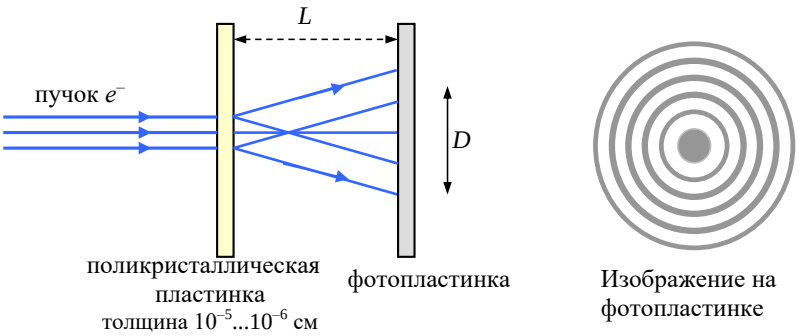


Рис. 2.3.7

Эксперимент показал ожидаемую дифракционную картину, что независимо подтвердило существование волновых свойств электрона.

Тартаковский рассматривал рассеяние более медленных электронов на алюминиевой фольге при постоянном угле рассеяния. Меняя скорость электронов, он получил ряд максимумов, появляющихся при выполнении условия Вульфа — Брэгга.

2.3.4. Дифракция атомов и молекул, нейтронов

Частицы более тяжелые, чем электроны, также обладают волновыми свойствами, которые характеризуются определенными длинами волн де Бройля. Следовательно, можно попытаться наблюдать их дифракцию.

О. Штерн в 1930 г. наблюдал *дифракцию легких атомов и молекул*, а именно He и H_2. Легкие атомы и молекулы нужны для того, чтобы их длина волны де Бройля была достаточна велика для наблюдения явления дифракции. Так при комнатной температуре длина волны атома гелия равна λ_{He} ~ ~ 0,1 нм, т. е. порядка постоянной кристаллической решетки.

Схема опыта показана на рисунке 2.3.8. Пучок атомов бросается на кристалл, и отраженные атомы фиксируются чувствительным манометром. Чтобы избавиться от теплового разброса скоростей используется селектор скоростей (зубчатое колесо, как в оптических экспериментах Физо).

Кристалл действует на пучки атомов как плоская двухмерная отражательная решетка. В картине углового распределения дифрагированных атомов наблюдается большой максимум под углом отражения, равным углу падения, а при других углах — вторичные максимумы (см. рис. 3.9). Отметим, что положение вторичных максимумов меняется с температурой падающих атомов, т. е. с длиной волны λ.

Дифракция нейтронов в настоящее время используется для целей рентгеноструктурного анализа вещества. Для наблюдения дифракции нейтронов чаще всего используется метод М. Лауэ, хотя дифракция может наблюдаться и в методах Вульфа — Брэгга, Дебая — Шеррера.

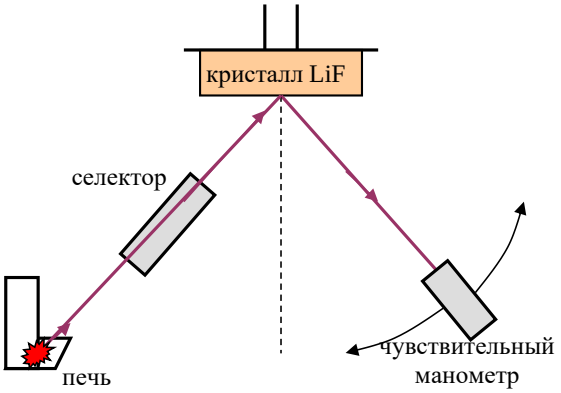


Рис. 2.3.8

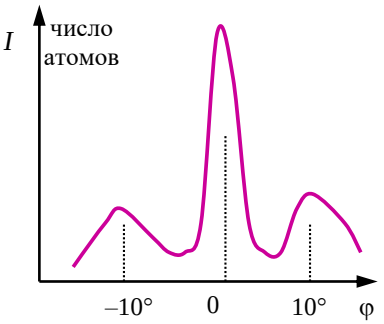


Рис. 2.3.9

Для регистрации нейтронов используются ядерные реакции. В методе Лауэ в качестве налетающих частиц используется «белый» пучок тепловых нейтронов, который падает на монокристалл. На экране за монокристаллом (рис. 2.3.10) проявляются дифракционные максимумы в виде пятен Лауэ: центральное пятно и система симметричных пятен вокруг центрального.

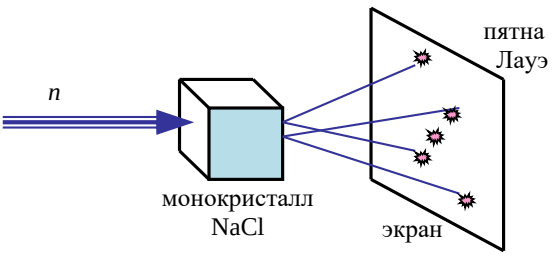


Рис. 2.3.10

Итак, можно сделать вывод, что явление дифракции имеет всеобщий характер, т. е. волновые свойства присущи всем материальным объектам.

Примечание 22. Клинтон Джозеф Дэвиссон, американский физик, 1881–1958, Нобелевская премия 1937 г. за экспериментальное подтверждение волновых свойств материи.

Лестер Халберт Джермер, американский физик, 1896–1971.

Георгий Викторович Вульф, русский-советский физик, 1863–1925.

Лоуренс Брэгг, английский физик, 1890–1971, Нобелевская премия 1915 г.

Ханс Альбрехт Бете, немецкий и американский физик-теоретик, 1906–2005 гг., Нобелевская премия 1967 г. за открытие циклов термоядерных реакций, являющихся источником энергии звезд.

Джордж Паджет Томсон, английский физик, 1892–1975, Нобелевская премия 1937 г. за открытие волновой природы электрона.

Петер Йозеф Вильгельм Дебай, швейцарско-немецкий физик, 1884–1966, Нобелевская премия по химии 1936 г.

Пауль Шерер, швейцарский физик, 1890–1970.

Тартаковский Петр Саввич, советский физик 1895–1940, работал в ФТИ, в Томске, в ЛПИ.

Отто Штерн, немецкий физик, 1888–1969, Нобелевская премия 1943 г. за развитие молекулярно-лучевого метода и открытие магнитного момента протона.

Макс Феликс Теодор фон Лауэ, немецкий физик-теоретик, 1879–1960, Нобелевская премия 1914 г. за открытие дифракции рентгеновских лучей.

2.4. Статистическое толкование волн де Бройля и соотношение неопределенностей

2.4.1. Волны вероятности

В п. 2.2 отмечалось, что из равенства групповой скорости волн де Бройля и скорости частицы, было заманчиво предполагать, что частица — это волновые образования, т. е. пакет волн де Бройля. Однако от этого положения довольно быстро отказались, поскольку такая «частица» получается нестабильной и за время порядка 10^{-24} с расплывается из-за дисперсии волн де Бройля в вакууме. Кроме того, в результате интерференции и дифракции волн такие частицы должны также делиться или разрушаться.

Что же такое представляют собой волны де Бройля, описываемые функцией $\psi(\vec{r},t)$?

Рассмотрим интерференционный опыт (см. рис. 2.4.1): пучок электронов направляется на экран с двумя щелями. На некотором расстоянии от щелей на другом экране измеряется число электронов, попавших в различные точки экрана. Пучок может быть такой малой интенсивности, что электроны летят и падают на экран со щелями поочередно. Это делалось для того, чтобы понять обладает ли единичный электрон волновыми свойствами.

Прямые измерения с «единичными» электронами — пучками малой интенсивности — были проведены в 1949 г. Л. М. Биберманом, Н. Г. Сушкиным и В. А. Фабрикантом: пучок электронов слабой интенсивности направлялся на дифрагирующий объект. В качестве последнего брались кристаллики окиси магния, нанесённые на коллоидную плёнку. С помощью таких кристаллов получали дифракционную картину. Есть сведения, что эти же авторы проводили также эксперименты по дифракции слабого пучка электронов на двух щелях и также получили дифракцию. (Однако часть физиков не признает достоверность измерений, проведенных этими авторами.)

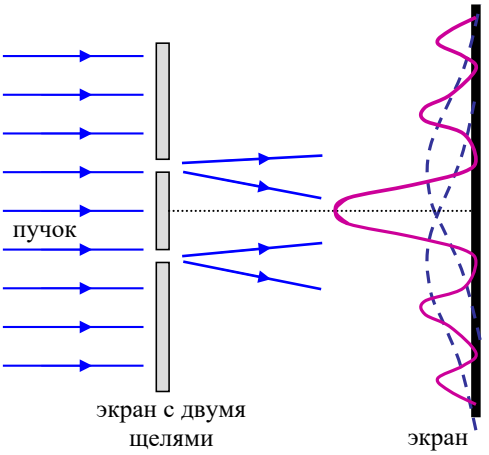


Рис. 2.4.1

В 1961 г. эксперименты по дифракции электронов на двух щелях были проведены Йёнсеном, а еще позже была получена дифракционная картина от одной до пяти щелей (см. публикацию C. Jönsson, D. Brandt, S. Hirschi. Electron diffraction at multiple slits // Am. J. Phys. 1974. Vol. 42. P. 4–11).

Существовавшая ранее точка зрения, что волновые свойства проявляются и существуют в среде с большим числом частиц (электронов), оказалась неверной. Оказалось, что даже единичные электроны, когда взаимодействие между электронами не играет никакой роли, дают интерференционную картину. Отсюда следует вывод: *отдельные электроны обладают волновыми свойствами*.

Если закрывать одну или другую щель, то получаем на экране расширенное изображение щели — пунктир на рисунке 2.4.1. Но когда падают одиночные электроны на обе открытые щели, то получаем интерференционную картину.

Однако электрон не делится: он проходит либо через одну, либо через другую щель. Если поставим счетчик на фиксирующем экране, то он «срабатывает» в определенном месте от «целого» электрона и никакой интерференции не увидим. Просто следующий электрон будет зафиксирован в другом месте, за ним другой снова в другом месте и т. д. И там, где амплитуда волнового поля максимальна, там чаще будут регистрироваться электроны, там вероятность нахождения электрона максимальна. Иногда говорят, что, как и в случае фотона, электрон интерферирует сам с собой, если не фиксировать его пролет через определенную щель.

Вероятность всегда связывают с квадратом модуля амплитуды волны $|A|^2$. Сама амплитуда имеет различные знаки (плюс-минус), и она является неудобной характеристикой для описания интенсивности поля.

Исходя из этого, М. Борном была предложена статистическая интерпретация волн де Бройля. Волны де Бройля следует рассматривать как волны вероятности.

Интенсивность волн де Бройля в данный момент времени и в данном месте определяет вероятность обнаружить частицу в данное время и в данном месте. А интенсивность волн пропорциональна квадрату амплитуды.

Но статистические свойства частицы могут быть проверены на опыте не с одной частицей, а лишь со многими частицами (или с одной, если он может быть повторен многократно). То есть могут быть проверены при использовании «квантового ансамбля» — большого числа тождественных частиц.

Итак, при прохождении щелей однозначно предсказать, куда попадет электрон, невозможно. Можно лишь определить вероятность этого попадания. Пусть $\psi(\vec{r},t)$ дает амплитуду волн де Бройля или, иначе говоря, $\psi(\vec{r},t)$ — волновая функция, описывающая поведение частицы. Для свободной частицы мы ее уже знаем — это плоская волна:

$$\psi(\vec{r},t) = A \cdot \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left(Et - \vec{p}\vec{r}\right)\right\}. \qquad (2.4.1)$$

Вероятность обнаружить частицу в какой-либо точке пространства $\vec{r}$ и в момент времени t равна:

$$W \sim \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 = \psi^*\psi. \qquad (2.4.2)$$

Для свободной частицы получаем вероятность, не зависящую от координат и времени $W \sim |A|^2$, т. е. в любом месте пространства нахождение частицы равновероятно.

Если частица находится в силовом поле, то волновая функция частицы $\psi(\vec{r},t)$ не есть плоская волна, однако и в этом случае волновая функция дает амплитуду вероятности, причем можно записать $dW \sim \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2$ или более точно:

$$dW(\vec{r},t) = \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 dV, \qquad (2.4.3)$$

где dW — вероятность обнаружить частицу в элементе объема dV. Плотность вероятности записывается обычным образом:

$$w = \frac{dW}{dV} = \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2. \qquad (2.4.4)$$

Сама волновая функция — ненаблюдаемая величина, она рассматривается как вспомогательная величина. Физический смысл связывается с квадратом ее модуля: $\psi^*\psi$.

Если частица существует, то где-то она с достоверностью находится, следовательно, должно выполняться условие нормировки:

$$\int dW = \int \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 dV = 1. \qquad (2.4.5)$$

Отметим, что в некоторых случаях такая нормировка невозможна, например, как в случае свободной частицы. В этом случае волновые функции нормируют другим способом.

Примечание 23. Валентин Александрович Фабрикант, советский физик, 1907–1991.

Леонид Михайлович Биберман, советский и российский физик, член-корреспондент РАН, 1915–1998.

Николай Гаврилович Сушкин, советский и российский физик-изобретатель, 1911.

Макс Борн, немецкий физик-теоретик, 1882–1970, Нобелевская премия 1954 г. за статистическую интерпретацию волновой функции.

2.4.2. Соотношение неопределенностей

В 1927 г. В. Гейзенбергом было получено соотношение неопределенностей.

Свободная частица — нелокализованная частица, ее волновая функция определяется формулой (2.4.1) и плотность вероятности равна постоянной величине $|A|^2$. Частицу можно локализовать, если описывать ее пакетом волн. Рассмотрим волновой пакет частицы, локализованной по оси x, при этом амплитуда отлична от 0 на отрезке Δx (см. рис. 2.4.2):

$$\psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} a(k)\cos\{\omega(k)t - kx\}\,dk\,. \qquad (2.4.6)$$

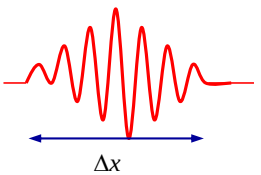


Рис. 2.4.2

Соотношение (2.4.6) представляет собой разложение локализованной функции по волнам с определенной частотой. Итак, локализация частицы описывается пакетом или суперпозицией волн де Бройля.

Вспомним, что, изучая оптику ([4], п. 1.8), для пакета волн мы получали следующее соотношение неопределенностей:

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq 1 \qquad (2.4.7)$$

или

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq 2\pi\,.$$

Здесь Δx — ширина пакета, а Δk — разброс волновых чисел тех волн, суперпозиция которых образует данный пакет. Пример с цугом волны и выводом соотношения неопределенностей был ранее разобран в указанном выше разделе «Оптика» [4], еще один подобный пример приведен Приложении 3.

Тогда для волнового пакета частицы, умножая (2.4.7) на постоянную Планка $\hbar$, получаем соотношение неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar\,, \tag{2.4.8}$$

где Δx — неопределенность координаты частицы, Δp_x — неопределенность проекции импульса на ось x. Их произведение не может быть меньше постоянной Планка $\hbar$. При рассмотрении конкретных примеров в правой части неравенства (2.4.8) могут стоять различные значения, такие как $h = 2\pi\hbar$, $4\pi\hbar$ и т. д. Это зависит от того, как определяем величины неопределенностей Δx и Δp_x. Физически это означает, что *чем точнее пытаемся определить положение* (*координату*) *микрочастицы, тем менее определенным является ее импульс и наоборот*.

Однако если под неопределенностью понимать строгое определение ее как среднеквадратичные отклонения физических величин от их среднего значения, т. е. следующие определения:

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle} = \sqrt{\left\langle \left(x - \langle x \rangle \right)^2 \right\rangle} \\ \Delta p &= \sqrt{\langle \Delta p^2 \rangle} = \sqrt{\left\langle \left(p - \langle p \rangle \right)^2 \right\rangle} \end{aligned}, \tag{2.4.9}$$

тогда соотношения неопределенностей принимают вид:

$$\begin{aligned} \Delta p_x \Delta x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta p_y \Delta y &\geq \frac{\hbar}{2}\,. \\ \Delta p_z \Delta z &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \tag{2.4.10}$$

Итак, существует предел в точности одновременного измерения координаты и соответствующей компоненты импульса. Таким образом, *нет понятия траектории частицы*, и это есть следствие особой природы частиц микромира (корпускулярно-волновой дуализм). Отметим, что в то же время можно измерить одновременно и с любой точностью координату x, например, и перпендикулярную компоненту импульса p_y (или p_z), т. е. формально можно записать

$$\Delta x \Delta p_y \geq 0\,.$$

Известно, что x и p_x *канонически сопряженные величины*, так же как и соответствующие пары по другим осям: $y \leftrightarrow p_y$ и $z \leftrightarrow p_z$. Кроме них имеются и другие канонически сопряженные величины, например: ($E \leftrightarrow t$) — энергия и время, ($\varphi \leftrightarrow L_z$) — угол и соответствующая проекция момента импульса. Оказывается, что соотношение неопределенностей всегда верно для любой пары канонически сопряженных (дополнительных друг другу) величин. Так,

например, если имеем пару канонически сопряженных величин ($A \leftrightarrow B$), тогда произведение неопределенностей значений двух сопряженных переменных не может быть меньше $\hbar/2$:

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \hbar/2. \qquad (2.4.11)$$

Так как энергия и время являются тоже канонически сопряженными величинами, то имеем еще одно соотношение неопределенностей:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2. \qquad (2.4.12)$$

Соотношение (2.4.12) имеет более сложное физическое содержание из-за того, что имеются как стационарные, т. е. постоянные во времени, состояния, так и нестационарные состояния, время жизни которых конечно.

1. Если частица находится в стационарном состоянии, то определение энергии с точностью ΔE должно занять время, по меньшей мере $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$. То есть здесь имеем дело с процессом измерения или наблюдения стационарного состояния: чем меньше время наблюдения, тем меньше точность определения энергии.

2. Если система (или частица) находится в нестационарном состоянии, например в возбужденном состоянии, то получаем следующую интерпретацию соотношения (2.4.12): неопределенность энергии ΔE соответствует разбросу энергии этого состояния, иначе, его энергетической ширине, а неопределенность времени $\Delta t = \tau$ — времени жизни этого нестационарного возбужденного состояния.

Из соотношений неопределенностей следует важный вывод: при абсолютном нуле температуры $T = 0$ движение все равно не прекращается, поскольку всегда $\Delta p \neq 0$. Движение при абсолютном нуле температуры — это «нулевое» движение.

Примечание 24. Вернер Карл Гейзенберг, немецкий физик-теоретик, 1901–1976, Нобелевская премия 1932 г. за создание матричной квантовой механики.

Примечание 25. В волновой теории получали аналогичное соотношение для разброса частоты и длительностью импульса $\Delta\omega \cdot \Delta t \geq 1$. С другой стороны, (2.4.12) можно получить из (2.4.10) с помощью следующих простых рассуждений:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x = p_x \Delta p_x \cdot \frac{\Delta x}{p_x} = \frac{p_x \Delta p_x}{m} \frac{\Delta x}{v_x} = \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Соотношение (2.4.12) позволяет говорить о *виртуальных состояниях и возбуждениях*. Система за короткое время существования имеет большой разброс в энергии и может бывать во всех энергетических состояниях, т. е. состояниях с любой энергией. Это не реальные возбуждения, это состояния «временные», связанные с временным нарушением закона сохранения энергии.

2.4.3. Примеры и выводы

Рассмотрим несколько примеров, которые иллюстрируют волновые свойства частиц и в которых проявляются соотношения неопределенностей.

Пример 1. На щель размером Δx, изображенной на рисунке 2.4.3, падает пучок электронов определенной энергии и импульса. До щели электрон описывается плоской монохроматической волной де Бройля с определенным значением проекции поперечного импульса $p_x = 0$, при этом его x-ая координата не определена (любая величина). После прохождения щели получаем, что координата прошедшего электрона известна с точностью до Δx — ширины щели. Определим границы дифракционного максимума, т. е. расстояние между ближайшими минимумами. Условие первого минимума (условие минимумов в дифракции Фраунгофера на щели получали в разделе «Оптика», п. 2.5):

$$\Delta x \cdot \sin\varphi = \lambda.$$

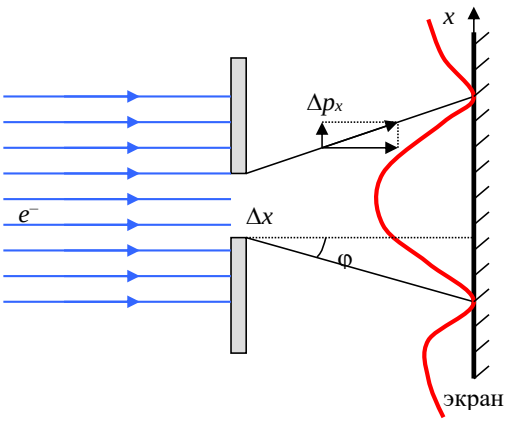


Рис. 2.4.3

Но при этом p_x изменяется вследствие дифракции волн де Бройля на щели:

$$\Delta p_x = p \cdot \sin\varphi = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}\sin\varphi. \qquad (2.4.13)$$

Тогда получаем соотношение неопределенностей в виде

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim \frac{2\pi\hbar}{\lambda}\sin\varphi \cdot \frac{\lambda}{\sin\varphi} = 2\pi\hbar > \frac{\hbar}{2}. \qquad (2.4.14)$$

Пример 2. Рассмотрим мысленный опыт В. Гейзенберга об измерении координаты электрона. Чтобы определить положение электрона, нужно его осветить, т. е. послать фотон и «поймать» рассеянный фотон. Тогда неопределенность в измерении координаты порядка длины волны используемого света $\Delta x \sim \lambda$. При взаимодействии с электроном свет передает ему импульс. Чтобы уменьшить передаваемый импульс, можно ослабить интенсивность света так, чтобы с электроном взаимодействовал один фотон. Передаваемый электрону импульс будет порядка импульса кванта: $\Delta p \sim p = 2\pi\hbar/\lambda$. Тогда снова получаем произведение «неточностей» в измерении, удовлетворяющее соотношению неопределенностей:

$$\Delta p \cdot \Delta x = p \cdot \lambda = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \cdot \lambda \sim 2\pi\hbar \geq \frac{\hbar}{2}. \qquad (2.4.15)$$

Какие основные выводы следуют из этого параграфа?

1. Принципиально (т. е. независимо от способа измерения) существует граница в точности одновременного измерения сопряженных переменных. Отсюда следует: *движение при абсолютном нуле температуры существует*. Состояния, в котором частица находится в полном покое, не существует.

2. Понятие «*траектории частицы*» не существует. Однако понятие траектории можно вводить в зависимости от степени необходимой точности измерения. В самом деле, перепишем соотношение неопределенностей в виде

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m}.$$

Откуда видно, что чем больше масса частицы, тем точнее можно использовать понятие траектории. В связи с этим утверждением рассмотрим некоторые примеры.

А. Рассмотрим рентгеновскую трубку или телеэкран, на котором фиксируются падающие электроны. Оценим разброс координаты появления электрона на экране: скорость электрона $v_e \sim 10^7$ см/с, разброс скоростей $\Delta v_x \sim 10^4$ см/с, тогда получаем неопределенность координаты электрона ($\hbar = 1{,}054 \cdot 10^{-27}$ эрг·с, $m = 0{,}9 \cdot 10^{-27}$ г):

$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{m\Delta v_x} \sim \frac{1{,}05 \cdot 10^{-27}}{10^4 \cdot 0{,}9 \cdot 10^{-27}} \sim 10^{-4} \text{ см},$$

т. е. положение электрона на экране фиксируется с хорошей точностью.

Б. Рассмотрим электрон, находящийся в атоме (атом Бора). Скорость электрона в атоме $v_e \sim 10^8$ см/с. Размеры атома определяют неопределенность координаты электрона $\Delta x \sim 10^{-8}$ см. Тогда из соотношения неопределенностей для неопределенности скорости электрона имеем

$$\Delta v_e \sim \frac{\hbar}{m \cdot \Delta x} \sim 10^8 \text{ см/с} \sim v_e.$$

Итак, получаем, что скорость электрона на орбите по порядку величины совпадает с ее неопределенностью. Таким образом, строго говоря, в атоме нельзя говорить об орбите (траектории) электрона.

В. При регистрации микрочастиц в камере Вильсона размер капель, возникающих после прохождения частицы, составляет величину $\Delta x \sim 10^{-4}$ см. Подсчитаем разброс по импульсам регистрируемой частицы

$$\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{1{,}054 \cdot 10^{-27}}{10^{-4}} \sim 10^{-23} \frac{\text{см} \cdot \text{г}}{\text{с}}.$$

Поэтому с хорошей точностью можно определять импульс и энергию частицы в камере Вильсона.

3. Теряет смысл деление полной энергии на кинетическую $K(\vec{v})$ и потенциальную $U(\vec{r})$ энергии, так как из-за соотношения неопределенностей для координаты и импульса и кинетическая и потенциальная энергии по отдельности не имеют определенного значения.

Примечание 26. Чарлз Томсон Рис Вильсон, английский физик, 1869–1959, Нобелевская премия 1927 г. за экспериментальное обнаружение реликтового фонового излучения.

Приложение 3. Имеем волновой пакет (2.4.6). Рассмотрим пакет в начальный момент $t = 0$ и для определенности положим $a(k) = a(k_0) = \text{const}$ во всем интервале $(k_0 - \Delta k)$–$(k_0 + \Delta k)$. Тогда вычисляем интеграл:

$$\psi(\vec{r}, t=0) = a(k_0)\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \cos kx\,dk = a(k_0)\frac{\sin kx}{x}\Bigg|_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} =$$

$$= \frac{a(k_0)}{x}\left(\sin(k_0+\Delta k)x - \sin(k_0-\Delta k)x\right) = \frac{2a(k_0)}{x}\sin\Delta kx \cdot \cos k_0 x.$$

Множитель перед косинусом дает медленно меняющуюся амплитуду, которая изображена на рисунке 2.4.4. Основной максимум расположен около точки $x = 0$ в области между ближайшими к этой точке нулями функции Ψ. Ближайшие нули определяются соотношениями

$$\sin\Delta kx = 0 \text{ и } \Delta kx = \pm\pi.$$

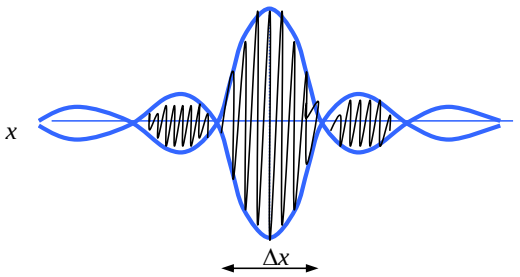


Рис. 2.4.4

Тогда размер области основной локализации пакета равен $\Delta x = 2\pi/\Delta k$ и при этом снова получаем соотношение неопределенностей:

$$\Delta x \Delta k \geq 2\pi \geq 1.$$

2.5. Уравнение Шредингера

2.5.1. Уравнение Шредингера

Вопрос, который встает перед физиками: как определить волновую функцию $\psi(\vec{r}, t)$? В предыдущем параграфе для свободной частицы мы определили волновую функцию, но как ее найти в других случаях?

Основное уравнение *нерелятивистской квантовой механики — уравнение Шредингера*. Уравнение Шредингера не выводится, а вводится как новый принцип, или постулат, и затем следствия, вытекающие из него, проверяются на эксперименте.

Примем во внимание следующие рассуждения:

1) плоские волны соответствуют свободной частице, следовательно, они должны быть частным решением уравнения для определения $\psi(\vec{r},t)$;

2) для определения волнового движения известно волновое уравнение; однако, оно не годится для описания частиц, так как оно справедливо для «чистых» волн (упругих, электромагнитных), в нем не отражено никаких свойств частицы, оно не содержит фундаментальных констант.

Чтобы получить уравнение для определения $\psi(\vec{r},t)$ необходимо понять и разобрать, какие требования необходимо предъявить к этому уравнению? Исходя из физических соображений, запишем эти требования:

1) уравнение должно быть линейным, так как должен выполняться принцип суперпозиции;

2) уравнение должно содержать только фундаментальные константы в качестве коэффициентов, например такие константы, как e, m, $\hbar$;

3) в уравнение не должны явно входить параметры движения, например, координата или скорость v.

Продолжим рассуждения в простейшем случае: для свободной нерелятивистской частицы имеет связь между энергией и импульсом:

$$E = \frac{p^2}{2m}. \tag{2.5.1}$$

А с другой стороны по гипотезе де Бройля для такой частицы имеем соотношения $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ и волновую функцию:

$$\psi(x,t) = A\exp\left[-i(\omega t - kx)\right] = A\exp\left[-\tfrac{i}{\hbar}(Et - px)\right]. \tag{2.5.2}$$

Далее применим следующие соображения. Возьмем первую производную по времени и вторую производную по координате от $\psi(\vec{r},t)$:

а) $$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = A\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} = -\frac{i}{\hbar}E\psi(x,t); \tag{2.5.3}$$

б) $$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}p\psi(x,t); \quad \frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x,t). \tag{2.5.4}$$

И сравнивая эти соотношения с формулой (2.5.1), получаем, что этому выражению можно сопоставить следующее равенство:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}. \tag{2.5.5}$$

Важно, что уравнение (2.5.5) удовлетворяет выше сформулированным условиям.

Это уравнение Шредингера — уравнение, описывающее *свободное одномерное движение в квантовой механике*. Проделанная процедура не есть вывод уравнения, а просто наводящие соображения для его написания.

Э. Шредингер написал это уравнение в 1926 г., а в 1933 г. ему была присуждена Нобелевская премия «за открытие новых плодотворных направлений атомной теории».

Обобщение уравнения на *трехмерный случай*, для которого свободная частица описывается волновой функцией

$$\psi = A\exp\left[-\tfrac{i}{\hbar}\left(Et - \vec{p}\vec{r}\right)\right],$$

получается достаточно тривиально:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi\left(x,y,z,t\right) = i\hbar\frac{\partial\psi\left(x,y,z,t\right)}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi\left(x,y,z,t\right) = i\hbar\frac{\partial\psi\left(x,y,z,t\right)}{\partial t}. \qquad (2.5.6)$$

Итак, уравнение (2.5.6) — *трехмерное уравнение Шредингера* для определения волновой функции свободного движения.

Обобщим теперь уравнение (2.5.6) для описания *движения во внешних полях*. Исходим из того, что полная энергия частицы равна

$$E = \frac{p^2}{2m} + U\left(\vec{r},t\right), \qquad (2.5.7)$$

где $U\left(\vec{r},t\right)$ — потенциальная энергия частицы (потенциал). Тогда аналогично (2.5.5) можно написать следующее обобщающее уравнение для определения волновой функции частицы, движущейся во внешнем поле:

$$i\hbar\frac{\partial\psi\left(\vec{r},t\right)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi\left(\vec{r},t\right) + U\left(\vec{r},t\right)\psi\left(\vec{r},t\right). \qquad (2.5.8)$$

Итак, *уравнение Шредингера — основное динамическое уравнение нерелятивистской волновой механики*, играет такую же важную роль, как уравнения Ньютона в классической механике и уравнения Максвелла в теории электромагнитного поля. Уравнение Шредингера описывает изменение во времени поведения микрообъектов, характеризуемых волновой функцией $\psi\left(\vec{r},t\right)$.

Обычно вводят оператор Гамильтона — *гамильтониан*:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\left(\vec{r},t\right) \qquad (2.5.9)$$

и тогда уравнение Шредингера запишется в символическом виде:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi. \qquad (2.5.10)$$

Уравнения (2.5.9)–(2.5.10) — *нестационарные уравнения Шредингера*.

2.5.2. Уравнение Шредингера для стационарных состояний

Если силовое поле $U(\vec{r},t)$ не зависит от времени t, то такое поле $U = U(\vec{r})$ называется стационарным. При этом можно разделить уравнение Шредингера на 2 отдельных уравнения — для координатной и временной частей волновой функции. В самом деле, представим волновую функцию в виде произведения:

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r}) \cdot \varphi(t), \tag{2.5.11}$$

и будем искать ее в таком виде. Подставим (2.5.11) в уравнение Шредингера:

$$i\hbar\varphi'_t(t) \cdot \psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi(t) \cdot \Delta\psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r})\varphi(t). \tag{2.5.12}$$

Делим обе части уравнения (2.5.12) на полную функцию Ψ из (2.5.11):

$$i\hbar\frac{\varphi'_t(t)}{\varphi(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + U(\vec{r}) = \text{const} = E. \tag{2.5.13}$$

Левая часть уравнения зависит только от времени t, правая часть зависит только от пространственных координат, и поскольку это равенство справедливо при произвольных значениях независимых переменных, то обе части уравнения равны константе — *константе разделения*, которую в (2.5.13) мы обозначили через E. Тогда уравнение (2.5.13) разделяется на 2 уравнения.

Первое уравнение — *временное уравнение*:

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(t)/\partial t}{\varphi(t)} = E. \tag{2.5.14}$$

Его общее решение легко получить в следующем виде:

$$\varphi(t) = A \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right), \tag{2.5.15}$$

где A = const.

Второе уравнение — *для координатной части волновой функции*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{2.5.16}$$

или иначе

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \tag{2.5.17}$$

Уравнения (2.5.16)–(2.5.17) и есть *стационарные уравнения Шредингера*.

Итак, полная волновая функция частицы или системы частиц, находящихся в стационарном внешнем поле, имеет вид:

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(\vec{r}). \tag{2.5.18}$$

Отсюда видно, что, когда силовое поле $U(\vec{r})$ не зависит от времени, распределение плотности вероятности также не зависит от времени, т. е. оно стационарно.

Примечание 27. Эрвин Шредингер, австрийский физик-теоретик, 1887–1961, Нобелевская премия 1933 г. за создание волновой механики.

2.6. Волновая функция. Интерпретация и нормировка

2.6.1. Интерпретация и свойства

Итак, состояние квантовой системы может быть описано определенной, вообще говоря, комплексной функцией координат и времени $\psi(\vec{r},t)$, называемой *волновой функцией* системы.

Знание волновой функции позволяет в принципе вычислить вероятности различных результатов измерений физических величин, как измерения координат, импульса, энергии, так и вообще всякого измерения. Так как квадрат модуля волновой функции $|\psi(\vec{r},t)|^2$ пропорционален вероятности того, что система находится в окрестности координаты $\vec{r}$, тогда вероятности обнаружения всех физических величин, зависящих от координат, будут определяться выражениями, билинейными по ψ и ψ^*. Например, выражением

$$\iint \psi^*(\vec{r}\,')\psi(\vec{r})\, f(\vec{r},\vec{r}\,')d\vec{r}d\vec{r}\,', \tag{2.6.1}$$

где $f(\vec{r},\vec{r}\,')$ — некоторая функция, зависящая от рода и результата измерения.

Волновая функция зависит от времени t, т. е. состояние системы с течением времени меняется. Если волновая функция известна в начальный момент t_0, то по смыслу полного описания состояния она определена и во все будущие времена t. Зависимость волновой функции от времени t определяется уравнением Шредингера.

Однако волновая функция — не физическое поле, а поле информации. Отсюда проистекает много особенностей квантовой механики. Чтобы приписать системе волновую функцию, над системой должен быть произведен максимально полный опыт. То есть необходимо создать состояние, в котором каждая из полного набора одновременно измеримых величин, определяющих поведение системы, имеет определенное значение. Если опыт не полон, теория позволяет сделать определенные предсказания.

В квантовой механике задавать «координаты и скорости» всех частиц, как это делается в классической механике, невозможно. Самое большое, что можно сделать — задать в начальный момент волновую функцию. *Волновая функция есть максимально полное допустимое описание состояния квантовой частицы или системы частиц*.

Итак, главное открытие квантовой механики — вероятностный характер законов микромира. Н. Бор писал: «Причина вероятностного описания

предсказаний в том, что свойства микроскопических объектов нельзя изучать, отвлекаясь от способа наблюдения».

Конечно, существуют свойства, независящие от способа наблюдения: масса, заряд, спин, магнитный момент и другие. Но всякий раз, когда одновременно измеряются дополнительные друг другу величины, результаты будут зависеть от способа наблюдения. Это свойство В. А. Фок назвал «относительностью к средствам наблюдения».

Рассмотрим, какие свойства и требования предъявляются к волновой функции $\psi(\vec{r},t)$. Учтем при этом, что волновая функция $\psi(\vec{r},t)$ — величина комплексная. Итак:

1) $\psi(\vec{r},t)$ — непрерывная функция;

2) производная $\psi'(\vec{r},t)$ — непрерывная функция;

3) $\psi(\vec{r},t)$ — ограниченная функция;

4) $\psi(\vec{r},t)$ — нормирована:

$$\int \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 dV = 1. \qquad (2.6.2)$$

Плотность вероятности определяется:

$$\frac{dW}{dV} = \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2.$$

Вероятность обнаружить частицу в элементе объема dV равна:

$$dW = \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 dV. \qquad (2.6.3)$$

Для связанных состояний, полная энергия которого меньше 0, что соответствует финитному движению по классической механике, нормировочный интеграл (2.6.2) всегда сходится, и функция нормируется на единицу. Для несвязанных состояний интеграл часто расходится

$$\int \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 dV \to \infty,$$

и волновые функции нельзя нормировать в обычном смысле. Пример: волновая функция свободной частицы, для нее имеем

$$\int \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3\vec{r} = \int \left| A\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left(Et - \vec{p}\vec{r}\right)\right\}\right|^2 dV = A^2 \int dV \to \infty.$$

Такие функции нормируют на *специальную функцию* — δ-*функцию*.

2.6.2. Плотность тока вероятности

Если волновая функция нормирована, то нормировка не меняется во времени:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_V \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 dV\right) = 0. \qquad (2.6.4)$$

Покажем это, рассмотрев подробнее производную от интеграла по некоторому произвольному объему V (обозначим ее за N):

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)dV = \int_V\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)dV \equiv N. \qquad (2.6.5)$$

Пусть волновые функции подчиняются уравнению Шредингера с гамильтонианом $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})$:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi; \quad -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \hat{H}\psi^*. \qquad (2.6.6)$$

Выражая отсюда производные по времени, подставим их в (2.6.5):

$$\begin{aligned} N &= \int_V\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi^*\cdot\psi - \psi^*\cdot\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi\right)dV = \\ &= \frac{i}{\hbar}\int_V\left(\psi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^*\right)-\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi\right)\right)dV = \\ &= -\frac{i\hbar}{2m}\int_V(\psi\Delta\psi^*-\psi^*\Delta\psi)dV = \\ &= -\frac{i\hbar}{2m}\int_V div(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)dV = -\int_V div\vec{j}dV. \end{aligned} \qquad (2.6.7)$$

Здесь введен вектор *плотности потока вероятности* $\vec{j}$:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi). \qquad (2.6.8)$$

Далее, пользуясь теоремой Остроградского — Гаусса, имеем

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V|\psi|^2 dV = -\int_V div\vec{j}dV = -\oint_S \vec{j}d\vec{S}.$$

В итоге, получаем, что изменение вероятности нахождения частицы (системы) в объеме V равна потоку вероятности через ограничивающую объем поверхность.

Рассмотрим случай бесконечного объема $V\to\infty$. Если волновая функция ограничена в пространстве (движение частицы ограничено), т. е. $\psi\to 0$ при $|\vec{r}|\to\infty$, то очевидно, что поток через замкнутую поверхность равен 0:

$$\oint_{S\to\infty}\vec{j}d\vec{S} \Rightarrow 0.$$

Таким образом, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t}\int|\psi(\vec{r},t)|^2 dV = 0 \qquad (2.6.9)$$

и нормировочный интеграл не меняется во времени.

С другой стороны, рассматривая произвольный объем V, получаем *уравнение неразрывности*:

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + div\vec{j} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial w}{\partial t} + div\vec{j} = 0, \qquad (2.6.10)$$

где согласно (2.4.4) квадрат модуля волновой функции определяет плотность вероятности $|\psi|^2 = w$. Уравнение неразрывности определяет закон сохранения числа частиц в системе или, если рассматривать одну частицу, закон сохранения вероятности. Изменение плотности вероятности нахождения частицы в системе $\partial w/\partial t$ определяется плотностью тока вероятности $\vec{j}(\vec{r},t)$ через поверхность, ограничивающую эту систему.

Примечание 28. Волновая функция свободного движения, т. е. плоская волна, может быть нормирована так, чтобы она описывала поток частиц с плотностью потока вероятности, равной единице: поток, в котором через единицу площади ее поперечного сечения, проходят в среднем по одной частице в 1 времени. При этом получаем: $\psi = \sqrt{m/p}\, e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\vec{r})}$. Действительно, сосчитав плотность тока вероятности (2.6.8), получим $|\vec{j}|=1$.

2.6.3. Еще раз об интерпретации волновой функции

В 1920–1930-х гг. разгорелся научный спор Н. Бора и А. Эйнштейна о вероятностной интерпретации волновой функции и соотношении неопределенностей.

Н. Бор и А. Эйнштейн встретились впервые в 1920 г. в Берлине. Наиболее сильно научный спор разгорелся на V Сольвеевском конгрессе в 1927 г. Эйнштейн предлагал Бору каждое утро очередное доказательство нарушения соотношения неопределенностей в придуманном им опыте, а Бор вечером показывал, что при более тщательном рассмотрении соотношение неопределенностей подтверждается. Эйнштейн не смог найти слабого места в логике квантовой механики, однако, по его убеждению, эта точка зрения не может быть окончательным решением: «...Господь Бог не играет в кости...».

Однако в 1935 г. дискуссия разгорелась с новой силой, так как появилась работа Эйнштейна, Розена и Подольского «Может ли квантово-механическое описание физической реальности считаться полным?».

Допустим, что 2 подсистемы взаимодействовали друг с другом, а потом разошлись на большое расстояние. Поскольку эти системы уже не взаимодействуют, то в результате каких бы то ни было операций или воздействий на первую систему, во второй уже не может получиться никаких реальных изменений. Между тем, согласно квантовой механике, с помощью измерений в первой системе можно изменить волновую функцию второй системы.

Рассмотрим следующий пример. Допустим, знаем импульсы двух частиц до столкновения, и пусть после столкновения одна частица летит к Земле, а другая летит на Луну. До того, как произведем измерение над одной

из частиц, мы не знаем точную волновую функцию частиц, она будет суперпозицией возможных различных состояний. Если земной наблюдатель произведет измерение и получит определенное значение импульса частицы на Земле, он по закону сохранения импульса может рассчитать импульс частицы на Луне. Следовательно, волновая функция этой частицы в результате измерения на Земле определится однозначным образом — она будет также соответствовать определенному импульсу.

Если понимать волновую функцию как физическое поле, то получаем совершенную бессмыслицу: результат измерения на Земле влияет на результат измерения на Луне. Если же учесть, что волновая функция — это волна информации, то результат естественен. Это есть обычное изменение вероятности предсказания с появлением новой информации. Таким образом, ставится вопрос: какова вероятность, что лунный экспериментатор найдет то или иное значение импульса при дополнительном условии, что на Земле найден импульс другой частицы? Это означает, что нужно взять весь набор многократных измерений импульса в обеих лабораториях и отобрать из этого набора те случаи, когда на Земле получится заданный импульс. При этом условии лунные измерения будут давать определенный и известный импульс согласно закону сохранения импульса.

Влияние измерений в одной подсистеме на предсказания о поведении другой подсистемы нужно понимать именно в смысле отбора случаев, соответствующих определенному условию.

Две подсистемы, находящиеся на больших расстояниях, физически никак не связаны, независимы, но условная вероятность, конечно, зависит от того, какое состояние одной из подсистем мы выбираем. Предсказание скачком изменяется при изменении условий отбора событий.

Нужно ли искать другую интерпретацию квантовой механики?

Примечание 29. Владимир Александрович Фок, советский физик-теоретик, 1898–1974, работал в Ленинградском университете, ФТИ, ГОИ.

Борис Подольский, американский физик-теоретик, 1896–1966.

ГЛАВА 3.
ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

3.1. Операторы. Собственные функции и собственные значения

3.1.1. Операторы в квантовой механике

Операторный метод — традиционная и основная формулировка квантовой механики. *В квантовой механике любой динамической переменной, любой физической величине приводится в соответствие оператор*. В этом параграфе кратко рассмотрим основные свойства операторного метода.

Оператор $\hat{F}$ — это правило, по которому любой выбранной функции φ приводится в соответствие другая функция *f*:

$$f = \hat{F}\varphi. \tag{3.1.1}$$

Ранее мы уже встречались с операторами: оператор градиента $\nabla \equiv \mathrm{grad}$, оператор Лапласа $\Delta = \nabla^2$, операторы дивергенции и ротора $div \equiv (\nabla ...)$, $rot \equiv [\nabla ...]$ соответственно.

При использовании операторов имеется «договорное» условие: оператор пишется всегда слева от функции, на которую он действует. Вообще оператор действует на все, что стоит справа от него, если нет ограничивающих скобок.

В квантовой механике применяются только *линейные операторы*, чтобы не нарушался принцип суперпозиции состояний. Одно из основных свойств линейного оператора: его действие на сумму функций равно сумме действий оператора на каждую из них в отдельности, которое записывается в виде

$$\hat{F}\left(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2\right) = C_1\hat{F}\varphi_1 + C_2\hat{F}\varphi_2, \tag{3.1.2}$$

где C_1, C_2 — произвольные постоянные.

Примеры операторов, соответствующих физическим величинам.

1. *Оператор координаты*: является оператором умножения

$$\hat{x} = x. \tag{3.1.3}$$

2. *Оператор полной энергии* — Гамильтониан:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}). \tag{3.1.4}$$

Оператор кинетической энергии:

$$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2. \tag{3.1.5}$$

Оператор потенциальной энергии (обычно оператор умножения):

$$\hat{U} = U(\vec{r}). \tag{3.1.6}$$

3. *Оператор импульса*. Исходя из выражения для кинетической энергии $E_{kin} = p^2/2m$, получим, что оператор импульса равен:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla. \tag{3.1.7}$$

Оператор x-проекции импульса (на выбранную ось $0x$) имеет вид

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}. \tag{3.1.8}$$

Аналогично выглядят операторы проекции импульса и на другие оси. Вводятся и другие операторы: момента импульса, проекции момента импульса, спина и так далее.

3.1.2. Собственные функции и собственные значения

Итак, каждой физической величине сопоставляется оператор. Свойства операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ определяются уравнениями на *собственные функции и собственные значения*:

$$\begin{aligned} \hat{F}\varphi_n &= f_n\varphi_n; \\ \hat{G}\psi_n &= g_n\psi_n, \end{aligned} \tag{3.1.9}$$

где n — немой значок, соответствующий номеру решения. Из этих уравнений находятся функции φ_n или ψ_n и числа f_n или g_n, соответствующих операторам $\hat{F}$ или $\hat{G}$.

На примере второго уравнения в (3.1.9) с оператором $\hat{G}$ рассмотрим основные определения. Так, найденные волновые функции ψ_n (их число может быть конечным, а может быть бесконечным) называются *собственными функциями оператора* $\hat{G}$. Иначе говоря, собственные функции — это такие функции, которые под действием оператора $\hat{G}$ переходят сами в себя, будучи умноженными на постоянное число g_n. Соответствующие значения g_n — *собственные значения оператора* $\hat{G}$.

<u>Физический смысл введенных функций</u>: собственные волновые функции ψ_n описывают в квантовой механике такие состояния, в которых данная физическая величина g имеет определенное значение g_n.

Или иначе, если частица (или система) находится в состоянии ψ_n, то описывающая ее физическая величина g в этом состоянии равна g_n и остается постоянной во времени.

Совокупность собственных значений g_n оператора $\hat{G}$ называют *спектром оператора* $\hat{G}$.

Спектр собственных значений может быть *дискретным* и *непрерывным*. Дискретный спектр g_n имеет место, если уравнение $\hat{G}\psi_n = g_n\psi_n$ имеет решение не при всех, а только при определенных значениях g_n. Непрерывный или сплошной спектр g_n имеет место, когда это уравнение имеет решение при всех значениях g_n или хотя бы при всех g_n в некоторой области непрерывных значений. Спектр собственных значений может быть смешанным, т. е. состоящим из дискретных и непрерывных значений g_n.

Рассмотрим несколько примеров.

1. Уравнение на собственные значения оператора координаты $\hat{x} = x$ имеет вид

$$\hat{x}\psi = x\psi . \tag{3.1.10}$$

Это уравнение имеет решение при всех (любых) значениях координаты, таким образом оператор координаты x имеет сплошной спектр.

2. Уравнение на собственные значения оператора проекции импульса $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$:

$$\hat{p}_x\psi = p_x\psi ;$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi = p_x\psi . \tag{3.1.11}$$

Решая (3.1.11), получаем собственные функции оператора проекции импульса:

$$\psi_{p_x} = Ae^{\frac{i}{\hbar}p_x x} . \tag{3.1.12}$$

В результате получаем решение уравнения (3.1.11) в виде (3.1.12) при любых значениях p_x и отсюда заключаем, что оператор проекции импульса $\hat{p}_x$ имеет непрерывный спектр.

3. Стационарное уравнение Шредингера — уравнение на собственные значения оператора Гамильтона, т. е. оператора полной энергии (3.1.4):

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n . \tag{3.1.13}$$

Решение этого уравнения во многом зависит от вида оператора потенциальной энергии $U(\vec{r})$, входящего в (3.1.4). При этом в результате решения можем получить дискретный спектр энергий в случае, когда решение имеется только при определенных значениях энергии E_n (например, как связанные состояния в атоме водорода), либо непрерывный спектр, когда решение уравнения получаем при любой энергии (например, энергетические состояния свободной частицы).

3.1.3. Правила действия с операторами

Рассмотрим кратко основные свойства операторов в квантовой механике.

1. Суперпозиция действия двух или нескольких операторов

$$\hat{G}\left(C_1\varphi + C_2\psi\right) = C_1\hat{G}\varphi + C_2\hat{G}\psi. \qquad (3.1.14)$$

2. Действие оператора, определяемого суммой операторов, равно сумме действий каждого оператора на волновую функцию:

$$(\hat{G} + \hat{F})\psi = \hat{G}\psi + \hat{F}\psi. \qquad (3.1.15)$$

3. Действие оператора, определяемого произведением операторов, равно последовательному упорядоченному действию операторов:

$$\left(\hat{G}\hat{F}\right)\psi = \hat{G}\left(\hat{F}\psi\right). \qquad (3.1.16)$$

В общем случае операторы $\hat{G}$ и $\hat{F}$ некоммутативны, т. е. их последовательное действие в прямом порядке не совпадает с последовательным обратным действием операторов: $\hat{G}\hat{F}\psi \neq \hat{F}\hat{G}\psi$. Можно определить *коммутатор двух операторов*, или *скобки Пуассона*:

$$\left[\hat{G}, \hat{F}\right] = \hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G}. \qquad (3.1.17)$$

Определение *коммутативных операторов*: операторы называются коммутирующими (или коммутативными), когда действие их произведения на волновые функции не зависит от порядка последовательности операторов:

$$\hat{G}\hat{F} = \hat{F}\hat{G}. \qquad (3.1.18)$$

Коммутатор таких операторов равен нулю $\left[\hat{G}, \hat{F}\right] = 0$.

Если последовательное действие двух операторов на стоящую справа функцию зависит от порядка их действия, то такие операторы называются некоммутирующими операторами $\left[\hat{G}, \hat{F}\right] \neq 0$.

Приведем примеры коммутативных и некоммутативных операторов.

А. Коммутируют операторы координаты *y* и проекции импульса на перпендикулярную по отношению к *y* ось, например $\hat{p}_x$:

$$\hat{y}\hat{p}_x\psi = \hat{p}_x\hat{y}\psi;$$

$$\left[\hat{y}, \hat{p}_x\right] = 0.$$

В самом деле, действие этих операторов на волновую функцию не зависит от порядка их действия

$$\left[\hat{y}, \hat{p}_x\right]\psi = y\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(y\psi\right) = 0.$$

Б. Не коммутируют операторы координаты и проекции оператора импульса на эту же ось:

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi - \hat{p}_x x\psi = \left[\hat{x}, \hat{p}_x\right]\psi \neq 0.$$

Их коммутатор равен:

$$x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi-\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)(x\psi)=-i\hbar x\psi'_x+i\hbar(x\psi)'_x=i\hbar\psi\,.$$

Или в символической форме коммутатор можно представить в следующем виде:

$$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=i\hbar\,. \qquad (3.1.19)$$

Важные свойства, касающиеся коммутируюших операторов, состоят в том, что у этих операторов могут быть общие собственные волновые функции и одновременно определенные собственные значения.

Выводы параграфа.

1. Физические величины, чьи операторы коммутируют, могут иметь одновременно определенные значения и могут быть одновременно измерены с любой точностью.

2. Физические величины, которым соответствуют некоммутирующие операторы, не могут иметь одновременно определенные значения и, соответственно, не могут быть одновременно точно измерены.

Примечание 30. Существуют операторы, изменение порядка действия которых приводит к изменению знака $\hat{F}\hat{G}=-\hat{G}\hat{F}$. Такие операторы называются антикоммутирующими операторами. Или, иначе, их антикоммутатор равен нулю:

$$\hat{F}\hat{G}+\hat{G}\hat{F}=\left\{\hat{F},\hat{G}\right\}=0\,. \qquad (3.1.20)$$

3.2. Самосопряженные или эрмитовы операторы

3.2.1. Самосопряженные операторы

Непосредственно измеряемые («наблюдаемые») физические величины вещественны. Отсюда следует, что все собственные значения оператора $\hat{G}$, соответствующего данной физической величине, — g_n должны быть вещественны.

Что мы получаем в результате измерения физической величины, описываемой оператором $\hat{G}$?

А. Если физическая система (частица) находится в состоянии, описываемом собственной функцией ψ_n оператора $\hat{G}$, то при измерении получим собственное значение этого оператора g_n, которое следует из уравнения

$$\hat{G}\psi_n=g_n\psi_n\,.$$

Б. Если система (частица) описывается произвольной функцией ψ, то при измерении наблюдаемой величины, т. е. при действии оператора $\hat{G}$, получим линейную комбинацию из собственных значений g_n — некое среднее

значение, которое тоже вещественно. Например: разлагая произвольную функцию ψ в ряд (интеграл) по собственным функциям оператора $\hat{G}$ – ψ_n получаем

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2 + ...$$

и тогда в результате действия оператора $\hat{G}$ на эту функцию имеем

$$\hat{G}\psi = C_1 g_1\psi_1 + C_2 g_2\psi_2 + ...$$

Вводится понятие *сопряженного* оператора $\hat{F}^+$ следующим равенством:

$$\int \psi_1^* \hat{F}\psi_2 dV = \int \psi_2 \left(\hat{F}^+\psi_1\right)^* dV . \qquad (3.2.1)$$

То есть оператор $\hat{F}^+$ является сопряженным к оператору $\hat{F}$, когда в интеграле (3.2.1) действие $\hat{F}$ на правую функцию ψ_2, стоящую под интегралом, дает тот же результат, как и действие комплексно сопряженного оператора $\left(\hat{F}^+\right)^*$ на левую функцию ψ_1^*.

Самосопряженные операторы определяются следующим равенством:

$$\int \psi_1^* \hat{F}\psi_2 dV = \int \psi_2 \left(\hat{F}^+\psi_1\right)^* dV = \int \psi_2 \left(\hat{F}\psi_1\right)^* dV , \qquad (3.2.2)$$

где $\hat{F}^+$ — *сопряженный* оператор к оператору $\hat{F}$. Итак, если выполняется равенство

$$\hat{F}^+ = \hat{F} , \qquad (3.2.3)$$

то этот оператор $\hat{F}$ называется *эрмитовым* или *самосопряженным* оператором. Продолжая равенство (3.2.2), можно сказать, что действие самосопряженного оператора $\hat{F}$ на правую от него функцию совпадает с действием комплексно сопряженного оператора на левую функцию:

$$\int \psi_1^* \hat{F}\psi_2 dV = \int \psi_2 \left(\hat{F}\psi_1\right)^* dV = \int \psi_2 \hat{F}^* \psi_1^* dV . \qquad (3.2.4)$$

Как покажем в следующем пункте этого параграфа, именно эрмитовые операторы имеют вещественные собственные значения.

Часто вводится понятие *транспонированного* оператора $\hat{F}^{\text{тр}}$, которое определяется из соотношения

$$\int \psi_1^* \hat{F}\psi_2 dV = \int \left(\hat{F}^{\text{тр}}\psi_1^*\right)\psi_2 dV , \qquad (3.2.5)$$

то есть вводится оператор $\hat{F}^{\text{тр}}$, который дает тот же результат, действуя на левую функцию, как и оператор $\hat{F}$, действующий на правую. Таким образом, сопряженный оператор — это комплексно сопряженный оператор от транспонированного оператора:

$$\hat{F}^{+} = (\hat{F}^{\text{тр}})^{*}. \qquad (3.2.6)$$

Рассмотрим примеры операторов.

1. Легко убедиться из (3.2.4), что оператор координаты $\hat{x} = x$ эрмитов (самосопряженный) оператор.

2. Рассмотрим оператор дифференцирования $\hat{F} = d/dx$. При этом будем считать, что волновые функции обращаются в 0 на бесконечности, т. е. $\psi_1, \psi_2 \to 0$ при $x \to \pm\infty$. Вычислим оператор, сопряженный оператору $\hat{F}$ с помощью интегрирования по частям:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \frac{d}{dx}\psi_2 dx = \psi_1^*\psi_2\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \frac{d}{dx}\psi_1^* dx = 0 + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left(-\frac{d}{dx}\right)\psi_1^* dx.$$

Таким образом, оператор, сопряженный оператору $\hat{F} = d/dx$, равен:

$$\hat{F}^{+} = -\frac{d}{dx} \qquad (3.2.7)$$

и, следовательно, оператор $\hat{F} = d/dx$ не является эрмитовым.

3. Оператор проекции импульса $\hat{F} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}_x$ является самосопряженным оператором. Проверим это:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_2 dx = \psi_1^*(-i\hbar)\psi_2\Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_1^*\right) dx =$$

$$= 0 + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_1^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_1\right)^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left(\hat{p}_x\psi_1\right)^* dx.$$

Таким образом, оператор проекции импульса

$$\hat{p}_x = \hat{p}_x^{+} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad (3.2.8)$$

эрмитов (самосопряженный) оператор.

3.2.2. Собственные функции и собственные значения самосопряженных операторов

Рассмотрим основные свойства эрмитовых операторов.

1. Собственные значения эрмитовых операторов — вещественны. Запишем уравнение на собственные значения и комплексно сопряженное ему уравнение:

$$\hat{F}\psi_n = \lambda_n\psi_n \qquad \text{и} \qquad \hat{F}^{*}\psi_n^* = \lambda_n^*\psi_n^*. \qquad (3.2.9)$$

Умножим слева первое уравнение на ψ_n^* (либо второе на ψ_n), проинтегрируем по всему пространству и воспользуемся свойством «эрмитовости»:

$$\int \psi_n^*\hat{F}\psi_n dV = \lambda_n \int |\psi_n|^2 dV = \lambda_n = \int \psi_n \left(\hat{F}\psi_n\right)^* dV = \lambda_n^*.$$

Отсюда имеем равенство

$$\lambda_n = \lambda_n^* \ , \tag{3.2.10}$$

из которого следует, что собственные значения эрмитовых операторов вещественны.

2. Произведение двух эрмитовых коммутирующих операторов есть эрмитов оператор

$$\hat{F}\hat{G} = \hat{F}^+\hat{G}^+ = (\hat{G}\hat{F})^+ = (\hat{F}\hat{G})^+. \tag{3.2.11}$$

3. Важное свойство эрмитовых операторов. Пусть имеем дискретный набор собственных значений и собственных функций оператора $\hat{F}$ (причем сначала считаем, что нет вырождения, т. е. все волновые функции ψ_n разные для разных собственных значений λ_n):

$$\begin{gathered} \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, ... \\ \psi_1, \psi_2, \psi_3, ... \end{gathered} \tag{3.2.12}$$

Такой набор волновых функций образует так называемую *полную систему ортонормированных* волновых функций:

$$\int \psi_m^* \psi_n dV = \begin{Bmatrix} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{Bmatrix} = \delta_{mn}, \tag{3.2.13}$$

где δ_{mn} — символ Кроникера. В самом деле, для доказательства ортогональности рассмотрим два равенства

$$\begin{cases} \hat{F}\psi_n = \lambda_n \psi_n \\ \hat{F}^* \psi_m^* = \lambda_m^* \psi_m^* \end{cases}. \tag{3.2.14}$$

Умножим слева первое уравнение на ψ_m^*, а второе — на ψ_n^*, и проинтегрируем по всему пространству. Вычитая второе уравнение (3.2.14) из первого уравнения и учитывая, что $\hat{F}$ — эрмитов оператор и, следовательно, $\lambda_m^* = \lambda_m$, получаем:

$$0 = \int (\lambda_n - \lambda_m) \psi_m^* \psi_n dV;$$

$$(\lambda_n - \lambda_m) \int \psi_m^* \psi_n dV = 0. \tag{3.2.15}$$

Из (3.2.15) следует, что, если собственные значения различны $\lambda_n \neq \lambda_m$, получаем ортогональность функций $\int \psi_m^* \psi_n dV = 0$. Полнота набора собственных функций означает, что любую функцию можно разложить в ряд по функциям ψ_n.

В случае, когда имеем вырождение состояния, тогда введем новые волновые функции состояния и возьмем их в виде линейной комбинации:

$$\psi_n = \alpha_{n_1} \psi_{n_1} + \alpha_{n_2} \psi_{n_2} + \alpha_{n_3} \psi_{n_3} + ..., \tag{3.2.16}$$

где все волновые функции имеют одно и то же собственное значение $\hat{F}\psi_{n_i} = \lambda_n \psi_{n_i}$. При этом линейные комбинации можно сделать такими, что новые волновые функции ψ_n были бы ортонормированными.

Вывод: *условие ортонормированности собственных функций самосопряженных линейных операторов выполняется всегда*. В случае вырождения можно заменить собственные функции их ортонормированными линейными комбинациями.

4. Разложение произвольной функции в ряд по системе собственных функций ψ_n самосопряженных линейных операторов. Иначе говоря, любую функцию можно представить в виде

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_n C_n \psi_n(\vec{r}). \tag{3.2.17}$$

Коэффициенты разложения можно получить, умножив (3.2.17) на ψ_k^* и проинтегрировав по объему:

$$\int \Psi(\vec{r})\psi_k^*(\vec{r})dV = \int \sum_n C_n \psi_n(\vec{r})\psi_k^*(\vec{r})dV =$$

$$= \sum_n C_n \int \psi_k^*(\vec{r})\psi_n(\vec{r})dV = \sum_n C_n \delta_{kn} = C_k.$$

Таким образом, имеем выражение для получения коэффициентов разложения:

$$C_k = \int \Psi(\vec{r})\psi_k^*(\vec{r})dV. \tag{3.2.18}$$

Каков смысл этих коэффициентов? *Квадрат коэффициента разложения C_k^2 дает вероятность того, что в состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi(\vec{r})$, присутствует примесь состояния ψ_k.*

Если имеем непрерывный спектр значений λ, тогда волновую функцию раскладываем в интеграл:

$$\Psi(\vec{r}) = \int C(\lambda)\psi_\lambda(\vec{r})d\lambda, \tag{3.2.19}$$

где коэффициенты определяются также интегралом

$$C(\lambda_1) = \int \psi_{\lambda_1}^*(\vec{r})\Psi(\vec{r})dV. \tag{3.2.20}$$

Волновые функции непрерывного спектра (вместо (3.2.13)) нормируются на δ-функцию:

$$\int \psi_{\lambda'}^*(\vec{r})\psi_\lambda(\vec{r})dV = \delta(\lambda' - \lambda). \tag{3.2.21}$$

Рассмотрим некоторые свойства δ-функции. Функция $\delta(x-a)$ везде равна нулю за исключением точки $x = a$, где она обращается в бесконечность:

$$\delta(x-a) = \begin{cases} 0, & x \neq a \\ \infty, & x = a \end{cases}$$

или

$$\delta(x)=\begin{cases}0, & x\neq 0\\ \infty, & x=0\end{cases}. \qquad (3.2.22)$$

Однако интеграл от δ-функции равен единице (т. е. имеем бесконечность с «мощностью» равной 1):

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)dx=1$$

или

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)dx=1. \qquad (3.2.23)$$

Вообще геометрически δ-функцию можно рассматривать как предел максимума, стремящегося к бесконечности в точке a и сохраняющего равную единице площадь под кривой (см. рис. 3.2.1). Важное свойство δ-функции состоит в том, что она «вырезает» в подынтегральной функции значение этой функции в точке a:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x)\delta(x-a)dx=\Psi(a). \qquad (3.2.24)$$

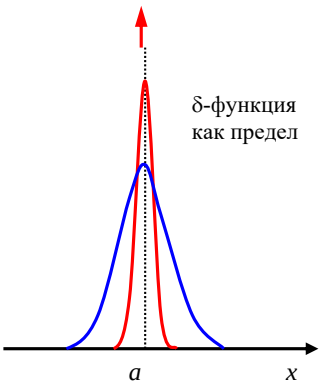


Рис. 3.2.1

Последнее условие и нормировка позволяет получать коэффициенты $C(\lambda)$ из разложения (3.2.19).

5. Вычисление средних значений физических величин. Поскольку вероятность dW найти частицу в элементе объема dV равна

$$dW=\psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})dV=\left|\psi(\vec{r})\right|^2 dV,$$

то можно определить средние значения различных физических величин в состоянии, определяемой $\psi(\vec{r})$. Напомним, что среднее значение, например, координаты, определяется:

$$\langle x \rangle = \int x dW = \int \rho(x) x dx,$$

где вероятность dW определяется через плотность вероятности $dW = \rho(x)dx$. Аналогично получаем для средних значений координаты в состоянии, определяемой волновой функцией $\Psi(x)$:

$$\langle x \rangle = \frac{\int \Psi^*(x) x \Psi(x) dx}{\int \Psi^*(x) \Psi(x) dx}. \qquad (3.2.25)$$

Если волновая функция $\Psi(x)$ уже нормирована, то среднее значение координаты равно

$$\langle x \rangle = \int \Psi^*(x) x \Psi(x) dx. \qquad (3.2.26)$$

Можно записать выражение для среднего значения любого оператора $\hat{F}$ в состоянии, описываемом произвольной волновой функцией $\Psi(x)$:

$$\langle \hat{F} \rangle = \int \Psi^*(\vec{r}) \hat{F} \Psi(\vec{r}) dV. \qquad (3.2.27)$$

Следуя (3.2.17), волновую функцию $\Psi(x)$ можно разложить в ряд (интеграл) по собственным функциям оператора $\hat{F}$:

$$\hat{F}\psi_n = \lambda_n \psi_n.$$

Тогда получаем из (3.2.27):

$$\begin{aligned} \langle \hat{F} \rangle &= \int \sum_n C_n^* \psi_n^* \cdot \hat{F} \cdot \sum_m C_m \psi_m dV = \sum_{n,m} C_n^* C_m \int \psi_n^* \hat{F} \psi_m dV = \\ &= \sum_{n,m} C_n^* C_m \lambda_m \int \psi_n^* \psi_m dV = \sum_{n,m} \lambda_m C_n^* C_m \delta_{nm} = \sum_n \lambda_n |C_n|^2. \end{aligned} \qquad (3.2.28)$$

Таким образом, среднее значение оператора $\hat{F}$ определяется суммой собственных значений этого оператора, взятых с весовыми множителями $|C_n|^2$, определяющими долю (вероятность) примеси данного собственного состояния n в полной волновой функции $\Psi(x)$.

Аналогичные выражения при вычислении среднего значения оператора $\hat{F}$ можно получить для непрерывного спектра собственных значений λ, используя выражения (3.2.19)–(3.2.24).

3.3. Частица в потенциальной яме

3.3.1. Одномерная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками

Пусть частица совершает одномерное движение вдоль оси x в потенциальной яме, изображенной на рисунке 3.3.1. Математически одномерный потенциал записывается в виде

$$U = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le a \\ \infty & x > a, x < 0 \end{cases}. \qquad (3.3.1)$$

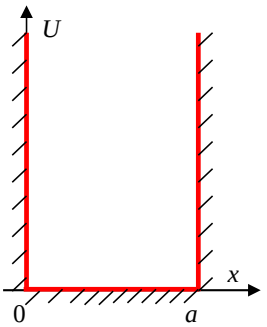


Рис. 3.3.1

Стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi = E\Psi. \qquad (3.3.2)$$

Запишем это уравнение в области внутри ямы, где потенциальная энергия равна нулю:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = E\Psi(x). \qquad (3.3.3)$$

Преобразуем уравнение к виду:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0 \quad \text{или} \quad \Psi'' + k^2\Psi = 0, \qquad (3.3.4)$$

где ввели волновое число k обычным соотношением:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \qquad (3.3.5)$$

Решения вне ямы не существует, поскольку там потенциальная энергия равна бесконечности, и частица не может находиться вне ямы. Для учета этого обстоятельства введем граничные условия, запрещающие частице находиться на левой и правой границах (стенках) потенциальной ямы:

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0. \qquad (3.3.6)$$

Общее решение уравнения (3.3.4) представляем в виде

$$\Psi = A\sin kx + B\cos kx. \qquad (3.3.7)$$

Для определения коэффициентов в решении (3.3.7) используем граничные условия:

1) при $x = 0$ имеем $\Psi(0) = B = 0$, откуда получаем коэффициент $B = 0$;

2) при $x = a$ имеем $\Psi(a) = A\sin ka = 0$, откуда получаем, что $\sin ka = 0$, и $ka = \pm n\pi$, где $n = 1,2,3,...$ (коэффициент $A \ne 0$, иначе внутри вообще нет частицы).

Фактически полученное равенство из граничных условий

$$ka = \pm n\pi, \tag{3.3.8}$$

есть *условие квантования уровней энергии* в потенциальной яме с бесконечными стенками, поскольку решения, отличные от нуля, имеются только при определенном наборе волновых чисел.

Итак, получаем окончательно решение уравнения (3.3.4):

$$\Psi_n = A\sin\frac{n\pi}{a}x. \tag{3.3.9}$$

Эти функции являются собственными функциями гамильтониана (3.3.2) при данных граничных условиях (3.3.6).

Примечание 31. Вместо решения (3.3.7) можно было записать общее решение в виде суммы экспонент:

$$\Psi = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx).$$

Используя те же граничные условия (3.3.6), получаем то же условие квантования (3.3.8) и решение (3.3.9).

Примечание 32. Об импульсе. Внутри ямы гамильтониан равен $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ и казалось бы коммутатор оператора импульса с гамильтонианом равен нулю $\left[\hat{p},\hat{H}\right] = \left[\hat{p},\hat{p}^2/2m\right] = 0$. При этом получаем, что энергия E и импульс p для электрона в бесконечной потенциальной яме одновременно измеримы. Однако это не так. Собственная волновая функция импульса $\psi_p = C\exp(ipx/\hbar)$ не удовлетворяет поставленным граничным условиям. Импульс только по модулю имеет постоянное значение, но сам импульс p как векторная величина не имеет определенного значения.

Подставляя условие квантования в уравнение (3.3.5), получаем уровни энергии:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2. \tag{3.3.10}$$

Итак, *энергия частицы в потенциальной яме принимает дискретные значения* (n = 1, 2, 3, ...). Состояния частицы описываются соответствующими волновыми функциями (3.3.9). При этом постоянную A находим из условия нормировки:

$$\int_0^a \left|\Psi(x)\right|^2 dx = A^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = \frac{1}{2}A^2\int_0^a\left(1-\cos\frac{2n\pi}{a}x\right)dx = A^2\frac{a}{2} = 1.$$

Отсюда получаем коэффициент A:

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}. \tag{3.3.11}$$

Окончательно запишем собственные функции и собственные энергии:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right);$$
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2. \qquad (3.3.12)$$

Здесь квантовое число n = 1, 2, 3, ... определяет номер состояния. На рисунке 3.3.2 построены графики энергии, волновых функций Ψ_n (рис. 3.3.2*А*) и плотности вероятности $|\Psi_n|^2$ (рис. 3.3.2*Б*) нахождения частицы внутри ямы для различных значений n.

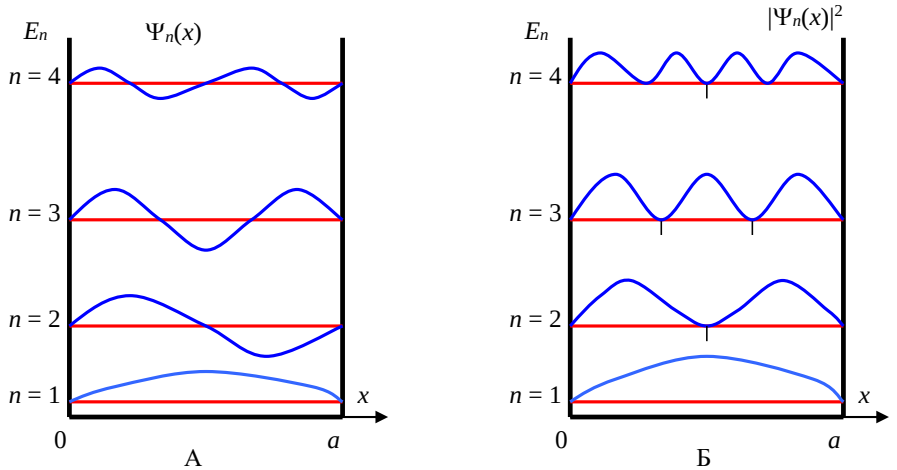


Рис. 3.3.2

При n = 1 мы имеем низшее значение энергии частицы

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \qquad (3.3.13)$$

Наименьшее значение энергии можно оценить так же из соотношения неопределенностей: $\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$. Здесь $\Delta x = a$, $\Delta p \sim p = \sqrt{2mE}$, тогда получаем

$$a \cdot \sqrt{2mE} \geq \hbar$$

и отсюда имеем

$$E \geq \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \qquad (3.3.14)$$

Примечание 33. В этой простой задаче те же значения энергии можно так же получить исходя из правил квантования Бора — Зоммерфельда (или, что то же самое, из стоячих волн де Бройля): $\oint p_x dx = n2\pi\hbar$. Вычисляя интеграл от 0 до a и обратно, имеем

$$2a \cdot \sqrt{2mE} = n2\pi\hbar \qquad (3.3.15)$$

и отсюда получаем то же выражение для энергии (3.3.12).

Расстояние между соседними уровнями определяется разностью

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2n+1). \qquad (3.3.16)$$

При больших значениях номера уровня n ($n \gg 1$) для разности получаем

$$\Delta E_n \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}n. \qquad (3.3.17)$$

Оценим расстояние между уровнями энергий для нескольких случаев.

1. Атомы или молекулы находятся в сосуде с размерами $a \sim 1$ см. Масса молекулы $m \sim 10^{-23}$ г. Энергии квантованы, но оценим расстояние между уровнями энергии по (3.3.17):

$$\Delta E_n \sim \frac{(3{,}14)^2 \cdot (1{,}05)^2 10^{-54}}{1 \cdot 10^{-23}} n \sim 10^{-30} n\,(\text{эрг}). \qquad (3.3.18)$$

Получаем, что расстояние между уровнями чрезвычайно мало, уровни расположены очень густо. Для наших приборов они представляют практически сплошной спектр. Дискретность уровней никак не сказывается на движении молекул в таком сосуде.

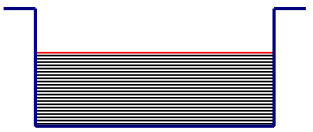


Рис. 3.3.3

2. Примерно те же условия имеем для электронов в металле. Свободные или валентные электроны находятся в «потенциальной яме», размеры которой пусть также порядка $a \sim 1$ см. Тогда расстояние между уровнями (при массе электронов $m \sim 10^{-27}$ г) равно:

$$\Delta E_n \sim 10^{-26} n\,(\text{эрг}) \approx 10^{-14} n\,(\text{эВ}). \qquad (3.3.19)$$

Расстояние между уровнями также чрезвычайно мало, и дискретность уровней не сказывается на движении электронов в металле.

3. Иное дело для электронов, находящихся в яме с размерами порядка размеров атома $a \sim 10^{-8}$ см. В этом случае расстояние между уровнями весьма существенно:

$$\Delta E_n \sim 10^{-10} n\,(\text{эрг}) \approx 10^{2} n\,(\text{эВ}). \qquad (3.3.20)$$

Поэтому в объектах с подобными размерами необходимо учитывать дискретность энергетических уровней.

Дополнение 1. Рассмотрим трехмерную прямоугольную яму с бесконечными стенками. Пусть размеры ямы равны: a, b, c. Внутри ямы потенциальная энергия равна нулю: $U = 0$ при $0 \le x \le a$, $0 \le y \le b$, $0 \le z \le c$. На границах $U = \infty$. Движение частицы в яме происходит независимо вдоль осей x, y и z. Тогда волновая функция может быть пред-

ставлена в виде произведения функций, отдельно зависящих от каждой из координат, и полная функция имеет вид

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\frac{n_1\pi}{a}x \cdot \sin\frac{n_2\pi}{b}y \cdot \sin\frac{n_3\pi}{c}z\,. \qquad (3.3.21)$$

При этом энергия равна сумме энергий движений по всем трем осям:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right) \quad \text{при} \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \ldots \qquad (3.3.22)$$

Когда размеры ямы: a, b, c соизмеримы, либо $a = b$ ($b = c$), либо $a = b = c$ возникают вырожденные уровни энергии. Это когда одному и тому же значению энергии соответствуют несколько состояний, описываемых различными функциями.

3.3.2. Одномерная потенциальная яма с конечными стенками

Рассмотрим одномерную прямоугольную яму со стенками конечной высоты (см. рис. 3.3.4). Определим возможные значения энергии и волновые функции частицы в такой яме. Расположим начало координат на дне ямы симметрично относительно стенок:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -\dfrac{a}{2} < x < \dfrac{a}{2} \\ U_0, & x > \dfrac{a}{2};\ x < -\dfrac{a}{2} \end{cases}. \qquad (3.3.23)$$

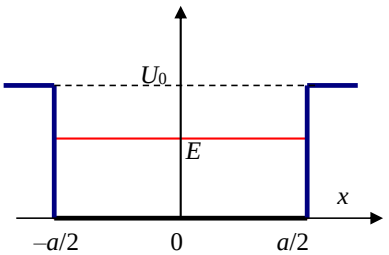


Рис. 3.3.4

Имеем симметричную яму $U(x) = U(-x)$ относительно начала координат, и при решении задачи этим воспользуемся ниже.

Решения уравнения Шредингера рассмотрим в двух областях отдельно: внутри и вне ямы. Для этих областей мы получаем различные решения. Для получения общего решения необходимо «сшивать» эти решения на границе ямы для выполнения условия непрерывности волновой функции и ее производных. Для этого необходимо приравнять значения волновой функции и их производных на границах.

3.3.2.1. Энергия частицы больше глубины ямы

Пусть энергия отсчитывается от дна ямы. При энергии частицы $E > U_0$ имеем непрерывный спектр энергий — частица пролетает над ямой и мо-

жет иметь любую энергию. В самом деле, в области координат внутри самой ямы имеем уравнение типа (3.3.4):

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0. \qquad (3.3.24)$$

Вводя волновое число, как и ранее в (3.3.5) $k_0' = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, записываем решение в этой области:

$$\psi(x) = A_1 \cos k_0' x + B_1 \sin k_0' x. \qquad (3.3.25)$$

В областях вне ямы имеем уравнение:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0. \qquad (3.3.26)$$

Вводя новое волновое число $k_0 = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}$, получаем вне ямы решение аналогичное (3.3.25), но с другими параметрами:

$$\psi(x) = A\cos k_0 x + B\sin k_0 x. \qquad (3.3.27)$$

Далее сшиваем полученные решения (3.3.25) и (3.3.27) на границах ямы $x = \pm a/2$, т. е. при этих координатах приравниваем сами функции и их производные. В силу симметрии относительно начала координат достаточно рассмотреть эти соотношения только при одной границе, например при $x = a/2$.

$$A_1 \cos\frac{k_0' a}{2} + B_1 \sin\frac{k_0' a}{2} = A\cos\frac{k_0 a}{2} + B\sin\frac{k_0 a}{2};$$

$$-A_1 k_0' \sin\frac{k_0' a}{2} + B_1 k_0' \cos\frac{k_0' a}{2} = -Ak_0 \sin\frac{k_0 a}{2} + Bk_0 \cos\frac{k_0 a}{2}.$$

Из полученных уравнений определяются коэффициенты при осциллирующих функциях, и можно легко убедиться, что система уравнений имеет решения при любых k_0'. Это означает, что любые энергии частицы разрешены. Таким образом, при $E > U_0$ имеем сплошной спектр энергий.

3.3.2.2. Энергия частицы меньше высоты ямы $E < U_0$

В этом случае мы получаем дискретный спектр энергий, т. е. получаем связанные состояния, когда волновая функция при удалении ее от ямы стремится к нулю $\psi \to 0$. Для двух областей имеем следующие уравнения и их решения:

1) $|x| < a/2$, $\psi'' + k^2\psi = 0$, $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$,

$$\psi_< = A\sin kx + B\cos kx; \qquad (3.3.28)$$

2) $|x| > a/2$, $\psi'' - \alpha^2\psi = 0$, $\alpha^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = \kappa^2 - k^2$, $\kappa^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}U_0$

$$\psi_> = C_1 e^{-\alpha x} + C_2 e^{\alpha x}. \qquad (3.3.29)$$

Здесь удобно ввести понятие *четности состояний*. Поскольку потенциальная яма симметрична относительно начала координат, то волновая функция также обладает свойствами симметрии. Введем оператор четности $\hat{P}$, определяемый с помощью соотношения:

$$\hat{P}\psi(x) = \lambda\psi(-x). \tag{3.3.30}$$

Собственные числа оператора четности могут быть получены, если повторно подействовать оператором четности $\hat{P}$ на уравнение (3.3.30). При этом получаем исходную волновую функцию:

$$\hat{P}\psi(x) = \lambda^2\psi(x) = \psi(x).$$

Из последнего равенства получаем значения собственных чисел $\lambda = \pm 1$. Когда $\lambda = 1$, то получаем «*четное*» состояние, если $\lambda = -1$, то имеем «*нечетное*» состояние. Легко видеть, что оператор четности коммутирует с гамильтонианом рассматриваемой задачи, поскольку $U(x) = U(-x)$:

$$\left[\hat{P}, \hat{H}\right] = 0. \tag{3.3.31}$$

Таким образом получаем, что четность и энергия одновременно могут иметь определенные значения, значит, все получающиеся состояния имеют определенную четность: *либо нечетные, либо четные*. Рассмотрим эти состояния поочередно.

Нечетные состояния

Запишем решения уравнений (3.3.28) $\psi_<$ и (3.3.29) $\psi_>$ для нечетных состояний

$$\psi_< = A\sin kx;$$
$$\psi_> = \begin{cases} C\exp(-\alpha x), & x > a/2 \\ -C\exp(\alpha x), & x < -a/2 \end{cases}. \tag{3.3.32}$$

Бесконечно растущие решения в областях за пределами ямы не подходят, поскольку волновая функция стремится к бесконечности при $x \to \pm\infty$. Поэтому в (3.3.32) оставляем только затухающие решения. Таким образом, видно, что частица «проникает» в области вне ямы, при этом $L \sim 1/\alpha$ — глубина проникновения частицы под барьер.

Из условия непрерывности волновой функции и ее производной на границе $x = a/2$ получаем следующие соотношения:

$$\begin{cases} A\sin\dfrac{ka}{2} = C\exp\left(-\dfrac{\alpha a}{2}\right) \\ kA\cos\dfrac{ka}{2} = -\alpha C\exp\left(-\dfrac{\alpha a}{2}\right) \end{cases}. \tag{3.3.33}$$

Простейшее решение (3.3.32) изображено на рисунке 3.3.5. Делением верхнего уравнения (3.3.33) на нижнее уравнение получаем

$$\mathrm{tg}\frac{ka}{2} = -\frac{k}{\alpha}. \qquad (3.3.34)$$

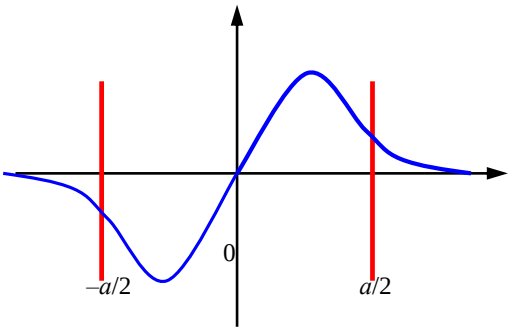


Рис. 3.3.5

Это уравнение, следующее из граничных условий, определяет энергии разрешенных состояний. То же самое уравнение получим в силу симметрии из граничного условия на другой границе при $x = -a/2$, поэтому его не рассматриваем. Введем следующее обозначение:

$$t = ka/2,$$

тогда для правой части (3.3.34) получаем из (3.3.29):

$$\frac{k}{\alpha} = \frac{t}{(a\alpha/2)} = \frac{t}{\sqrt{(\kappa a/2)^2 - (ka/2)^2}} = \frac{t}{\sqrt{\tau^2 - t^2}},$$

где введен параметр *мощности ямы*:

$$\tau = \frac{a}{\hbar}\sqrt{\frac{mU_0}{2}}. \qquad (3.3.35)$$

Итак, для определения спектра (разрешенных уровней энергии) будем решать трансцендентное уравнение:

$$\mathrm{tg}\,t = -\frac{t}{\sqrt{\tau^2 - t^2}}. \qquad (3.3.36)$$

Решения этого уравнения можно проанализировать графически. Для этого на рисунке 3.3.6 построим отдельно правую (фиолетовая (*1*), красная (*2*) и коричневая (*3*) линии для различных значений τ) и левую (зеленые линии (*4*) тангенса) части уравнения. Точки пересечения дают корни уравнения (3.3.36). Из рисунка 3.3.6 видно, что число решений зависит от мощности ямы τ. Чем больше мощность ямы τ, тем больше корней уравнения — больше разрешенных уровней энергии. При уменьшении τ число корней уменьшается. А при мощности $\tau < \pi/2$, т. е. при следующих значениях:

$$mU_0 a^2 < 2\frac{\pi^2}{4}\hbar^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2},$$

корней, соответствующих нечетным состояниям, нет вовсе. При этом напомним, что $t_0 = 0$ и $E_0 = 0$ не являются корнями, так как при этом решение внутри ямы равно $\psi_< = Ax$, которое не удовлетворяет граничным условиям.

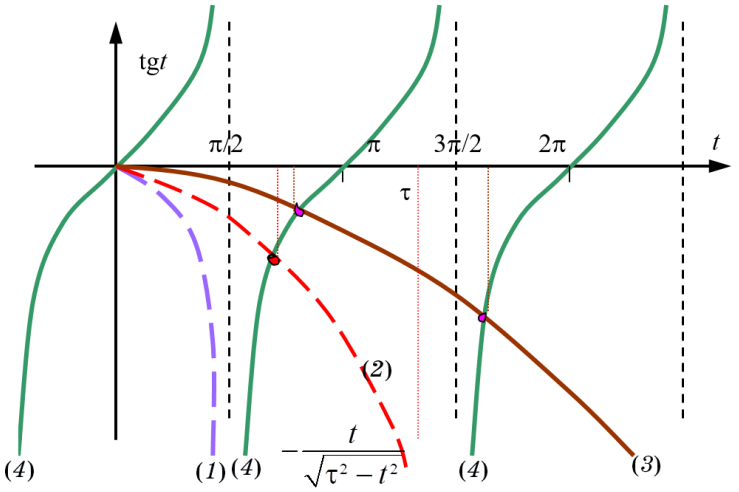


Рис. 3.3.6

Итак, касаясь нечетных дискретных состояний, получаем следующее:

а) при мощности ямы $\tau < \pi/2$ нет дискретных состояний, т. е. когда $U_0 \le \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$;

б) при мощности ямы $\pi/2 < \tau < 3\pi/2$ получаем 1 нечетное состояние;

в) при мощности ямы $3\pi/2 < \tau < 5\pi/2$ имеем 2 нечетных состояний и т. д.

Четные состояния

Запишем теперь решения уравнений (3.3.28) $\psi_<$ и (3.3.29) $\psi_>$ для четных состояний:

$$\begin{cases} \psi_< = B\cos kx \\ \psi_> = D\exp\left(-\alpha|x|\right) \end{cases}. \qquad (3.3.37)$$

На границе ямы при $x = a/2$ запишем условия непрерывности для функции и производной:

$$\begin{cases} B\cos\frac{ka}{2} = D\exp\left(-\frac{\alpha a}{2}\right) \\ -kB\sin\frac{ka}{2} = -\alpha D\exp\left(-\frac{\alpha a}{2}\right) \end{cases}. \qquad (3.3.38)$$

Откуда получаем новое трансцендентное уравнение:

$$\mathrm{tg}\frac{ka}{2} = \frac{\alpha}{k}. \qquad (3.3.39)$$

В силу симметрии граничные условия при $x = -a/2$ дают то же уравнение. Введя те же обозначения: $t = ka/2$ и $\tau = a/\hbar \cdot \sqrt{mU_0/2}$, получаем следующее уравнение для определения спектра:

$$\mathrm{tg}\,t = \frac{\sqrt{\tau^2 - t^2}}{t}. \qquad (3.3.40)$$

Рассмотрим также графически возможные решения этого уравнения, построив отдельно правую и левую части уравнения на рисунке 3.3.7. Точки пересечения дают корни этого уравнения. Правая в равенстве функция уменьшается от бесконечного значения при $t = 0$ и обрывается при $t = \tau$. Из рисунка 3.7 видно, что при всех возможных значениях параметра τ всегда есть хотя бы одно решение. Чем больше мощность ямы τ, тем больше четных решений. Итак, получаем:

1) при мощности ямы $\tau < \pi$ имеем 1 четное решение, т. е. при $U_0 \le 4 \cdot \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$;

2) при мощности $\pi < \tau < 2\pi$ получаем 2 четных решения;

3) при мощности $2\pi < \tau < 3\pi$ получаем 3 четных решения и т. д.

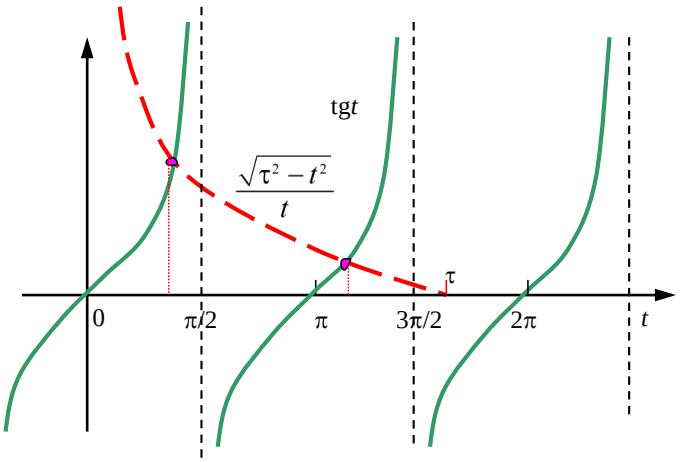


Рис. 3.3.7

Для того чтобы яснее понять появление уровней в яме, рассмотрим «мелкую» яму, т. е. для которой параметр мощности $\tau \ll 1$. Для такой ямы достаточно легко найти энергию единственного четного состояния ($t \le \tau \ll 1$). Из (3.3.40), разложив тангенс в ряд, получаем

$$\mathrm{tg}\,t \approx t = \frac{\sqrt{\tau^2 - t^2}}{t}.$$

Решая это уравнение и учитывая, что t и τ одного порядка, имеем

$$t^2 = \tau^2 - t^4 \approx \tau^2 - \tau^4.$$

Далее, вспоминая, что введенные параметры равны $t = ka/2$ и $\tau = a/\hbar \cdot \sqrt{mU_0/2}$, записываем выражение для квадрата волнового числа:

$$k^2 = \frac{4}{a^2}t^2 \approx \frac{4}{a^2}\frac{a^2}{\hbar^2}\frac{mU_0}{2}\left(1 - \frac{a^2}{\hbar^2}\frac{mU_0}{2}\right) = \frac{2mU_0}{\hbar^2}\left(1 - \frac{a^2}{\hbar^2}\frac{mU_0}{2}\right).$$

Для энергии получаем

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2m}\frac{2m}{\hbar^2}U_0\left(1 - \frac{ma^2}{2\hbar^2}U_0\right) = U_0\left(1 - \frac{ma^2}{2\hbar^2}U_0\right). \qquad (3.3.41)$$

Получаем, что первый (четный) уровень энергии в мелкой яме $\tau \ll 1$ находится у самого «верха» ямы. Иначе говоря, $E \approx U_0$, хотя и чуть меньше этого значения на малую величину $\tau^2 = \frac{ma^2}{2\hbar^2}U_0^2$.

Подытожим полученное. Число уровней в одномерной яме с конечными стенками — конечно, но при этом всегда существует хотя бы одно связанное состояние. При малой глубине и ширине, иначе говоря, мощности ямы, в яме имеется только один уровень — четный уровень. С ростом U_0 и a растет мощность ямы, и появляются новые уровни при прохождении параметром τ значений $\tau = \pi n/2$, где n — целое число. Четные и нечетные уровни появляются по очереди, причем вначале четные. Уровни энергии E_n в спектре нумеруется главными квантовыми числами n = 1,2,3,.... Причем нечетным значениям n соответствуют четные состояния, а четным n — нечетные.

Качественное поведение волновых функции низших состояний показано на рисунке 3.3.8. Возводя в квадрат эти волновые функции, получаем плотность вероятности нахождения частицы при данной координате.

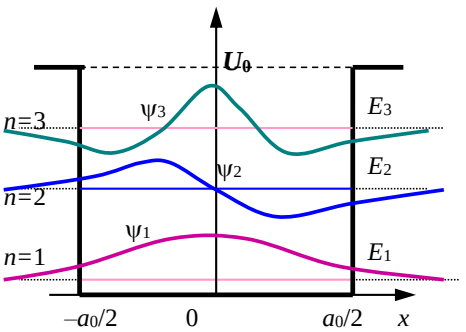


Рис. 3.3.8

Важно отметить, что *частица может некоторое время существовать в классически запрещенной зоне*, где $U_0 > E$.

Примечание 34. В одномерной потенциальной яме хотя бы один уровень существует всегда, но это не так в трехмерной потенциальной яме. Для нее существование хотя бы одного уровня зависит от «мощности» потенциальной ямы:

a^2U_0, где U_0 — глубина ямы, а a — ее размер. При малых мощностях ямы энергия частицы тоже должна быть малой, т. е. частица имеет большую длину волну де Бройля, и она как бы не «помещается» внутри ямы.

3.4. Потенциальные барьеры

3.4.1. Понятие потенциального барьера. Прямоугольная ступенька

Одномерный потенциальный барьер определяется зависимостью потенциальной энергии от координаты $U = U(x)$. Если на каком-то участке координаты x потенциальная энергия возрастает (или падает), то говорят об одномерной потенциальной ступеньке (см. рис. 3.4.1).

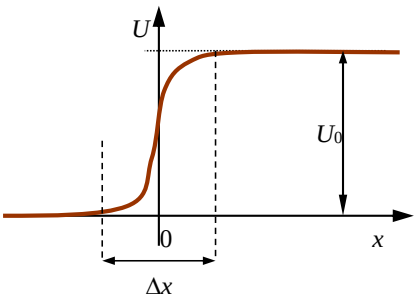


Рис. 3.4.1

Напомним, что происходит при классическом рассмотрении этого процесса:

1) если энергия налетающей частицы $E < U_0$, тогда частица с достоверностью отражается от барьера и в правую область не проникает;

2) если ее энергия $E > U_0$, тогда частица с достоверностью проходит над барьером и в правой области она движется с меньшей кинетической энергией $E_1 = E - U_0$ и, соответственно, с меньшей скоростью $v = 2/m\sqrt{E - U_0}$.

В качестве примера рассмотрим такую задачу, когда на одномерную потенциальную ступеньку налетает частица с энергией E. При выполнении условия, что размер области изменения потенциальной энергии Δx мал по сравнению с волной де Бройля налетающей частицы:

$$\Delta x \le \frac{2\pi\hbar}{mv}, \tag{3.4.1}$$

можно считать барьер достаточно быстро растущим и заменить его прямоугольным потенциальным барьером, изображенным на рисунке 3.4.2. Его потенциальная энергия такой «ступеньки» записывается в виде

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x \ge 0 \end{cases}. \tag{3.4.2}$$

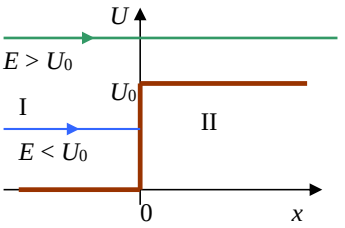


Рис. 3.4.2

В рамках квантовомеханического рассмотрения решается уравнение Шредингера в области до потенциального порога $x < 0$ и после порога $x > 0$, а затем решения «сшиваются» на границе ($x = 0$).

Будем рассматривать уравнение Шредингера для частицы с энергией E в двух областях пространства: в области I — до потенциальной ступеньки ($-\infty < x < 0$) и в области II — после ступеньки ($x > 0$). При этом необходимо отдельно рассмотреть оба возможных случая, когда энергия частицы меньше величины барьера $E < U_0$ и когда больше барьера $E > U_0$.

Этот вопрос удобно проработать самостоятельно, поскольку прямоугольная ступенька является частным случаем прямоугольного барьера, рассмотренного в следующем пункте этого параграфа (см. также Сивухин Д. В., том 5, часть 1. Атомная и ядерная физика, § 28). Итак, обратимся к задаче о частице, налетающей на прямоугольный потенциальный барьер.

3.4.2. Прямоугольный потенциальный барьер

Рассмотрим прямоугольный потенциальный барьер (см. рис. 3.4.3). Его потенциальная энергия запишется:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 \le x \le a \\ 0, & x > a \end{cases}. \qquad (3.4.3)$$

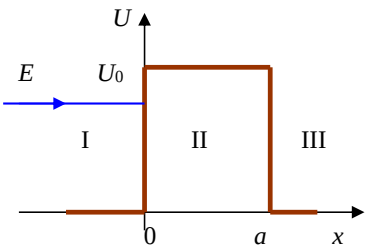


Рис. 3.4.3

В основном нас будет интересовать случай, когда падающие на барьер частицы имеют полную энергию меньшую, чем высота барьера: $E < U_0$. Это тот случай, когда по классической физике частица отразится от барьера и не проникнет в область $x > 0$.

Итак, пусть на барьер налетает поток частиц из бесконечности вдоль оси x (из $-\infty$). Разобьем пространство на три части. Далее будем решать стационарное уравнение Шредингера последовательно в трех областях I, II и III, отмеченных на рисунке 3.4.3.

В I и III областях имеем уравнение Шредингера, описывающее движение свободной частицы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi,\quad \psi''+k^2\psi=0,\quad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3.4.4}$$

и его решения в этих областях записываются, соответственно:

I область

$$\psi(x)=A\exp(ikx)+B\exp(-ikx); \tag{3.4.5}$$

III область

$$\psi(x)=G\exp(ikx)+F\exp(-ikx). \tag{3.4.6}$$

Во II области имеем следующее уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U_0\psi=E\psi,\quad \psi''-\alpha^2\psi=0,\quad \alpha=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)} \tag{3.4.7}$$

и при условии $E<U_0$ получаем следующее решение уравнения (3.4.7):

II область

$$\psi(x)=C\exp(\alpha x)+D\exp(-\alpha x). \tag{3.4.8}$$

Волна, описываемая экспонентой exp(ikx), распространяется в положительном направлении оси x, а волна, описываемая exp(-ikx), — в обратном направлении. В III области не будет волны, распространяющейся в обратном направлении оси x: Fexp($-ikx$), так как из области ($x = \infty$) нет потока частиц, идущих к барьеру.

Итак, полное решение можно записать в виде

$$\psi(x)=\begin{cases} A\exp(ikx)+B\exp(-ikx) & x<0 \\ C\exp(\alpha x)+D\exp(-\alpha x) & 0\le x\le a \\ G\exp(ikx) & x>a \end{cases}. \tag{3.4.9}$$

Произведем сшивание волновых функций на границах барьера, поскольку полная волновая функция и ее первая производная должны быть непрерывны во всем пространстве. Условия на границах барьера образуют систему уравнений для определения коэффициентов A, B, C, D и G:

При $x = 0$

$$\begin{cases} A+B=C+D \\ ik(A-B)=\alpha(C-D) \end{cases}. \tag{3.4.10}$$

При $x = a$

$$\begin{cases} C\exp(\alpha a) + D\exp(-\alpha a) = G\exp(ika) \\ \alpha\left(C\exp(\alpha a) - D\exp(-\alpha a)\right) = ikG\exp(ika) \end{cases}. \qquad (3.4.11)$$

Введем коэффициенты *отражения* и *прохождения* как отношение плотностей потока вероятностей (2.6.8) (аналогично тому, как в оптике рассматривали плотности потока энергии для определения подобных коэффициентов):

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right). \qquad (3.4.12)$$

В I области плотность потока вправо по оси x определяется через волну, распространяющуюся вдоль положительного направления оси x: $\psi_1 = A\exp(ikx)$. Подставляя ее в (3.4.12), имеем:

$$\begin{aligned} j_1 = \frac{i\hbar}{2m}(A^2\exp(ikx)(-ik)\exp(-ikx) - \\ -A^2\exp(-ikx)(ik)\exp(ikx)) = \frac{\hbar k}{m}A^2. \end{aligned} \qquad (3.4.13)$$

Плотность потока влево против оси x в I области определяется волной $\psi_2 = B\exp(-ikx)$:

$$j_2 = \frac{i\hbar}{2m}ikB^2 = -\frac{\hbar k}{m}B^2. \qquad (3.4.14)$$

Коэффициент отражения определяют как отношение плотностей потоков:

$$R = \left|\frac{j_2}{j_1}\right| = \left|\frac{B}{A}\right|^2. \qquad (3.4.15)$$

Поток вероятности прошедшей волны определяется волновой функцией $\psi = G\exp(ik_3x)$, $k_3 = k_1$, и тогда *коэффициент прохождения* получаем аналогично как отношение потоков:

$$T = \left|\frac{j_3}{j_1}\right| = \left|\frac{k_3G^2}{k_1A^2}\right| = \left|\frac{G}{A}\right|^2. \qquad (3.4.16)$$

Решая систему уравнений (3.4.10)–(3.4.11) и учитывая, что все коэффициенты в (3.4.9) выражаются через A, можно найти следующее выражение для коэффициента прохождения (см. Приложение 4):

$$\begin{aligned} T = \frac{4(\alpha/k)^2}{\left(1+\alpha^2/k^2\right)^2 Sh^2\alpha a + 4\alpha^2/k^2} = \\ = \frac{1}{1+\left(\left(1+\alpha^2/k^2\right)^2/4\alpha^2/k^2\right)Sh^2\alpha a}, \end{aligned} \qquad (3.4.17)$$

где гиперболический синус определяется:

$$Shx = \frac{e^x - e^{-x}}{2}. \qquad (3.4.18)$$

Приложение 4. Покажем, как получается одно из решений системы уравнений (3.4.10)–(3.4.11). В первой паре уравнений (3.4.10) сложим два уравнения, избавляясь от коэффициента B:

$$2A = -i\frac{\alpha}{k}(C - D) + C + D = C\left(1 - i\frac{\alpha}{k}\right) + D\left(1 + i\frac{\alpha}{k}\right).$$

Во второй паре уравнений (3.4.11) делим на α второе уравнение, затем складываем и вычитаем, получая следующие два соотношения:

$$2Ce^{\alpha a} = Ge^{ika}\left(1 + i\frac{k}{\alpha}\right);$$

$$2De^{-\alpha a} = Ge^{ika}\left(1 - i\frac{k}{\alpha}\right).$$

Выражая отсюда $2C$ и $2D$, подставим их в предыдущее уравнение:

$$4A = \left(1 - i\frac{\alpha}{k}\right)\left(1 + i\frac{\alpha}{k}\right)Ge^{ika - \alpha a} + \left(1 + i\frac{\alpha}{k}\right)\left(1 - i\frac{\alpha}{k}\right)Ge^{ika + \alpha a}.$$

Преобразуем, раскрывая скобки и перегруппировав:

$$4A = 2Ge^{ika}\left(e^{\alpha a} + e^{-\alpha a}\right) + iGe^{ika}\left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)\left(e^{\alpha a} - e^{-\alpha a}\right).$$

Введем гиперболический косинус и гиперболический синус:

$$Ch\alpha a = \frac{1}{2}\left(e^{\alpha a} + e^{-\alpha a}\right), \quad Sh\alpha a = \frac{1}{2}\left(e^{\alpha a} - e^{-\alpha a}\right).$$

Для них выполняется теорема Пифагора:

$$Ch^2\alpha a - Sh^2\alpha a = 1.$$

Тогда получаем для $2A$:

$$2A = 2Ge^{ika}Ch\alpha a + iGe^{ika}\left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)Sh\alpha a.$$

Возведем по модулю в квадрат:

$$4A^2 = G^2\left[4Ch^2\alpha a + \left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)^2 Sh^2\alpha a\right].$$

Откуда раскрывая скобки и учитывая теорему Пифагора, получаем для отношения квадратов:

$$\frac{G^2}{A^2} = \frac{4}{4 + \left(\frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}\right)^2 Sh^2\alpha a} = \frac{4\alpha^2/k^2}{\left(1 + \frac{\alpha^2}{k^2}\right)^2 Sh^2\alpha a + 4\frac{\alpha^2}{k^2}},$$

что совпадает с (3.4.17).

Энергетический коэффициент прохождения T можно выразить через энергию частицы E и высоту барьера U_0, используя отношение волновых чисел (3.4.4) и (3.4.7)

$$\alpha/k = \sqrt{(U_0 - E)/E} = \sqrt{U_0/E - 1}. \qquad (3.4.19)$$

При этом получаем окончательное выражение для коэффициента прохождения:

$$T = \left(1 + \frac{U_0^2 Sh^2 \alpha a}{4E(U_0 - E)}\right)^{-1}. \qquad (3.4.20)$$

Исследуем коэффициенты прохождения и отражения.

1. Коэффициент прохождения не равен нулю $T \neq 0$ при полной энергии частицы меньшей высоты потенциального барьера $E < U_0$. Это явление называется *туннельным эффектом*. Качественно поведение волновой функции изображено на рисунке 3.4.4. В классической физике ничего подобного нет, туннельная эффект — чисто квантовый эффект.

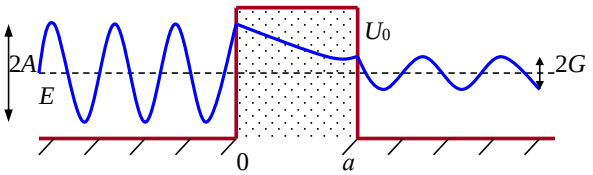


Рис. 3.4.4

2. При условии $\alpha a \gg 1$ можно упростить выражение для коэффициента прохождения T:

$$T \approx \frac{4(\alpha/k)^2 \cdot 2^2}{(1 + \alpha^2/k^2)^2 \exp(2\alpha a)} = \frac{16(\alpha/k)^2}{(1 + \alpha^2/k^2)^2} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} a \sqrt{2m(U_0 - E)}\right). \qquad (3.4.21)$$

То есть коэффициент прохождения определяется затухающей экспонентой:

$$T \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} a \sqrt{2m(U_0 - E)}\right)$$

показатель которой зависит от ширины барьера и от разности между высотой барьера и полной энергии частицы. Чем выше эта разница, тем меньше коэффициент прохождения.

3. Коэффициент прохождения T, или вероятность туннелирования частицы через барьер, стремится к 0 в следующих предельных случаях:

а) $a \to \infty$ (т. е. в случае потенциальной прямоугольной ступеньки);

б) $U_0 \to \infty$ (случай бесконечно высокого барьера);

в) $m \to \infty$ (тяжелая частица);

г) $\hbar \to 0$ (переход к классическому рассмотрению).

4. Коэффициент отражения определяется соотношением (3.4.15): $R = |B/A|^2$. Подставляя решения системы уравнений (3.4.10)–(3.4.11), получаем выражение для коэффициента отражения частицы от барьера при энергии $E < U_0$:

$$R = \frac{\frac{(k^2+\alpha^2)^2}{4k^2\alpha^2} Sh^2\alpha a}{1+\frac{(k^2+\alpha^2)^2}{4k^2\alpha^2} Sh^2\alpha a} = \frac{\frac{U_0^2 Sh^2\alpha a}{4E(U_0-E)}}{1+\frac{U_0^2 Sh^2\alpha a}{4E(U_0-E)}}. \qquad (3.4.22)$$

5. Как и должно быть из закона сохранения потока вероятности, имеем

$$R + T = 1. \qquad (3.4.23)$$

Рассмотрим теперь кратко случай $E > U_0$.

При условии $E > U_0$ решения получаются тем же путем, как и было сделано выше, только в области II имеем решение, описывающее движение свободной частицы с действительным волновым числом:

$$\alpha = \sqrt{2m(E-U_0)}/\hbar.$$

В результате решения мы получаем те же формулы для коэффициентов прохождения и отражения, в которых только параметр «α» меняем на «$i\alpha$» (вследствие изменения знака под корнем в выражении (3.7.4)) и, соответственно, гиперболический синус «*Sh*» на «–*iSin*»:

$$T = \frac{4(\alpha/k)^2}{\left[1-(\alpha/k)^2\right]^2 \sin^2\alpha a + 4(\alpha/k)^2} = \left(1+\frac{\left[1-(\alpha/k)^2\right]^2}{4(\alpha/k)^2}\sin^2\alpha a\right)^{-1}; \qquad (3.4.24)$$

$$R = \frac{\left[1-(\alpha/k)^2\right]^2 \sin^2\alpha a}{\left[1-(\alpha/k)^2\right]^2 \sin^2\alpha a + 4(\alpha/k)^2}. \qquad (3.4.25)$$

Таким образом, в общем случае даже при энергиях частицы выше высоты барьера мы получаем коэффициент отражения, не равный нулю $R \neq 0$, а коэффициент прохождения $T < 1$.

Вывод состоит в том, что квантовая частица может отразиться от барьера и при энергии, превышающей величину барьера, $E > U_0$, когда по классической механике частица проходит с достоверностью, равной единице, над барьером.

Однако есть такие характерные энергии частицы, когда коэффициент отражения равен 0, а коэффициент прохождения равен 1. Эти энергии находятся из условия:

$$\sin\alpha a = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha a = n\pi \quad \Rightarrow \quad \alpha^2 = 2m(E-U_0)/\hbar^2;$$

$$E_n = U_0 + \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2. \qquad (3.4.26)$$

При таких энергиях E частица пролетает над барьером с достоверностью, равной единице, и в случае квантового рассмотрения. Заметим, что при этом целое число полуволн де Бройля укладывается на ширине барьера, чему соответствует условие $\alpha a = n\pi$ (см. рис. 3.4.5).

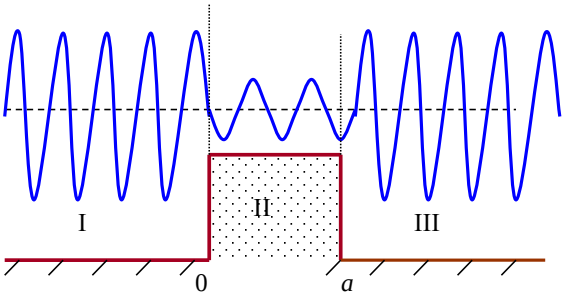


Рис. 3.4.5

Примечание 35. Аналогичное решение для коэффициентов прохождения и отражения получаем для барьера в виде прямоугольной ямы (рис. 3.4.6), при этом в формулах меняется только «U_0» на «$-U_0$». Отметим, что и в этой задаче в общем случае коэффициент отражения не равен нулю, хотя по классическим представлениям частица проходит над ямой с достоверностью. Коэффициент прохождения обращается в единицу только для таких энергий, когда размер ямы соответствует целому числу полуволн де Бройля.

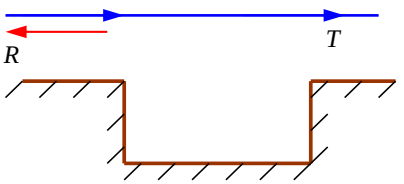


Рис. 3.4.6

3.4.3. Барьер произвольной формы

Если барьер имеет произвольную форму $U = U(x)$, то задача о прохождении частицы усложняется, однако часто такую задачу можно решить приближенно, когда величина барьера достаточно плавно меняется с расстоянием.

Пусть энергия частицы $E = \text{const}$ и тогда равенство $E = U(x)$ определяет 2 точки a и b, где частица классически «входит» под барьер и «выходит» из барьера (см. рис. 3.4.7). Сам барьер можно представить в виде суммы прямоугольных барьеров, причем прохождение каждого из них рассматривать отдельно, как это делали ранее.

Приближенно задачу можно решить, если барьеры достаточно широкие, и при этом импульс $p(x)$ и соответствующая волна де Бройля

$\lambda = 2\pi\hbar / p(x)$ медленно меняются на расстоянии ~ λ. Это условие математически записывается в следующем виде:

$$\lambda \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| << \lambda . \qquad (3.4.27)$$

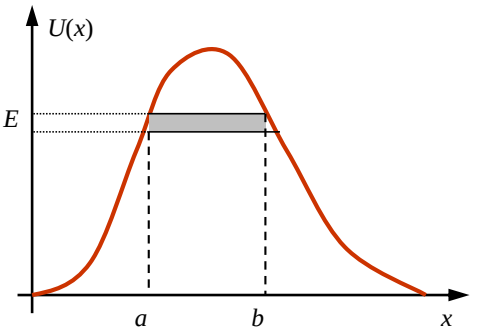


Рис. 3.4.7

Соотношение (3.4.27) определяет условие применения так называемого *квазиклассического приближения*. В самом деле, воспользуемся описанием изменения волновой функции при распространении частицы в пространстве с постоянным потенциалом, а именно:

$$\psi(x) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar} px},$$

где $p(x)$ = const (здесь временной множитель $e^{\frac{i}{\hbar}Et}$ опустили, так как он не существенен для определения координатной зависимости).

Разбивая барьер на маленькие прямоугольные барьеры шириной Δx, как показано на рисунке 3.4.8, можно считать, что на ширине Δx такого барьера $U(x)$ = const и импульс частицы не меняется

$$p(x) = \sqrt{2m(E - U)} \approx \text{const} .$$

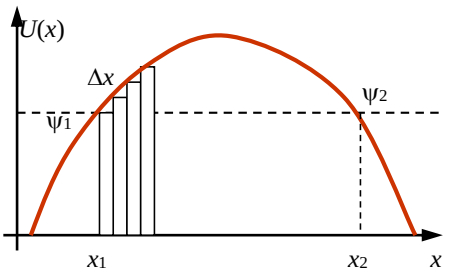


Рис. 3.4.8

Тогда можно записать последовательное приближенное изменение волновой функции при переходе от одного узкого барьера к другому:

$$\psi(x+\Delta x)\approx\psi(x)e^{\frac{i}{\hbar}p(x)\Delta x};$$

$$\psi(x+2\Delta x)\approx\psi(x+\Delta x)e^{\frac{i}{\hbar}p(x+\Delta x)\Delta x};$$

$$\psi(x+3\Delta x)\approx\psi(x+2\Delta x)e^{\frac{i}{\hbar}p(x+2\Delta x)\Delta x}$$

и т. д.

Складывая все изменения волновой функции на каждом барьере, получаем связь волновой функции ψ_2 на выходе из барьера с волновой функцией ψ_1 на входе в барьер:

$$\psi_2\approx\psi_1\exp\left(\frac{i}{\hbar}\left[p(x)\Delta x+p(x+\Delta x)\Delta x+p(x+2\Delta x)\Delta x+...\right]\right)=$$
$$=\psi_1\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}p(x)dx\right). \qquad (3.4.28)$$

Коэффициент прохождения через барьер произвольной формы приближенно равен отношению квадратов амплитуд:

$$T\approx\left|\frac{\psi_2}{\psi_1}\right|^2\approx\left|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}p(x)dx\right)\right|^2=\left|\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U(x)-E)}dx\right)\right|^2.$$

Здесь в интеграле под корнем мы поменяли местами потенциальную и полную энергии частицы. Окончательно коэффициент прохождения равен:

$$T=T_0\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2m(U(x)-E)}dx\right\}. \qquad (3.4.29)$$

Это выражение позволяет найти коэффициент прохождения через барьер произвольной формы в квазиклассическом приближении.

3.5. Физические явления, связанные с туннельным эффектом

3.5.1. Контактная разность потенциалов

Электронную структуру металлических образцов рассматриваем с точки зрения простейшей модели металла: валентные и делокализованные электроны находятся в поле потенциальной ямы с конечными стенками, образованной положительными ионами решетки. Делокализованные электроны движутся в усредненном потенциальном поле ионов и заполняют уровни энергии от дна потенциальной ямы до максимальной энергии — энергии Ферми.

Глубина потенциальной ямы и уровень Ферми для различных металлов в принципе имеют разную энергию. Сблизим 2 куска разных металлов друг с другом так, чтобы зазор между ними стал небольшим — порядка размеров

атома (~ 10^{-8} см). Тогда между двумя металлами возникает узкий потенциальный барьер, через который электроны с большой вероятностью могут туннелировать, т. е. переходить из одного металла в другой на свободные уровни выше уровня Ферми (см. рис. 3.5.1). Так будет происходить до тех пор, пока не установится статистическое равновесие. Это равновесие установится, когда уровни Ферми обоих металлов сравняются. Но при этом электрические потенциалы металлов изменятся, так как заряд переходит с одного металла на другой, и, следовательно, *возникает контактная разность потенциалов*.

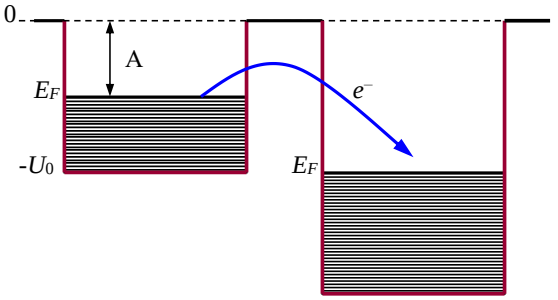


Рис. 3.5.1

3.5.2. Явление холодной эмиссии

При приложении к поверхности металла внешнего электрического поля (~ 10^6 В/см), с поверхности металла вылетают электроны. Такая эмиссия называется *холодной эмиссией*.

Будем отсчитывать потенциальную энергию от дна потенциальной ямы, описывающей состояние валентных электронов в металле. При нрмальных условиях работа выхода равна $A = U_0 - E_F$ (см. рис. 3.5.2), т. е. электрон должен получить энергию $E \geq A$, чтобы оказаться в области $x > 0$.

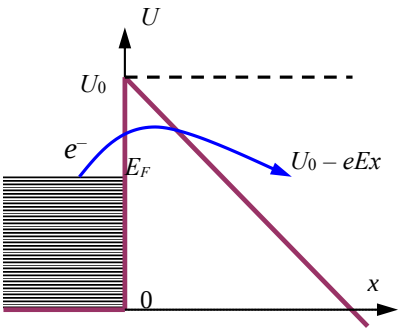


Рис. 3.5.2

При включении внешнего электрического поля напряженностью E потенциальная энергия на границе металл — вакуум определяется

$$U(x)=\begin{cases} 0 & x<0 \\ U_0-eEx & x>0 \end{cases}.$$

Возникает потенциальный барьер между металлом и вакуумом для электронов, находящихся в металле, как показано на рисунке 3.5.2. При этом электроны с заполненных энергетических уровней в металле могут проходить под барьером («туннелировать») и переходить из объема металла в пространство за поверхностью металла, где будут ускоряться во внешнем электрическом поле. Явление холодной эмиссии — яркое доказательство проявления туннельного эффекта.

Чем сильнее напряженность электрического поля, тем больше выход электронов. На этом принципе разработан *туннельный микроскоп*. Тонкая игла сканирует поверхность вещества и одновременно создает электрическое поле. За счет туннельного эффекта электроны переходят с поверхности на иглу, что можно фиксировать возникающим током в цепи, связанной с иглой. Чем меньше расстояние от иглы до поверхностных атомов (молекул или структурных особенностей), тем сильнее туннельный эффект и возникающий ток.

3.6. Линейный гармонический осциллятор

3.6.1. Классический осциллятор

Задача об осцилляторе одна из самых важных задач в механике, электромагнетизме и в квантовой механике. Сложное периодическое или колебательное движение можно свести к совокупности так называемых нормальных колебаний, эквивалентных колебаниям гармонического осциллятора (см. [1], глава 4).

Напомним рассмотрение осциллятора в классической механике. Упругая возвращающая сила равна $F=-kx$, при этом уравнение Ньютона имеет вид

$$m\ddot{x}=-kx, \tag{3.6.1}$$

или иначе, уравнение, описывающее гармоническое колебательное движение (осциллятор):

$$\ddot{x}+\omega^2 x=0, \tag{3.6.2}$$

где частота колебаний $\omega=\sqrt{k/m}$. Решение уравнения (3.6.2) имеет вид:

$$x=a\cos(\omega t+\varphi). \tag{3.6.3}$$

Ранее в курсе электромагнетизма (см. [4], глава 1, § 1.10) также получали интенсивность (мощность) излучения ускоренно движущегося заряда:

$$P(t)=\frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\ddot{x}^2. \tag{3.6.4}$$

Средняя интенсивность излучения есть мощность излучения:

$$\langle P\rangle = \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\left\langle (\ddot{x})^2\right\rangle = \frac{e^2a^2\omega^4}{3c^3}. \qquad (3.6.5)$$

Энергия гармонического осциллятора равна

$$E = T + U = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{kx^2}{2} \Rightarrow \frac{m\omega^2a^2}{2}. \qquad (3.6.6)$$

Тогда мощность излучения пропорциональна энергии осциллятора

$$\langle P\rangle = \frac{2e^2\omega^2}{3mc^3}E. \qquad (3.6.7)$$

В классической механике колебательное движение характеризуется следующими параметрами:

1) интенсивность излучения;
2) частота излучения;
3) энергия осциллятора.

При этом отметим, что энергия осциллятора может принимать произвольное значение.

3.6.2. Квантовый осциллятор

Потенциальная энергия одномерного гармонического осциллятора, изображенная на рисунке 3.6.1, записывается в виде ([1], глава 4):

$$U(x) = \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2.$$

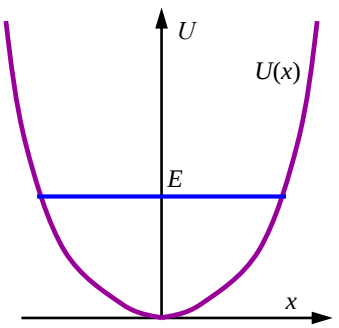


Рис. 3.6.1

Задачу о квантовом одномерном осцилляторе решим точно, разбивая ее решение на отдельные этапы.

Уравнение Шредингера для одномерного осциллятора имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2x^2}{2}\psi(x) = E\psi(x). \qquad (3.6.8)$$

Граничные условия состоят в том, что волновая функция убывает на больших расстояниях:

$$\psi(\pm\infty) = 0. \qquad (3.6.9)$$

Из качественных физических представлений получаем, что в области энергий $E > U$ решение должно иметь вид «плоских волн», но искаженных зависимостью потенциала от координаты, а в «запрещенной» области $E < U$ — затухающие решения. Перепишем уравнение (3.6.8) в виде

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi = 0. \qquad (3.6.10)$$

Для упрощения записи и решения уравнения введем новые обозначения переменных и констант. Так, введем безразмерную константу λ

$$\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}. \qquad (3.6.11)$$

и вместо координаты x переменную ξ

$$\xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \qquad \text{или} \qquad x^2 = \frac{\hbar}{m\omega}\xi^2. \qquad (3.6.12)$$

Вычисляя производные

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{d\xi}\frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\psi'_\xi, \qquad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar}\psi''_\xi, \qquad (3.6.13)$$

подставляем их в (3.6.10). Сокращая, получаем следующее уравнение:

$$\psi''_\xi + \left(\lambda - \xi^2\right)\psi = 0. \qquad (3.6.14)$$

Последовательное решение этого уравнения представлено ниже в Приложении 5.

Приложение 5. Исследуем и решим уравнение (3.6.14) поэтапно.

1. *Асимптотическое решение уравнения*. Рассмотрим асимптотические решения при $\xi \to \pm\infty$. Тогда уравнение приобретает вид

$$\psi''_\infty - \xi^2\psi_\infty = 0. \qquad (3.6.15)$$

Ищем решение (3.6.15) в виде

$$\psi_\infty = \exp\left(\gamma\xi^2\right), \qquad (3.6.16)$$

где γ — постоянная. При этом вторая производная равна

$$\psi''_\infty = 2\gamma\left(2\gamma\xi^2 + 1\right)\exp\left(\gamma\xi^2\right).$$

Здесь еще раз воспользуемся тем, что $\xi \to \pm\infty$, тогда вторая производная равна:

$$\psi''_\infty \approx 4\gamma^2\xi^2\exp\left(\gamma\xi^2\right). \qquad (3.6.17)$$

Подставляем (3.6.17) в уравнение (3.6.15):

$$4\gamma^2\xi^2\exp\left(\gamma\xi^2\right) - \xi^2\exp\left(\gamma\xi^2\right) = 0.$$

Откуда получаем параметр γ:

$$\gamma = \pm\frac{1}{2}. \qquad (3.6.18)$$

Тогда асимптотическое решение уравнения имеет вид линейной комбинации двух решений, соответствующих двум значениям параметра γ:

$$\psi_\infty(\xi) = C_1 \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) + C_2 \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right).$$

Исходя из граничных условий (3.6.9): при $\xi \to \pm\infty$ должно быть $\psi \to 0$, тогда получаем $C_2 = 0$. Итак, решение на бесконечности (коэффициент перед экспонентой не существенен) имеет вид затухающей экспоненты:

$$\psi_\infty(\xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right). \tag{3.6.19}$$

2. <u>*Выделение асимптотического решения из общего решения*</u>. Ищем решение в виде произведения:

$$\psi = \psi_\infty(\xi) \cdot u(\xi) = \exp\left(-\xi^2/2\right) \cdot u(\xi). \tag{3.6.20}$$

Снова считаем вторую производную:

$$\begin{gathered}\psi''_\xi = \left(-\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} u(\xi) + e^{-\frac{\xi^2}{2}} u'(\xi)\right)'_\xi = \\ = e^{-\frac{\xi^2}{2}}\left[-u(\xi) - \xi u'(\xi) + \xi^2 u(\xi) - \xi u'(\xi) + u''(\xi)\right] = \\ = e^{-\frac{\xi^2}{2}}\left[u'' - 2\xi u' + (\xi^2 - 1)u\right].\end{gathered} \tag{3.6.21}$$

Подставляя в уравнение (3.6.14), получаем уравнение для функции $u(\xi)$:

$$u'' - 2\xi u' + (\lambda - 1)u = 0. \tag{3.6.22}$$

3. <u>*Решение в виде ряда*</u>. Решение уравнения (3.6.22) ищем в виде ряда по степеням ξ:

$$u(\xi) = b_\nu \xi^\nu + b_{\nu+1}\xi^{\nu+1} + b_{\nu+2}\xi^{\nu+2} + \ldots = \sum_{k=\nu}^{\infty} b_k \xi^k. \tag{3.6.23}$$

Начальную степень ν определим из условия, чтобы $u(\xi)$ нигде в бесконечность не обращалась. Подставим (3.6.23) в (3.6.22), предварительно сосчитав производные:

$$u'(\xi) = \sum_{k=\nu}^{\infty} k b_k \xi^{k-1};$$

$$u''(\xi) = \sum_{k=\nu}^{\infty} k(k-1) b_k \xi^{k-2}.$$

Тогда получаем

$$\sum_{k=\nu}^{\infty} k(k-1) b_k \xi^{k-2} - 2\xi \sum_{k=\nu}^{\infty} k b_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1)\sum_{k=\nu}^{\infty} b_k \xi^k = 0$$

или

$$\sum_{k=\nu}^{\infty}\left[k(k-1) b_k \xi^{k-2} - 2k b_k \xi^k + (\lambda - 1) b_k \xi^k\right] = 0. \tag{3.6.24}$$

Приравнивая нулю слагаемые с одинаковыми степенями ξ – ξ^k, определяем начальные степени искомого ряда:

1) при $k=\nu$, $\nu(\nu-1)b_\nu\xi^{\nu-2}=0$, откуда получаем: $\nu = 0$ или $\nu = 1$;

2) при $k=\nu+1$, $(\nu+1)\nu b_{\nu+1}\xi^{\nu-1}=0$, откуда получаем $\nu = 0$, что не дает ничего нового, или $\nu = -1$.

Однако начало ряда со степени $\nu = -1$ не годится, поскольку слагаемое ξ^{-1} расходится при стремлении ξ к нулю $\xi \to 0$.

В общем случае из равенства нулю коэффициентов при одинаковых степенях ξ^k имеем

$$(k+2)(k+1)b_{k+2}\xi^{k-2+2}+(\lambda-1-2k)b_k\xi^k=0,$$

и тогда получаем рекуррентное соотношение для коэффициентов:

$$b_{k+2}=\frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)}b_k. \qquad (3.6.25)$$

Общее рекуррентное соотношение позволяет вычислить коэффициенты ряда через единицу. Ряды могут начинаться с $\nu = 0$ (четные степени ξ) или с $\nu = 1$ (нечетные степени ξ). Итак, имеем 2 возможных решения (3.6.22) в виде двух рядов:

$$\begin{cases} u_1=b_0+b_2\xi^2+b_4\xi^4+b_6\xi^6+\ldots \\ u_2=b_1\xi^1+b_3\xi^3+b_5\xi^5+b_7\xi^7\ldots \end{cases}, \qquad (3.6.26)$$

в которых коэффициенты связаны рекуррентными соотношениями (3.6.25).

4. <u>*Исследование рядов*</u>. Оказывается, что ряды (3.6.26) расходятся. В самом деле, исследуем их поведение при $\xi \to \infty$. Вначале рассмотрим ряд, который определенно расходится при $\xi \to \infty$:

$$e^{\xi^2}=1+\frac{\xi^2}{1!}+\frac{\xi^4}{2!}+\frac{\xi^6}{3!}+\ldots+\frac{\xi^\tau}{\left(\frac{\tau}{2}\right)!}+\frac{\xi^{\tau+2}}{\left(\frac{\tau+2}{2}\right)!}+\ldots. \qquad (3.6.27)$$

Возьмем отношение коэффициентов этого ряда при высоких членах $\tau >> 1$:

$$\frac{a_{\tau+2}}{a_\tau}=\frac{(\tau/2)!}{\left(\frac{\tau+2}{2}\right)!}=\frac{1}{\frac{\tau}{2}+1}\approx\frac{2}{\tau}. \qquad (3.6.28)$$

Возьмем также отношение коэффициентов из рекуррентной формулы (3.6.25):

$$\frac{b_{k+2}}{b_k}=\frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)}\approx\frac{2k}{k^2}=\frac{2}{k}. \qquad (3.6.29)$$

Из сравнения поведения коэффициентов получаем, что отличие нашего ряда (3.6.26) от ряда (3.6.27) может быть только в постоянном множителе. Иначе так же как ряд (3.6.27), наш ряд (3.6.26) расходится:

$$u(\xi)\Rightarrow\exp(\xi^2)\to\infty \quad \text{при } \xi\to\infty.$$

Итак, ряд (3.6.26) расходится, как $\exp(\xi^2)$, а общее решение $\psi(\xi)$, следовательно, расходится как $\exp(\xi^2/2)$, что следует из формулы (3.6.20). Такое решение не удовлетворяет очевидным граничным условиям (3.6.9).

Означает ли это, что решений вообще нет? Нет, не означает! Решение существует, если ряд (3.6.26) оборвать и сделать конечным. Оборвать ряд u можно с помощью выбора параметра λ (3.6.11). Оборвать ряд — это означает приравнять коэффициент b_{k+2} в соотношении (3.6.25) нулю: $b_{k+2} = 0$, откуда получаем следующее условие:

$$2k + 1 - \lambda = 0.$$

И поскольку k есть порядковый номер членов ряда, то это есть целое число, и тогда λ также целое число. Для параметра λ можно записать выражение:

$$\lambda = 2n + 1, \quad \text{где } n = 0, 1, 2, 3, \ldots \qquad (3.6.30)$$

Чтобы решение уравнения (3.6.14) существовало и имело бы физический смысл, то параметр λ должен быть целым числом:

$$\lambda = 2n + 1, \qquad \text{где } n = 0,1,2,3,\ldots$$

Вспоминая выражение для параметра λ (3.6.11), получаем разрешенные уровни энергии E_n из условия $E = 1/2 \cdot \lambda\hbar\omega$:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad (3.6.31)$$

где n = 0, 1, 2, 3, ...

Итак, получаем спектр энергий одномерного осциллятора, — энергия квантуется, и уровни энергии находятся на одинаковом расстоянии друг от друга — *эквидистантный спектр* (см. рис. 3.6.2). Расстояние между уровнями равно энергии кванта $\hbar\omega$. Низший уровень энергии отличен от нуля и составляет половину энергии кванта $\hbar\omega$.

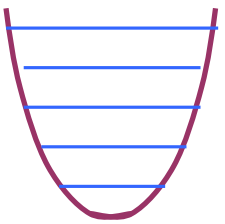


Рис. 3.6.2

Обратимся к волновым функциям этих энергетических состояний, которые характеризуются квантовым числом n = 0, 1, 2, 3, ... и которые можно записать в виде (3.6.20):

$$\psi_n = \exp\left(-\xi^2/2\right) \cdot u_n(\xi).$$

Получающиеся конечные ряды для функции $u_n(\xi)$ называются *полиномами Эрмита* и обозначаются $H_n(\xi)$. Для нескольких значений n имеем:

$$n = 0 \quad H_0(\xi) = 1;$$

$$n = 1 \quad H_1(\xi) = 2\xi;$$

$$n = 2 \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2;$$

$$n = 3 \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

и т. д. Коэффициенты в полиномах Эрмита для удобства выбраны так, что коэффициент при максимальной степени переменной ξ равен $b_n = 2^n$. Все остальные коэффициенты b_k в ряду тогда определяются рекуррентной формулой (3.6.25), в которой $\lambda = 2n + 1$:

$$b_{k-2} = \frac{k(k-1)}{2k-4-2n} b_k = -\frac{k(k-1)}{2(n-k+2)} b_k. \qquad (3.6.32)$$

Уравнение, которому подчиняются полиномы Эрмита, является частным случаем уравнения (3.6.22):

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0. \qquad (3.6.33)$$

Решение этого уравнений представляется:

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!}(2\xi)^{n-2} + \\ + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}(2\xi)^{n-4} + \ldots + \begin{cases} b_1\xi & n \text{ — нечетное} \\ b_0 & n \text{ — четное} \end{cases}. \qquad (3.6.34)$$

Можно привести замкнутую формулу для получения полиномов Эрмита:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \qquad (3.6.35)$$

Итак, окончательно *полное решение уравнения Шредингера для одномерного осциллятора* имеет вид

$$\psi_n(\xi) = C_n \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \cdot H_n(\xi), \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x. \qquad (3.6.36)$$

Коэффициенты C_n находят из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(\xi)|^2 d\xi = 1.$$

Вычисляя соответствующие интегралы (см. Приложение 6), получаем следующее выражение для коэффициентов:

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\hbar\pi/m\omega}}}. \qquad (3.6.37)$$

Запишем несколько волновых функций, описывающих наиболее низкие по энергии состояния частицы в одномерном осцилляторе:

$$\psi_0(\xi)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right);$$

$$\psi_1(\xi)=\left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{1/4}2\xi\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)=\frac{2^{1/2}}{\pi^{1/4}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4}\cdot x\cdot\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right);$$

$$\psi_2(\xi)=\left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{1/4}(2\xi^2-1)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right);$$

$$\psi_3(\xi)=\left(\frac{m\omega}{9\pi\hbar}\right)^{1/4}\xi(2\xi^2-1)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right).$$

На рисунке 3.6.3 изображены волновые функции ψ_n осциллятора (сплошные линии) и соответствующие плотности распределения вероятностей $|\psi_n|^2$ (пунктир).

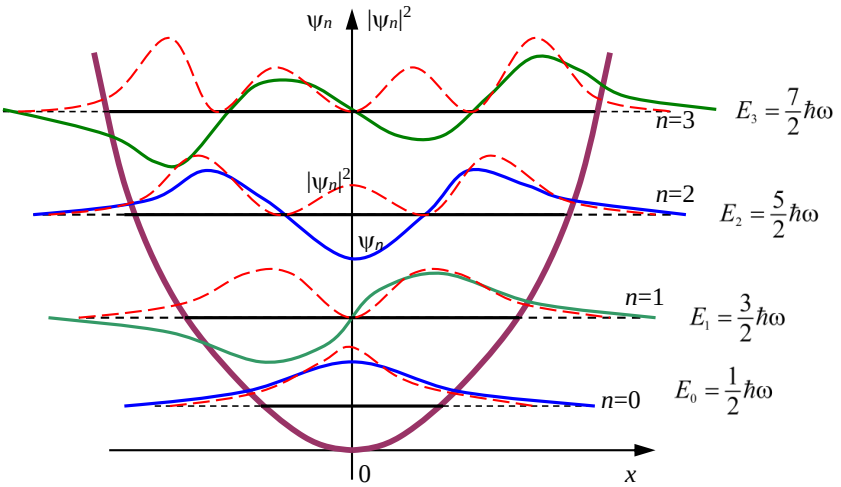


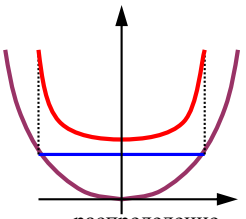
Рис. 3.6.3

Из решения (3.6.34) видно, что имеются четные и нечетные состояния. Внутри области $E > U$ имеем осцилляционное поведение волновых функций, напоминающее поведение свободной частицы, но, очевидно, искаженное изменяющейся с координатой x потенциальной энергией. Отметим, что с ростом энергии волновые функции и плотности вероятности испытывают большее число осцилляций внутри «классически разрешенной» области. Рост осцилляций обеспечивает ортогональность волновых функций разных состояний. При этом возрастает амплитуда и вероятность нахождения частицы у границы потенциала. Это не удивительно, так как с ростом номера уровня распределение плотности вероятности приближается к классическому распределению вероятности нахождения частицы внутри такой ямы (см. рис. 3.6.4).

В квантовой механике для осциллятора возможны переходы частицы между соседними уровнями с излучением света частоты ω или, что то же,

фотона энергии $\hbar\omega$. На первый взгляд, в квантовом осцилляторе возможно излучение со всеми частотами, кратными ω: $N\omega$, где N целое число. В старой квантовой теории Н. Бор вводил *правила отбора*: $\Delta n = \pm 1$, т. е. переход с излучением происходит только с соседних уровней. Эти правила отбора сохраняются и в квантовой механике: они получаются при вычислении вероятности перехода осциллятора с одного уровня на другой с излучением или поглощением фотона:

$$\begin{aligned} &\Delta n = \pm 1; \\ &E_{\text{фотон}} = \hbar\omega. \end{aligned} \tag{3.6.38}$$



распределение вероятности для классической частицы

Рис. 3.6.4

Таким образом, квантовый осциллятор, определяемый потенциальной энергией $U(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$, излучает фотоны с определенной энергией $\hbar\omega$.

Примечание 36. Иногда удобно ввести параметр длины $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$, и тогда волновые функции имеют вид

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}} \exp\left(\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right) H_n\left(\frac{x}{x_0}\right).$$

Приложение 6. Нормировка волновых функций одномерного осциллятора. Нормировку проще получить, используя замену (3.6.12):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)| dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(\xi)| d\xi = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 1.$$

Подставим в интеграл выражение для одного из полиномов Эрмита из замкнутой формулы (3.6.35):

$$(-1)^n \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} e^{\xi^2} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi = (-1)^n \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi = 1.$$

Интеграл можно взять n раз по частям, при этом все свободные члены обращаются в нуль на бесконечности из-за убывания волновой функции. Тогда имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} d\xi = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi) d\xi.$$

Воспользуемся выражением для полинома Эрмита в виде ряда (3.6.34), и тогда видно, что в результате дифференцирования получаем

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n!.$$

Тогда под интегралом остается только экспоненциальная функция, и интеграл представляет собой известный табличный интеграл:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2) d\xi = \sqrt{\pi}\,.$$

Подставляя все в нормировочный интеграл, получаем

$$(-1)^n (-1)^n \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} C_n^2 2^n n! \sqrt{\pi} = 1\,.$$

Окончательно находим нормировочный множитель:

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\hbar\pi/m\omega}}}\,.$$

Примечание 37. Аналогично можно показать, что волновые функции с разными n ортогональны:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\psi_n(x) dx = \delta_{mn}\,.$$

3.6.3. Операторный подход к задаче о квантовом осцилляторе

Покажем решение задачи о квантовом одномерном осцилляторе в рамках операторного подхода. Решаем уравнение Шредингера (3.6.8), которое запишем через оператор проекции импульса $\hat{p}_x \equiv \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$:

$$\hat{H}\psi \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi(x) = E\psi(x)\,.$$

Введем операторы:

$$\hat{a} = \frac{\hat{p} - im\omega x}{\sqrt{2m\hbar\omega}}; \tag{3.6.39}$$

$$\hat{a}^+ = \frac{\hat{p} + im\omega x}{\sqrt{2m\hbar\omega}}. \tag{3.6.40}$$

Найдем последовательное действие этих операторов на произвольную функцию, стоящую справа от него:

$$\hat{a}^+\hat{a} = \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} - \frac{i\omega}{2}\left[\hat{p}x - x\hat{p}\right]\right) = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\,. \tag{3.6.41}$$

Видно, что последовательное действие операторов $\hat{a}^{+}\hat{a}$ выражается через действие оператора Гамильтона $\hat{H}$. Аналогично получаем их действие в обратном порядке:

$$\hat{a}\hat{a}^{+} = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}. \qquad (3.6.42)$$

Тогда гамильтониан осциллятора $\hat{H}$ можно записать:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^{+}\hat{a} + \frac{1}{2}\right). \qquad (3.6.43)$$

Сосчитаем коммутатор операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^{+}$:

$$\left[\hat{a}\hat{a}^{+}\right] = \hat{a}\hat{a}^{+} - \hat{a}^{+}\hat{a} = 1. \qquad (3.6.44)$$

Физический смысл введенных операторов: $\hat{a}$ — *оператор уничтожения,* $\hat{a}^{+}$ — *оператор рождения*. В самом деле, действие операторов на волновые функции, являющиеся собственными функциями гамильтониана:

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E \qquad (3.6.45)$$

приводит к новым собственным функциям гамильтониана с собственными значениями меньшими или большими на энергию $\hbar\omega$

$$\hat{a}\psi_E \Rightarrow \psi_{E-\hbar\omega} \quad \text{и} \quad \hat{a}^{+}\psi_E \Rightarrow \psi_{E+\hbar\omega}.$$

Проверим это.

$$\hat{H}\hat{a}\psi_E = \left(\hbar\omega\hat{a}\hat{a}^{+} - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\hat{a}\psi_E = \hat{a}\left(\hbar\omega\hat{a}^{+}\hat{a} - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\psi_E =$$

$$= \hat{a}\left(\hat{H} - \hbar\omega\right)\psi_E = \left(E - \hbar\omega\right)\hat{a}\psi_E = \left(E - \hbar\omega\right)\psi_{E-\hbar\omega}.$$

Аналогично получаем

$$\hat{H}\hat{a}^{+}\psi_E = \left(E + \hbar\omega\right)\hat{a}^{+}\psi_E = \left(E + \hbar\omega\right)\psi_{E+\hbar\omega}. \qquad (3.6.46)$$

Рассмотрим основное состояние, т. е. состояние с наименьшей энергией E_0, описываемое волновой функцией ψ_0. Тогда действие оператора уничтожения на ψ_0 равно нулю (поскольку нет состояния с меньшей энергией):

$$\hat{a}\psi_0 = 0. \qquad (3.6.47)$$

Или, добавив действие оператора рождения, имеем из (3.6.41):

$$\hat{a}^{+}\hat{a}\psi_0 = \left(\frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)\psi_0 = 0.$$

Откуда получаем уравнение на собственные значения и собственные функции оператора энергии:

$$\hat{H}\psi_0 = \hbar\omega/2 \cdot \psi_0; \qquad (3.6.48)$$

$$E_0 = \hbar\omega/2 . \qquad (3.6.49)$$

А последующие уровни получаются действием операторов рождения на функцию ψ_0. Получаем спектр энергий (3.6.31):

$$E_n = \left(n + 1/2\right)\hbar\omega .$$

Волновая функция основного состояния находится из уравнения (3.6.47):

$$\hat{a}\psi_0 = \frac{\hat{p} - im\omega x}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\psi_0 = 0 .$$

Или это уравнение имеет вид

$$-i\hbar\frac{d}{dx}\psi_0 - im\omega x\psi_0 = 0 . \qquad (3.6.50)$$

Решением этого уравнения является волновая функция основного состояния, определенная с точностью до нормировочной постоянной C_0:

$$\psi_0 = C_0 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right). \qquad (3.6.51)$$

Волновые функции следующих по энергии состояний определяются действием операторов рождения на волновую функцию основного состояния.

3.7. Движение в центральном поле

3.7.1. Уравнение Шредингера в центральном поле

Центральное (или *центрально-симметричное*) поле является полем, потенциальная энергия которого зависит только от модуля разности координат взаимодействующих частиц. Движение в центральном поле было уже рассмотрено в классической механике. Это очень важная задача в физике, поскольку проблема системы двух взаимодействующих тел сводится к решению задачи о движении одной частицы в поле центральных сил. В микромире в качестве примера таких задач можно привести задачи об атоме водорода, одноэлектронных ионах He^+, Li^{+2}, ..., о позитронии (система, состоящая из электрона и позитрона) и ряда других объектов.

Итак, рассматриваем потенциальную энергию (в квантовой механике обычно ее называют *потенциалом*) системы двух тел: $U\left(\left|\vec{r}_2 - \vec{r}_1\right|\right)$. Потенциал зависит от относительного расстояния двух взаимодействующих тел. Обычно в такой задаче переходят в систему отсчета, связанную с центром масс двух частиц, и разделяют поступательное движение центра масс системы из двух частиц и их относительное движение. Относительное движение — это задача о движении одной частицы приведенной массы в поле центральных сил (см. [1], глава 1, § 1.14).

Если масса одного тела значительно больше массы другого $M \gg m_0$, то можно считать, что центр масс находится в центре массивной частицы и рассматривать движение одной частицы массы m_0 в поле $U(r)$, где r — ее расстояние от второй, более массивной частицы.

Рассматривается стационарное уравнение Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\hat{\nabla}^2 + U(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \tag{3.7.1}$$

В сферической системе координат оператор Лапласа имеет вид

$$\hat{\nabla}^2 \equiv \Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\hat{\Lambda} \equiv \hat{\nabla}_r^2 + \frac{1}{r^2}\hat{\Lambda}, \tag{3.7.2}$$

где угловая часть оператора Лапласа, называемая иногда оператором Лежандра, имеет вид

$$\hat{\Lambda} = \frac{\partial}{\sin\theta\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{3.7.3}$$

Отметим важное обстоятельство: оператор Лежандра $\hat{\Lambda}$ не зависит от радиуса r и конкретного вида потенциала $U(r)$. Это позволяет разделить уравнение Шредингера на две части: одна зависит только от радиуса r, другая — от угловых переменных θ и φ. Убедимся в этом, если представим волновую функцию в виде произведения двух функций:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Upsilon(\theta,\varphi). \tag{3.7.4}$$

Такой вид волновой функции приводит к разделению переменных в уравнении Шредингера. Представим (3.7.1) в более удобном виде:

$$\left(\hat{\nabla}_r^2 + \frac{1}{r^2}\hat{\Lambda}\right)\psi + k^2(r)\psi = 0, \tag{3.7.5}$$

где величина k^2 (квадрат волнового числа в рамках классической механики):

$$k^2(r) = \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - U(r)\right) \tag{3.7.6}$$

зависит только от радиуса r.

Умножим последнее уравнение Шредингера (3.7.5) на множитель $r^2/\psi = r^2/(R\cdot\Upsilon)$ и, сокращая соответствующие части волновой функции, получаем уравнение в следующем виде:

$$\underbrace{\frac{r^2}{R(r)}\hat{\nabla}_r^2 R(r) + r^2k^2(r)}_{\text{зависит только от } r} = \underbrace{-\frac{1}{\Upsilon(\theta,\varphi)}\hat{\Lambda}\Upsilon(\theta,\varphi)}_{\text{зависит только от } \theta,\varphi}. \tag{3.7.7}$$

Поскольку левая и правая части в уравнении (3.7.7) зависят от разных переменных (каждая часть только от своей переменной), то левая и правая части отдельно равны постоянной — *постоянной разделения* λ.

$$\frac{r^2}{R(r)}\hat{\nabla}_r^2 R(r) + r^2 k^2(r) = \lambda = -\frac{1}{\Upsilon(\theta,\varphi)}\hat{\Lambda}\Upsilon(\theta,\varphi).$$

Таким образом получаем 2 уравнения, которые рассмотрим отдельно.

3.7.2. Уравнение для радиальной части

Рассмотрим уравнение для радиальной части, которое приобретает вид

$$\hat{\nabla}_r^2 R + k^2(r)R = \frac{\lambda}{r^2}R.$$

Или, подставляя $\hat{\nabla}_r^2$ из (3.7.2) и k^2 из (3.7.6), получаем более подробную запись уравнения

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r) + \left[\frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - U(r)\right) - \frac{\lambda}{r^2}\right]R(r) = 0. \qquad (3.7.8)$$

Производя дифференцирование, получаем следующее уравнение для радиальной части волновой функции:

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right)R = 0. \qquad (3.7.9)$$

Уравнение для радиальной части волновой функции зависит от потенциала $U(r)$. Поэтому чтобы решать это уравнение необходимо знать конкретный вид центрального потенциала.

В радиальном уравнении (3.7.9) обычно делается следующая замена:

$$R(r) = \frac{1}{r}\chi(r). \qquad (3.7.10)$$

Новая функция $\chi(r)$ вводится для того, чтобы избавиться от первой производной в уравнении (3.7.9) для определения радиальной части. Вычисляя производные и подставляя их в (3.7.9), получаем уравнение для радиальной функции $\chi(r)$:

$$R' = \frac{\chi'}{r} - \frac{\chi}{r^2}, \quad R'' = \frac{\chi''}{r} - \frac{2\chi'}{r^2} + \frac{2\chi}{r^3};$$

$$\chi'' + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right)\chi = 0. \qquad (3.7.11)$$

Решение этого уравнения для атома водорода рассмотрим ниже.

3.7.3. Уравнение для угловой части

Уравнение для определения угловой части волновой функции также получается из (3.7.7):

$$-\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\hat{\Lambda}Y(\theta,\varphi) = \lambda;$$

$$\hat{\Lambda}Y(\theta,\varphi) + \lambda Y(\theta,\varphi) = 0. \qquad (3.7.12)$$

Записывая явный вид оператора Лежандра (3.7.3), имеем:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)Y(\theta,\varphi)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}Y(\theta,\varphi)+\lambda Y(\theta,\varphi)=0; \quad (3.7.13)$$

$$Y_\theta''+\operatorname{ctg}\theta Y_\theta'+\frac{1}{\sin^2\theta}Y_\varphi''+\lambda Y=0. \quad (3.7.14)$$

Получили уравнение для угловой части волновой функции $Y(\theta,\varphi)$ частицы в центрально-симметричном поле.

Уравнение для угловой части волновой функции не зависит от конкретного вида потенциала $U(r)$ и для всех центральных полей имеет одно и то же решение. Поэтому имеет смысл рассмотреть его решение в общем виде.

3.8. Момент импульса в квантовой механике

3.8.1. Оператор момента импульса

В классической механике момент импульса материальной точки относительно начала отсчета определяется:

$$\vec{L}=[\vec{r},\vec{p}]=m_0[\vec{r},\vec{v}], \quad (3.8.1)$$

где $\vec{r}$ — радиус-вектор частицы, а $\vec{p}$ и m_0 — ее импульс и масса. Аналогично этому определению вводится оператор момента импульса в квантовой механике (отметим, ранее в п. 3.1 был введен оператор импульса: $\hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla$):

$$\hat{\vec{L}}=\left[\vec{r},\hat{\vec{p}}\right]=-i\hbar\left[\vec{r},\hat{\nabla}\right]. \quad (3.8.2)$$

Оператор момента импульса — векторный оператор, поэтому его можно представить, как сумму операторов проекций:

$$\hat{\vec{L}}=\hat{L}_x\vec{e}_x+\hat{L}_y\vec{e}_y+\hat{L}_z\vec{e}_z, \quad (3.8.3)$$

где операторы проекций момента импульса определяются:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x&=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right);\\ \hat{L}_y&=-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right);\\ \hat{L}_z&=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right).\end{aligned} \quad (3.8.4)$$

Легко получить коммутатор для двух различных проекций момента импульса:

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=-\hbar^2\left\{\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)-\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right\}=$$

$$=-\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)=i\hbar\left[-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]=i\hbar\hat{L}_z. \quad (3.8.5)$$

В итоге для всех проекций момента импульса получаем следующие коммутаторы:

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z, \quad \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x, \quad \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y\,. \tag{3.8.6}$$

Коммутаторы операторов проекций отличны от нуля, т. е. любые 2 проекции момента импульса не могут иметь одновременно точные значения.

Поскольку следует важный вывод. *Две любые проекции момента импульса не могут одновременно иметь определенные значения*. Следовательно, и сам *вектор момента импульса* $\vec{L}$ *не имеет определенного направления в пространстве*.

В классической механике при движении частицы в центральном поле помимо энергии сохраняется вектор момента импульса, то есть сохраняются его величина (длина вектора) и направление в пространстве (иначе, все проекции вектора). Закон сохранения момента импульса приводит к плоской траектории движения частицы [1].

В квантовой механике при движении частицы в центральном поле получаем, что векторная величина момента импульса не может иметь определенного значения. Однако оказывается, как будет рассмотрено в следующем параграфе, *определенные значения могут иметь одновременно абсолютная величина момента импульса (квадрат момента импульса сохраняется) и одна из трех его проекций*.

3.8.2. Оператор проекции момента импульса

Поскольку нас будет интересовать приложение теории момента импульса (МИ) к движению частицы в центральном поле, то удобнее представлять оператор МИ в сферической системе координат (r, θ, φ):

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta. \tag{3.8.7}$$

Рассмотрим для начала только одну координату — угол φ, определяющую угловое положение (вращение) вокруг оси z. Пусть φ меняется и рассмотрим производную от функции ψ по координате φ:

$$\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi} =$$

$$= \frac{\partial\psi}{\partial x}\left(-r\sin\theta\sin\varphi\right) + \frac{\partial\psi}{\partial y}r\sin\theta\cos\varphi + \frac{\partial\psi}{\partial z}\cdot 0 = \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi.$$

Тогда, умножая последнее равенство на множитель «$-i\hbar$», получаем оператор проекции момента импульса а ось z:

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \hat{L}_z\,. \tag{3.8.8}$$

Итак, в сферической системе координат оператор проекции МИ на ось z определяется соотношением

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}. \qquad (3.8.9)$$

В принципе ось z — произвольная, так как в центральном поле нет выделенного направления, если нет каких-либо внешних условий или ограничений.

Решим уравнение на *собственные значения и собственные функции оператора проекции момента импульса*:

$$\hat{L}_z\psi = L_z\psi;$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = L_z\psi. \qquad (3.8.10)$$

Или далее имеем:

$$\frac{\partial\psi}{\psi} = \frac{i}{\hbar}L_z\partial\varphi.$$

Решением уравнения (3.8.10) является осциллирующая экспонента:

$$\psi_m = A\cdot\exp\left(\frac{i}{\hbar}L_z\varphi\right). \qquad (3.8.11)$$

Воспользуемся условием однозначности решения, которое означает, что функция должна остаться той же при повороте на целое число полных оборотов $2\pi n$, в частности на полный оборот 2π, т. е. записываем

$$\psi_m(\varphi) = \psi_m(\varphi + 2\pi). \qquad (3.8.12)$$

Тогда подставляя (3.8.11), имеем следующее условие:

$$Ae^{\frac{i}{\hbar}L_z\phi} = Ae^{\frac{i}{\hbar}L_z\phi}e^{\frac{i}{\hbar}L_z 2\pi}.$$

В силу однозначности решения получаем соотношение

$$e^{\frac{i}{\hbar}2\pi L_z} = 1. \qquad (3.8.13)$$

Откуда получаем условие на собственные значения L_z

$$L_z = m\hbar, \qquad m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots \qquad (3.8.14)$$

Число m определяет собственные значения проекций момента импульса частицы L_z и называется *магнитным квантовым числом*.

Подставляя (3.8.14) в (3.8.11), записываем собственную функцию оператора проекции момента импульса

$$\psi_m(\varphi) = Ae^{im\varphi}. \qquad (3.8.15)$$

Коэффициент A определяем из нормировки собственной функции:

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^* \psi_m d\varphi = A^2 \int_0^{2\pi} e^{-im\phi} e^{im\phi} d\varphi = 2\pi A^2 = 1.$$

Откуда получаем нормировочный множитель:

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \tag{3.8.16}$$

Легко видеть, что выполняется условие ортонормированности:

$$\int_0^{2\pi} \psi_{m'}^* \psi_m d\varphi = \delta_{m'm}. \tag{3.8.17}$$

Окончательно получаем *собственные функции и собственные значения оператора проекции МИ*:

$$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi); \tag{3.8.18}$$

$$\hat{L}_z \psi_m = m\hbar \psi_m. \tag{3.8.19}$$

Итак, проекция момента импульса на выделенное направление *квантована*, т. е. проекция МИ может принимать только значения кратные $\hbar$. Хотя направление оси z произвольно, но после выбора z — направления проекции L_z квантуются и принимают определенные дискретные значения, а другие проекции момента импульса остаются *неопределенными*.

3.9. Оператор квадрата момента импульса. Сферические функции

3.9.1. Оператор квадрата момента импульса (МИ)

Оператор квадрата МИ определяется, как и обычный квадрат МИ, через проекции:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \tag{3.9.1}$$

Для анализа поведения частицы в центрально-симметричном поле нам нужно записать оператор в сферической системе координат. Искать это выражение удобно, если представить оператор квадрата МИ в следующем виде:

$$\hat{L}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right) + \hat{L}_z^2. \tag{3.9.2}$$

Здесь мы введем операторы «*рождения*» и «*уничтожения*» (их смысл будет виден ниже в пункте 3.9.2):

$$\hat{L}_+ \equiv \left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right); \tag{3.9.3}$$

$$\hat{L}_- \equiv \left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right). \tag{3.9.4}$$

Воспользовавшись коммутационным соотношением

$$\left[\hat{L}_+, \hat{L}_-\right] = \hat{L}_+\hat{L}_- - \hat{L}_-\hat{L}_+ = 2\hbar\hat{L}_z, \tag{3.9.5}$$

представим оператор квадрата МИ в следующем виде:

$$\hat{L}^2 = \left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right) + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z. \tag{3.9.6}$$

Для того чтобы определить $\hat{L}^2$ через угловые переменные θ,φ, сделаем некоторые заготовки для производных по этим переменным:

$$\frac{\partial\psi}{\partial\phi} = \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi; \tag{3.9.7}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial\theta} = \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\theta} = \left(x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi\cdot\mathrm{ctg}\,\theta - z\frac{\partial\psi}{\partial z}\mathrm{tg}\,\theta. \tag{3.9.8}$$

Итак, чтобы определить оператор квадрата МИ $\hat{L}^2$, ищем сначала выражение для оператора «рождения». Напомним, что декартовы координаты записываются через сферические координаты в следующем виде:

$$\begin{cases} z = r\cos\theta \\ x + iy = r\sin\theta\cos\varphi + ir\sin\theta\sin\varphi = r\sin\theta\cdot e^{i\varphi} \end{cases} \tag{3.9.9}$$

Далее проводим вычисления:

$$\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right)\psi = -i\hbar\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) + i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right]\psi =$$

$$= \hbar\left[iz\frac{\partial}{\partial y} + z\frac{\partial}{\partial x} - (x+iy)\frac{\partial}{\partial z}\right]\psi = *.$$

Для дальнейшего вывода воспользуемся сначала (3.9.9) и затем следующим соотношением:

$$re^{-i\varphi}\cos\theta = \frac{r\cos\theta\sin\theta}{\sin\theta}(\cos\varphi - i\sin\varphi) = (x - iy)\mathrm{ctg}\,\theta;$$

$$* = \hbar\left[r\cos\theta\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) - r\sin\theta\cdot e^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial z}\right]\psi =$$

$$= \hbar\cdot e^{i\varphi}\left[r\cos\theta\cdot e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) - r\sin\theta\frac{\partial}{\partial z}\right]\psi =$$

$$= \hbar\cdot e^{i\varphi}\left[(x - iy)\mathrm{ctg}\theta\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) - r\sin\theta\frac{\cos\theta}{\cos\theta}\frac{\partial}{\partial z}\right]\psi =$$

$$= \hbar\cdot e^{i\varphi}\left[\left(x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y}\right)\mathrm{ctg}\theta - \mathrm{tg}\theta\cdot z\frac{\partial}{\partial z} + i\mathrm{ctg}\theta\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\psi.$$

Теперь воспользуемся (3.9.7) и (3.9.8) и окончательно получим для оператора «рождения» выражение в сферической системе координат:

$$\hat{L}_+\psi = \left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right)\psi = \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + i\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right). \qquad (3.9.10)$$

Аналогично можно получить выражение для оператора «уничтожения»:

$$\hat{L}_-\psi = \left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right)\psi = -\hbar e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial\psi}{\partial\theta} - i\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right). \qquad (3.9.11)$$

Следующий шаг — получим произведение операторов «рождения» и «уничтожения», которое входит в оператор квадрата момента импульса (3.9.6):

$$\hat{L}_-\hat{L}_+ = \left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right) = -\hbar^2\cdot e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) =$$

$$= -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}^2\,\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + i\left(\mathrm{ctg}^2\,\theta - \frac{1}{\sin^2\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right].$$

Итак, получаем для произведения операторов выражение через сферические координаты:

$$\left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right) = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}^2\,\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \qquad (3.9.12)$$

Вспомним также полученный в п. 3.8 оператор проекции МИ:

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad \hat{L}_z^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \qquad (3.9.13)$$

Подставим (3.9.12) и (3.9.13) в оператор квадрата МИ (3.9.6). Итак, получаем окончательный вид *оператора квадрата момента импульса в сферической системе координат*:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}^2\,\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) = \\ &= -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right).\end{aligned} \qquad (3.9.14)$$

Легко видеть, что выражение в скобках (3.9.14) совпадает с выражением для оператора Лежандра (3.7.3), т. е. угловой частью оператора Δ.

3.9.2. Собственные значения оператора квадрата МИ

Вспоминая выражение для оператора Лежандра $\hat{\Lambda}$ (3.7.13), видим, что оператор квадрата МИ (3.9.14) пропорционален ему:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\hat{\Lambda}. \qquad (3.9.15)$$

Таким образом, решение уравнения на собственные значения оператора Лежандра (3.7.12):

$$\hat{\Lambda} Y(\theta,\varphi) = -\lambda Y(\theta,\varphi) \tag{3.9.16}$$

определяет также *собственные функции* и *собственные значения оператора квадрата МИ*. С другой стороны, уравнение (3.9.16) есть уравнение для определения угловой части волновой функции при движении в центральном поле.

Легко увидеть, что оператор квадрата МИ коммутирует с оператором любой проекции МИ:

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_y\right] = 0. \tag{3.9.17}$$

Таким образом, наряду с квадратом МИ может быть определена и любая проекция (но только одна!). Поскольку операторы проекций МИ не коммутируют между собой.

Обычно в качестве выделенной выбирают проекцию момента импульса на ось z — L_z. Поскольку коммутатор $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0$, то у этих операторов могут быть *общие собственные функции*. Отличие собственных функций этих операторов состоит только в том, что собственная функция оператора $\hat{L}^2$ умножается на функцию от угла θ — $f(\theta)$:

$$\begin{gathered} \hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = L^2 Y(\theta,\varphi); \\ \hat{L}^2 f(\theta) \cdot e^{im\varphi} = L^2 f(\theta) \cdot e^{im\varphi}. \end{gathered} \tag{3.9.18}$$

В рамках этого курса мы не будем решать уравнения (3.9.16) или (3.9.18), однако сможем получить собственные значения оператора квадрата МИ, не решая эти уравнения.

Для этого для начала определим смысл введенных выше операторов «рождения» и «уничтожения» (3.9.3) и (3.9.4). Подействуем оператором рождения $\hat{L}_+$ на собственную функцию операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ — $Y_m(\theta,\varphi) = f(\theta) \cdot \exp(im\varphi)$, а затем оператором $\hat{L}_z$, чтобы узнать, какова проекция МИ после действия оператора рождения:

$$\hat{L}_z \hat{L}_+ Y_m(\theta,\varphi) = \hat{L}_z \left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right) Y_m(\theta,\varphi) = *.$$

Пронесем оператор проекции МИ через оператор рождения, вспомнив коммутационные соотношения (3.8.6) из предыдущего параграфа:

$$* = \left(i\hbar\hat{L}_y + \hat{L}_x\hat{L}_z + i\hat{L}_y\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_x\right) Y_m = \hat{L}_+\left(m\hbar Y_m + \hbar Y_m\right) = \hbar(m+1)\hat{L}_+ Y_m.$$

Таким образом, видно из полученных выражений, что функция, образованная после действия оператора «рождения» («уничтожения») $\left(\hat{L}_\pm Y_m\right)$, есть собственная функция оператора L_z с собственным значением $\hbar(m \pm 1)$.

Итак, делаем следующий вывод: оператор «рождения» $\hat{L}_+$ увеличивает проекцию МИ на величину $\hbar$, а оператор $\hat{L}_-$ уменьшает проекцию МИ на $\hbar$:

$$\begin{cases} \hat{L}_+ Y_m = Y_{m+1} \\ \hat{L}_- Y_m = Y_{m-1} \end{cases}. \tag{3.9.19}$$

Далее рассуждаем следующим образом. Собственное значение $\hat{L}^2$ дает квадрат длины вектора МИ, а L_z есть проекция МИ, равная $m\hbar$. Очевидно, что проекция вектора не может быть больше длины вектора. Пусть *максимальное значение проекции* равно: $|m| = l$, т. е.

$$\hat{L}_z Y_m(\theta,\varphi) = \hbar m Y_m(\theta,\varphi) = \hbar l Y_m(\theta,\varphi) = \hbar l Y_l(\theta,\varphi). \tag{3.9.20}$$

Если l максимальная проекция, то тогда действие оператора рождения не может увеличить эту проекцию и его действие на такую волновую функцию должно быть равно нулю:

$$\hat{L}_+ Y_l = 0. \tag{3.9.21}$$

Очевидно также, что

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ Y_l = 0.$$

Тогда воспользуемся выражением для оператора МИ (3.9.6) и подействуем им на волновую функцию с максимальной проекцией МИ. С одной стороны, из (3.9.18) имеем

$$\hat{L}^2 Y_l = L^2 Y_l.$$

С другой стороны, исходя из (3.9.21) и действия операторов проекции, имеем

$$\hat{L}^2 Y_l = \left(\hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z\right) Y_l = \left(0 + \hbar^2 l^2 + \hbar^2 l\right) Y_l = \hbar^2 l(l+1) Y_l.$$

Откуда получаем, что *собственные значения оператора квадрата МИ* равны

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \tag{3.9.22}$$

где l — максимальная проекция МИ на ось z в единицах $\hbar$ и принимает значения

$$l = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Итак, собственные значения операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$:

$$\begin{cases} \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi) \\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi) \end{cases}. \tag{3.9.23}$$

Здесь волновые функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ имеют два индекса: максимальная проекция МИ l и его текущая проекция m. Квантовое число l носит название *орбитального квантового числа* и принимает значения:

$$\begin{aligned} l = &\quad 0,1,2,3,4,... \\ \text{или} &\quad s,p,d,f,... \end{aligned} \tag{3.9.24}$$

Снизу от чисел приведены часто встречающиеся буквенные обозначения этого квантового числа. Квантовое число m называется *магнитным квантовым числом*, и оно принимает все значения через единицу до максимального значения:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, ..., \pm l. \tag{3.9.25}$$

Напомним, что это квантовое число m определяет проекцию МИ на ось z.

3.9.3. О собственных функциях оператора квадрата МИ

Собственными функциями оператора квадрата МИ являются *сферические* или *шаровые* функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$. Они являются собственными функциями следующих операторов: $\hat{\Lambda}$, $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ с соответствующими собственными значениями:

$$\begin{gathered} \hat{\Lambda} Y_{lm}(\theta,\varphi) = -l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi); \\ \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi); \\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi). \end{gathered} \tag{3.9.26}$$

Шаровые функции определяют *плотность вероятности нахождения частицы* под определенными углами θ, φ. Ранее (см. п. 3.8) мы получали собственные функции оператора проекции МИ отдельно (3.8.16), поэтому шаровые функции можно представить в виде

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Theta_{lm}(\theta), \tag{3.9.27}$$

где выделены функции, зависящие только от угла θ:

$$\Theta_{lm}(\theta) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} (\sin\theta)^m \frac{d^{l+m}(\sin\theta)^{2l}}{(d\cos\theta)^{l+m}}. \tag{3.9.28}$$

Можно убедиться, что так выбранные шаровые функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ удовлетворяют условию ортонормированности:

$$\int Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi) Y_{lm}(\theta,\varphi) d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi) Y_{lm}(\theta,\varphi) \sin\theta d\theta = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \tag{3.9.29}$$

Примечание 38. Функции $\Theta_{lm}(\theta)$ связаны с присоединенными полиномами Лежандра:

$$\Theta_{lm}(\theta)=(-1)^m\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta).$$

Присоединенные полиномы Лежандра могут быть определены по следующей рекуррентной формуле:

$$P_l^m(x)=\frac{\sin^m\theta}{2^l l!}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l,$$

где $x=\cos\theta$. Присоединенные полиномы Лежандра удовлетворяют уравнению:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)P_l^m(\cos\theta)+l(l+1)P_l^m(\cos\theta)-\frac{m^2P_l^m(\cos\theta)}{\sin^2\theta}=0.$$

3.9.4. Описание состояний в центрально-симметричном поле

Итак, для описания движения частицы массы m_0 в центрально симметричном поле имеем следующий гамильтониан

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta+U(r). \tag{3.9.30}$$

Стационарное уравнение Шредингера и соответствующая волновая функция, как мы определили в п. 3.7, имеют вид:

$$\hat{H}\psi=E\psi;$$

$$\psi(\vec{r})=R(r)Y(\theta,\varphi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{3.9.31}$$

Поскольку оператор Лапласа в (3.9.30) представляется в виде

$$\Delta=\Delta_r+\frac{1}{r^2}\hat{\Lambda},$$

мы имеем 2 разделившихся уравнения — для радиальной и угловой частей волновой функции:

$$\begin{cases}\Delta_r R(r)+\left(k^2-\dfrac{\lambda}{r^2}\right)R(r)=0\\ \hat{\Lambda}Y(\theta,\varphi)+\lambda Y(\theta,\varphi)=0\end{cases}, \tag{3.9.32}$$

где

$$k^2=\frac{2m_0}{\hbar^2}(E-U(r)),\quad \lambda=l(l+1),\quad Y(\theta,\varphi)=Y_{lm}(\theta,\varphi).$$

Определение k^2 в задаче равносильно определению энергии частицы, т. е. нахождению собственных значений энергии E. Поле $U(r)$ — стационарное, т. е. энергия частицы сохраняется.

Что еще сохраняется при движении частицы в центральном поле? По классической механике — сохраняются полная энергия и момент импульса частицы как векторная величина.

В квантовой механике формулируется следующее утверждение: *для того, чтобы динамическая переменная сохранялась во времени* (т. е. была бы интегралом движения), *необходимо и достаточно, чтобы соответствующий оператор не зависел явно от времени и коммутировал с оператором полной энергии*.

В самом деле, рассмотрим производную по времени от среднего значения какого- либо оператора:

$$\frac{d}{dt}\int \psi^* \hat{Q}\psi dV = \int \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\hat{Q}\psi + \psi^* \hat{Q}\frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\psi \right] dV . \qquad (3.9.33)$$

Из стационарного уравнения Шредингера выражаем первые производные по времени

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}^*\psi^*$$

и подставим в выражение (3.9.33), используя свойство эрмитовости оператора $\hat{H}$:

$$\int \left(\hat{H}^*\psi^* \right) \varphi dV = \int \psi^* \hat{H}\varphi dV.$$

Продолжаем запись (3.9.33):

$$\frac{d}{dt}\int \psi^* \hat{Q}\psi dV = \int \left[\frac{i}{\hbar}\hat{H}^*\psi^*\hat{Q}\psi - \frac{i}{\hbar}\psi^*\hat{Q}\hat{H}\psi + \psi^* \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\psi \right] dV =$$

$$= \int \psi^* \left[\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{Q} \right] \right] \psi dV.$$

Итак, если полная производная по времени равна 0 (интеграл есть сохраняющаяся величина), то получаем следующее соотношение:

$$\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{Q} \right] = 0 , \qquad (3.9.34)$$

что и требовалось доказать.

Например, рассмотрим импульс. Оператор импульса $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ от времени явно не зависит. Однако коммутатор не равен нулю в общем случае $\left[\hat{p}, \hat{H} \right] \neq 0$ из-за зависимости потенциальной энергии от координат. Таким образом, *импульс не сохраняется при движении* частицы в центрально-симметричном поле, как и в классической механике.

Легко также увидеть, что в центральном поле коммутаторы оператора квадрата момента импульса $\hat{L}^2$ и проекции момента импульса $\hat{L}_z$ с операто-

ром полной энергии $\hat{H}$ равны нулю, поскольку потенциальная энергия зависит только от модуля $\vec{r}$:

$$\left[\hat{L}^2, \hat{H}\right] = 0 \quad \text{и} \quad \left[\hat{L}_z, \hat{H}\right] = 0. \qquad (3.9.35)$$

Кроме того, эти операторы явно не зависят от времени. Таким образом, определенные ранее величины L^2 и L_z сохраняются при квантовомеханическом описании движения частицы в центральном поле: *момент импульса по абсолютной величине* (*длина вектора МИ*) *и его проекция имеют определенные значения и сохраняются во времени*.

Соответствующим собственным значениям энергии E, квадрата момента импульса L^2, его проекции L_z сопоставляются *квантовые числа*, описывающие состояние частиц в центральном поле, соответственно: n, l, m. Энергия, в общем, определяется радиальным движением и, соответственно, главным квантовым числом n, хотя она может также зависеть и от других квантовых чисел l, m.

Однако движение, описываемое угловыми переменными, определяются квантовыми числами l, m. Оно является общим для всех центрально-симметричных полей. Ниже разберем классификацию состояний по этому движению.

Рассмотрим несколько состояний с наименьшими значениями орбитального квантового числа l.

1. Состояние с квантовыми числами $l = 0$, $m = 0$. Это так называемое S — состояние. Это состояние обладает сферической симметрией. Момент импульса и соответственно его проекция равны нулю. Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

которая вообще не зависит от углов. Поэтому распределение плотности симметрично относительно центра (см. рис. 3.9.1).

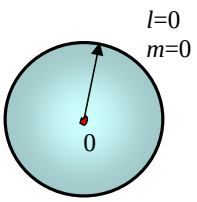


Рис. 3.9.1

2. Состояние с квантовыми числами $l = 1$, $m = 0, \pm 1$. Это P — состояние. Полный момент импульса частицы в таком состоянии равен $L = \hbar\sqrt{l(l+1)} = \hbar\sqrt{2}$. Три возможных состояния частицы отличаются магнитными квантовыми числами m — проекциями момента импульса на ось z, которые схематично изображены на рисунке 3.9.2. Рассмотрим эти состояния подробнее.

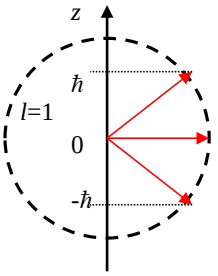


Рис. 3.9.2

А. Состояние с магнитным квантовым числом $m = 0$, угловая часть волновой функции этого состояния описывается шаровой функцией

$$Y_{10} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta.$$

Проекция МИ на ось z равна 0. Поскольку зависимости шаровой функции от угла φ нет, то распределение плотности симметрично относительно оси z и имеет вид «гантели», ориентированной по оси z (см. рис. 3.9.3).

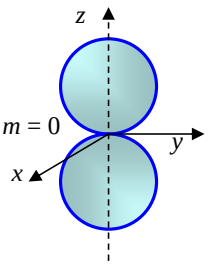


Рис. 3.9.3

Б. Для состояния с магнитным квантовым числом $m = \pm 1$ соответствующая шаровая функция равна

$$Y_{1,\pm 1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta \cdot e^{\pm i\varphi}.$$

Эти состояния с проекцией МИ на ось z равной $\pm\hbar$. Распределение плотности имеет вид бублика, нанизанного на ось z (на рис. 3.9.4 даны разрезы распределения плотности в плоскости (zy)). Причем бублик может «закручиваться» в разные стороны, причем направления «закручивания» вокруг оси z соответствуют различным знакам проекции МИ.

3. Состояние с квантовыми числами $l = 2$, $m = 0, \pm 1, \pm 2$. Имеем D — состояние. Полный момент импульса частицы равен $L = \hbar\sqrt{l(l+1)} = \hbar\sqrt{6}$. Пять возможных состояний отличаются проекциями момента импульса m на ось z (см. рис. 3.9.5). Запишем соответствующие угловые части волновых функций.

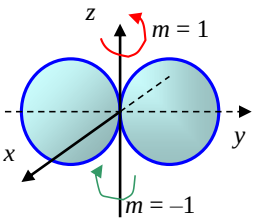


Рис. 3.9.4

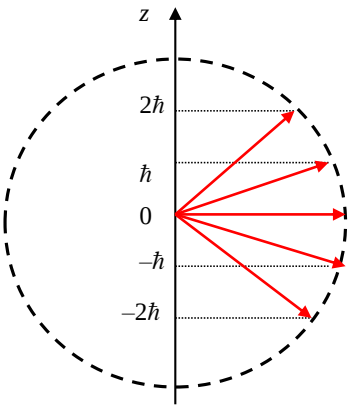


Рис. 3.9.5

А. Состояние с магнитным квантовым числом $m = 0$. Проекция МИ равна нулю. Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{20}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta-1\right).$$

Шаровая функция, описывающая состояние с нулевой проекцией момента импульса, от угла φ не зависит, поэтому распределение плотности симметрично относительно оси z. Распределение плотности вероятности изображается «гантелей с манжеткой» вокруг оси z (см. рис. 3.9.6*А*).

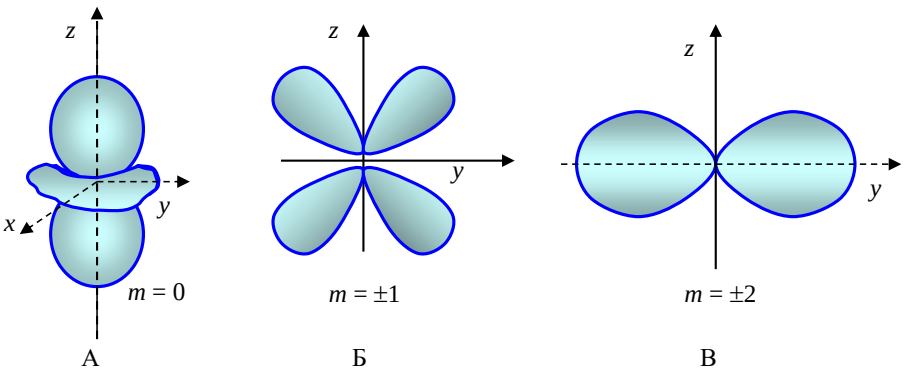


Рис. 3.9.6

Б. Состояние с магнитным квантовым числом $m = \pm 1$. Проекция момента импульса L_z равна постоянной Планка $L_z. = \pm\hbar$. Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{2,\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\varphi}.$$

Разрез распределения плотности вероятности, симметричный относительно оси z, в плоскости (zy) изображен на рисунке 3.9.6*Б*.

В. Состояние с магнитным квантовым числом $m = \pm 2$. Проекция МИ равна двум (в единицах $\hbar$). Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{2,\pm 2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta \cdot e^{\pm 2i\varphi}.$$

Разрез распределения плотности вероятности в плоскости (zy), имеющей тороидообразный вид относительно оси z, изображен на рисунке 3.9.6*В*.

Аналогично рассматриваются шаровые функции и плотности вероятности распределения частиц по угловым переменным при больших значениях орбитального числа l.

ГЛАВА 4.
ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ АТОМОВ

4.1. Движение в кулоновском поле

4.1.1. Уравнение для радиальной части волновой функции

Для определения радиальной части волновой функции частицы $R(r)$ в центральном поле мы получали следующее уравнение (см. п. 3.7, (3.7.8)–(3.7.9)):

$$\Delta_r R(r) + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right) R(r) = 0, \tag{4.1.1}$$

где

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right), \qquad k^2(r) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U(r)\right).$$

Здесь параметр $\lambda = l(l+1)$, поскольку для угловой части волновой функции в § 3.9 получили уравнение в виде:

$$\hat{\Lambda} Y_{lm}(\theta,\phi) = -l(l+1) Y_{lm}(\theta,\phi). \tag{4.1.2}$$

Иногда вводят эффективный потенциал U_l (см. §1.13. в [1]):

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{l(l+1)}{r^2}, \tag{4.1.3}$$

где второе слагаемое в (4.1.3) называют *центробежным потенциалом*. Ранее (см. § 3.7, формула (3.7.10)) делали замену переменных $R(r) = \chi(r)/r$ и получили следующее уравнение для функции $\chi(r)$:

$$\chi''(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi(r) = 0. \tag{4.1.4}$$

Преимущество этого уравнения по сравнению с (4.1.1) состоит в том, что в нем отсутствует первая производная по r от искомой функции.

Рассмотрим движение электрона в *кулоновском поле*. Взаимодействие электрона с полем заряда ядра атома Ze (где e — заряд электрона, а Z — заряд ядра в электронных единицах заряда):

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \tag{4.1.5}$$

При $Z = 1$ имеем атом водорода, а при $Z > 1$ — положительно заряженный ион с одним электроном. Тогда получаем радиальное уравнение Шредингера в виде

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[\frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0. \tag{4.1.6}$$

Или с учетом замены (3.7.10)

$$\chi'' + \left[\frac{2m_0}{\hbar^2}E + \frac{2m_0}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi = 0. \qquad (4.1.7)$$

Уравнение (4.1.7) проще записать и решать в *атомной системе единиц*, в которой мировые константы — постоянная Планка, масса и заряд электрона — приняты за единицу: $\hbar = m_0 = e = 1$. Тогда основные единицы в атомной системе определяются следующими соотношениями:

Единица длины: $a_0 = \dfrac{\hbar^2}{m_0 e^2} = 0{,}529 \cdot 10^{-8}$ см (Боровский радиус).

Единица времени: $t_0 = \dfrac{\hbar^3}{m_0 e^4} = 2{,}419 \cdot 10^{-17}$ с.

Единица энергии: $\varepsilon_0 = \dfrac{m_0 e^4}{\hbar^2} = 4{,}36 \cdot 10^{-11}$ эрг = 27,212 эВ.

Все остальные производные единицы (скорость, импульс, момент импульса и другие) выражаются через основные единицы. Атомная система единиц в основном используется в квантовой физике атомов и молекул.

4.1.2. Радиальное уравнение для атома водорода

Рассмотрим атом водорода $Z = 1$. Уравнение (4.1.7) в атомной системе единиц записывается в виде

$$\chi'' + \left[2E + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi = 0. \qquad (4.1.8)$$

Будем решать это уравнение, чтобы найти радиальные волновые функции и энергии состояний. Нас интересуют отрицательные значения энергии $E < 0$, которые определяют связанные состояния (дискретный спектр) электрона в кулоновском поле (рис. 4.1.1). Введем в уравнение новую переменную ρ и константу n:

$$\rho = \frac{2r}{n}, \qquad n = \frac{1}{\sqrt{-2E}}. \qquad (4.1.9)$$

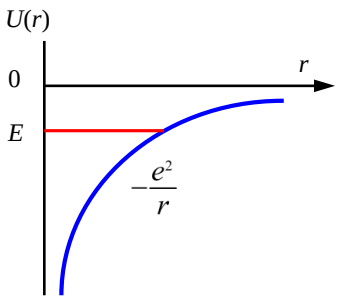


Рис. 4.1.1

Получим производные от функции $\chi(r)$ по новой переменной:

$$\chi'_r = \chi'_\rho \rho'_r = \frac{2}{n}\chi'_\rho,$$

$$\chi''_r = \frac{4}{n^2}\chi''_\rho,$$

которые подставим в (4.1.8). Тогда уравнение (4.1.8) преобразуется к виду

$$\chi'' + \left(-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\chi = 0. \qquad (4.1.10)$$

Итак, эффективная потенциальная энергия равна:

$$U(\rho) = -\frac{n}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}.$$

Потенциальная яма, образованная кулоновским и центробежным потенциалами, изображена на рисунке 4.1.2 сплошной кривой. Потенциал имеет отталкивательный характер на малых расстояниях за счет центробежной энергии и притягивающий характер на больших расстояниях за счет кулоновского взаимодействия. Аналогичную потенциальную яму получали в классической механике, когда рассматривали движение классической частицы в центрально-симметричном поле (см. [1], Глава 1, § 1.13) и рассеяние частиц на кулоновском центре.

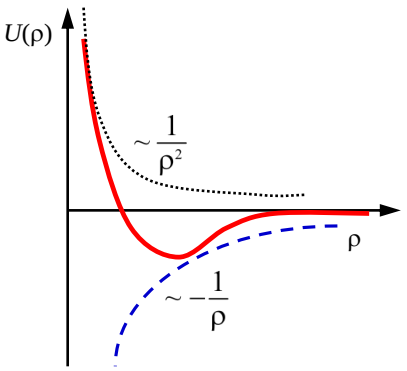


Рис. 4.1.2

4.1.3. Асимптотические решения

Рассмотрим вначале решения уравнения (4.1.10) в предельных случаях — асимптотические решения при $\rho \to 0$ и $\rho \to \infty$.

1. Рассмотрим сначала асимптотическое решение на бесконечности: $\rho \to \infty$. Пренебрегая малыми членами в уравнении (4.1.10), получаем следующее уравнение:

$$\chi''_\infty - \frac{\chi_\infty}{4} = 0. \qquad (4.1.11)$$

Общее решение уравнения (4.1.11) имеет вид

$$\chi_\infty = C_1 e^{-\rho/2} + C_2 e^{\rho/2}. \qquad (4.1.12)$$

Нас интересует решение, убывающее на бесконечности, таким образом, коэффициент при втором слагаемом $C_2 = 0$. Тогда имеем асимптотическое решение на бесконечности равно:

$$\chi_\infty = \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right). \qquad (4.1.13)$$

2. Теперь рассмотрим решение на малых расстояниях: $\rho \to 0$. Множим уравнение (4.1.10) на ρ^2 и пренебрегаем малыми членами:

$$\rho^2\chi'' + \left[-\frac{\rho^2}{4} + n\rho - l(l+1)\right]\chi = 0;$$

$$\rho^2\chi'' - l(l+1)\chi = 0. \qquad (4.1.14)$$

Ищем решение (4.1.14) в виде

$$\chi = c\rho^s,$$

где c — константа, а s — неизвестная степень. Находим производные:

$$\chi' = cs\rho^{s-1}, \qquad \chi'' = cs(s-1)\rho^{s-2},$$

и подставим их в (4.1.14):

$$cs(s-1)\rho^s - l(l+1)c\rho^s = 0$$

или

$$s(s-1) = l(l+1).$$

Решая это алгебраическое уравнение относительно неизвестной степени s, получаем 2 решения с $s = l + 1$ и $s = -l$.

А. При $s = -l$ получаем решение при $\rho \to 0$ в виде $\chi_0(\rho) = C\rho^{-l}$ или $R_0(\rho) = C\rho^{-(l+1)}$. Однако это решение не годится, поскольку для всех возможных значений орбитального квантового числа ($l = 0,1,2,3,...$) оно расходится в начале координат (при $\rho = 0$).

Б. При $s = l + 1$ имеем решение $\chi_0 = c\rho^{l+1}$ или $R_0 = C\rho^l$. Это решение удовлетворяет нашей задаче. Следовательно, на малых расстояниях $\rho \to 0$ мы получаем следующее асимптотическое решение:

$$\chi_0 = c\rho^{l+1}. \qquad (4.1.15)$$

4.1.4. Общее решение уравнения

Ищем общее решение уравнения (4.1.10) в виде

$$\chi(\rho)=\rho^{l+1}e^{-\rho/2}w(\rho), \tag{4.1.16}$$

выделив асимптотические поведения функции в предельных случаях. Какие требования предъявляются к функции $w(\rho)$, определяющей поведение функции на промежуточных расстояниях? На больших расстояниях функция $w(\rho)$ должна возрастать не быстрее, чем ρ^t, где t — конечное число, чтобы не «перебить» затухающую экспоненту. Итак, имеем условие на функцию $w(\rho)\le\rho^t$ при больших ρ.

Вычисляем производные, чтобы подставить их в уравнение (4.1.10).

$$\chi'=(l+1)\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}}w-\frac{1}{2}\rho^{l+1}e^{-\frac{\rho}{2}}w+\rho^{l+1}e^{-\frac{\rho}{2}}w';$$

$$\chi''=\rho^{l-1}e^{-\frac{\rho}{2}}\left[\rho^2 w''+w'\left(-\rho^2+2(l+1)\rho\right)+w\left(l(l+1)-(l+1)\rho+\frac{1}{4}\rho^2\right)\right].$$

Подставляя производные в (4.1.10) и сокращая на $\rho^{l-1}e^{-\rho/2}$, получаем уравнение для определения $w(\rho)$:

$$\rho w''+(2l+2-\rho)w'+(n-l-1)w=0. \tag{4.1.17}$$

Последнее уравнение специально исследовано в математической физике — оно определяет специальные функции — *вырожденные гипергеометрические функции*:

$$w=F(-n+l+1,2l+2,\rho). \tag{4.1.18}$$

В теории специальных функций уравнение для вырожденных гипергеометрических функций $F(b,a,\rho)$ имеет следующий вид:

$$\rho w''+(a-\rho)w'-bw=0.$$

Его решение есть функция, которая может быть представлена в виде специальных бесконечных рядов:

$$F(b,a,\rho)=1+\frac{b}{a}\frac{\rho}{1!}+\frac{b(b+1)}{a(a+1)}\frac{\rho^2}{2!}+\frac{b(b+1)(b+2)}{a(a+1)(a+2)}\frac{\rho^3}{3!}+\ldots.$$

Эти ряды сходятся при всех конечных ρ. Однако при больших значениях ρ ($\rho\to\infty$), они расходятся, причем ведут себя как $\sim e^{\rho}$.

Таким образом, при больших значениях ρ, ряды, представляющие решение $w(\rho)$, расходятся и растут быстрее, чем убывает $e^{-\rho/2}$. Следовательно, получаем, что такое общее решение $\chi(\rho)=\rho^{l+1}e^{-\rho/2}w(\rho)$ не годится.

Однако можно найти подходящее решение, если этот ряд оборвать и сделать его конечным. Ряд становится конечным, если параметр b либо равен нулю, либо целому отрицательному числу. Поскольку имеем

$$b=-n+l+1=0,-1,-2,\ldots,$$

то с необходимостью получаем, что n есть *целое число*, и, следовательно, можно записать:

$$n \geq l + 1. \tag{4.1.19}$$

Поскольку минимальное значение орбитального квантового числа l = = 0, то минимальное значение n = 1.

Итак, решение существует, когда ряды конечны и тогда имеем:

$$n \geq l + 1 \qquad \begin{cases} n = 1,2,3,4,... \\ l = 0,1,2,3,... \end{cases}. \tag{4.1.20}$$

Здесь имеем n — *главное квантовое число*, l — *орбитальное квантовое число*.

Вспомним из (4.1.9), что главное квантовое число определяет энергию частицы. Откуда в атомной системе единиц имеем для энергии:

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.1.21}$$

Вспоминая запись единицы энергии в атомной системе единиц, получаем энергию в обычной системе единиц (СГСЕ):

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \tag{4.1.22}$$

Для $Z > 1$ имеем:

$$E_n = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}. \tag{4.1.23}$$

Итак, получаем дискретный набор разрешенных энергий E_n — *дискретный спектр энергии электрона* в кулоновском поле. Эти значения соответствуют уровням энергии электрона в атоме водорода или в водородоподобном ионе с зарядом Z.

При n целом и большем или равном (l+1) вырожденные гипергеометрические функции превращаются в конечные полиномы — *полиномы Лагерра*:

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho),$$

где $\rho = \dfrac{2r}{n}$.

Итак, радиальные волновые функции имеют вид:

$$\chi_{nl} = C\rho^{l+1}e^{-\rho/2}L_{n+l}^{2l+1}(\rho); \tag{4.1.24}$$

$$R_{nl}(\rho) = C\rho^{l}e^{-\rho/2}L_{n+l}^{2l+1}(\rho). \tag{4.1.25}$$

Напомним, что полная волновая функция атома водорода имеет теперь 3 «значка» — квантовых числа, которые характеризуют состояние электрона, и записывается в виде

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi). \qquad (4.1.26)$$

Угловые части полной волновой функции нормированы, поэтому коэффициент в (4.1.24) находится из нормировки радиальной части:

$$\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi_{nl}(r)|^2 dr = 1. \qquad (4.1.27)$$

Вычисляя интегралы (4.1.27) с функциями (4.1.24), получаем в атомной системе единиц:

$$R_{nl}(r) = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}\left(\frac{2r}{n}\right)^l e^{-r/n} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right). \qquad (4.1.28)$$

В обычной системе единиц радиальные части волновой функции записываются:

$$R_{nl}(r) = \frac{2Z^{3/2}}{n^2 a_0^{3/2}}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l e^{-Zr/na_0} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right). \qquad (4.1.29)$$

Полиномы Лагерра могут быть получены из производящей формулы:

$$L_k^s(\rho) = \frac{d^s}{d\rho^s}L_k(\rho) = \frac{d^s}{d\rho^s}\left[e^\rho \frac{d^k}{d\rho^k}\left(\rho^k e^{-\rho}\right)\right]. \qquad (4.1.30)$$

Поведение радиальных волновых функций для ряда состояний атома водорода рассмотрим в следующем параграфе.

4.2. Состояния атома водорода

4.2.1. Вырождение уровней энергии

Стационарные состояния электрона в атоме водорода описываются волновыми функциями (4.1.26):

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi). \qquad (4.2.1)$$

Соответствующие энергии электрона в атоме равны:

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \qquad (4.2.2)$$

где главное квантовое число $n = 1, 2, 3, 4,...$ Важно, что энергия определяется главным квантовым числом n. Но при данном n электрон может иметь различные орбитальные квантовые числа:

$$l = 0, 1, 2, 3,..., n - 1.$$

Часто в литературе используют их буквенные обозначения $s, p, d, f, g,...$, соответственно.

Энергия зависит от главного квантового числа n, а от орбитального квантового числа l не зависит. Соответствующие волновые функции, и в

частности, радиальная функция, зависят от обоих чисел n и l. Итак, радиальные волновые функции различны при одном n и разных числах l, а энергия при этом одинакова. Таким образом, имеем дело с *вырождением состояний*. Это специального типа вырождение в кулоновском поле называется «случайным вырождением».

Какова кратность вырождения? Каждому значению главного квантового числа n соответствует $(n - 1)$ значений орбитального квантового числа l, а каждому l — $(2l + 1)$ значений магнитного квантового числа m. Полное вырождение уровня с энергией E_n, или его кратность, получается равной:

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2. \qquad (4.2.3)$$

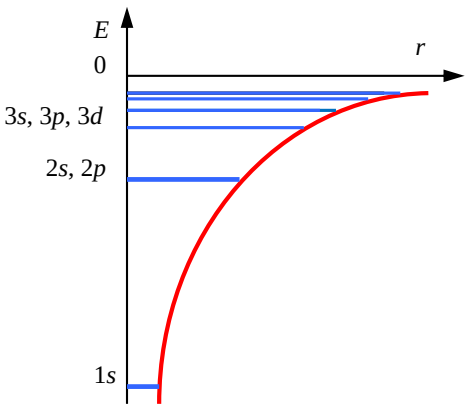


Рис. 4.2.1

Заметим, что в (4.2.3) еще не учитываются спиновые состояния электрона.

Примечание 39. Вырождение всегда связано с некоторой симметрией в пространстве и времени. В. А. Фок показал, что для атома водорода симметрия связана с определенным преобразованием в четырехмерном пространстве-времени.

Владимир Александрович Фок, 1898–1974, советский физик-теоретик, академик, работал в Ленинградском университете, Физико-техническом институте, государственном оптическом институте.

4.2.2. Состояния атома водорода

Рассмотрим низшие состояния атома водорода.

1. *Главное квантовое число* $n = 1$. $1s$ состояние: $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$. Энергия низшего состояния электрона определяется (4.1.22):

$$E_1=-\frac{m_0e^4}{2\hbar^2}=-13{,}606\,\text{эВ}=-1\,\text{Рид}=-0{,}5\,\text{а.е.} \qquad (4.2.4)$$

Полином Лагерра равен, исходя из соотношения (4.1.30):

$$L_1^1=\frac{d}{d\rho}\left(e^{\rho}\frac{d}{d\rho}\rho e^{-\rho}\right)=-1.$$

Тогда радиальная волновая функция записывается:

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}}, \qquad (4.2.5)$$

где $a_0 = \hbar^2 / m_0 e^2$ — Боровский радиус. И поскольку угловая часть волновой функции равна:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

получаем полную волновую функцию 1*s* состояния в виде

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}. \qquad (4.2.6)$$

На рисунке 4.2.2 изображена волновая функция в зависимости от расстояния от ядра (кривая (*1*)) и плотность вероятности обнаружить частицу на расстоянии *r*: $dW/dr \sim r^2 |\psi|^2$ (кривая (*2*)). Максимум плотности вероятности приходится на расстояние, равное радиусу Бора a_0.

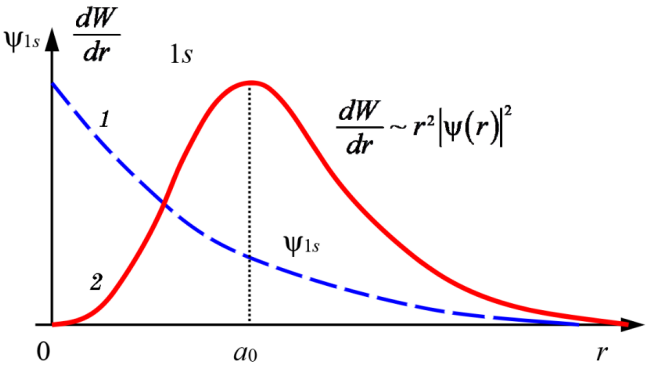


Рис. 4.2.2

2. *Главное квантовое число* $n = 2$. Энергия этого состояния равна:

$$E_2 = -\frac{m_0 e^4}{8\hbar^2} = -3{,}401\,\text{эВ} = 0{,}25\,\text{Рид} = 0{,}125\,\text{а.е.} \qquad (4.2.7)$$

А. 2*s* состояние: $n = 2$, $l = 0$, $m = 0$.

Полная волновая функция 2*s* состояния определяется:

$$\psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}. \qquad (4.2.8)$$

Отметим, что волновая функция 2*s* состояния проходит через нуль — появляется «узел» (см. рис. 4.2.3, кривая (*1*)). Именно изменение знака волновой функции обеспечивает ортогональность этой волновой функции к волновой функции 1*s* состояния. Максимум в плотности вероятности смещается в сторону больших значений радиуса (кривая (*2*) на рис. 4.2.3).

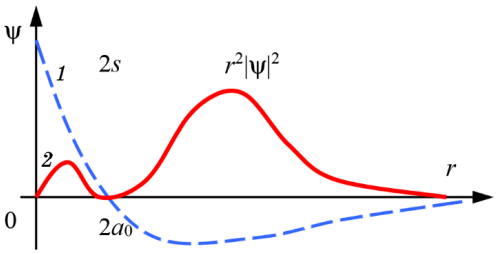


Рис. 4.2.3

Б. 2*p* состояние: $n = 2$, $l = 1$, $m = 0, \pm 1$.

Три различные волновые функции описывают состояния с различными проекциями момента импульса:

$$\psi_{210} = \frac{1}{\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta;$$
$$\psi_{21\pm1} = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \cdot e^{\pm i\varphi}. \qquad (4.2.9)$$

Волновая функция 2*p* состояния не имеет узлов. Ее ортогональность к волновым функциям 1*s* и 2*s* состояний обеспечивается ортогональностью угловых частей функции. Поведение радиальной части волновой функции и плотности вероятности показано на рисунке 4.2.4.

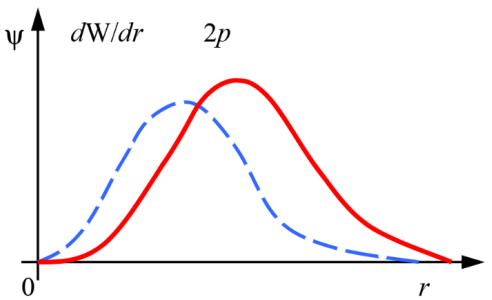


Рис. 4.2.4

3. *Главное квантовое число* $n = 3$. Энергия этого состояния равна

$$E_3 = -\frac{m_0 e^4}{18\hbar^2} = -1{,}51\,\text{эВ}. \qquad (4.2.10)$$

Для простоты приведем здесь только радиальные волновые функции для трех возможных значений орбитального числа. Радиальные волновые функции состояний с одинаковыми главными квантовыми числами *n* и моментами импульса *l* одинаковы для всех состояний с разными проекциями момента импульса *m*.

А. 3*s* состояние: $n = 3$, $l = 0$, $m = 0$. Радиальная волновая функция имеет вид

$$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}}\left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a_0}}. \qquad (4.2.11)$$

Волновая функция имеет два узла, а ее основной максимум еще дальше отстоит от центра ядра. На рисунке 4.2.5 кривая (*1*) показывает поведение радиальной функции, а кривая (*2*) дает распределение плотности вероятности нахождения частицы в зависимости от расстояния от ядра. Эта функция ортогональна к волновым функциям 1*s* и 2*s* состояний.

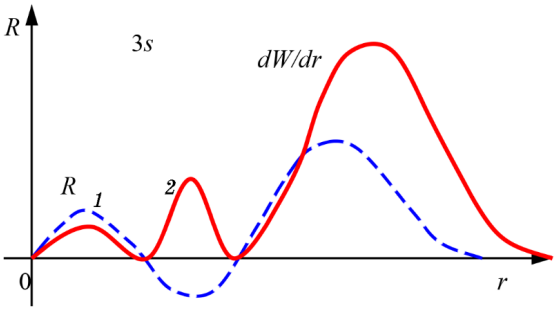


Рис. 4.2.5

Б. 3*p* состояние: $n = 3$, $l = 1$, $m = 0, \pm 1$. Радиальная волновая функция 3*p* состояния один раз меняет знак (одна узловая точка) и имеет вид

$$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0}\left(1 - \frac{r}{6a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a_0}}. \qquad (4.2.12)$$

Полная волновая функция получается умножением R_{31} на соответствующие угловые части *p* состояния $Y_{1m}(\theta,\varphi)$.

В. 3*d* состояние: $n = 3$, $l = 2$, $m = 0, \pm 1, \pm 2$. Радиальная волновая функция 3*d* состояния не имеет нулей:

$$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30a_0^3}} \frac{r^2}{a_0^2} \cdot e^{-\frac{r}{3a_0}}. \qquad (4.2.13)$$

Распределение плотности вероятности нахождения частицы в 3*d* состоянии в радиальном направлении не имеет нулей подобно распределению плотности в 2*p* состоянии (рис. 4.2.4), однако максимум 3*d* распределения сдвигается в область более далеких расстояний от ядра.

Схема уровней атома водорода качественно изображена ниже на рисунке 4.2.6. Уровни энергии вырождены по орбитальному и магнитному квантовым числам в соответствие с формулой (4.2.3). Поскольку это вырождение — особенность чистого кулоновского поля, то для атомов с числом электронов больше одного потенциальное поле, в котором движутся электроны, искажается и отличается от чисто кулоновского поля благодаря межэлектронному взаимодействию. При этом нарушается условие для «случайного вырождения», и энергия состояния становится зависимой от главного *n* и орбитального *l* квантовых чисел. Уровни энергии при одинаковом главном квантовым числом *n* расщепляются на подуровни, характеризуемые *n* и *l*: E_{nl}. Примерная схема уровней для атомов с зарядом ядра $Z > 1$ и числом электронов больше одного изображена на рисунке 4.2.7.

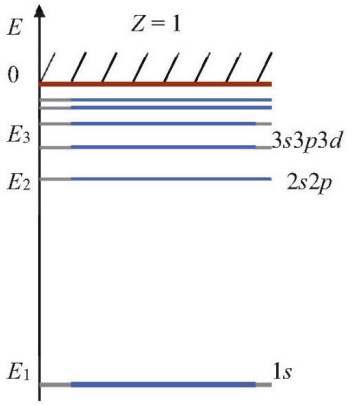


Рис. 4.2.6

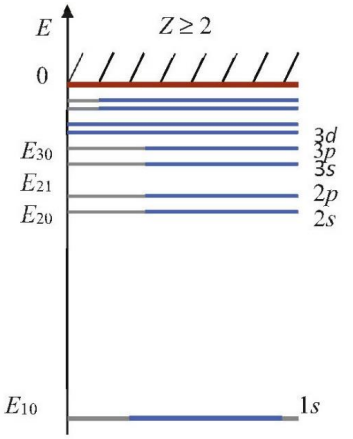


Рис. 4.2.7

Следует отметить, что с появлением дополнительных электронов в атоме потенциальное поле, создаваемое всеми электронами и ядром и в котором движется каждый электрон атома, отличается от чисто кулоновского поля и лишь приближенно сохраняет центральную симметрию.

4.3. Спин электрона

4.3.1. Экспериментальные факты существования спина

Такая относительно простая теория атома водорода, которая представлена в предыдущем параграфе, при описании атомов с большим количеством электронов, натолкнулась на некоторые трудности, обнаруженные на эксперименте. Было понятно, что взаимодействие между электронами должно изменить состояния, волновые функции и энергии, отдельных электронов. Однако если наружный электрон находится достаточно далеко от остальных электронов в атоме, т. е. он находится практически в кулоновском поле ядра, экранированном внутренними электронами, то его поведение должно быть аналогично поведению электрона в атоме водорода. Это можно проверить измерениями спектров излучения, которые определяются переходами электронов между уровнями.

Например, атомы щелочных металлов должны быть похожи на атом водорода, так как их наружный валентный электрон расположен на значительном удалении от остальных и, по идее, должен двигаться в поле достаточно близко приближенному к чисто кулоновскому полю. Однако оказалось, что спектр атомов щелочных металлов имеет более сложную структуру, чем это следует из задачи о состояниях в кулоновском поле. Линии спектра имеют вид дублетов, т. е. линии аналогичные линиям в атоме водорода расщеплены и имеют тонкую структуру. Это означает, что возбужденные уровни наружного электрона расщеплены по энергии (см. рис. 4.3.1).

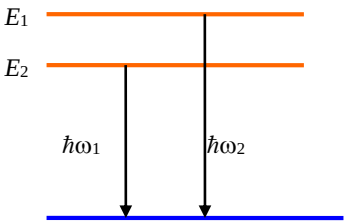


Рис. 4.3.1

Спектры других атомов, оказывается, часто также имеют мультиплетную структуру, то есть вместо синглетов (одна линия в спектре излучения), наблюдаются дублеты (2 линии), триплеты (3 линии), квартеты и так далее. Очевидно, что эта структура линий испускания обусловлена расщеплением энергетических уровней, которое называется *тонкой структурой* уровней.

Рассмотрим для примера спектры атомов щелочных металлов. Так для атома лития Li (Z = 3), в основном состоянии которого находится один наружный электрон на уровне 2*s*, имеется излучательный переход из возбужденного состояния 2*p* в состояние 2*s*. Энергия излученного кванта равна $\hbar\omega$ = 1,848 эВ, что соответствует длине волны света λ = 6707.85 Å. Оказалось, что уровень 2*p* двойной и эта линия перехода в спектре расщеплена, причем расщепление очень мало и составляет $2\cdot10^{-5}$ эВ (на рис. 4.3.2 это малое расщепление не показано).

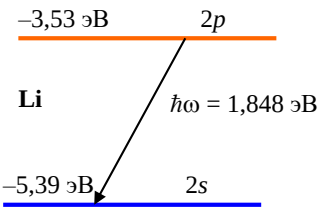


Рис. 4.3.2

Существенно большее расщепление получается для аналогичных линий в спектре натрия с *Z* = 11 (см. рис. 4.3.3). Возбужденный 3*p* уровень расщепляется, и поэтому могут излучаться два фотона с энергиями $\hbar\omega$ = 2,1049 эВ и $\hbar\omega$ = 2,1027 эВ (или длинами волн λ = 5889,9 Å и λ = 5895,9 Å, соответственно). Разность длин волн $\Delta\lambda$ = 6 Å.

Для атома цезия (Z = 55) расщепление уже составляет величину $\Delta\lambda$ = = 422,34 Å.

Откуда возникает эта двойственность линий в спектре излучения? Расщепление энергетических уровней может быть связано только с тем фактом, что имеется какое-то дополнительное взаимодействие, не учтенное в простой теории атомов. К вопросу об этом взаимодействии мы еще вернемся в дальнейшем в п. 4.5.

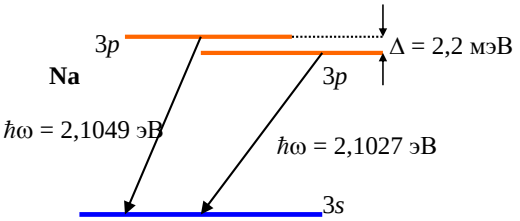


Рис. 4.3.3

Другой экспериментальный факт, который не укладывается в простую теорию атома: *аномальный эффект Зеемана*. При помещении атома в магнитное поле наблюдается расщепление уровней энергии с ненулевым орбитальным моментом импульса. Это не удивительно, поскольку орбитальное движение сопровождается магнитным моментом, который и взаимодействует с внешним магнитным полем. Энергия взаимодействия определяется $W = -\vec{M}\vec{B}$ (см. [3], § 3.8), где $\vec{M}$ — магнитный момент, $\vec{B}$ — индукция магнитного поля.

Ранее в курсе «Электромагнетизм» [3] (§ 3.11) рассматривался эксперимент Штерна — Герлаха (1921 г.), в котором пучок атомов проходил через неоднородное магнитное поле. Напомним, что классическая физика утверждает, что угол между векторами момента импульса и магнитного поля может быть любым. Однако в опыте Штерна — Герлаха было обнаружено явление пространственного квантования магнитного момента атома при помещении атома в неоднородное магнитное поле. В квантовой теории угол между магнитным моментом и направлением магнитного поля не произвольный, т. е. *угол и проекция магнитного момента на направление поля квантуется*.

Однако для атома серебра, у которого снаружи находится один неспаренный электрон, а орбитальный момент импульса атома равен нулю ($l = 0$), магнитный момент также должен быть равным нулю. Тем не менее эксперимент для атомов серебра показал, что все равно наблюдается расщепление на 2 подуровня. Это означает, что атомы обладают *дополнительным магнитным моментом*, не связанным с орбитальным движением.

Кроме того, спектр излучения атомов, помещенных в магнитное поле, показывает, что расщепление уровней происходило таким образом, что уровни энергии имеют нецелые значения квантовых чисел момента импульса.

Все эти факты говорили о том, что существуют еще дополнительные свойства электронных состояний, которые характеризуют момент импульса электрона.

Примечание 40. Питер Зееман, 1865–1943, нидерландский физик, Нобелевская премия 1902 г.

Отто Штерн, 1888–1969, немецкий физик, Нобелевская премия 1943 г.

Вальтер Герлах, 1889–1979, немецкий физик.

4.3.2. Описание спина электрона

С. Гаудсмит и Дж. Уленбек в 1925 г. выдвинули гипотезу, что электрон обладает *собственным механическим моментом импульса* L_s, не связанным с движением электрона в пространстве.

Собственный механический момент импульса электрона L_s — *спин*. Как всякий заряженный объект, обладающий моментом импульса, электрон обладает магнитным моментом. Напомним также, что вопрос о соотношении собственного механического и собственного магнитного моментов электрона мы уже обсуждали в курсе Электромагнетизма [3] (Глава 3, § 3.11), когда рассматривали гиромагнитные эффекты.

Первоначально предполагалось, что спин — это момент импульса, связанный просто с вращением электрона вокруг собственной оси. Тогда электрон должен был бы обладать магнитным моментом, равным:

$$\mathsf{M} = -\frac{e}{2m_0c}L_S\,.$$

Такое же соотношение получаем между магнитным моментом и механическим орбитальным моментом импульса при движении электрона по орбите ([3], Глава 3, § 3.11):

$$\vec{\mathsf{M}}_L = -\frac{e}{2m_0c}\vec{L}\,. \qquad (4.3.1)$$

Знак «минус» появляется из-за отрицательного заряда электрона, поэтому механический и магнитный моменты электрона направлены в разные стороны.

Однако из эксперимента следует, что собственный магнитный момент электрона в два раза больше собственного механического момента L_s и равен

$$\mathsf{M} = -\frac{e}{m_0c}L_S\,. \qquad (4.3.2)$$

Это означает лишь то, что спин электрона не связан с вращением заряженного шара, а есть его *внутреннее свойство*, присущее ему так же, как его заряд и масса.

Вообще спином обладает большинство элементарных частиц: протон, нейтрон, фотон, нейтрино и другие. Напомним, что частицы с целочисленным спином — бозоны, они подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна. Частицы с полуцелым спином — фермионы, и они подчиняются статистике Ферми — Дирака.

По законам квантовой механики вводится оператор спина, находятся соответствующие собственные волновые функции и собственные значения, а также квантовые числа, определяющие спиновое состояние частиц. Для электрона спиновое квантовое число s = ½ (максимальное значение проекции). По аналогии с обычным моментом импульса *собственное значение собственного момента импульса — спина* — равно:

$$L_S = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \hbar\sqrt{1/2\cdot 3/2} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar\,. \qquad (4.3.3)$$

Проекция на заданное направление определяется аналогично:

$$L_{Sz} = m_S \hbar\,, \tag{4.3.4}$$

где $m_S = \pm\, s = \pm\, ½$.

Собственный магнитный момент электрона:

$$\mathbf{M} = -\frac{e}{m_0 c} L_S = -\frac{e\hbar}{m_0 c}\sqrt{s(s+1)} = -2\mu_B\sqrt{s(s+1)} = -\mu_B\sqrt{3}\,. \tag{4.3.5}$$

Здесь введен *магнетон Бора*, который равен:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0 c} = 0{,}927\cdot 10^{-23}\,\frac{\text{Дж}}{\text{Тл}}. \tag{4.3.6}$$

Проекция магнитного момента на ось z по модулю равна магнетону Бора:

$$\mathbf{M}_z = -\frac{e}{m_0 c} L_{Sz} = -\frac{e}{m_0 c} m_S \hbar = -\frac{e\hbar}{m_0 c}\cdot\left(\pm\frac{1}{2}\right) = \mp\mu_B\,. \tag{4.3.7}$$

Именно наличием спина и соответствующего ему магнитного момента объясняются и дублетная структура спектральных линий в атомах щелочных металлов, и аномальный эффект Зеемана, а также многие другие явления в атомной физике.

Спин — это новая характеристика элементарных частиц, которая не связана с обычными пространственными координатами. В квантовой теории поэтому вводят так называемое спиновое пространство — новую «координату» или переменную — спин. Для электрона это пространство состоит из двух возможных значений переменной: ± ½. Оператор спина действует в этом пространстве на эту дополнительную переменную, а собственная функция оператора спина для электрона представляет собой двухкомпонентную функцию — спинор, — компоненты которой отличаются разными «спиновыми координатами».

Оператор спина $\hat{s}$, как и остальные операторы момента, имеет компоненты $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$ и $\hat{s}_z$, причем выполняются следующие коммутационные соотношения: $\left[\hat{s}_x, \hat{s}_y\right] = i\hbar\hat{s}_z$ с соответствующей циклической перестановкой.

Примечание 41. Сэмюэл Абрахам Гаудсмит, 1902–1979, американский физик-теоретик.

Джордж Юджин Уленбек, 1900–1988, американский физик-теоретик.

4.4. Принцип Паули. Распределение электронов в атоме

4.4.1. Многоэлектронный атом

Для многоэлектронных атомов систематика уровней усложняется, случайное вырождение снимается, поскольку каждый электрон движется в

поле, отличающемся от чисто кулоновского. Наличие других электронов искажает кулоновское поле ядра, и в общем случае нарушает сферическую симметрию потенциала поля.

Однако взаимодействие между электронами для большинства электронов атома меньше взаимодействия с ядром, поэтому в *первом приближении* можно считать, что каждый отдельный электрон движется независимо от других в среднем центрально-симметричном поле, создаваемом ядром и всеми остальными электронами атома. Таким образом, в первом приближении рассматриваем одноэлектронные состояния, причем состояние каждого электрона по-прежнему может характеризоваться набором четырех квантовых чисел: n, l, m, μ (или m_s, s):

1) главное квантовое число — n (= 1, 2, 3, 4, ...);
2) орбитальное квантовое число — l (= 0, 1, 2.3, ...);
3) магнитное квантовое число — m (= 0, ±1, ±2, ... ±l);
4) спиновое квантовое число — μ (= ±1/2).

Энергия зависит в первом приближении от квантовых чисел n, l и слабо зависит от m, μ. Основное энергетическое состояние системы получаем, когда электроны располагаются на самых нижних уровнях для того, чтобы была минимальная энергия всей системы — атома. Тогда, казалось бы, что все электроны должны находиться на нижнем 1s уровне (с орбитальным квантовым числом $l = 0$, моментом импульса $L = 0$), но опыт показывает, что это не так. Объяснение опыта состоит в свойствах распределения Ферми-Дирака и *принципа Паули*, который справедлив для фермионов.

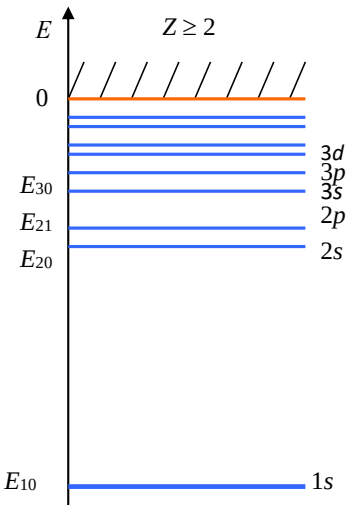


Рис. 4.4.1

<u>Принцип Паули</u>: *в одной квантовой системе (атоме) в одном состоянии, характеризующемся одинаковыми квантовыми числами* (n, l, m, μ), *не может находиться более одного электрона*.

Принцип Паули — это общий квантовомеханический принцип — относится ко всем микрочастицам с полуцелым спином (фермионам). Итак, в

атоме не могут находиться 2 электрона в одном состоянии, определяемым набором квантовых чисел

$$(n, l, m, \mu).$$

В п. 4.1 рассматривали состояния атома водорода, при этом получали, что если рассматриваем уровень с главным квантовым числом n, то в нем находится n^2 состояний с разными значениями l и m. Если к этим возможным состояниям добавить 2 возможные спиновые проекции, то для уровня с главным квантовым числом n имеем $2n^2$ различных состояний. Совокупность электронов, находящихся на уровне энергии с одним значением n, образует *оболочку*.

Иногда оболочкой (подоболочкой) называют совокупность электронов с одинаковыми значениями квантовых чисел n и l — главного и орбитального квантового числа.

4.4.2. Распределение электронов в атомах

Если бы среднее поле, в котором находятся электроны, сохраняло бы кулоновский характер, то заполнение оболочек происходило бы идеальным образом, как показано в таблице 4.4.1. Сначала заполняется 1*s*-уровень, затем следующий по энергии 2*s*-уровень, затем — 2*p*-уровень и т. д.

Таблица 4.4.1

Оболочка	***n***	***l***	m_l	m_s	**Уровень**	**Число электронов на уровне**	**Число электронов в оболочке**
K	1	0	0	±1/2	$1s^2$	2	2
L	2	0	0	±1/2	$2s^2$	2	8
		1	1 0 –1	±1/2 ±1/2 ±1/2	$2p^6$	6	
M	3	0	0	±1/2	$3s^2$	2	18
		1	1 0 –1	±1/2 ±1/2 ±1/2	$3p^6$	6	
		2	2 1 0 –1 –2	±1/2 ±1/2 ±1/2 ±1/2 ±1/2	$3d^{10}$	10	

Итак, сначала заполняются уровни с минимальным главным квантовым числом n и при этом с минимальным значением орбитального квантового числа l:

$$\begin{aligned} n &\Rightarrow \min; \\ l &\Rightarrow \min. \end{aligned} \qquad (4.4.1)$$

По отношению к проекциям момента импульса m и спиновым проекциям μ уровни вырождены, и порядок их заполнения определяется тем, как взаимодействуют электроны с разными проекциями между собой, и зависит от полного момента импульса всей системы в целом, о котором речь пойдет в следующем параграфе.

Распределением электронов по уровням определяются *электронные конфигурации* всех атомов, находящихся в основном состоянии. Таким образом, составляется *Периодическая система элементов*. Первые элементы таблицы имеют следующие электронные конфигурации.

Водород	Z = 1	H	$1s$
Гелий	Z = 2	He	$1s^2$
Литий	Z = 3	Li	$1s^2 2s$
Бериллий	Z = 4	Be	$1s^2 2s^2$
Бор	Z = 5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$
Углерод	Z = 6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$
Азот	Z = 7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$
Кислород	Z = 8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$
.....			

Правилом заполнения уровней (4.4.1) и его иллюстрацией в таблице 4.4.1 представлен тот порядок заполнения, который диктуется кулоновским характером поля атома. Однако опыт показывает, что такой порядок (4.4.1) заполнения электронных оболочек нарушается с ростом заряда ядра атома Z. Так, например, электронная конфигурация атома калия имеет следующий вид:

$$\text{Калий} \quad Z = 19 \quad K \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1.$$

То есть вместо уровня $3d$ вначале заполняется уровень $4s$, который имеет большее значение главного квантового числа. Отклонения от правила (4.4.1) далее с ростом Z наблюдаются чаще.

Другой пример — атом бария:

$$\text{Барий} \quad Z = 56 \quad Ba \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 6s^2.$$

Видно, что первые три оболочки (**K**, **L**, **M**) заполнены полностью, а в следующей оболочке — **N** ($n = 4$) — не заполнено состояние с орбитальным моментом $l = 4$ (f-состояние). Только частично оказалась заполненной и следующая **O** — оболочка ($n = 5$), в то время как начала заполняться следующая оболочка с $n = 6$.

Эти изменения в заполнении уровней связаны с отклонением потенциального поля атома от чисто кулоновского поля, что связано с влиянием взаимодействия между электронами. Теоретические исследования потенциала, в котором движутся атомные электроны, позволили получить другое приближенное правило заполнения уровней атомов:

$$n + l \Rightarrow \min;$$
$$n \Rightarrow \min. \qquad (4.4.2)$$

Следуя этому правилу, мы можем получить правильные электронные конфигурации основных состояний практически всех атомов периодической системы. В самом деле, в атоме бария для 4*f* уровня имеем $n + l = 4 + 4 = 8$, что больше чем для остальных уровней:

$$5s - n + l = 5 + 0 = 5;$$
$$5p - n + l = 5 + 1 = 6;$$
$$6s - n + l = 6 + 0 = 6.$$

Уровень 5*p* заполняется раньше, чем 6*s*, поскольку *n* меньше в первом случае.

Однако и правило (4.4.2) также является приближенным, поэтому существуют несколько отклонений от этого правила в порядке заполнения электронных уровней у тяжелых атомов. Например, появление 5*d* электронов в лантане La, 4*f* электронов в церии Ce и празеодиме Pr происходит в обход правилу (4.4.2) вследствие дополнительного отклонения внутриатомного потенциала для этих элементов.

4.5. Сложение моментов в квантовой механике

4.5.1. Сложение двух моментов импульса

Как складываются моменты импульса в квантовой механике? В классической физике моменты складываются как вектора, и суммарный вектор момента импульса может принимать любое значение. В квантовой физике они складываются тоже как вектора, но при этом их сумма не может принимать непрерывные, произвольные значения.

В этом параграфе будем рассматривать квантовые числа *l* и *m*, т. е. удобнее рассматривать моменты импульса в единицах $\hbar$ и подразумевать, что эти числа связаны с моментами импульса соотношениями

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1);$$
$$L_z = m\hbar.$$

Пусть имеется две частицы с орбитальными квантовыми числами l_1 и l_2 — орбитальными моментами. Операторы углового момента суммы (полного момента) и проекции запишутся:

$$\hat{\vec{l}} = \hat{\vec{l}}_1 + \hat{\vec{l}}_2;$$
$$\hat{l}_z = \hat{l}_{1z} + \hat{l}_{2z}. \qquad (4.5.1)$$

Сосчитаем число возможных после сложения моментов состояний: для каждой отдельной частицы имеем число состояний с различными проекциями соответственно

$$(2l_1 + 1) \quad \text{и} \quad (2l_2 + 1).$$

Если имеем невзаимодействующие частицы, для которых рассмотрение проще, то эти частицы рассматриваются независимо. Тогда полное число возможных состояний обеих частиц в системе равно произведению чисел состояний каждой из частиц:

$$(2l_1 + 1)(2l_2 + 1). \tag{4.5.2}$$

Аналогично тому, как мы делали и ранее, введем оператор квадрата суммы моментов:

$$\hat{l}^2 = \left(\hat{\vec{l}}_1 + \hat{\vec{l}}_2\right)^2. \tag{4.5.3}$$

Можно показать, что он также коммутирует с любой проекцией, в частности с суммарной проекцией на выделенную ось z: $\hat{l}_z = \hat{l}_{1z} + \hat{l}_{2z}$:

$$\left[\hat{l}^2, \hat{l}_z\right] = 0. \tag{4.5.4}$$

Если для каждой частицы в отдельности проекции имеют определенные значения m_1 и m_2, то и проекция полного момента системы из двух частиц (т. е. собственное число $\hat{l}_z$) равна сумме:

$$m = m_1 + m_2.$$

Проекции полного момента меняются также на единицу от максимального значения до минимального (т. е. со знаком «минус» максимальное значение). Следовательно, мы можем построить все возможные значения полного момента через проекции момента отдельных частиц, складывая их всеми возможными способами.

Рассмотрим пример, когда складываются 2 момента импульса $l_1 = 2$ и $l_2 = 1$. Запишем все возможные проекции суммарного момента импульса:

$$\begin{array}{lllll} 2 + 1 = 3 & 1 + 1 = 2 & 0 + 1 = 1 & -1 + 1 = 0 & -2 + 1 = -1; \\ 2 + 0 = 2 & 1 + 0 = 1 & 0 + 0 = 0 & -1 + 0 = -1 & -2 + 0 = -2; \\ 2 - 1 = 1 & 1 - 1 = 0 & 0 - 1 = -1 & -1 - 1 = -2 & -2 - 1 = -3. \end{array} \tag{4.5.5}$$

Выпишем все 15 проекций суммарного момента, скомбинировав их в 3 группы:

1) (3, 2, 1, 0, –1, –2, –3);
2) (2, 1, 0, –1, –2);
3) (1, 0, –1).

Видно, что первая (на рис. 4.5.1 представлены пунктирными линиями) группа представляет собой 7 проекций суммарного момента импульса $l_1 = 3$, вторая (на рис. 4.5.1 линии с точками) группа — 5 проекций момента

импульса $l_2 = 2$, третья (сплошные линии) группа — 3 проекции $l_3 = 1$. Итак, в разобранном примере получаем 3 возможных значения полного момента импульса при сложении двух моментов импульса $l_1 = 2$ и $l_2 = 1$. На этом примере можно заметить правило получения полного момента импульса при сложении двух моментов: меняем квантовые числа через единицу от их суммы $l_1 = l_1 + l_2$ до их разности $l_3 = l_1 - l_2$.

Рисунок 4.5.1 иллюстрирует различные полные моменты импульса системы двух частиц и в то же время одинаковые значения проекции момента импульса для различных полных моментов l. Виды векторов на рисунке 4.5.1 соответствуют виду выделенных групп в (4.5.5). Напомним, что вектор полного момента импульса не имеет определенного направления в пространстве (поэтому на рис. 4.5.1 их направления условны), а сохраняется только его величина и проекция на выделенную ось z.

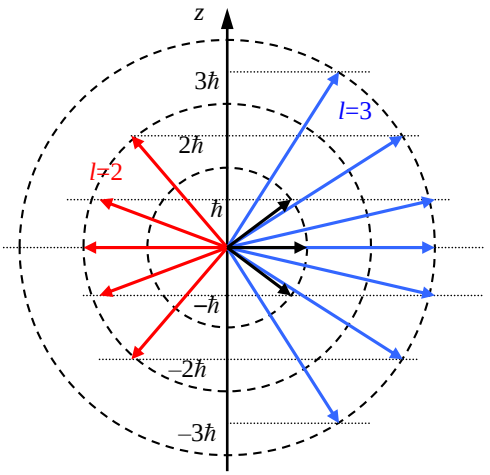


Рис. 4.5.1

Построив таблицу аналогичную (4.5.5) и выбирая соответствующим образом группы проекций МИ, можно убедиться, что момент импульса l, являющийся суммой двух произвольных моментов импульса l_1 и l_2, может принимать значения следующие значения:

$$l = l_1 + l_2,\ l_1 + l_2 - 1,\ l_1 + l_2 - 2, \ldots,\ |l_1 - l_2|. \qquad (4.5.6)$$

При этом для каждого значения l имеем $(2l + 1)$ проекций момента на ось z:

$$m_l = l,\ l - 1, \ldots - l + 1, -l. \qquad (4.5.7)$$

В самом деле, построим таблицу (табл. 4.5.1) всех возможных значений проекции полного момента импульса. Пусть для определенности $l_1 > l_2$, тогда число столбцов $2l_2 + 1$ дает общее число возможных значений суммарного момента импульса l. Строим таблицу таким образом, что проекция мо-

мента импульса в верхней строке левого столбца соответствует максимальному значению проекции $m_{max} = (l_1 + l_2)$, в то время в нижней строке правого столбца — минимальному значению $m_{min} = -(l_1 + l_2)$.

Все остальные проекции последовательно уменьшаются на единицу. Все проекции суммарного момента импульса выбираются, например, по правилу: для максимального момента импульса — берутся все значения в левом столбце и нижней строке (эти значения отмечены п/ж начертанием). Для значения полного момента импульса на единицу меньше — значения во втором столбце и второй снизу строки (ячейки с заливкой), и так далее — для последующих значений МИ — столбец и строка меньших размеров. Таким образом, получаем все возможные значения момента импульса, определяемые выражением (4.5.6).

Таблица 4.5.1

	Число столбцов $2l_2+1$				
Число строк $2l_1 + 1$	$\boldsymbol{l_1 + l_2}$	$l_1 + l_2 - 1$	$l_1 + l_2 - 2$	.....	$l_1 - l_2$
	$\boldsymbol{l_1 - 1 + l_2}$	$l_1 - 1 + l_2 - 1$	$l_1 - 1 + l_2 - 2$	.....	$l_1 - 1 - l_2$
	$\boldsymbol{l_1 - 2 + l_2}$	$l_1 - 2 + l_2 - 1$	$l_1 - 2 + l_2 - 2$	.....	$l_1 - 2 - l_2$
	.....	.....	.....	.....	.....
	$\boldsymbol{-l_1 + 2 + l_2}$	$-l_1 + 2 + l_2 - 1$	$-l_1 + 2 + l_2 - 2$	.....	$-l_1 + 2 - l_2$
	$\boldsymbol{-l_1 + 1 + l_2}$	$-l_1 + 1 + l_2 - 1$	$-l_1 + 1 + l_2 - 2$	.....	$-l_1 + 1 - l_2$
	$\boldsymbol{-l_1 + l_2}$	$\boldsymbol{-l_1 + l_2 - 1}$	$\boldsymbol{-l_1 + l_2 - 2}$	**.....**	$\boldsymbol{-l_1 - l_2}$

Из таблицы 4.5.1 также легко видеть, что число состояний не изменилось — оно равно произведению числа строк на число столбцов: $(2l_1+1)(2l_2+1)$:

$$\begin{aligned}&\left[2\left(l_1+l_2\right)+1\right]+\left[2\left(l_1+l_2-1\right)+1\right]+\ldots+\left[2\left(l_1-l_2\right)+1\right]=\\&=\frac{2\left(l_1+l_2\right)+1+2\left(l_1-l_2\right)+1}{2}\left(2l_2+1\right)=\left(2l_1+1\right)\left(2l_2+1\right).\end{aligned} \tag{4.5.8}$$

Следуя этим правилам, можно получит полный момент импульса атома с незаполненными оболочками.

Группы электронов в заполненной оболочке, а следовательно, атомы с замкнутыми оболочками, имеют суммарный момент импульса равный нулю.

Примечание 42. При сложении моментов импульса трех и более частиц правила становятся более сложными из-за того, какие пары частиц складывать в первую очередь. Для взаимодействующих электронов атомы с различными полными моментами импульса имеют различные энергии, что приводит к усложнению его энергетической структуры.

4.5.2. Полный момент импульса одного электрона

Рассмотрим теперь один электрон, обладающего орбитальным l и спиновым $s = ½$ моментами импульса. Моменты складываются по общему правилу сложения моментов (4.5.6). Поэтому полный момент импульса одного электрона принимает 2 значения:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}\,; \tag{4.5.9}$$

$$j = l \pm s = l \pm \frac{1}{2}. \tag{4.5.10}$$

Здесь j — квантовое число, определяющее полный момент импульса электрона. Проекции полного момента импульса также могут принимать значения через единицу:

$$m_j = j, \quad j-1, \quad j-2,..., \quad -j+1, \quad -j\,. \tag{4.5.11}$$

Примеры построения полных моментов электронов для небольших орбитальных моментов:

орбитальный момент		полный момент
1)	$l = 0$,	$j = 1/2$;
2)	$l = 1$,	$j = 1/2, 3/2$;
3)	$l = 2$,	$j = 3/2, 5/2$

и т. д.

Таким образом, обычные состояния электрона в центрально симметричном поле определяются с помощью следующей четверки квантовых чисел: n, l, j, m_j.

Итак, получаем следующие одноэлектронные состояния с учетом спина и полного момента.

$n = 1,\ l = 0,\ j = 1/2$	—	$1s_{1/2}$
$n = 2,\ l = 0,\ j = 1/2$	—	$2s_{1/2}$
$n = 2,\ l = 1,\ j = 1/2$	—	$2p_{1/2}$
$n = 2,\ l = 1,\ j = 3/2$	—	$2p_{3/2}$
$n = 3,\ l = 0,\ j = 1/2$	—	$3s_{1/2}$
$n = 3,\ l = 1,\ j = 1/2$	—	$3p_{1/2}$
$n = 3,\ l = 1,\ j = 3/2$	—	$3p_{3/2}$
$n = 1,\ l = 2,\ j = 3/2$	—	$3d_{3/2}$
$n = 1,\ l = 2,\ j = 5/2$	—	$3d_{5/2}$
.....		

Энергия состояния электрона в атомах зависит от полного момента импульса. Это обстоятельство и объясняет в спектрах атомов щелочных металлов дублетную структуру уровней, о которой говорилось в п. 4.3. Наружный электрон в этих атомах в первом приближении находится в центрально симметричном поле (поле, созданном ядром и электронами заполненных внутренних оболочек). Однако это поле отличается от чисто кулоновского поля,

поэтому уровни энергии с разными l и j расщепляются. Поэтому при оптическом переходе из np состояния в ns получаем дублетную структуру линий в спектре, так как np расщепляется на 2 подуровня $np_{1/2}$ и $np_{3/2}$.

На рисунке 4.5.2 схематически показано расщепление для энергетического состояния наружного электрона атома лития, приводящее к дублетной структуре в спектре испускания.

Взаимодействие электронов, зависящее от величины и взаимной ориентации их орбитального и спинового моментов импульса и приводящее к так называемой тонкой структуре уровней энергии системы, носит название *спин-орбитального взаимодействия.*

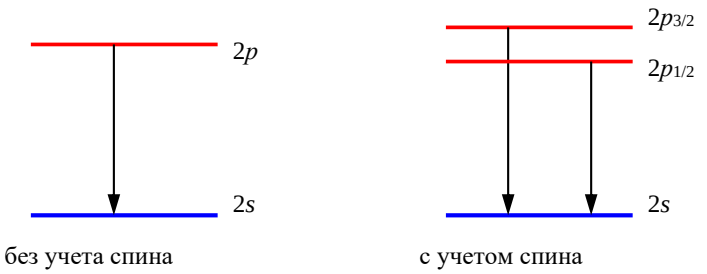


Рис. 4.5.2

4.6. Сложение моментов в многоэлектронном атоме. Понятие терма

4.6.1. Нормальная *L–S* связь

Вопрос теперь состоит в том, как складываются моменты импульсов электронов в многоэлектронном атоме? Очевидно, что система из многих электронов — атом — характеризуется полным моментом импульса J. Для изолированного атома именно *полный момент импульса* является интегралом движения — сохраняющейся величиной.

Полный момент импульса атома определяется сложением орбитальных и спиновых моментов или сложением полных моментов отдельных электронов. При этом порядок сложения моментов не имел бы никакого значения, если бы состояние атома, его волновая функция и энергия зависели только от окончательного полного момента атома. Однако в действительности в описании состояний электронной системы атома имеют значение не только полный момент, но и другие, промежуточные квантовые числа тоже, которые возникают в процессе сложения моментов. Поэтому порядок сложения отдельных моментов электронов в полный момент атома, оказывается, имеет значение.

Наиболее распространенный и важный предельный случай — L–S связь, которая исторически иногда называется *нормальной* или *Рассел-Саундерсовской* связью. Такая связь осуществляется для легких и промежу-

точных атомов в Периодической системе. Для этих атомов электростатическое отталкивание между электронами велико по сравнению с взаимодействием между орбитальным и спиновым моментами — *спин-орбитального взаимодействия*. При этом орбитальные и спиновые моменты электронов складываются отдельно в *полные орбитальный и спиновый моменты* всего атома:

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 + \vec{l}_3 + ... \tag{4.6.1}$$

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 + \vec{s}_3 + ... \tag{4.6.2}$$

Состояние системы электронов, в частности электронной оболочки, характеризуется суммарными моментами $\vec{L}$ и $\vec{S}$, а также полным моментом импульса $\vec{J}$:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}\,. \tag{4.6.3}$$

Переходя от квантовых чисел к обычной записи моментов импульса, имеем соответственно для полного, орбитального и спинового моментов атома следующие выражения:

$$\vec{L}_J^2 = \hbar^2 J\left(J+1\right), \quad \vec{L}_L^2 = \hbar^2 L\left(L+1\right), \quad \vec{L}_S^2 = \hbar^2 S\left(S+1\right), \tag{4.6.4}$$

а также соответствующие проекции моментов импульса: M_J, M_L и M_S. Количество проекций определяется максимальной проекцией момента импульса и равно соответственно: $\left(2J+1\right)$, $\left(2L+1\right)$, $\left(2S+1\right)$.

Рассмотрим атомы с заполненными оболочками. В силу того, что в такой оболочке состояния со всеми возможными проекциями момента импульса заполнены, то суммарная проекция момента импульса всей оболочки в целом равна 0. И других проекций для заполненных оболочек не существует. Следовательно, *полный момент импульса заполненной оболочки атома равен также нулю*. Итак, атомы с заполненными оболочками, т. е. с заполненными *nl* уровнями, имеют полный момент импульса равный нулю. Такой атом обладает сферической симметрией. К таким атомам относятся атом гелия, атомы щелочноземельных металлов и атомы благородных газов, атом палладия.

Атомы с одним электроном сверх заполненных оболочек характеризуются полным моментом этого одного электрона, т. е.

$$J = j = l \pm \frac{1}{2}. \tag{4.6.5}$$

Таким образом, полный момент всего атома определяется орбитальным и спиновым моментами одного наружного электрона.

Переходя к атомам с незамкнутыми оболочками с числом электронов более одного, путем сложения их моментов может получиться различное число его состояний, характеризующихся разными полными моментами импульса J, орбитальными L и спиновыми S моментами.

Исходя из общих законов сохранения, сохраняется в изолированном атоме полный момент импульса J. Моменты L и S по отдельности не сохраняются, точнее в первом приближении они сохраняются по модулю, но не имеют определенного направления в пространстве.

Состояния таких атомов в целом характеризуются *термом* и записываются в следующем виде:

$$^{2S+1}L_J = {}^{\text{мультиплетность}}(\text{полный орбит. МИ})_{\text{полный МИ}}. \qquad (4.6.6)$$

Здесь полный орбитальный момент импульса L определяется (4.6.1), при этом каждое его значение в спектроскопии характеризуется заглавными латинскими символами:

$$\begin{array}{ll} L = & 0,\ 1,\ 2,\ 3,... \\ \text{состояние} & S, P, D, F,... \end{array} \qquad (4.6.7)$$

Полный спиновый момент S определяется соотношением (4.6.2), при этом величина $2S + 1$ называется *мультиплетностью уровня*, которая определяет число компонент в расщепляющемся уровне. Полный момент импульса J определяется по формуле (4.6.3).

При определении количества термов в атоме необходимо отличать *эквивалентные* или *неэквивалентные* электроны. Эквивалентными называются электроны с одним значением главного и орбитального квантовых чисел, но разными проекциями МИ, т. е. электроны одной (n,l)-оболочки. Для эквивалентных электронов принцип Паули вносит свои ограничения в число возможных термов.

Рассмотрим конкретный пример — электронная конфигурация p^2. В этом случае имеем дело с двумя эквивалентными электронами. Вопрос, какие термы возможны при этой конфигурации? Для этого будем «рассаживать» эти 2 электрона по возможным шести состояниям в этой оболочке, которые различаются проекциями орбитального m и спинового m_S моментов импульса. Число возможных расположений двух электронов по этим состояниям равно числу сочетаний из 6 по 2:

$$C_6^2 = \frac{6!}{2! \cdot 4!} = 15.$$

В таблице 4.6.1 показано заполнение вакантных мест в оболочке p двумя электронами с различными проекциями спинов. Электроны с проекцией спина +1/2 показаны стрелкой «вверх», а с проекцией спина –1/2 — стрелкой «вниз». Там же приведены всевозможные проекции орбитального, спинового и полного моментов системы 2-х электронов в p оболочке.

Из анализа проекций полного, спинового и орбитального моментов получаем 5 термов. Квантовые числа с 1-го по 5-й столбец представляют собой состояние с $J = L = 2$, и $S = 0$, т. е. получаем терм $^1D_2$. Совокупность проекций с 6-го по 14-й столбец дает двухэлектронное состояние с $L = 1$, $S = 1$, но с несколькими значениями полного момента $J = 0,1,2$, что соответствует термам: $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$ (эти состояния в табл. 4.6.1 помечены разными цветами).

Последний 15-й столбец дает состояние с $J = L = S = 0$, которое соответствует терму $^1S_0$.

Таблица 4.6.1

m	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1 0 –1	↑↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑↓	↑ ↑	↑ ↑	↑ ↑	↓ ↑	↓ ↑	↓ ↑	↓ ↓	↓ ↓	↓ ↓	↑ ↓
M_L	2	1	0	–1	–2	1	0	–1	1	0	–1	1	0	–1	0
M_S	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	–1	–1	–1	0
M_J	2	1	0	–1	–2	2	1	0	1	0	–1	0	–1	–2	0
Терм	$^1D_2$					$^3P_{0,1,2}$									$^1S_0$

Вопрос теперь состоит в том, какой терм соответствует наиболее низкому по энергии состоянию, т. е. является основным. Эмпирическое правило было выдвинуто Ф. Хундом. Позднее это эмпирическое правило Хунда получило теоретическое обоснование. Состоит оно в следующем: *наименьшей энергией при данной электронной конфигурации обладает терм с наибольшим возможным значением суммарного спинового момента S и наибольшим (при этом значении S) значением орбитального момента L.*

Таким образом, в рассмотренном выше примере наименьшей энергией обладает терм $^3P_0$. Например для атома углерода C ($1s^22s^22p^2$) имеем следующее значение для энергии основного состояния:

$$E\ (1s^22s^22p^2\ \ ^3P_0) = 90820{,}4\ \text{см}^{-1} = 11{,}260\ \text{эВ}.$$

Остальные термы той же конфигурации отстоят от основного состояния на следующие значения:

$$\Delta E\ (1s^22s^22p^2\ \ ^3P_1) = 16{,}4\ \text{см}^{-1} = 0{,}002\ \text{эВ}.$$

$$\Delta E\ (1s^22s^22p^2\ \ ^3P_2) = 43{,}4\ \text{см}^{-1} = 0{,}005\ \text{эВ}.$$

$$\Delta E\ (1s^22s^22p^2\ \ ^1D_2) = 10192{,}6\ \text{см}^{-1} = 1{,}264\ \text{эВ}.$$

$$\Delta E\ (1s^22s^22p^2\ \ ^1S_0) = 21648{,}0\ \text{см}^{-1} = 2{,}684\ \text{эВ}.$$

Состояния с изменением конфигурации электронов (как правило) лежат выше по энергии:

$$\Delta E\ (1s^22s2p^3\ \ ^5S_2) = 33735{,}2\ \text{см}^{-1} = 4{,}183\ \text{эВ}.$$

$$\Delta E\ (1s^22s2p^23s\ \ ^3P_0) = 60333{,}4\ \text{см}^{-1} = 7{,}480\ \text{эВ}.$$

В дальнейшем — при больших возбуждениях — термы различных конфигураций могут перепутываться и создавать сложную картину уровней в спектре.

Приведем еще несколько примеров.

1. Если в атоме имеется полузаполненная оболочка: np^3, nd^5, nf^7. Тогда наименьшую энергию имеет состояние, определяемое S-термом, в котором все спиновые проекции выстроены: $^4S_{3/2}$, $^6S_{5/2}$, $^8S_{7/2}$, соответственно.

2. Если в атоме в наружной оболочке находится один *d*-электрон, тогда получаем 2 возможных состояния с термами: $^2D_{3/2}$ и $^2D_{5/2}$, причем первый из них имеет меньшую энергию.

3. Если в атоме находятся 2 неэквивалентных электрона, например, конфигурация $3d^14s^1$, тогда получаем 4 терма: $^3D_{1,2,3}$ и $^1D_2$, при этом состояние с термом $^3D_1$ является основным.

4.6.2. *j–j* связь

Связывание моментов импульса в полный момент импульса атомной системы может осуществляться различными способами. Крайний случай по отношению к *L–S* связи сложения моментов осуществляется, когда релятивистское взаимодействие велико и когда сила взаимодействия между орбитальным движением *l* и спином *s*, больше, чем сила взаимодействия различных электронов между собой. При этом говорят, что магнитное спин-орбитальное взаимодействие велико по сравнению с электростатическим взаимодействием различных электронов между собой. Таким образом, на первом этапе осуществляется сложение орбитального и спинового момента каждого электрона:

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i . \qquad (4.6.8)$$

Такая связь носит название *j-j* связи. Полный момент всего атома тогда равен

$$\vec{J} = \sum_i \vec{j}_i . \qquad (4.6.9)$$

Такая схема сложения моментов представляет собой приближение, которое полностью не реализуется в атомах. Наиболее близки к этой связи сложения моментов электроны тяжелых атомов и главным образом внутренние электроны. Или электроны в тяжелых многозарядных ионах.

Итак, все схемы сложения моментов импульсов являются приближенными в реальных атомах. Однако для легких атомов в основном реализуется *L–S* связь, и с ее помощью достаточно хорошо описываются энергетические спектры атомов. С ростом заряда ядра в атомах появляются нарушения в *L–S* связи, при этом чаще всего реализуются схемы промежуточной связи.

Примечание 43. Фридрих Хунд, 1896–1986, немецкий физик-теоретик.

4.7. Оптические спектры. Правила отбора оптических переходов

4.7.1. Правила отбора для полного момента импульса

Переходы в атомах с возбужденного уровня на более низкие уровни по энергии сопровождается излучением кванта электромагнитного поля. Это так называемые оптические переходы. Однако не все переходы осуществляются. Те переходы, которые совершаются с испусканием фотона, называются *разрешенными переходами*. Для их определения имеются *правила отбора*. Исторически впервые правила отбора были введены эмпирически, однако затем в квантовой механике они были получены в результате строгого вывода. Каждое правило отбора выражает какой-то закон сохранения (точный или приближенный).

Рассмотрим однофотонный процесс излучения и ограничения, связанные с ним. Наиболее важным для введения ограничений на переходы является закон сохранения момента импульса. Пусть начальное состояние атома характеризуется полным моментом импульса J_1, а конечное — J_2. Тогда по закону сохранения момента импульса имеем

$$\vec{J}_2 = \vec{J}_1 + \vec{l}_{\text{фот}}, \tag{4.7.1}$$

где $\vec{l}_{\text{фот}}$ — вектор спина излученного фотона, который по модулю равен единице: $l_{\text{фот}} = 1$. Итак, спин фотона равен 1, но при этом необходимо также помнить, что одна из его проекций (вдоль распространения фотона) не осуществляется из-за поперечности электромагнитных волн. Поэтому у фотона только 2 значения поляризации ±1.

Напомним, что выражение (4.7.1) записано в символической форме, поскольку 3 компоненты момента импульса не имеют одновременно точного значения. Поэтому речь идет о квантовых числах, для которых и выполняется (4.7.1) правило векторного сложения.

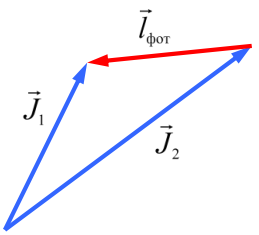


Рис. 4.7.1

Рассуждение, которое сейчас приведем, не дает строгий теоретический вывод правил отбора, однако позволяет качественно понять их возникновение и приводит к правильным результатам. Рассмотрим классическое сложение векторов, длины которых выражаются квантовым образом. Тогда из треугольника, выражающего закон сохранения момента импульса, получаем

$$\sqrt{J_2\left(J_2+1\right)} \le \sqrt{J_1\left(J_1+1\right)} + \sqrt{l_{\text{фот}}\left(l_{\text{фот}}+1\right)}. \qquad (4.7.2)$$

Из соотношения треугольника (рис. 4.7.1 и (4.7.1)–(4.7.2)) получаем следующие следствия.

1. Не могут осуществляться переходы между состояниями с $J_1 = 0$ и $J_2 = 0$, поскольку не выполняется соотношение треугольника, иначе говоря, так называемые 0 — 0 переходы строго запрещены.

2. Если только один из моментов не равен нулю, например $J_1 \neq 0$, то треугольник вырождается в 2 отрезка направленных одинаково или противоположно. Таким образом, возможны переходы только с $\Delta J = \pm 1$.

3. Если же моменты импульсов $J_1 \neq J_2 \neq 0$, то возможны следующие переходы между состояниями:

$$\Delta J = \pm 1, 0. \qquad (4.7.3)$$

В самом деле, для фотона имеем:

$$l_{\text{фот}} = 1 \text{ и } \sqrt{l_{\text{фот}}\left(l_{\text{фот}}+1\right)} = \sqrt{2}.$$

Далее, квантовые числа J_1 и J_1 являются целыми числами, когда число электронов четное, и полуцелыми, когда число электронов нечетное. Поэтому в любом случае разность $J_2 - J_1 = \Delta J$ является целым числом. Заменяя $J_2 = J_1 + \Delta J$ и возводя в квадрат (4.7.2), получаем

$$\Delta J^2 + \left(2J_1+1\right)\Delta J - 2 \le 2\sqrt{2J_1\left(J_1+1\right)}. \qquad (4.7.4)$$

Это неравенство выполняется только для следующих изменений полного момента $\Delta J = \pm 1, 0$.

Если сформулировать правила отбора для проекций полного момента импульса, то можно записать сразу:

$$\Delta M_J = M_{J2} - M_{J1} = \pm 1, \quad 0. \qquad (4.7.5)$$

Правила (4.7.5) должны, конечно, выполняться при одновременном выполнении (4.7.3).

Когда $\Delta J = \pm 1$, то излучается фотон с круговой поляризацией. Когда $\Delta J = 0$, то поляризация излучения получается линейной.

Правила отбора при поглощении фотона получаются таким же образом, как и при излучении.

4.7.2. Правила отбора для моментов *L* и *S*

Поскольку энергия состояния в атоме зависит не только от полного момента, но и от орбитального и спинового моментов, то необходимо рассматривать правила отбора и для этих векторов.

Излучение электромагнитных волн обусловлено электромагнитными свойствами электрона, находящегося в атоме, т. е. его зарядом и магнитным моментом. Поэтому излучение возникает:

а) либо при изменении движения заряда (для электрона в атоме — изменение орбитального квантового числа);

б) либо при изменении спинового магнитного момента (поворот спина в пространстве);

в) либо в результате обоих процессов сразу.

В теории показывается, что взаимодействие фотона (электромагнитного поля) с собственным магнитным моментом электрона на несколько порядков слабее взаимодействия фотона с зарядом электрона. Это говорит о том, что релятивистские эффекты в наиболее распространенном оптическом диапазоне малы. Отсюда следует приближенное правило отбора:

$$\Delta\vec{S} = 0. \tag{4.7.6}$$

Тогда для не слишком коротких волн можно о спине «забыть», и правила отбора для орбитального момента будут идентичны правилам отбора для полного момента (4.7.3):

$$\Delta L = \pm 1, 0. \tag{4.7.7}$$

Аналогично переходам с изменением полного момента, если в одном из состояний $L = 0$, то оптический переход с $\Delta L = 0$ исключается.

4.7.3. Правила отбора для отдельного электрона

Рассмотрим атомы с одним электроном сверх заполненных оболочек или, что проще, атом водорода. Тогда мы имеем один электрон, и для переходов его с уровня на уровень также можно записать правила отбора. Правила отбора для отдельного электрона имеют вид:

$$\begin{aligned} \Delta l &= \pm 1 \qquad & \Delta m_l &= \pm 1; \\ \Delta j &= \pm 1, 0 \qquad & \Delta m_j &= \pm 1, 0. \end{aligned} \tag{4.7.8}$$

В атоме водорода энергия электрона зависит только от главного квантового числа n и слегка от полного момента j (из-за наличия спин-орбитального взаимодействия), но не зависит от орбитального квантового числа l. Это приводит к тонкой структуре спектральных линий.

Рассмотрим одну линию из серии Бальмера — переходы с уровня $n = 3$ на уровень с главным квантовым числом $n = 2$. Если бы не было спин-орбитального взаимодействия, то мы получили бы одну линию в соответствие с формулой Бальмера (см. п. 2.1, формула (2.1.16)). Из-за спин-орбитального взаимодействия уровни с разными полными моментами импульса имеют различную энергию, т. е. испытывают «тонкое» расщепление. Это относится как к уровню с $n = 3$, так и к уровню с $n = 2$. Воспользовавшись правилами отбора можно построить диаграмму всех возможных переходов между этими уровнями, которая изображена на рисунке 4.7.2.

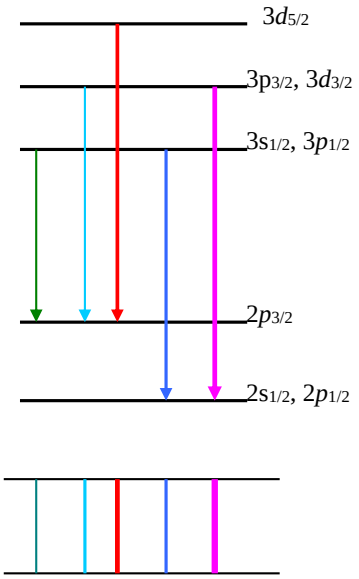


Рис. 4.7.2

Таким образом, можно убедиться, что главная линия серии Бальмера расщеплена на 5 компонент.

4.8. Электрон во внешнем магнитном поле. Эффект Зеемана

4.8.1. Электрон в магнитном поле

В классической электродинамике при рассмотрении движения частицы с зарядом e во внешнем электромагнитном поле, характеризуемом векторным потенциалом $\vec{A}(\vec{r},t)$, импульс частицы $\vec{p}$ заменяется выражением $\left(\vec{p}-e/c\cdot\vec{A}\right)$. Здесь величина $e\vec{A}/c$ играет роль импульса электромагнитного поля. *Классическая функция Гамильтона* тогда имеет вид

$$H=\frac{1}{2m_0}\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2+U\,. \qquad (4.8.1)$$

Здесь c — скорость света, m_0 — масса электрона (индекс 0 приведен, чтобы в дальнейшем не путать массу с проекцией орбитального квантового числа m), U — потенциальная энергия электрона во внешнем поле. Вспомним, что магнитное поле получаем из уравнения

$$\vec{B}=rot\vec{A}. \qquad (4.8.2)$$

В квантовой механике вместо векторов классических полей записываются соответствующие операторы:

$$\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right) \Rightarrow \left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\hat{\vec{A}}\right). \qquad (4.8.3)$$

Оператор полной энергии — *оператор Гамильтона* — можно записать в виде

$$\hat{H}=\frac{1}{2m_0}\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2+U=$$
$$=\frac{1}{2m_0}\left[\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}-\frac{e}{c}A_x\right)^2+\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}-\frac{e}{c}A_y\right)^2+\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}-\frac{e}{c}A_z\right)^2\right]+U. \qquad (4.8.4)$$

Преобразуем гамильтониан. Запишем действие оператора кинетической энергии на волновую функцию

$$\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\hat{\vec{A}}\right)^2\psi=-\hbar^2\nabla^2\psi+i\hbar\frac{e}{c}\left(div\vec{A}\right)\psi+2i\hbar\frac{e}{c}\vec{A}\cdot\nabla\psi+\frac{e^2}{c^2}A^2\psi\,. \qquad (4.8.5)$$

Будем использовать *калибровку Лоренца* (в случае стационарных полей):

$$div\vec{A}=0, \qquad (4.8.6)$$

а также тот факт, что последнее слагаемое в (4.8.5) $e^2A^2/c^2\cdot\psi$ вносит малый вклад в энергию. В самом деле, это слагаемое дает небольшой вклад по малому параметру $\alpha=e^2/\hbar c=1/137$.

Примечание 44. Если не выполняется условие (4.8.6), то можно сделать преобразование

$$\vec{A}'=\vec{A}+grad\,a\,,$$

где a — произвольный скаляр, который можно выбрать условием $div\left(grad\,a\right)=-div\vec{A}$.

Тогда $div\vec{A}'=div\vec{A}+div\left(grad\,a\right)=0$. При таком преобразовании и переходе к $\vec{A}'$ магнитное поле не меняется, поскольку $rot\,grad\,a\equiv 0$.

В результате получаем следующее уравнение Шредингера:

$$\nabla^2\psi-i\frac{2e}{\hbar c}\vec{A}\nabla\psi+\frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E-U\right)\psi=0\,. \qquad (4.8.7)$$

Итак, при движении частицы в магнитном поле в уравнении Шредингера появляется дополнительное слагаемое, связанное с векторным потенциалом этого поля.

4.8.2. Простой эффект Зеемана

Рассмотрим поведение атомарного электрона в постоянном однородном магнитном поле. Напомним следующие моменты, рассмотренные в курсе ранее. В кулоновском поле в нерелятивистском приближении энергетические уровни вырождены, т. е. энергия зависит только от главного кван-

тового числа n. В центрально-симметричном поле, но отличном от кулоновского (как электрон приближенно рассматривается в многоэлектронном атоме), снимается вырождение по орбитальному квантовому числу, и энергия электрона зависит от n и l. Наличие спин-орбитального взаимодействия приводит к тонкой структуре спектральных линий, так что энергия зависит от полного момента импульса J (или j). В отсутствие внешних полей все направления в пространстве эквивалентны, поэтому энергия уровней не зависит от магнитного квантового числа m. При этом кратность вырождения составляет $2J + 1$ значений.

Однако при включении магнитного поля получаем, что это вырождение снимается, поскольку состояния с различными проекциями магнитного момента имеют различные энергии во внешнем магнитном поле. Это расщепление приводит к усложнению структуры спектральных линий, что и составляет суть *эффекта Зеемана*.

На первом этапе рассмотрения забудем о спине электрона. На практике это означает, что рассматриваем состояние атома со спином равным нулю: $S = 0$. Выберем направление однородного магнитного поля по оси z:

$$B = B_z, \qquad B_x = B_y = 0. \tag{4.8.8}$$

Тогда векторный потенциал, описывающий такое постоянное магнитное поле в калибровке Лоренца, имеет следующие векторные компоненты (см. [3], § 3.7 в Главе 3):

$$A_x = -\frac{1}{2}By, \quad A_y = \frac{1}{2}Bx, \quad A_z = 0. \tag{4.8.9}$$

И магнитное поле записывается как

$$B_z = \left(rot\vec{A}\right)_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = B. \tag{4.8.10}$$

Вычислим следующее слагаемое, входящее в уравнение (4.8.7):

$$\vec{A}\nabla\psi = A_x\frac{\partial}{\partial x}\psi + A_y\frac{\partial}{\partial y}\psi + A_z\frac{\partial}{\partial z}\psi = \frac{1}{2}B\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = \frac{1}{2}B\frac{\partial\psi}{\partial\phi}, \tag{4.8.11}$$

где φ — азимутальный угол в сферической системе координат, определяющий поворот вокруг оси z. Магнитное поле направлено вдоль оси z, при этом, очевидно, что в задаче выполняется *аксиальная* (осевая) *симметрия*. Тогда полная волновая функция может быть представлена в виде произведения трех функций:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)\Theta_l(\theta)\Phi_m(\phi) = R_{nl}(r)\Theta_l(\theta)e^{im\phi}. \tag{4.8.12}$$

Здесь, как и ранее, ввели магнитное квантовое число m, характеризующее проекцию момента импульса на ось z. При этом имеем

$$\frac{\partial\psi}{\partial\phi} = imR_{nl}(r)\Theta_l(\theta)e^{im\phi} = im\psi. \tag{4.8.13}$$

Тогда подставим функцию (4.8.11) в уравнение Шредингера (4.8.7) и, учитывая (4.8.13), получаем

$$\nabla^2\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E_0 + m\frac{eB\hbar}{2m_0c} - U\right)\psi = 0\,. \qquad (4.8.14)$$

Вводя полную энергию электрона

$$\mathrm{E} = E_0 + m\frac{e\hbar}{2m_0c}B, \qquad (4.8.15)$$

где E_0 — энергия в отсутствие магнитного поля, получаем такое же уравнение Шредингера, как без магнитного поля. Изменилось лишь собственное значение энергии, которое теперь зависит от величины магнитного поля и квантового числа m:

$$\mathrm{E}_n = E_{0n} + m\frac{e\hbar}{2m_0c}B = E_{0n} + \hbar m\Omega_{\text{ларм}} = E_{0n} + m\mathcal{M}_{\text{в}}B, \qquad (4.8.16)$$

где $\mathcal{M}_{\text{в}} = \dfrac{e\hbar}{2m_0c}$ — магнетон Бора; $\Omega_{\text{ларм}} = \dfrac{eB}{2m_0c}$ — Ларморовская частота прецессии.

Итак, получаем, что уровни с $l \neq 0$ расщепляются на $(2l + 1)$ компоненту, которые соответствуют различным значениям проекции момента импульса m. На рис. 8.1 показано расщепление np ($l = 1$) и nd ($l = 2$) уровней на 3 и 5 компонент, соответственно.

Рассмотрим оптические переходы, разрешенные правилами отбора для орбитального квантового числа $\Delta l = \pm 1$. В отсутствие магнитного поля имеем переходы с уровня np на уровень ns (левая часть рис. 4.8.1) и с уровня nd на уровень np (правая часть рис. 4.8.1). Обозначим частоту излученного кванта при $B = 0$ через ω_0.

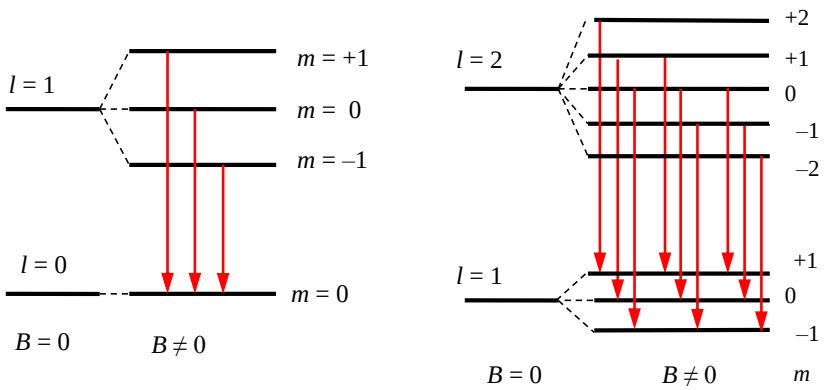


Рис. 4.8.1

Вспоминая правила отбора оптических переходов для магнитного квантового числа $\Delta m = 0, \pm 1$, получаем, что при включении внешнего маг-

нитного поля каждая спектральная линия с частотой ω_0 расщепляется на три линии излучения с энергиями:

$$\hbar\omega = \hbar\left(\omega_0 - \frac{eB}{2m_0c}\right),\ \hbar\omega_0,\ \hbar\left(\omega_0 + \frac{eB}{2m_0c}\right). \qquad (4.8.17)$$

Хотя число возможных переходов с уровня *nd* велико (т. е. больше трех), тем не менее получаем только 3 различные значения энергии излученного кванта.

Таким образом, при включении магнитного поля вместо одной спектральной линии получаем *простой триплет — Лоренцевский триплет*:

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0, \hbar\omega_0 \pm \hbar\Delta m\Omega_{\text{ларм}}. \qquad (4.8.18)$$

Напомним, что и в классической электродинамике мы также получали частоту Ларморовской прецессии электронных орбит в магнитном поле, что также приводит к трем частотам возможных переходов ([3], § 3.12 в Главе 3):

$$\omega = \omega_0,\ \omega_0 \pm \Omega_{\text{ларм}}.$$

Это так называемый *простой* или *нормальный эффект Зеемана*. В соответствии с классикой переходам $\Delta m = 0$ соответствуют колебания вдоль (π-компоненты), а переходам $\Delta m = \pm 1$ — поперек магнитного поля (σ-компоненты).

На эксперименте простой эффект Зеемана реализуется, когда спин распадающегося состояния равен нулю $S = 0$.

4.8.3. Сложный эффект Зеемана

Однако на эксперименте вместо триплета чаще всего появляется четное число расщепленных линий излучения атома в магнитном поле. Причиной появления подобной структуры является спин и спин-орбитальное взаимодействие в атоме, что приводит к необходимости учитывать полный момент импульса.

Рассмотрим атом в рамках нормальной связи, когда состояние характеризуется орбитальным $\vec{L}$, спиновым $\vec{S}$ и полным $\vec{J}$ моментами импульса:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}.$$

Механическим моментам импульса электрона $\vec{L}$ и $\vec{S}$ соответствуют орбитальный и спиновый магнитные моменты. Орбитальный магнитный момент и его проекция определяются следующими соотношениями (см. [3], глава 3, § 3.11):

$$\vec{\mathcal{M}}_L = -\frac{e}{2m_0c}\vec{L} = -g_L\vec{L};$$

$$\mathcal{M}_L = -\frac{e}{2m_0c}L_L = -\frac{e\hbar}{2m_0c}\sqrt{L(L+1)}; \qquad (4.8.19)$$

$$\mathcal{M}_{Lz} = -\frac{e}{2m_0c}L_z = -\frac{e}{2m_0c}m\hbar.$$

Спиновый магнитный момент и его проекция определяются соответствующим образом (см. соотношение (4.3.2) в п. 4.3):

$$\vec{\mathcal{M}}_S = -\frac{e}{m_0 c}\vec{S} = -g_S\vec{S};$$

$$\mathcal{M}_S = -\frac{e}{m_0 c}L_S = -\frac{e\hbar}{m_0 c}\sqrt{S(S+1)}; \qquad (4.8.20)$$

$$\mathcal{M}_{Sz} = -\frac{e}{m_0 c}L_{Sz} = -\frac{e}{m_0 c}m_S\hbar = -\frac{e\hbar}{m_0 c}\cdot\left(\pm\frac{1}{2}\right) = \mp\mathcal{M}_B.$$

Здесь мы ввели *гиромагнитные отношения* для орбитального и спинового моментов g_L и g_S ([3] Глава 3, § 3.11).

Если измерять механический момент электрона в единицах $\hbar$, а магнитный момент в единицах магнетона Бора $\mathcal{M}_B = -\frac{e\hbar}{2m_0 c}$, то в этих единицах:

$$g_L = 1, \quad g_S = 2.$$

То, что g_L и g_S разные по величине, обеспечивает сложную связь полного механического момента импульса $\vec{J}$ и полного магнитного момента $\vec{\mathcal{M}}_J$, т. е. определяют сложный характер эффекта Зеемана.

Вследствие этой сложной связи получаем, что вектор полного магнитного момента $\vec{\mathcal{M}}_J$ становится не параллельным полному механическому моменту $\vec{J}$ (рис. 4.8.2) и определяется суммой орбитального и спинового механическими моментами с соответствующими гиромагнитными отношениями:

$$\vec{\mathcal{M}}_J = -g_L\vec{L} - g_S\vec{S}. \qquad (4.8.21)$$

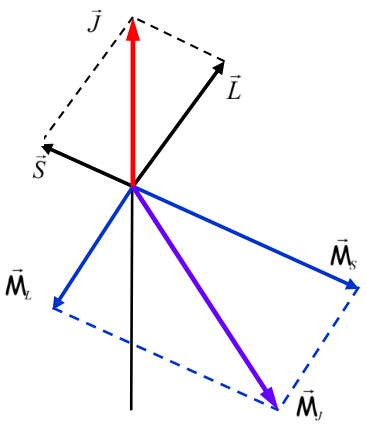


Рис. 4.8.2

Можно найти проекцию магнитного момента на направление полного механического момента $\vec{J}$, сосчитав скалярное произведение:

$$\left(\vec{\mathcal{M}}_J, \vec{J}\right) = \mathcal{M}_{J||} J\,;$$

$$\left(\vec{\mathcal{M}}_J, \vec{J}\right) = \left(-g_L \vec{L} - g_S \vec{S}\right)\left(\vec{L} + \vec{S}\right) = \\ = -g_L \vec{L}^2 - g_S \vec{S}^2 - \left(g_L + g_S\right)\vec{L}\vec{S}. \tag{4.8.22}$$

В последнее выражение можно подставить скалярное произведение $\vec{L}\vec{S}$ из квадрата полного механического момента:

$$\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L}\vec{S}\,;$$

$$\vec{L}\vec{S} = \tfrac{1}{2}\left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\right) = \tfrac{1}{2}\left[J\left(J+1\right) - L\left(L+1\right) - S\left(S+1\right)\right].$$

Тогда получаем

$$\left(\vec{\mathcal{M}}_J, \vec{J}\right) = \mathcal{M}_{J||} J = -\frac{g_L + g_S}{2}\vec{J}^2 - \frac{g_L - g_S}{2}\left(\vec{L}^2 - \vec{S}^2\right) = -g\vec{J}^2.$$

Здесь мы ввели *множитель Ланде g*:

$$g = \frac{g_L + g_S}{2} + \frac{g_S - g_L}{2}\frac{S\left(S+1\right) - L\left(L+1\right)}{J\left(J+1\right)}. \tag{4.8.23}$$

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S\left(S+1\right) - L\left(L+1\right)}{2J\left(J+1\right)}\,;$$

$$\left(\vec{\mathcal{M}}_J, \vec{J}\right) = \mathcal{M}_{J||} J = -g\vec{J}^2.$$

Из последнего равенства имеем связь между параллельной составляющей магнитного момента и полного механического момента:

$$\mathcal{M}_{J||} = -gJ\,. \tag{4.8.24}$$

Поскольку перпендикулярная составляющая полного магнитного момента не определена, она совершает прецессию вокруг направления $\vec{J}$. При достаточно медленных процессах от нее можно отвлечься и считать, что полный магнитный момент сводится только к его продольной проекции $\mathcal{M}_J \approx \mathcal{M}_{J||}$.

Тогда энергия уровня в магнитном поле расщепляется согласно следующему соотношению (в обычных единицах):

$$E = E_0 - \left(\vec{\mathcal{M}}_J, \vec{B}\right) = E_0 + g m_J \Omega \hbar = E_0 + g m_J \mathcal{M}_B B\,.$$

Это расщепление уровней приводит к *сложному эффекту Зеемана*.

В качестве примера рассмотрим переходы в щелочных металлах с дублетного уровня $n^2p_{1/2}$, $n^2p_{3/2}$ на синглетный уровень $n^2s_{1/2}$. Для определения спектральных линий рассчитаем множитель Ланде для этих уровней, пользуясь формулами (4.8.23).

Для $n^2p_{3/2}$:

$$L = l = 1, \quad S = s = ½, \quad J = j = 3/2,$$

и получаем $g = 4/3$.

Для $n^2p_{1/2}$:

$$L = 1, \quad S = ½, \quad J = 1/2,$$

получаем $g = 2/3$.

Для $n^2s_{1/2}$:

$$L = 0, \quad S = ½, \quad J = 1/2,$$

получаем $g = 2$.

Примерная структура зеемановского расщепления этих уровней в магнитном поле и схема оптических переходов показана на рисунке 4.8.3. Заметим, что при включении магнитного поля первоначальные линии (левая часть рис. 4.8.3) отсутствуют. Вместо линии $^2P_{1/2} \rightarrow {}^2S_{1/2}$ появляются 4 зеемановские компоненты с соответствующими смещениями, а вместо линии $^2P_{3/2} \rightarrow {}^2S_{1/2}$ появляются 6 компонент.

Сложный эффект Зеемана наблюдается в слабом магнитном поле, когда зеемановское расщепление уровней мало по сравнению с энергетическим расщеплением между компонентами тонкой структуры (т. е. разностью энергий $^2P_{3/2}$ и $^2P_{1/2}$ уровней). В сильном магнитном поле связь между моментами $\vec{M}_L$ и $\vec{M}_S$ разрывается и они ведут себя по отношению к магнитному полю независимо друг от друга. В результате в сильном магнитном поле, когда магнитное расщепление оказывается больше тонкого расщепления, проявляется нормальный зеемановский триплет (эффект Пашена — Бака).

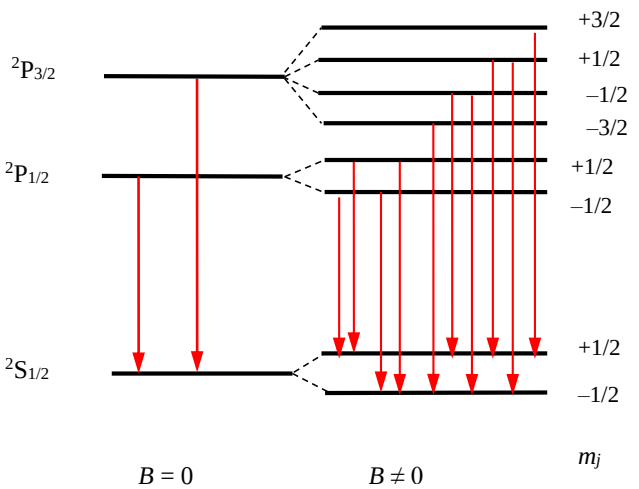


Рис. 4.8.3

Таким образом, при увеличении индукции магнитного поля сначала наблюдается тонкое расщепление линий, затем сложный эффект Зеемана

(множество компонент), и при сильном поле проявляется простой эффект в виде компонент триплета.

4.9. Атом в электрическом поле. Эффект Штарка

4.9.1. Расщепление уровней энергии в электрическом поле

При помещении атома во внешнее электрическое поле его уровни энергии сдвигаются и расщепляются. Этот эффект был установлен в 1913 г. немецким ученым Йоганессом Штарком. По сути эффект Штарка аналогичен эффекту Зеемана. Под действием электрического поля облако электронов, окружающих ядро излучающего атома, изменяет свое положение относительно ядра. В результате изменяются энергетические уровни электронов в атоме. Поскольку свет испускается при переходе электрона с одного энергетического уровня на другой, изменение энергетических уровней приводит к изменению спектра испускаемого света. Соответственно, спектр излучения атомов зависит от напряжённости электрического поля. Эта зависимость энергий переходов может быть линейной и квадратичной. Для атомов, имеющих ненулевой дипольный момент сдвиг линий спектра пропорционален напряженности электрического поля в первой степени, а для других атомов — во второй.

Эффект был открыт при изучении спектра водорода. Кроме водорода сдвиги и расщепление уровней в электрическом поле подробно изучен в спектрах гелия, щелочных металлов (Li, Na, K и т. д.) и ряда других элементов. Этот эффект имеет полностью квантовомеханическую природу и не может быть объяснён в рамках классической физики. Электронные термы расщепляются не только во внешнем поле, но и в поле, созданном соседними атомами и молекулами. Поэтому штарковское расщепление лежит в основе теории кристаллического поля, которая имеет большое значение в химии.

Итак, если атомы или молекулы вещества обладают ненулевым дипольным моментом $\vec{p}$ ($\vec{p} = q\vec{l}$), то при включении внешнего электрического поля $\vec{E}$ они приобретают дополнительную энергию $\Delta\varepsilon = \Delta W$:

$$\Delta W = -\left(\vec{p}, \vec{E}\right).$$

Это взаимодействие приводит к расщеплению уровня и сдвигу энергии с дипольным моментом $\vec{p}$, причем сдвиг энергии прямо пропорционален напряженности внешнего электрического поля.

Если в обычном состоянии (в отсутствии внешнего поля) дипольный момент у молекул отсутствует, то под действием электрического поля он появляется. Появление дипольного момента, пропорционального напряженности внешнего поля, приводит к квадратичной зависимости спектра расщепления от напряженности электрического поля $\left(\vec{E}\right)^2$. Следует отметить, что поле может быть либо внешним по отношению к источнику, либо внутренним, создаваемым соседними атомами или ионами.

Примечание 45. Иоганнес Штарк, немецкий физик, 1874–1957, лауреат Нобелевской премии по физике за 1919 г.

4.9.2. Линейный эффект Штарка

Линейным эффектом Штарка называется расщепление спектральных термов, величина которого пропорциональна первой степени напряжённости электрического поля. Это явление наблюдается только у водородоподобных атомов. Последний факт объясняется тем обстоятельством, что только у таких атомов наблюдается вырождение термов с разными значениями орбитального квантового числа.

Оператор Гамильтона водородоподобного атома во внешнем электрическом поле с напряженностью $\vec{E}$ в гауссовой системе единиц имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\hat{\Delta} - \frac{Ze^2}{r} - e\left(\vec{r},\vec{E}\right), \tag{4.9.1}$$

где m_0 — масса электрона, e — элементарный заряд, Z — зарядовое число ядра, приведённая постоянная Планка.

Задачу об отыскании собственных значений гамильтониана (4.9.1) невозможно решить аналитически. Задача некорректна в том смысле, что стационарных состояний не существует из-за отсутствия у гамильтониана (для случая однородного электрического поля) дискретного спектра. Квантовый туннельный эффект рано или поздно приведёт атом к ионизации. Линейные относительно электрического поля смещения электронных термов находятся с помощью теории возмущений. Теория возмущений справедлива, если напряжённость поля не превышает 10^4 В/см. Единственный точный результат, который вытекает из осевой симметрии задачи — это сохранение магнитного квантового числа m.

Другие результаты сводятся к следующим утверждениям:

- энергия основного состояния не меняется;
- первое возбуждённое состояние с главным квантовым числом $n = 2$ в случае, когда поля нет, четырёхкратно вырождено. В электрическом поле вырождение снимается частично. Два состояния остаются на месте с энергией $E_{n=2} = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{Z^2 e^2}{8a_0}$ (см. (4.1.23)), два других имеют энергию

$$E = -\frac{Z^2 e^2}{8a_0} \pm \frac{3e\left|\vec{E}\right|a_0}{Z}$$

где $a_0 = \hbar^2/m_0 e^2$ — Боровский радиус;

- высшие термы атома водорода расщепляются на $2n - 1$ компоненту, где n — главное квантовое число. Частичное снятие вырождения связано с тем фактом, что во внешнем электрическом поле сохраняется осевая симметрия.

Расщепление электронных термов проявляется в оптических спектрах. При этом излучение с $\Delta m = 0$, где m — магнитное квантовое число, при наблюдении в направлении, перпендикулярном к полю, поляризовано продольно полю (так называемые, π-компоненты), а линии с $\Delta m = 1$ — поперечно ему (σ-компоненты).

Этот факт объясняется тем обстоятельством, что для атома водорода существует вырождение электронных термов с разными значениями орбитального квантового числа, какое не присуще никакому другому элементу.

4.9.3. Еще об эффекте Штарка в атомах

Эффект Штарка объясняется в рамках квантовой механики. Квантовая многоэлектронная система (атом, молекула) в состоянии с определенной энергией ε приобретает во внешнем электрическом поле $\vec{E}$ дополнительную энергию $\Delta\varepsilon$, поскольку электрическое поле изменяет состояние входящих в систему заряженных частиц (электронов в атоме). В результате уровень энергии, которому соответствует одно возможное состояние атома (невырожденный уровень), в электрическом поле будет иметь смещенную энергию $\varepsilon + \Delta\varepsilon$.

Для вырожденного уровня энергии, которому соответствует несколько возможных состояний системы с одинаковой энергией ε, различные состояния могут приобрести разные дополнительные энергии:

$$\Delta\varepsilon_\alpha, \qquad \alpha = 1, 2, ..., g,$$

где g — степень вырождения уровня. В результате вырожденный уровень расщепляется на подуровни с энергией $\varepsilon + \Delta\varepsilon_\alpha$, число которых равно числу различных значений α. Так, уровень энергии атома с заданным значением момента импульса J ($J = 0, 1, 2, ...$ — квантовое число):

$$L = \hbar\sqrt{J\left(J+1\right)}$$

расщепляется в электрическом поле на подуровни, характеризуемые различными значениями другого квантового числа m_J, т. е. различной величиной проекции момента L на направление электрического поля. Однако значениям $-m_J$ и $+m_J$ соответствует одинаковая дополнительная энергия $\Delta\varepsilon$, так что все штарковские подуровни (с $m_J \neq 0$) оказываются дважды вырожденными (в отличие от расщепления в магнитном поле, где все подуровни не вырождены).

Поясним отличия линейного эффекта Штарка, когда $\Delta\varepsilon$ пропорционально $|\vec{E}|$ (рис. 4.9.1), от квадратичного эффекта Штарка, когда $\Delta\varepsilon$ пропорционально $\left(\vec{E}\right)^2$ (рис. 4.9.2). В первом случае картина расщепления уровней энергии и получающихся при переходах между ними спектральных линий симметрична, во втором — несимметрична.

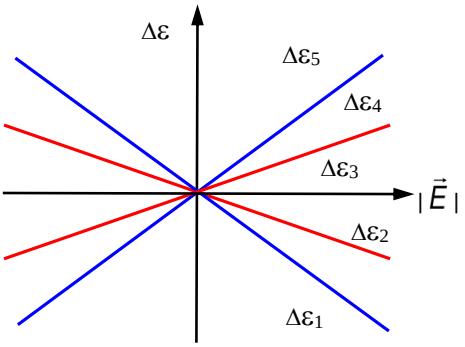


Рис. 4.9.1

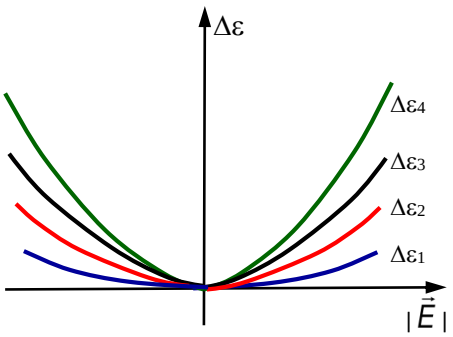


Рис. 4.9.2

Линейный эффект Штарка, рассмотренный в предыдущем параграфе 4.9.2, характерен для водорода, находящегося в не слишком сильных полях (в полях ~10^4 В/см он составляет тысячные доли эВ). В качестве примера на рисунке 4.9.1 показана зависимость величины расщепления $\Delta\varepsilon$ от напряженности электрического поля E при линейном эффекте Штарка для уровня атома водорода с главным квантовым числом $n = 3$ (расщепление происходит на $2n - 1 = 5$ подуровней).

Во втором случае у атома нет собственного электрического момента. В электрическом поле возбуждается лишь индуцированный дипольный момент

$$p = \alpha E,$$

где α — поляризуемость атома, которая может быть вычислена методами квантовой механики. При увеличении электрического поля от 0 до E дипольный момент атома также увеличивается от 0 до p. При этом над атомом совершается работа $\left(\vec{p}\vec{E}\right)/2 = \alpha E^2/2$, которая идет на приращение потенциальной энергии атома $\Delta\varepsilon$ в электрическом поле. Смещение и расщепление спектральных линий окажутся пропорциональными $\left(\vec{E}\right)^2$. Эффект Штарка в этом случае называется *квадратичным*.

На рисунке 4.9.2 показана примерная зависимость величины расщепления $\Delta\varepsilon$ от напряженности электрического поля E при *квадратичном эф-*

фекте Штарка, при котором подуровни оказываются отстоящими на разные расстояния по энергии.

У компонентов спектральные линии, обусловленных переходами между расщепленными в электрическом поле уровнями, наблюдается эффект поляризации. Если электрическое поле ориентировано перпендикулярно к наблюдателю, то часть компонентов поляризована продольно (π-компоненты), остальные — поперечно (σ-компоненты). При продольном направлении поля π-компоненты не появляются, а на месте σ-компонентов возникают неполяризованные компоненты. Интенсивности разных компонентов различны.

На рисунке 4.9.3 показано расщепление линии водорода H_α в электрическом поле. Различно поляризованные компоненты линии возникают при определенных комбинациях подуровней.

Кроме водорода линейный эффект Штарка наблюдается в водородоподобных атомах (He^+, Li^{2+}, B^{3+} и т. д.) и для сильно возбужденных уровней других атомов (в ряде случаев эффект Штарка приводит к появлению запрещенных спектральных линий).

В сильных полях, а также в слабых полях для ряда элементов имеет место главным образом квадратичный эффект Штарка с асимметричной картиной расщепления. Величина квадратичного эффекта невелика (в полях ~ 10^5 В/см расщепление достигает десятитысячных долей эВ).

Эффект Штарка наблюдается не только в постоянных, но и в переменных электрических полях. Влияние высокочастотного электрического поля на уровни энергии атомов (ионов) определяет, в частности, уширение спектральных линий космической плазмы. Движение частиц плазмы и связанное с этим изменение расстояний между ними приводят к быстрым изменениям электрического поля около каждой излучающей частицы. В результате энергетические уровни атомов (ионов), расщепляясь, смещаются на неодинаковую величину. Для излучения совокупности таких частиц характерно увеличение ширины спектральных линий (так называемое штарковское уширение линий).

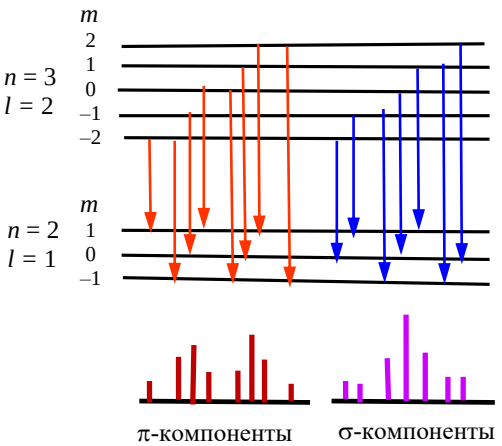


Рис. 4.9.3

Теория квантово-размерного эффекта Штарка используется при исследовании полупроводниковых нанокристаллов, находящихся в условиях, когда поляризационное взаимодействие электрона и дырки с поверхностью нанокристалла играет доминирующую роль. Установлено, что сдвиги уровней размерного квантования электрона и дырки в нанокристалле во внешнем однородном электрическом поле в области межзонного поглощения определяются квадратичным эффектом Штарка. Предложен новый электрооптический метод, дающий возможность определить величины критических радиусов нанокристаллов, в которых могут возникнуть объемные экситоны.

ГЛАВА 5.
ЭЛЕМЕНТЫ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

5.1. Атомное ядро

5.1.1. Состав ядра

Ядра всех атомов состоят из двух видов элементарных частиц — *протонов* и *нейтронов*. Обе эти частицы называют также *нуклонами*. Основные свойства этих частиц в той или иной степени рассматривались в этом курсе физики ранее при изучении релятивистской механики и основных законов электромагнетизма [1–4]. Ниже напомним основные характеристики протона и нейтрона.

А. *Протон p* — заряженная частица, положительный заряд протона по модулю равен заряду электрона (элементарный заряд):

$$e = 4{,}803 \cdot 10^{-10} \text{ ед. СГСЭ} = 1{,}602 \cdot 10^{-19} \text{ Кл.}$$

Масса протона m_p почти в 2000 раз больше массы электрона m_e:

$$m_p = 938{,}28 \text{ МэВ} = 1836\, m_e.$$

Протон — *фермион*, поскольку он имеет собственный механический момент импульса (спин), равный

$$L_S = \hbar\sqrt{s(s+1)}, \tag{5.1.1}$$

со спиновым квантовым числом $s = 1/2$. По модулю получаем для спина следующую величину:

$$L_S = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar, \tag{5.1.2}$$

где постоянная Планка $\hbar = 1{,}054 \cdot 10^{-34}$ Дж · с. Собственный магнитный момент протона (следуя релятивистской теории) должен равняться ядерному магнетону. В действительности он равен

$$\mu_p = +2{,}793\frac{e\hbar}{2m_p c} = 2{,}793\,\mu_я. \tag{5.1.3}$$

Здесь $\mu_я$ — *ядерный магнетон*, который в 1836 раз меньше магнетона Бора (магнетон Бора равен $M_в = e\hbar/2m_0c = 9{,}27 \cdot 10^{-21}$ эрг/Гс):

$$\mu_я = \frac{e\hbar}{2m_p c} = 5{,}05 \cdot 10^{-24} \text{ эрг}/\text{Гс}. \tag{5.1.4}$$

Б. *Нейтрон n* — нейтральная частица, открытая Д. Чадвиком в 1932 г. Масса нейтрона близка к массе протона:

$$m_n = 939{,}55 \text{ МэВ} = 1838{,}68 m_e.$$

Разница в их массах обусловлена наличием электрического заряда у протона и составляет величину:

$$m_n - m_p = 1{,}3\,\text{МэВ} = 2{,}5 m_e. \qquad (5.1.5)$$

Нейтрон — фермион, его спиновое квантовое число так же, как у протона, равно половине $s = 1/2$.

У нейтрона не должно быть магнитного момента (согласно релятивистской теории П. Дирака), поскольку нейтрон не несёт электрического заряда, но опыт показывает, что несмотря на электронейтральность нейтрон обладает *собственным магнитным моментом*. Собственный магнитный момент нейтрона направлен в противоположную сторону по отношению к направлению собственного механического момента и составляет примерно величину

$$\mu_n = -1{,}913\mu_я.$$

Аномальные магнитные моменты протона и нейтрона возникают из-за того, что протон и нейтрон в действительности состоят из электрически заряженных частиц — *кварков* (подробнее о кварках см. ниже § 5.4). Отношение магнитных моментов нейтрона и протона равно

$$\frac{\mu_n}{\mu_p} = -\frac{2}{3}, \qquad (5.1.6)$$

что объясняется *кварковой теорией* (п. 5.4).

В свободном состоянии нейтрон нестабилен и испытывает радиоактивный распад на протон, электрон и антинейтрино:

$$n \to p + e^- + \tilde{\nu}. \qquad (5.1.7)$$

Время жизни свободного нейтрона составляет τ = (880,1 ± 1,1) с, что соответствует периоду полураспада $T_{1/2}$ = (611 ± 0,8) с. В распаде принимает участие нейтральная частица нейтрино, которая имеют ненулевую массу, но эта масса крайне мала (о свойствах элементарных частиц также см. ниже).

Протоны и нейтроны удерживаются внутри ядра ядерными силами — *сильными взаимодействиями*. Основные характеристики ядра: *зарядовое число Z* и *массовое число A*. При этом заряд ядра обычно записывается в единицах заряда электрона — $+Ze$, где Z определяет атомный номер ядра. Соответственно, число нейтронов в ядре равно:

$$N = A - Z.$$

Для обозначения ядер и его состава используется следующая запись:

$${}^{A}_{Z}\mathrm{X} \quad \text{или} \quad {}_{Z}\mathrm{X}^{A},$$

где X — краткое обозначение элемента в Периодической системе элементов Менделеева.

Изотопы — ядра с одинаковым числом протонов, но различным числом нейтронов. Например, изотопы с зарядовым числом Z = 1: *водород* (N = = 0), *дейтерий* (N = 1), *тритий* (N = 2).

В природе встречаются элементы с зарядами ядра Z от 1 до 92, другие — трансурановые элементы с Z от 93 до 107 — получены искусственным путем.

Размеры (радиусы) ядер растут с ростом массового числа A:

$$r = 1{,}3 \cdot 10^{-13} \cdot A^{1/3} \text{ см} = 1{,}3 \cdot A^{1/3} \text{ ферми.}$$

Полный спин ядра слагается из спинов нуклонов и их орбитальных моментов импульса. Спин ядра может быть целым или полуцелым числом в зависимости от числа нуклонов, четного или нечетного. Со спином ядра связан магнитный момент ядра. Взаимодействие магнитного момента ядра и магнитных моментов электронов приводит к дополнительному расщеплению линий тонкой структуры атома — сверхтонкая структура спектральных линий. Соответствующее расщепление в длинах волн весьма мало — тысячные доли нанометра.

Примечание 46. Джеймс Чадвиг, английский физик, 1891–1974, за открытие нейтрона получил Нобелевскую премию по физике в 1935 г.

5.1.2. Масса и энергия связи ядра

Из-за сильного взаимодействия между нуклонами ядра для ядер в полной мере проявляются релятивистские эффекты. В частности, масса покоя ядра $M_я$ оказывается меньше суммы масс покоя составляющих это ядро нуклонов. Это явление, называемое *дефектом масс*, рассматривалось ранее в курсе Механики ([1], глава 2). Таким образом, дефект масс определяется следующей разностью:

$$\Delta = \left[Zm_p + (A - Z) m_n \right] - M_я. \tag{5.1.8}$$

При этом энергия связи ядра определяется соотношением [1]:

$$E_{св} = c^2 \Delta = c^2 \left\{ \left[Zm_p + (A - Z) m_n \right] - M_я \right\}. \tag{5.1.9}$$

Удельная энергия связи — это энергия связи, приходящаяся на один нуклон, она определяется отношением: $E_{св}/A$. Она составляет величину 7,1–8,7 МэВ на нуклон (за исключением нескольких легких ядер). Слабая зависимость удельной энергии связи от размеров ядра говорит о свойстве насыщения ядерных сил. На рисунке 5.1.1 показана примерная зависимость удельной энергии связи от массового числа ядра A.

Силы взаимодействия между нуклонами (протонами и нейтронами) — *ядерные силы* — являются самым сильным взаимодействием из фундаментальных. Основные свойства ядерных сил состоят в следующем.

1. Силы *короткодействующие*, радиус их действия ~ 10^{-13} см.

2. *Зарядо-независимые* силы, т. е. парные силы одинаковы для протонов и нейтронов отдельно и между собой.

3. Силы *спинозависящие*, т. е. зависят от ориентации спинов нуклонов.

4. *Не являются центральными*, т. е. их действие нельзя представить направленным вдоль прямой, соединяющей центры взаимодействующих

нуклонов. Это связано с тем, что ядерные силы зависят от ориентации спинов нуклонов.

5. Силы обладают свойством *насыщения*. Каждый нуклон в ядре взаимодействует с ограниченным числом ближайших нуклонов.

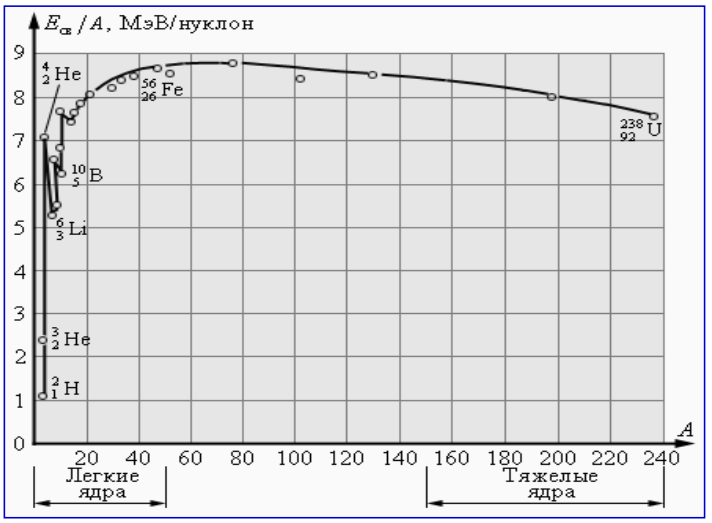


Рис. 5.1.1

Благодаря насыщению плотность ядерного вещества внутри ядра постоянна и быстро спадает на границе ядра. Именно поэтому линейные размеры ядра пропорциональны $A^{1/3}$, а удельная энергия связи слабо зависит от массового числа A (для ядер с $Z \geq 4$).

Взаимодействие между нуклонами осуществляется путем обмена π-мезонами, массы которых равны: $264m_e$ для нейтрального π-мезона, 273 m_e — для заряженных π-мезонов. π-мезоны были предсказаны Юкавой в 1935 г. и затем обнаружены экспериментально. Подобные процессы *обменного взаимодействия* могут происходить только благодаря соотношению неопределенностей, поскольку покоящийся нуклон не может превратиться в нуклон и π-мезон самопроизвольно, так как их суммарная масса больше нуклона. Квантовая механика этот запрет устраняет на короткое время, определяемое соотношением неопределенностей. Частицы, испускание и поглощение которых происходит с кажущимся нарушением закона сохранения энергии, называют *виртуальными*.

Свободные нуклоны испускают виртуальные мезоны, которые поглощаются обратно нуклоном. Нуклон всегда окружен «мезонной шубой». Расстояние, на которое мезоны удаляются от нуклона, в среднем порядка Комптоновской длины волны мезона l:

$$l \sim c\tau_\pi \approx \frac{\hbar}{m_\pi c}, \qquad (5.1.10)$$

где τ_π — время нарушения закона сохранения энергии, определяемое из соотношения неопределенностей. Когда сближаются 2 нуклона, то их мезон-

ные шубы соприкасаются и создаются условия для обмена виртуальными мезонами. Это и обуславливает ядерное взаимодействие. Учитывая массы испускаемых мезонов, получаем из (5.1.10) радиус действия ядерных сил ~ 10^{-13} см.

Если нуклону передать энергию больше энергии покоя π-мезона, то один или несколько виртуальных мезонов могут быть превращены в обычные π-мезоны, которые могут существовать независимо от нуклона. Спин π-мезонов равен 0. Частицы нестабильны и распадаются на μ-мезоны, нейтрино и кванты (подробнее о свойствах этих частиц см. п. 5.4).

5.1.3. Модели ядер

Ядерные модели — приближённые методы описания некоторых свойств ядер, основанные на отожествлении ядра с какой-либо другой физической системой, свойства которой либо хорошо изучены, либо поддаются более простому теоретическому анализу. Таковы, например, капельная модель ядра, оболочечная модель, модель нуклонных ассоциаций.

Степени свободы ядра можно разделить на одночастичные и коллективные. Соответственно ядерные модели делятся на:

а) одночастичные (модели независимых частиц), описывающие движение индивидуальных частиц, в некотором среднем поле, создаваемом другими нуклонами;

б) коллективные (модели с сильным взаимодействием), описывающие коррелированное движение большого числа частиц;

в) обобщенные, в которых рассматривается как одночастичные, так и коллективные степени свободы.

Для простоты ограничимся упоминанием двух моделей ядра, которые появились исторически первыми и смогли описать ряд свойств ядра.

1. *Капельная модель* (Я. И. Френкель, Н. Бор, М. Борн). Атомное ядро рассматривается как капля заряженной несжимаемой жидкости с очень высокой плотностью вещества ~ 10^{14} г/см^3. В капельной модели ядро рассматривается как непрерывная среда, состоящая из нейтронной и протонной жидкостей и описываемая уравнениями классической гидродинамики. Плотность ядерной жидкости почти постоянна внутри объёма капли и резко падает в поверхностном слое, толщина которого значительно меньше радиуса капли. Примерное распределение концентрации нуклонов в зависимости от расстояния до центра ядра показано на рисунке 5.1.2, где $r_я$ — радиус ядра.

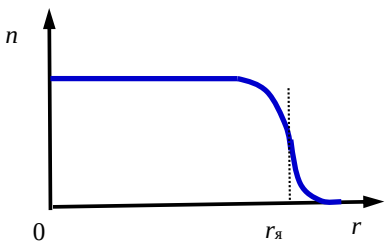


Рис. 5.1.2

2. *Оболочечная модель* (М. Гепперт-Майер и др.). Каждый нуклон движется в среднем поле, создаваемом всеми остальными нуклонами ядра. В этом среднем потенциальном поле имеются дискретные энергетические уровни. Эти уровни группируются в оболочки, в которых может находиться определенное количество нуклонов. Заполнение дискретных энергетических уровней происходит в соответствие с принципом Паули. Полностью заполненные оболочки образуют наиболее устойчивые структуры — *магические ядра*. Магические числа — характеризуют магические ядра с числом протонов или нейтронов равным

$$2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, \ldots$$

Дважды магические ядра — это те ядра, у которых количество как протонов, так и нейтронов равно магическим числам — являются наиболее устойчивыми. Оболочечная модель позволила объяснить спины и магнитные моменты ядер, различную устойчивость атомных ядер, а также периодичность изменений их свойств. Модель применима для описания легких и средних ядер, а также ядер, находящихся в основном состоянии.

Помимо выше перечисленных было развито много других ядерных моделей, которые с помощью сравнительно простых математических средств позволяли описывать определенную совокупность свойств ядра и определенный круг явлений. Коротко перечислим ряд наиболее популярных моделей: сверхтекучая модель ядра, кластерная модель, статистическая модель ядра, оптическая модель ядра. В каждой модели содержатся произвольные параметры, значения которых подбираются для лучшего согласия с экспериментальными данными.

Примечание 47. Хидэки Юкава — японский физик-теоретик, 1907–1881. Нобелевская премия 1949 г. за предсказание существования мезонов и теоретические исследования природы ядерных сил.

Яков Ильич Френкель — советский физик-теоретик, 1894–1952. Работал в физико-техническом институте и в Ленинградском политехническом институте.

Макс Борн — немецкий и британский физик-теоретик, 1882–1970. Нобелевская премия 1954 г. за фундаментальные исследования по квантовой механике, особенно за его статистическую интерпретацию волновой функции.

Мария Гепперт-Майер — немецкий физик, 1906–1972. Нобелевская премия 1963 г. за открытия касающиеся оболочечной структуры ядра (совместно с Х. Йенсеном).

5.2. Радиоактивность

5.2.1. Радиоактивность

Среди ядер различают стабильные и радиоактивные ядра. *Радиоактивность* — спонтанный распад ядер с испусканием одной или нескольких частиц. Ядро до распада называют *материнским*, а ядро, образующееся в результате распада, — *дочерним*.

Различают *естественную* (А. Беккерель, 1896) и *искусственную* радиоактивность.

Радиоактивный распад ядра возможен тогда, когда он энергетически выгоден, т. е. сопровождается выделением энергии. Условием этого является превышение массы M исходного ядра над суммой масс m_i продуктов распада, которому соответствует неравенство

$$M > \sum m_i. \tag{5.2.1}$$

Это условие является необходимым, но не всегда достаточным. Распад может быть запрещен другими законами сохранения — сохранения момента количества движения, электрического заряда, барионного заряда и т. д.

Радиоактивный распад характеризуется временем жизни радиоактивного изотопа, типом испускаемых частиц, их энергиями. Можно записать, что убыль числа ядер dN за счет распада пропорциональна числу имеющихся ядер и времени dt:

$$dN = -\lambda N dt.$$

Откуда получаем *закон радиоактивного распада*:

$$N = N_0 e^{-\lambda t}, \tag{5.2.2}$$

где λ — постоянная распада, N_0 — начальное количество распадающихся ядер. Интенсивность радиоактивного распада характеризуют *активностью* — числом ядер, распадающихся в единицу времени. Численно активность определяется как производная по времени от (5.2.2)

$$\frac{|dN|}{dt} = \left|\frac{d}{dt} N_0 e^{-\lambda T}\right| = \lambda N \tag{5.2.3}$$

и фактически равна произведению постоянной распада на количество еще нераспавшихся ядер. Активность распада в системе СИ измеряют в *Беккерелях* — 1 Бк = 1 распад/с, а также в несистемных единицах *Кюри* — 1 Ки = $= 3{,}7 \cdot 10^{10}$ Бк.

Период полураспада T — время, за которое распадается половина начального количества ядер:

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

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0{,}693}{\lambda}. \tag{5.2.4}$$

Среднее время жизни радиоактивного ядра τ:

$$\tau = \frac{1}{N_0}\int_0^\infty t dN(t) = -\frac{1}{N_0}\int_0^\infty t\lambda N(t) dt = \frac{1}{\lambda}. \tag{5.2.5}$$

Таким образом, получаем, что среднее время жизни определяется обратной величиной постоянной распада λ.

Основными видами радиоактивного распада являются следующие процессы:

- α-распад — испускание атомным ядром α-частицы;

• β-распад — испускание атомным ядром электрона и антинейтрино, позитрона и нейтрино, поглощение ядром атомного электрона с испусканием нейтрино;

• γ-распад — испускание атомным ядром γ-квантов;

• *спонтанное деление* — распад атомного ядра на два осколка сравнимой массы.

К более редким видам радиоактивного распада относятся процессы испускания ядром двух электронов, одного или двух протонов, а также кластеров — лёгких ядер от ^{12}C до ^{32}S. Во всех видах радиоактивности (кроме γ-распада) изменяется состав ядра — число протонов Z, массовое число A или и то и другое одновременно. На характеристики радиоактивного распада существенное влияние оказывает тип взаимодействия, вызывающего распад ядра.

5.2.2. α-распад

Альфа-распад — это самопроизвольное испускание ядром α-частицы — ядра атома гелия:

$$ {}_{Z}X^{A} \rightarrow {}_{Z-2}Y^{A-4} + {}_{2}He^{4}, \qquad (5.2.6) $$

где ${}_{Z}X^{A}$ — химический символ материнского ядра, а ${}_{Z-2}Y^{A-4}$ — химический символ дочернего ядра. Для того чтобы происходил α-распад, необходимо, чтобы масса исходного ядра $M(A,Z)$ была больше суммы масс конечного ядра $M(A\text{-}4, Z\text{-}2)$ и α-частицы m_α:

$$ M(A,Z) > M(A\text{-}4, Z\text{-}2) + m_\alpha. $$

Энергия α-распада

$$ Q_\alpha = [M(A,Z) - M(A\text{-}4, Z\text{-}2) - m_\alpha]c^2. \qquad (5.2.7) $$

Энергия, освобождающаяся при α-распаде, обычно заключена в интервале 2–9 МэВ, и основная её часть (~ 98%) уносится α-частицей в виде её кинетической энергии. Оставшиеся 2% — это кинетическая энергия конечного (дочернего) ядра. Периоды полураспада α-излучателей изменяются в очень широких пределах: от $5\cdot10^{-8}$ с до $8\cdot10^{18}$ лет. Столь широкий разброс периодов полураспада, а также огромные значения этих периодов для многих α-радиоактивных ядер объясняется тем, что α-частица не может «мгновенно» покинуть ядро, несмотря на то, что это энергетически выгодно. Для того чтобы покинуть ядро, α-частица должна преодолеть потенциальный барьер (рис. 5.2.1).

Распад с испусканием α-частицы происходит путем *туннельного эффекта*. Потенциальный барьер на границе ядра образуется за счет потенциальной энергии электростатического отталкивания α-частицы и конечного ядра и потенциальной энергии сил притяжения между нуклонами.

Однако дочернее ядро может возникать не только в основном, но и в возбужденных состояниях. Такие возбужденные состояния ядра распадаются с испусканием либо γ- квантов, либо с испусканием других частиц,

либо с возбуждением внутренних электронов атома, в состав которого входило распадающееся ядро. Последний процесс имеет название *внутренней конверсии*, и он обычно сопровождается испусканием характеристических рентгеновских лучей.

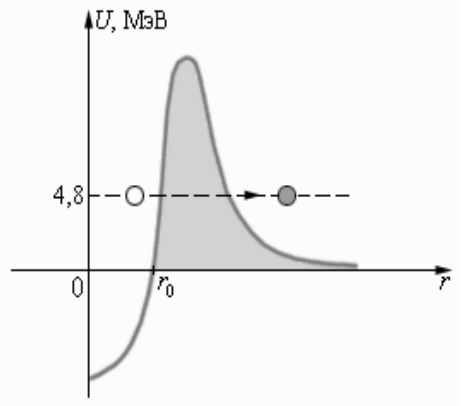


Рис. 5.2.1

5.2.3. β-распад

Самопроизвольный процесс распада ядра, при котором изменяется зарядовое состояние ядра на ±1, называется *бета-распад*.

Электронный β-распад — спонтанное превращение свободного нейтрона в протон p, электрон e^- и антинейтрино $\tilde{\nu}$, вызываемое *слабым взаимодействием*:

$$n \to p + e^- + \tilde{\nu}. \qquad (5.2.8)$$

Спектр кинетической энергии излучаемого электрона лежит в диапазоне от 0 до 782,3 КэВ.

Аналогичным образом, нейтрон, находящийся в ядре с зарядовым числом Z и массовым числом A, распадается по схеме

$${}_Z\mathrm{X}^A \to {}_{Z+1}\mathrm{Y}^A + e^- + \tilde{\nu}_e. \qquad (5.2.9)$$

Бета-распад может сопровождаться также испусканием γ-квантов, поскольку дочернее ядро возникает не только в основном, но и в возбужденных состояниях. В отличие от α-частиц β-электроны обладают самой разнообразной кинетической энергией от 0 до $E_{\max}$.

Позитронный распад — второй тип бета-распада, также иногда называемый «бета-плюс-распад» (β^+-распад), «эмиссия позитронов» или «позитронная эмиссия». Это распад, при котором один из протонов ядра превращается посредством слабого взаимодействия в нейтрон, позитрон и нейтрино:

$$p \to n + e^+ + \nu. \qquad (5.2.10)$$

Для свободного протона такой процесс невозможен по энергетическим соображениям, так как масса протона меньше массы нейтрона. Однако в ядре протон может получить требуемую энергию от других нуклонов, входящих в состав ядра. Многие изотопы испускают позитроны, в том числе углерод — ${}_{6}C^{11}$, азот — ${}_{7}N^{13}$, кислород — ${}_{8}O^{15}$, фтор — ${}_{9}F^{18}$, иод — ${}_{53}I^{121}$. Например, позитронный распад изотопов углерода и азота:

$$ {}_{6}C^{11} \to {}_{5}B^{11} + e^{+} + \nu_{e}; $$

$$ {}_{7}N^{13} \to {}_{6}C^{13} + e^{+} + \nu_{e}. $$

K-захват — это еще один вид β-распада — захват ядром электрона со внутренней оболочки атома. Обычно захват электрона происходит с K-оболочки, реже с L и M оболочек, своего атома, при этом протон ядра превращается в нейтрон и часть энергии уносит нейтрино:

$$ e^{-} + p \to n + \nu. \qquad (5.2.11) $$

Схема процесса выглядит следующим образом:

$$ {}_{Z}X^{A} + e^{-} \to {}_{Z-1}Y^{A} + \nu_{e}. \qquad (5.2.12) $$

Пример реакции K-захвата:

$$ {}^{26}_{13}Al + e^{-} \to {}^{26}_{12}Mg + \nu_{e}. $$

Главной особенностью β-распада является то, что он обусловлен слабым взаимодействием. Бета-распад — это процесс внутринуклонный: в ядре распадается одиночный нуклон.

5.2.4. γ-излучение

Процесс испускания возбужденным ядром γ-квантов называется *γ-распад* или *γ-излучение*.

Энергии испускаемых квантов простираются от 10 КэВ до 5 МэВ, а при ядерных реакциях рождаются γ-кванты до 20 МэВ. Длина волны этого «жесткого» коротковолнового излучения составляет $10^{-8}...10^{-11}$ см.

Периоды полураспада для γ-переходов изменяются от 10^{-19} с до 10^{10} лет. Так как в γ-распаде не происходит рождения протона или нейтрона, то, в отличие от α- и β-распадов, каждый из которых является ядерным превращением, при γ-распаде ядерного превращения не происходит. Верхний предел энергии испускаемых квантов, как и для альфа- или бета-распадов, связан с энергией связи нуклона в ядре.

Свободный нуклон испускать γ-квант не может из-за нарушения законов сохранения энергии и импульса. Однако такой процесс возможен для нуклона, находящегося внутри ядра, поскольку испущенный γ-квант может обмениваться импульсом не только с порождаемым его нуклоном, но и с остальными нуклонами ядра. Таким образом, в отличие от β-распада γ-распад — процесс внутриядерный, а не внутринуклонный. В качестве примера

можно рассмотреть распад возбужденного состояния ядра бария с испусканием высокоэнергетического γ-кванта:

$$_{56}\mathrm{Ba}^{137*} \rightarrow {}_{56}\mathrm{Ba}^{137} + \hbar\omega_{\gamma}\ (0{,}662\ \text{МэВ}).$$

Полный момент количества движения фотона J называется мультипольностью фотона. Значение спина фотона $J = 1$, а поэтому, полный момент J, уносимый фотоном, может принимать целочисленные значения 1, 2, ... (кроме нуля). Различают электрические (EJ) и магнитные (MJ) переходы. $E1$ — электрический дипольный переход, $M1$ — магнитный дипольный переход, $E2$ — электрический квадрупольный переход и т. д. Для электрических переходов четность определяется соотношением $P = (-1)^{J}$, для магнитных переходов — соотношением $P = (-1)^{J+1}$.

5.2.5. Спонтанное деление ядер

Четвертым видом радиоактивности, открытым в 1940 г. Г. Н. Флеровым и К. А. Петржаком под руководством И. В. Курчатова, оказалось самопроизвольное (спонтанное) деление ядер, в процессе которого некоторые достаточно тяжелые ядра распадаются на два осколка с примерно равными массами. *Спонтанное* (самопроизвольное) деление — радиоактивный распад, при котором ядро расщепляется без всякого внешнего вмешательства, т. е. без привнесения энергии. Спонтанное деление впервые было обнаружено для природного урана. Ядра урана ^{238}U могут делиться различным образом, давая два осколка (например, $_{56}$Ba-$_{36}$Kr, $_{54}$Xe-$_{38}$Sr и т. п.).

О сложности проведения эксперимента свидетельствуют следующие цифры. Парциальный период полураспада по отношению спонтанному делению изотопа ^{238}U составляет 10^{16}–10^{17} лет, в то время как период распада изотопа ^{238}U составляет $4.5 \cdot 10^{9}$ лет. Основным каналом распада изотопа ^{238}U является α-распад. Для того, чтобы наблюдать спонтанное деление изотопа ^{238}U, нужно было регистрировать один акт деления на фоне 10^{7}–10^{8} актов α-распада.

Вероятность спонтанного деления в основном определяется проницаемостью барьера деления. Вероятность спонтанного деления увеличивается с увеличением заряда ядра, так как при этом увеличивается параметр деления Z^2/A. В изотопах $Z < 92$–95 деление происходит преимущественно с образованием двух осколков деления с отношением масс тяжёлого и лёгкого осколков 3:2. В изотопах $Z > 100$ преобладает симметричное деление с образованием одинаковых по массе осколков. С увеличением заряда ядра доля спонтанного деления по сравнению с α-распадом увеличивается.

Для всех существующих в природе ядер вероятность и соответственно скорость спонтанного деления очень малы. Лишь для самых тяжёлых из них $Z \geq 90$ скорости увеличиваются настолько, что могут быть определены экспериментально.

Процесс спонтанного деления может протекать только в том случае, когда потенциальная энергия начального состояния делящегося ядра превышает сумму масс осколков деления. Поскольку удельная энергия связи тя-

жёлых ядер уменьшается с увеличением их массы, это условие выполняется почти для всех ядер с массовым числом $A > 90$. Однако, даже самые тяжёлые ядра самопроизвольно делятся с очень малой вероятностью. Это означает, что существует энергетический барьер, препятствующий делению.

В процессе деления ядро изменяет форму — последовательно проходит через следующие стадии (рис. 5.2.2): шар, эллипсоид, гантель, два грушевидных осколка, два сферических осколка. Начальная стадия деления — медленное изменение формы ядра, при котором появляется шейка, соединяющая два ещё не полностью сформированных осколка. Время прохождения этой стадии (10^{-14}...10^{-18} с) зависит от того, насколько сильно возбуждено делящееся ядро. Постепенно шейка утончается, и в некоторый момент происходит её разрыв. Образующиеся осколки с большой энергией разлетаются в противоположные стороны. После того как деление произошло, и осколки находятся друг от друга на расстоянии, много большем их радиуса, потенциальную энергию осколков, определяемую кулоновским взаимодействием между ними, можно считать равной нулю.

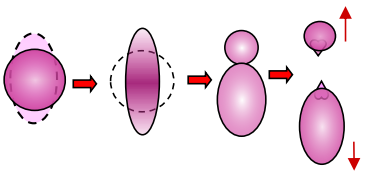


Рис. 5.2.2

В некоторых случаях переход из возбуждённого в основное состояние оказывается запрещён каким-либо законом сохранения, и тогда ядро может оставаться в возбуждённом состоянии гораздо дольше, чем этого можно ожидать в «нормальном» случае. Такое метастабильное (т. е. «почти-стабильное») состояние ядра называют изомером.

Изомеры — долгоживущие возбужденные состояния атомных ядер. Сочетание высокой мультипольности и малой энергии переходов обуславливает существование состояний с большими периодами полураспада, которые могут составлять годы. У изотопа может быть несколько изомерных уровней.

Характерное время жизни ядра в «нормальном» возбуждённом состоянии составляет порядка 10^{-12} с. Поэтому к изомерным состояниям относят состояния, в которых ядро находится 10^{-9} с или дольше. Среди изомеров есть рекордсмены с большими временами жизни: изомер тантала $_{83}Ta^{180}$ со временем жизни, оцениваемым в 1015 лет (содержится в природных образцах в отношении около 1:8300, релаксирует с испусканием фотона с энергией 75 кэВ).

Примечание 48. Георгий Николаевич Флеров — советский физик-ядерщик, 1913–1990.

Константин Антонович Петржак — советский физик, 1907–1998.

Игорь Васильевич Курчатов, советский физик, 1903–1960.

5.3. Ядерные реакции

5.3.1. Механизмы ядерных реакций

Процессы сильного взаимодействия атомного ядра с другими ядрами или с элементарными частицами, которые сопровождаются преобразованием ядер, составляют суть с *ядерных реакций*. Ядерное взаимодействие возникает при сближении ядер до расстояний порядка 10^{-13} см. Вероятность взаимодействия между ядерными частицами принято характеризовать с помощью *эффективного сечения* σ (см. также [1] § 1.15). Эффективное сечение ядерных процессов принято выражать в единицах, получивших название барн:

$$1 \text{ барн} = 10^{-24} \text{ см}^2. \qquad (5.3.1)$$

Ядерные реакции являются эффективным средством изучения структуры атомных ядер. Если длина волны налетающей частицы больше размеров ядра, то в таких экспериментах получается информация о ядре в целом. Если меньше размеров ядра, то из сечений реакций извлекается информация о распределении плотности ядерной материи, строении поверхности ядра, корреляции между нуклонами в ядре, распределении нуклонов по ядерным оболочкам.

Наиболее распространенным видом ядерной реакции является взаимодействие легкой частицы a с ядром X с образованием ядра Y и частицы b:

$$\mathrm{X} + a \to \mathrm{Y} + b. \qquad (5.3.2)$$

Или эту же реакцию сокращенно записываем в виде

$$\mathrm{X}(a,b)Y.$$

Впервые ядерная реакция была осуществлена Резерфордом в 1919 г. При облучении азота α-частицами, испускаемыми радиоактивным источником, некоторые атомы азота превращались в ядра кислорода, испуская при этом протон:

$${}_7\mathrm{N}^{14}(\alpha, p)\,{}_8\mathrm{O}^{17}.$$

В дальнейшем по мере развития техники ускорения заряженных частиц (ускорителей) множилось число ядерных превращений, осуществляемых искусственным путем.

При ядерных реакциях выполняются все законы сохранения классической физики. Эти законы накладывают ограничения на возможность осуществления ядерной реакции. Однако даже энергетически выгодный процесс оказывается невозможным, если сопровождается нарушением какого-либо закона сохранения. Кроме того, существуют законы сохранения, специфичные для микромира; некоторые из них, насколько это известно, выполняются всегда, например закон сохранения барионного числа, лептонного числа (см. п. 5.4). Другие законы сохранения, связанные с такими ха-

рактеристиками, как изоспин, чётность, странность, приводят обычно к подавлению определённых реакции, поскольку не выполняются для некоторых из фундаментальных взаимодействий. Следствиями законов сохранения являются так называемые правила отбора, указывающие на возможность или запрет тех или иных реакций.

Ядерные реакции могут сопровождаться как выделением, так и поглощением энергии. Количество выделяющейся (поглощающейся) энергии называется энергией реакции. Она обычно определяется разностью масс исходных и конечных ядер.

Классификацию ядерных реакций обычно проводят по типу ядер-мишеней и энергии налетающей частицы. По механизму взаимодействия ядерные реакции делятся на два вида:

- реакции с образованием *составного ядра*, это двухстадийный процесс, протекающий при не очень большой кинетической энергии сталкивающихся частиц (примерно до 10 МэВ);
- прямые ядерные реакции, проходящие за *ядерное время*, необходимое для того, чтобы частица пересекла ядро. Главным образом такой механизм проявляется при больших энергиях бомбардирующих частиц.

Теория механизма реакции с образованием составного ядра (компаунд-ядро) была разработана Н. Бором в 1936 г. совместно с теорией капельной модели ядра и лежит в основе современных представлений о наибольшей части ядерных реакций. Согласно этой теории, ядерная реакция идёт в два этапа. В начале исходные частицы образуют промежуточное (составное) ядро C^* за *ядерное время*, то есть время, необходимое для того, чтобы частица пересекла ядро, примерно равное $10^{-23}...10^{-21}$ с.

$$\mathrm{X} + a \to C^* \to \mathrm{Y} + b. \qquad (5.3.3)$$

При этом составное ядро всегда образуется в возбуждённом состоянии, так как оно обладает избыточной энергией, привносимой частицей в ядро в виде энергии связи нуклона в составном ядре, а также части его кинетической энергии. Последняя равна сумме кинетической энергии ядра-мишени с массовым числом и частицы в системе центра инерции.

Составное ядро C^* существует достаточно долго по сравнению с временем пролета налетающей частицы *a* через ядро. Так при энергии одного нуклона в 1 МэВ время пролета его через ядро (~ 10^{-12} см) составляет время ~ 10^{-21} с. Время же жизни составного ядра в возбужденном состоянии ~ 10^{-14}... 10^{-12} с, т. е. в ядерном масштабе составное ядро живет очень долго и практически «забывает» об истории его образования. Поэтому вторая стадия реакции — распад составного ядра — происходит независимо от способа образования составного ядра.

Течение ядерных реакций возможно и через механизм *прямого ядерного взаимодействия*, в основном, такой механизм проявляется при очень больших энергиях бомбардирующих частиц, когда нуклоны ядра можно рассматривать как свободные. От механизма составного ядра прямые реакции отличаются, прежде всего, распределением векторов импульсов частиц-

продуктов относительно импульса бомбардирующих частиц. В отличие от сферической симметрии механизма составного ядра для прямого взаимодействия характерно преимущественное направление полёта продуктов реакции вперёд относительно направления движения налетающих частиц. Распределения по энергиям частиц-продуктов в этих случаях также различны. Для прямого взаимодействия характерен избыток частиц с высокой энергией. При столкновениях с ядрами сложных частиц возможны процессы передачи нуклонов от ядра к ядру или обмен нуклонами. Такие реакции происходят без образования составного ядра и им присущи все особенности прямого взаимодействия.

Типичная реакция прямого взаимодействия — это реакция срыва, когда при нецентральных соударениях с ядром налетающей частицей является дейтрон. При таких соударениях один из нуклонов дейтрона попадает в зону действия ядерных сил и захватывается ядром, в то время как другой нуклон оказывается вне зоны действия ядерных сил и пролетит мимо ядра. В краткой записи такие реакции имеют вид

$$ {}_{Z}\mathrm{X}(d,n)_{Z+1}\mathrm{Y} \quad \text{или} \quad {}_{Z}\mathrm{X}(d,p)_{Z}\mathrm{Y}. \qquad (5.3.4) $$

Обратной по отношению к реакции срыва является реакция подхвата, когда налетевший нуклон «откалывает» от ядра другой нуклон, превращаясь в дейтрон: (n, d) или (p, d).

Большое значение имеют реакции, вызываемые нейтронами, поскольку они не испытывают кулоновского отталкивания от ядра. Вследствие этого нейтроны проникают внутрь ядра даже при малой энергии налетающих частиц, что приводит к увеличению эффективного сечения реакции. В качестве примера приведем ядерную реакцию, которая протекает в земной атмосфере под воздействием нейтронов, образуемых космическими лучами:

$$ {}_{7}\mathrm{N}^{14}(n,p)_{6}\mathrm{C}^{14}. $$

Возникающий при этом углерод называется радиоуглеродом, так как он радиоактивен и его период полураспада составляет 5730 лет. Радиоуглерод усваивается при фотосинтезе растениями и участвует в круговороте веществ в природе. Пока организм растения или животного живет концентрация радиоактивного углерода пополняется за счет обмена веществ при его питании. После смерти организма процесс усвоения углерода прекращается. Измерение концентрации радиоуглерода ^{14}C в останках организмов — радиоуглеродный анализ — используется для определения их возраста.

5.3.2. Деление ядер

Ядерная реакция деления — процесс расщепления атомного ядра на два (реже три) ядра с близкими массами, называемых осколками деления. В результате деления могут возникать и другие продукты реакции: лёгкие ядра (в основном альфа-частицы), нейтроны и гамма-кванты.

Деление бывает спонтанным (самопроизвольным) и вынужденным (в результате взаимодействия с другими частицами, прежде всего с нейтро-

нами). Однако *спонтанные* процессы, которые кратко были рассмотрены в предыдущем параграфе, обычно не относятся к ядерным реакциям, поэтому ядерной реакцией является лишь *вынужденное* деление (при захвате нейтронов, фотоделение и т. п.). Деление тяжёлых ядер — экзоэнергетический процесс, в результате которого высвобождается большое количество энергии в виде кинетической энергии продуктов реакции, а также излучения.

В 1934 г. Э. Ферми решил получить трансурановые элементы, облучая ^{238}U нейтронами. Идея Э. Ферми заключалась в том, что в результате β^--распада изотопа ^{239}U образуется химический элемент с порядковым номером $Z = 93$. Однако идентифицировать образование 93-го элемента не удавалось. Вместо этого в результате радиохимического анализа радиоактивных элементов, выполненного О. Ганом и Ф. Штрассманом, было показано, что одним из продуктов облучения урана нейтронами является барий ($Z = 56$) — химический элемент среднего атомного веса, в то время как согласно предположению теории Ферми, должны были получаться трансурановые элементы. Л. Мейтнер и О. Фриш высказали предположение, что в результате захвата нейтрона ядром урана происходит развал составного ядра на две части (рис. 5.3.1).

$$_{92}\mathrm{U} + n \rightarrow {}_{56}\mathrm{Ba} + {}_{36}\mathrm{Kr} + xn.$$

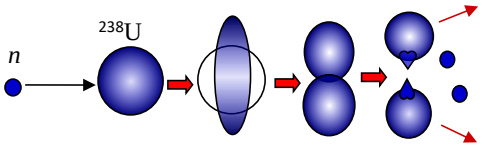


Рис. 5.3.1

Процесс деления урана сопровождается появлением вторичных нейтронов ($x > 1$), способных вызвать деление других ядер урана, что открывает потенциальную возможность возникновения цепной реакции деления — один нейтрон может дать начало разветвленной цепи делений ядер урана. При этом число разделившихся ядер должно возрастать экспоненциально. Н. Бор и Дж. Уиллер рассчитали критическую энергию необходимую, чтобы ядро ^{236}U, образовавшееся в результате захвата нейтрона изотопом ^{235}U, разделилось. Эта величина равна 6,2 МэВ, что меньше энергии возбуждения изотопа ^{236}U, образующегося при захвате теплового нейтрона ^{235}U. Поэтому при захвате тепловых нейтронов возможна цепная реакция деления ^{235}U.

Для наиболее распространенного изотопа ^{238}U критическая энергия равна 5,9 МэВ, в то время как при захвате теплового нейтрона энергия возбуждения образовавшегося ядра ^{239}U составляет только 5,2 МэВ. Поэтому цепная реакция деления наиболее распространенного в природе изотопа ^{238}U под действием тепловых нейтронов оказывается невозможной. В одном акте деления высвобождается энергия ≈ 200 МэВ (для сравнения в химических реакциях горения в одном акте реакции выделяется энергия ≈ 10 эВ).

Осколки являются ядрами радиоактивных изотопов элементов середины таблицы Менделеева. Обычно один из осколков больше другого. Например, при бомбардировке урана $_{92}U^{235}$ могут встречаться такие комбинации осколков, т. е. реакция идёт по следующим каналам:

• барий и криптон:

$$_{92}U^{235} + n \rightarrow {}_{56}Ba^{144} + {}_{36}Kr^{89} + 3n.$$

• цезий и рубидий:

$$_{92}U^{235} + n \rightarrow {}_{55}Cs^{140} + {}_{37}Rb^{94} + 2n;$$

• ксенон и стронций:

$$_{92}U^{235} + n \rightarrow {}_{54}Xe^{140} + {}_{38}Sr^{94} + 2n.$$

В каждой из этих реакций выделяется очень большая энергия — порядка 200 МэВ. Откуда берётся такое количество энергии?

Начнём с того, что из-за большого числа протонов (92), упакованных в ядре урана, кулоновские силы отталкивания, распирающие ядро, очень велики. Ядерные силы ещё в состоянии удерживать ядро от распада, но сильный кулоновский фактор готов проявиться в любой момент. Такой момент настаёт, когда в ядре застревает нейтрон — застрявший нейтрон вызывает деформацию ядра. При этом начинаются колебания формы ядра, которые могут стать столь интенсивными, что ядро вытягивается в «гантельку». Короткодействующие ядерные силы, скрепляющие небольшое число соседних нуклонов перешейка, не справляются с силами электрического отталкивания половинок гантели, и в результате ядро разрывается. Осколки разлетаются с огромной скоростью — около 1/30 скорости света. Они и уносят большую часть высвобождающейся энергии (около 170 МэВ из 200).

Масса делящегося ядра больше суммы масс образующихся осколков. Разница в массах соответствует энергии, выделяемой при делении атомного ядра. Значительная часть этой энергии выделяется в виде кинетической энергии осколков, приблизительно равной энергии их электростатического отталкивания в момент деления. Суммарная кинетическая энергия осколков несколько увеличивается по мере возрастания массового числа A делящегося ядра и составляет для урана и трансурановых элементов около 200 МэВ. Осколки быстро тормозятся в среде, вызывая ионизацию, нагревание и нарушая её структуру. Утилизация кинетической энергии осколков деления за счёт нагревания ими среды — основа использования ядерной энергии.

Появление двух-трёх нейтронов в процессе деления ядра урана — важнейший факт, который лежит в основе и осуществлении *цепной ядерной реакции*. Эти два-три нейтрона «первого поколения» могут попасть в новые ядра и вызвать их деление; в результате деления новых ядер возникнут нейтроны «второго поколения», которые попадут в следующие ядра и вызовут их деление; возникнут нейтроны «третьего поколения», которые приведут к делению очередных ядер и т. д. Так идёт цепная ядерная реакция, в ходе которой высвобождается колоссальное количество энергии.

Для протекания цепной ядерной реакции необходимо, чтобы число N_i высвободившихся нейтронов в очередном поколении было не меньше числа N_{i-1} нейтронов в предыдущем поколении. Величина

$$k = N_i / N_{i-1} \tag{5.3.5}$$

называется коэффициентом размножения нейтронов. Таким образом, цепная реакция идёт при условии $k > 1$. Если $k < 1$, то цепная реакция не возникает.

В случае $k > 1$ происходит лавинообразное нарастание числа освобождающихся нейтронов, и цепная реакция становится неуправляемой. Так происходит взрыв атомной бомбы. В ядерных реакторах происходит управляемая цепная реакция деления с коэффициентом размножения $k = 1$. Стационарное течение управляемой цепной реакции обеспечивается введением в активную зону реактора (то есть в ту область, где протекает реакция) специальных управляющих стержней, поглощающих нейтроны. При полностью введённых стержнях поглощение ими нейтронов настолько велико, что $k < 1$ и реакция не идёт. В процессе запуска реактора стержни постепенно выводят из активной зоны, пока выделяемая мощность не достигнет требуемого уровня. Этот уровень тщательно контролируется, и при его превышении включаются устройства, вводящие управляющие стержни назад в активную зону.

Возможности создания условий для цепной реакции деления открыли перспективы использования энергии цепной реакции для создания атомных реакторов и атомного оружия. Первый ядерный реактор был построен Э. Ферми в США в 1942 г. В СССР первый ядерный реактор был запущен под руководством И. Курчатова в 1946 г. В 1954 г. в г. Обнинске начала работать первая в мире атомная электростанция. В настоящее время электрическая энергия вырабатывается примерно в 440 ядерных реакторах в 30 странах мира.

Примечание 49. Отто Ган, немецкий химик, 1879–1968. Нобелевская премия по химии 1944 г. за открытие расщепления тяжёлых атомных ядер.

Фриц Штрассман, немецкий химик и физик, 1902–1980.

Лиза Мейтмер, австрийский физик и радиохимик, 1878–1968.

Отто Роберт Фриш, английский физик-ядерщик, 1904–1979.

Джон Арчибальд Уилер, американский физик-теоретик, 1911–2008.

5.3.3. Термоядерные реакции синтеза

Термоядерный синтез — это процесс объединения или «слияния» ядер с выделением огромного количества тепла.

Наряду с реакцией деления тяжёлых ядер энергетически возможным оказывается и обратный в некотором смысле процесс — синтез лёгких ядер, то есть слияние ядер лёгких элементов, расположенных в начале периодической таблицы, с образованием более тяжёлого ядра. Чтобы началось слияние ядер, их нужно сблизить вплотную — чтобы вступили в действие ядер-

ные силы. Для такого сближения нужно преодолеть кулоновское отталкивание ядер, резко возрастающее с уменьшением расстояния между ними. Это возможно лишь при очень большой кинетической энергии ядер, а значит — при очень высокой температуре (в десятки и сотни миллионов градусов). Поэтому реакция ядерного синтеза называется *термоядерной реакцией*. В качестве примера термоядерной реакции приведём реакцию слияния ядер дейтерия и трития (тяжёлого и сверхтяжёлого изотопов водорода), в результате которой образуется ядро гелия и нейтрон:

$$ {}_1H^2 + {}_1H^3 \rightarrow {}_2He^4 + n + 17{,}6 \text{ МэВ}. \qquad (5.3.6) $$

Эта реакция идёт с огромным выделением энергии, равной 17,6 МэВ, учитывая, что в реакции участвуют всего 5 нуклонов. В самом деле, в расчёте на один нуклон в реакции выделяется энергия примерно 3,5 МэВ, в то время как при делении ядра урана выделяется «всего» ~ 1 МэВ на нуклон. Таким образом, термоядерные реакции служат источником ещё большего количества энергии, чем реакции деления ядер.

С физической точки зрения это понятно: энергия реакции ядерного деления есть в основном кинетическая энергия осколков, разогнанных электрическими силами отталкивания, а при ядерном синтезе энергия высвобождается в результате разгона нуклонов навстречу друг другу под действием куда более мощных ядерных сил притяжения. Иначе говоря, при делении ядер высвобождается энергия электрического взаимодействия, а при синтезе ядер — энергия сильного (ядерного) взаимодействия. В недрах звёзд достигаются температуры, подходящие для синтеза ядер. Свет Солнца и далёких звёзд несёт энергию, выделяющуюся в термоядерных реакциях, — при слиянии ядер водорода в ядра гелия и последующем слиянии ядер гелия в ядра более тяжёлых элементов, расположенных в средней части периодической системы. Синтез лёгких ядер энергетически выгоден, так как направлен в сторону увеличения удельной энергии связи ядра.

В основных ядерных реакциях, которые планируется использовать в целях осуществления управляемого термоядерного синтеза, будут применяться дейтерий (H^2) и тритий (H^3), а в более отдалённой перспективе — гелий-3 (He^3) и бор-11 (B^{11}). Для поддержания запасов трития его, в свою очередь, нужно «воспроизводить» путем улавливания тяжелым изотопом лития (Li) нейтронов, излучаемых в процессе реакции:

$$ {}^6Li + n \rightarrow {}^3H + {}^4He. $$

Существует две формы термоядерного синтеза: неконтролируемый, при котором результирующая энергия высвобождается неконтролируемым образом, как это происходит в термоядерном оружии («водородных бомбах») и в большинстве звезд; и контролируемый, когда реакции синтеза происходят в среде, позволяющей использовать часть или всю высвобожденную энергию для конструктивных целей.

Неуправляемая термоядерная реакция осуществляется при взрыве водородной бомбы. Сначала взрывается встроенная атомная бомба — это

нужно для создания высокой температуры на первой ступени термоядерного взрыва. При достижении необходимой температуры в термоядерном горючем бомбы начинаются реакции синтеза, и происходит взрыв собственно водородной бомбы.

Получение полезной термоядерной энергии возможно при выполнении двух условий.

1. Предназначенная для синтеза смесь должна быть нагрета до температуры, при которой кинетическая энергия ядер обеспечивает высокую вероятность их слияния при столкновении.

2. Реагирующая смесь должна быть очень хорошо термоизолирована, т. е. высокая температура должна поддерживаться достаточно долго, чтобы произошло необходимое число реакций и выделившаяся за счет этого энергия превышала энергию, затраченную на нагрев топлива.

Из трех ключевых параметров термоядерного синтеза — температуры, плотности и времени удержания плазмы — один, температура, задается выбранной реакцией. Соотношение двух других можно варьировать. Соответственно есть два основных пути: либо выбрать относительно низкую плотность топлива и продолжительное время удержания, либо, наоборот, максимально возможную плотность при очень небольшой продолжительности реакции.

Управляемый термоядерный синтез возможен при одновременном выполнении двух условий:

— скорость соударения ядер соответствует температуре плазмы: $T > 10^8$ К (для реакции дейтерия и трития (5.3.6));

— соблюдение критерия Лоусона: $n\tau > 10^{14}$ см$^{-3}$·с (для реакции дейтерия и трития (5.3.6)), где n — плотность высокотемпературной плазмы, τ — время удержания плазмы в системе.

Критерий Лоусона определяет условие начала управляемой реакции термоядерного синтеза. Его смысл в том, что по достижении температуры запуска реакции необходим компромисс между концентрацией (или плотностью) частиц и временем их удержания в объеме, обеспечивающем эту плотность. Можно «разжечь» термоядерный синтез при меньшей концентрации частиц за счет более длительного удержания плазмы, а можно — при меньшем времени удержания плазмы за счет повышения плотности частиц в ней. От значения этих двух критериев в основном зависит скорость протекания той или иной термоядерной реакции.

Наибольшие успехи в термоизоляции плазмы были достигнуты на так называемых *токамаках* — тороидальных камерах с магнитным полем. Их идея была предложена А. Д. Сахаровым и И. Е. Таммом в начале 1950-х гг., а в конце 1960-х — начале 1970-х гг. на них в Курчатовском институте под руководством академика Л. А. Арцимовича была впервые получена высокотемпературная термоядерная плазма.

Токамак — устройство для осуществления реакции термоядерного синтеза в горячей плазме в квазистационарном режиме, причем плазма создается в тороидальной камере и ее стабилизирует магнитное поле. В установках типа

токамак плазму создают внутри тороидальной камеры с помощью безэлектродного кольцевого разряда. Через плазменный сгусток пропускают электрический ток. При этом у него появляется собственное магнитное поле — сгусток плазмы как бы сам становится магнитом. Теперь с помощью внешнего магнитного поля определенной конфигурации можно подвесить плазменное облако в центре камеры, не позволяя ему соприкасаться со стенками.

Кроме магнитного управляемого термоядерного синтеза, существует и другой подход к проблеме — инерциальный управляемый термоядерный синтез. Идея заключается в быстром и равномерном нагреве термоядерного топлива, так, чтобы образовавшаяся плазма до разлёта успела прореагировать. Таким образом, при использовании данного принципа реактор будет импульсным. В 2009 г. в США в рамках исследования инерциального термоядерного синтеза произвели пробный запуск лазеров в национальном комплексе лазерных термоядерных реакций. В эксперименте на этой установке 5 декабря 2022 г. учёные впервые в истории добились положительного выхода энергии в ходе реакции термоядерного синтеза, удалось получить около 3,15 мегаджоуля энергии, что превысило направленную лазерами в мишень энергию — 2,05 мегаджоуля. В то же время речь идёт лишь о превышении выделившейся энергии над энергией, непосредственно переданной в мишень; для накачки системы лазеров потребовалась энергия, превышающая 400 мегаджоулей, т. е. КПД установки в этом эксперименте — менее 1%.

Управляемый термоядерный синтез пока не осуществлён в промышленных масштабах. Наиболее трудная задача, стоящая на пути осуществления управляемого термоядерного синтеза, заключается в изоляции плазмы от стенок реактора. Если удастся добиться управляемого течения термоядерного синтеза, то человечество получит в своё распоряжение фактически неограниченный источник энергии.

Примечание 50. Джон Дэвид Лоусон, английский физик, 1923–2008.

Андрей Дмитриевич Сахаров, советский физик-теоретик, 1921–1989, Нобелевская премия мира (1975).

Игорь Евгеньевич Тамм, советский физик-теоретик, 1895–1971, Нобелевская премия по физике (1958).

Лев Андреевич Арцимович, советский физик, 1909–1973.

Новый этап в теории ядра связан с развитием в 1970–1980-х гг. *квантовой хромодинамики* (КХД) как теории сильных взаимодействий. Согласно этой теории, нуклоны и мезоны не являются истинно элементарными частицами, а состоят из более фундаментальных частиц: *кварков* (фермионов) и *глюонов* (бозонов), взаимодействующих между собой. Последовательная теория КХД нуклона и ядра еще в процессе построения. Однако многие представления КХД и *кварковые модели* адронов позволили описать ядерные реакции под воздействием частиц высоких энергий, сопровождающиеся большой передачей энергии и импульса. При этом ожидалось, что ядро должно вести себя как система свободных нуклонов и что трудно найти спе-

цифически ядерные эффекты КХД. Однако такой эффект был обнаружен в 1982 г. Европейской мюонной коллаборацией (эффект ЕМС). Он заключается в значительном (до 15%) отличии сечения *глубоко неупругого процесса* рассеяния мюонов с энергиями порядка 100 ГэВ на ядре Fe (в расчёте на нуклон) от сечения на свободном нуклоне. Из этого наблюдения можно сделать вывод, что распределение импульсов кварков в нуклонах, связанных внутри ядер, отличается от распределения импульсов свободных нуклонов. До настоящего времени нет однозначной интерпретации этого явления. Эффект ЕМС оказался важным тестом для КХД моделей нуклона: оказалось, что некоторые модели не могут описать этот эффект, не вступая в сильное противоречие с другими ядерными свойствами. К настоящему времени обнаружено несколько ЕМС-подобных эффектов, и возникла новая область исследований — *релятивистская ядерная физика*, объединяющая ядерную физику с физикой *элементарных частиц*.

5.4. Элементарные частицы

5.4.1. Фундаментальные взаимодействия

Современные экспериментальные данные свидетельствуют, что существуют только четыре качественно различных вида фундаментальных взаимодействий, которые определяют физические законы и следствия при взаимодействии различных видов материи. Фундаментальные взаимодействия переносятся *квантами* — переносчиками взаимодействий. Все остальные силы в нашем мире являются частными проявлениями этих фундаментальных взаимодействий.

В настоящее время большое значение приобретает идея объединения фундаментальных взаимодействий, поэтому, строго говоря, при их объединении фундаментальных взаимодействий становится меньше. Однако при энергиях, реализующихся в нашей обычной жизни, эти проявления фундаментальных взаимодействий имеют качественные и количественные различия, поэтому напомним их отдельно в порядке увеличения интенсивности.

1. *Гравитационное взаимодействие*. Гравитационное взаимодействие присуще всем видам материи, имеет вид притяжения или тяготения и описывается Общей Теорией Относительности (ОТО). В случае пренебрежения всеми релятивистскими эффектами и рассмотрения слабых стационарных гравитационных полей, ОТО сводится к Ньютоновской *теории всемирного тяготения*. Тогда сила F и энергия U взаимодействия двух точечных частиц с массами m_1 и m_2 определяются следующими фундаментальными соотношениями:

$$\vec{F} = -G\frac{m_1 m_2}{r^3}\vec{r}, \quad U(r) = G\frac{m_1 m_2}{r}, \tag{5.4.1}$$

где r — расстояние между частицами, G — *Ньютоновская гравитационная постоянная*, которая играет роль константы гравитационного взаимодействия и которая равна

$$G = 6{,}67\cdot 10^{-8}\ \text{дин}\cdot\text{см}^2/\text{г}^2 = 6{,}67\cdot 10^{-11}\ \text{Н}\cdot\text{м}^2/\text{кг}^2. \tag{5.4.2}$$

О таких силах, которые убывают с расстоянием обратно пропорционально квадрату расстояния, говорят как о дальнодействующих силах. Радиус действия таких сил равен бесконечности.

Чтобы говорить о величине взаимодействия (интенсивности) удобно иметь безразмерную константу связи. Чтобы получить такую константу, можно использовать *фундаментальные постоянные*, которые мы неоднократно использовали в настоящем курсе:

— *постоянную Планка*:

$$\hbar = 1{,}05459 \cdot 10^{-27} \text{ эрг·с} = 1{,}05459 \cdot 10^{-34} \text{ Дж·с};$$

— *скорость света*:

$$c = 2{,}9979 \cdot 10^{10} \text{ см/с} = 2{,}9979 \cdot 10^{8} \text{ м/с};$$

— *массу протона*:

$$m_p = 1{,}67265 \cdot 10^{-24} \text{ г} = 1{,}67265 \cdot 10^{-27} \text{ кг}.$$

Тогда безразмерная константа связи гравитационного взаимодействия равна:

$$\frac{G m_p^2}{\hbar c} \sim 6 \cdot 10^{-39}, \tag{5.4.3}$$

что, конечно, является очень малой величиной. Гравитационные взаимодействия ответственны за силу тяготения на Земле, за образование звезд, планет, планетарных и звездных систем, галактик.

В квантовой теории тяготения переносчиками гравитационного взаимодействия являются *гравитоны* (или гравитационные волны) — безмассовые частицы $m_G = 0$. Гравитационные волны предсказываются общей теорией относительности и многими другими теориями гравитации, но ввиду их чрезвычайной малости не были зарегистрированы в течение 100 лет со времени их предсказания Эйнштейном.

Однако в 2015 г. международная коллаборация LIGO сообщила об экспериментальном обнаружении гравитационных волн от слияния двух черных дыр, что подтверждает одно из важных положений общей теории относительности.

2. *Слабое взаимодействие*. Так называемые *слабые взаимодействия* присущи всем элементарным частицам (кроме фотона, гравитона). Они ответственны за распад элементарных частиц, причем за счет этих сил происходит нарушение пространственной четности. Характерно, что если в каком-либо процессе появляется или участвует элементарная частица *нейтрино* (или *антинейтрино*), то взаимодействие, определяющее этот процесс, является слабым. Типичный пример: распад нейтрона n (β-распад нейтрона) на протон p, электрон e^- и антинейтрино $\tilde{\nu}$:

$$n \to p + e^- + \tilde{\nu}.$$

Существуют также слабые взаимодействия, не сопровождающиеся участием нейтрино или антинейтрино.

Интенсивность слабого взаимодействия характеризуется константой связи Ферми G_F. Эта константа имеет размерность и, чтобы образовать безразмерную величину для сравнения с другими константами взаимодействия, необходимо использовать какую-нибудь эталонную массу, например, массу протона m_p. Тогда безразмерная константа связи слабого взаимодействия будет равна

$$G_F m_p^2 \sim 10^{-5}. \qquad (5.4.4)$$

Видно, что слабое взаимодействие гораздо интенсивнее гравитационного, однако, с другой стороны, оно является самым слабым взаимодействием, которое проявляется в распадах элементарных частиц.

Слабое взаимодействие в отличие от гравитационного является *короткодействующим*, характерный радиус действия сил $r \leq 10^{-15}$ см. Переносчиками слабых взаимодействий являются частицы конечной массы — заряженные $W^{\pm}$*-бозоны* и нейтральные Z^0*-бозоны*. Эти элементарные частицы имеют спин, равный 1, и массы, равные по порядку величины $100m_p$ или $160\,000m_e$ ($m_e = 9{,}1095 \cdot 10^{-28}$ г). Если взять в качестве эталонной массы массу электрона, то безразмерная константа слабого взаимодействия примерно равна $G_F m_e^2 \sim 10^{-10}$.

3. *Электромагнитное взаимодействие*. Электромагнитные взаимодействия проявляются при взаимодействии электрических зарядов, магнитных моментов (токов) и электромагнитных полей. Они осуществляются квантами электромагнитного поля — *фотонами* (частицы-волны с массой покоя $m_\gamma = 0$).

Классическая теория электромагнитного взаимодействия — электродинамика Максвелла — обобщение опытных фактов и явлений, представленное в виде системы дифференциальных уравнений, описывающих электромагнитные явления [3, 4]. Система уравнений электромагнитного поля обобщает описание фундаментальных экспериментальных законов, таких как закон Кулона, законы Ампера и Био — Савара, законы электромагнитной индукции и распространения электромагнитных волн.

В квантовой теории переносчиком электромагнитного взаимодействия является квант электромагнитного поля — *фотон*, — частица, имеющая нулевую массу покоя и спин 1. Квантовое электромагнитное взаимодействие двух зарядов представляется следующим образом: заряд испускает фотон, в силу чего его состояние изменяется, а другой заряд поглощает этот фотон и также изменяет свое состояние.

Интенсивность электромагнитного взаимодействия характеризуется *зарядом электрона* как минимальным обнаруженным электрическим зарядом свободной частицы

$$e = 4{,}8032 \cdot 10^{-10} \text{ ед. СГС} = 1{,}60219 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}.$$

Удобно ввести безразмерную константу связи электромагнитного взаимодействия, используя, помимо заряда электрона, фундаментальные постоянные $\hbar$ и c. Эта константа называется *постоянной тонкой структуры*:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}. \qquad (5.4.5)$$

Таким образом, безразмерная константа электромагнитного взаимодействия составляет величину ~10^{-2}, а это означает, что электромагнитное взаимодействие значительно сильнее слабого и гравитационного взаимодействия.

4. *Сильное взаимодействие.* Сильное взаимодействие ответственно за устойчивость атомных ядер, проявляется в ядерных реакциях, т. е. описывает взаимодействие между *нуклонами* и *гиперонами*, объединенными общим названием — *адроны*. Адроны — сильно взаимодействующие элементарные частицы, к которым относятся нейтрон n, протон p, гипероны λ, Σ, ... Сильное взаимодействие зарядонезависимое, т. е. оно одинаковое для протонов и нейтронов.

Классическая квантовая теория ядра описывала сильные взаимодействия как обмен π-*мезонами*. Поскольку масса π-мезона конечная, то и радиус действия ядерных сил конечен $r \leq 10^{-13}$ см. Безразмерная *константа сильного взаимодействия* ~ 1, т. е. сильное взаимодействие является, в самом деле, наиболее сильным из всех фундаментальных взаимодействий.

Современная квантовая теория сильных взаимодействий– *квантовая хромодинамика*. Согласно этой теории, все адроны состоят из кварков. *Кварки* — элементарные частицы ненулевой массы со спином 1/2 и с дробным электрическим зарядом по отношению к электронному заряду. Кварки формируются в три пары (дублеты) и записываются парами в следующем виде:

$$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix}. \qquad (5.4.6)$$

Каждый тип кварков принято называть *ароматом* (6 ароматов). При этом u-, c-, t-кварки имеют электрический заряд $\frac{2}{3}|e|$, а d-, s-, b-кварки — $-\frac{1}{3}|e|$. Кроме того, каждый кварк (каждый аромат) может обладать разным *цветом* (так называют их различные характеристики — квантовые числа). Выделяют три цвета: желтый, синий и красный. Каждому кварку соответствует *антикварк*, имеющий по отношению к данному кварку, противоположный электрический заряд и антицвет. В итоге существует 36 кварков и антикварков.

Взаимодействие между кварками осуществляются квантами сильных взаимодействий — *глюонами*, которые являются переносчиками сильных взаимодействий со спином 1 и массой равной 0. При этом в процессе взаимодействия цвета кварков могут меняться. Все наблюдаемые частицы (адроны) — бесцветны, т. е. они представляют собой объединение как минимум трех разноцветных кварков и в целом цветом не обладают. Мезоны

также бесцветные частицы, но они образуются двумя кварками с одним цветом и соответствующим антицветом.

Отличительная черта кварк-кваркового взаимодействия через обмен глюонами состоит в том, что с уменьшением расстояния между кварками их взаимодействие ослабляется, а с увеличением расстояния между кварками растет. Внутри адрона кварки можно рассматривать как свободные частицы (понятие *асимптотической свободы*), но они не могут вылетать из адронов. Поэтому одиночные кварки и глюоны, как частицы, обладающие цветом, не могут существовать как свободные частицы. Явление удержания элементарных частиц, обладающих цветом, внутри адронов получило название *конфайнмента*.

В настоящее время существует тенденция объединения всех фундаментальных взаимодействий в одно с единой константой. Создана модель — *теория великого объединения*, в рамках которой объединяются сильное, слабое и электромагнитное взаимодействия и при этом характерная энергия объединения оказывается ~ 10^{15} ГэВ. Отметим, что наибольшая энергия, достижимая на современных ускорителях, не превышает 10^3 ГэВ.

Проблема объединения всех фундаментальных взаимодействий остается открытой.

5.4.2. О систематике элементарных частиц. Стандартная модель

Вернемся снова к элементарным частицам и их систематике. Можно выделить 3 основных класса элементарных частиц:

1) частицы переносчики взаимодействия или кванты всех полей, рассмотренных выше;

2) бесструктурные частицы — лептоны;

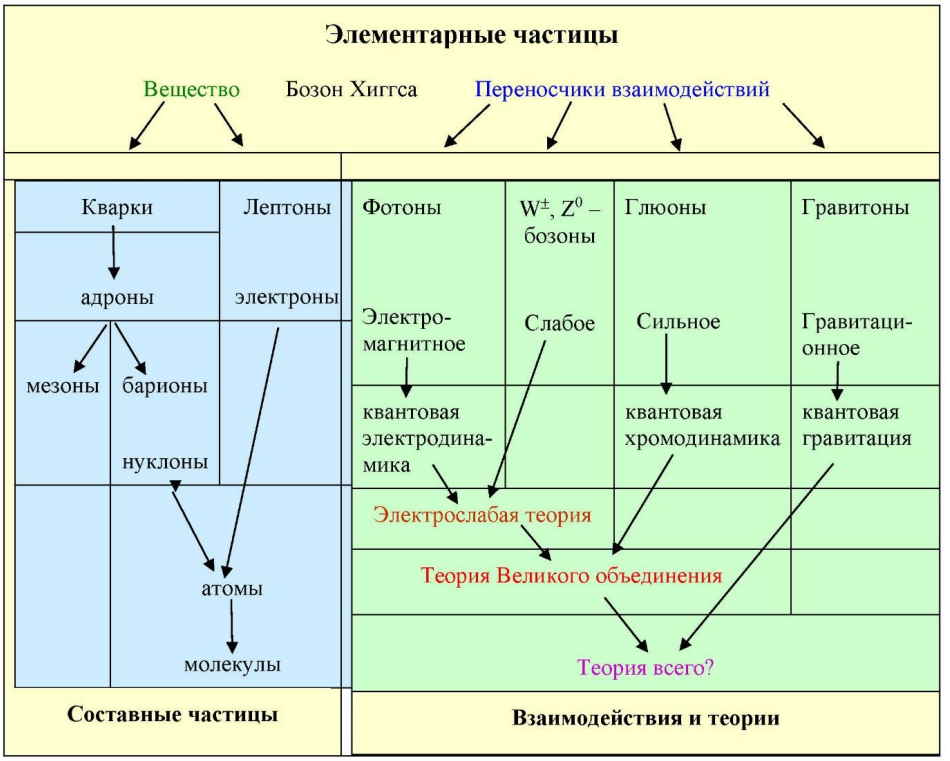
3) сильно взаимодействующие частицы — адроны.

Все известные на настоящий момент элементарные частицы, из которых образуются структурные частицы вещества, и элементарные переносчики взаимодействий кратко представлены в таблице 5.4.1. В левой части таблицы 5.4.1 стрелками показаны какие частицы составляют более сложные частицы и структуры вещества. В правой части таблицы представлены кванты фундаментальных физических полей, а стрелками показаны теории, которые объединяют описание (теорий) этих взаимодействий.

Группа теоретических моделей в физике элементарных частиц, описывающих единым образом сильное, слабое и электромагнитное взаимодействия, составляет суть *теории великого объединения*. Предполагается, что при чрезвычайно высоких энергиях (выше 10^{14} ГэВ) эти взаимодействия объединяются. Хотя это единое взаимодействие не наблюдалось непосредственно, многие модели теории великого объединения предсказывают его существование. Если объединение этих трех взаимодействий возможно, то вероятно, что в очень ранней Вселенной была великая объединительная эпоха, в которой эти три фундаментальных взаимодействия еще не были разделены друг от друга. Современная теория в физике элементарных ча-

стиц, которая описывает электромагнитное, слабое и сильное взаимодействие всех элементарных частиц, носит название *стандартной модели*. Модель основана на принципах локальной калибровочной инвариантности, т. е. инвариантности уравнений движения к произвольным изменениям координат пространства-времени.

Таблица 5.4.1



Эксперименты подтвердили, что при высокой энергии электромагнитное взаимодействие и слабое взаимодействие объединяются в единое *электрослабое* взаимодействие. Модели теории великого объединения предсказывают, что при достаточно высоких энергиях, сильные взаимодействия и электрослабые взаимодействия объединяются в одно *электроядерное* взаимодействие. Это взаимодействие характеризуется одной единой калибровочной симметрией и, следовательно, несколькими носителями силы, но одной унифицированной константой связи.

Экспериментальное подтверждение существования промежуточных векторных бозонов в середине 1980-х гг. завершило построение стандартной модели и её принятие как основной. Необходимость незначительного расширения модели возникла в 2002 г., после обнаружения нейтринных осцилляций, а подтверждение существования бозона Хиггса в 2012 г. завершило экспериментальное обнаружение предсказываемых стандартной моделью элементарных частиц.

Стандартная модель включает в себя следующие ингредиенты: 6 кварков, 6 лептонов, 4 частицы-переносчика силовых взаимодействий, а также 1 хиггсовский бозон. Если учитывать античастицы и различные цветовые заряды у глюонов, то в общей сложности стандартная модель описывает 61 уникальную частицу

Стандартная модель не является теорией всего, так как не описывает тёмную материю, тёмную энергию и не включает в себя гравитацию. Объединение гравитации с электроядерным взаимодействием привело бы скорее к теории всего, поэтому теория великого объединения часто рассматривается как промежуточный этап на пути к теории всего.

5.4.3. Переносчики взаимодействий

Кванты или переносчики фундаментальных взаимодействий представлены в правой колонке таблицы 5.4.1. Ниже в этой части параграфа кратко перечислим кванты фундаментальных взаимодействий.

Фотоны — кванты электромагнитного поля, фундаментальная частица и переносчик электромагнитного взаимодействия, распространяется в виде поперечных электромагнитных волн. Это безмассовая частица, способная существовать, только двигаясь со скоростью света. Электрический заряд фотона равен нулю. Фотон может находиться только в двух спиновых состояниях с проекцией спина на направление движения (спиральностью) ±1. Как переносчик электромагнитного взаимодействия обеспечивает связь атомов, молекул. Фотон относится к калибровочным бозонам как переносчик фундаментальных взаимодействий. Он участвует в электромагнитном и гравитационном взаимодействии.

Переносчиками слабого взаимодействия являются *векторные бозоны* W^+, W^- и Z^0. Все три частицы очень короткоживущие, со средним временем жизни около $3 \cdot 10^{-25}$ с. Эти *бозоны* отвечают за так называемое слабое взаимодействие, которое умеет превращать одни частицы в другие. При этом различают взаимодействие так называемых заряженных слабых токов и нейтральных слабых токов. Взаимодействие заряженных токов (при участии заряженных бозонов $W^{\pm}$) приводит к изменению зарядов частиц и превращению одних лептонов и кварков в другие лептоны и кварки. Взаимодействие нейтральных токов (при участии нейтрального бозона Z^0) не меняет заряды частиц и переводит лептоны и кварки в те же самые частицы.

Пример слабого взаимодействия — распад нейтрона: один из кварков, составляющих нейтрон, излучает W-бозон и превращается в другой кварк, а W-бозон распадается на электрон и антинейтрино (см. (5.1.7)).

В Стандартной модели фотон является одним из четырёх калибровочных бозонов, осуществляющих электрослабое взаимодействие. Остальные три бозона (W^+, W^- и Z^0) отвечают только за слабое взаимодействие. В отличие от фотона, у векторных бозонов есть масса, они обязаны быть массивными вследствие того, что слабое взаимодействие проявляется лишь на очень малых расстояниях, $< 10^{-15}$ см. Объединение фотона с калибровочными W- и Z-бозонами в электрослабом взаимодействии осуществили

Ш. Л. Глэшоу, А. Салам и С. Вайнберг, за что были удостоены Нобелевской премии по физике в 1979 г. Их теория электрослабого взаимодействия предсказала не только *W*-бозон, необходимый для объяснения бета-распада, но также новый *Z*-бозон, который до этого никогда не наблюдался. Экспериментальное открытие самих *W*- и *Z*-бозонов состоялось позже, пока не стало возможным построение достаточно мощных ускорителей, чтобы создать их. Частицы были обнаружены в 1983 году международной коллаборацией физиков в ЦЕРНе при столкновении встречных пучков протонов и антипротонов. Руководители эксперимента К. Руббиа и С. ван дер Меер были награждены Нобелевской премией по физике 1984 г.

Глюон — элементарная безмассовая частица, фундаментальный бозон, квант векторного поля, переносчик сильного взаимодействия (*gluon*, от *glue* — клей). Именно сильное взаимодействие отвечает за ядерные силы, скрепляющие протоны и нейтроны в ядрах. Иначе, глюоны — векторные калибровочные бозоны, непосредственно отвечающие за сильное цветовое взаимодействие между кварками в квантовой хромодинамике (КХД). В отличие от фотонов в квантовой электродинамике, которые электрически нейтральны и не взаимодействуют друг с другом, глюоны сами несут цветовой заряд и поэтому они не только переносят сильное взаимодействие, но и участвуют в нём. Всего существует 8 независимых типов глюонов, что делает КХД значительно более сложной для понимания по сравнению с квантовой электродинамикой.

Безмассовые векторные калибровочные бозоны, такие как глюон и фотон, имеют только две возможных поляризации из-за того, что калибровочная инвариантность требует поперечной поляризации.

В рамках Стандартной модели возникает необходимость рассматривать еще один бозон — *бозон Хиггса*. Теоретически он был предсказан еще в 60-х гг. XX в., но экспериментально его существование было доказано только в 2013 г. С помощью поля Хиггса объясняется наличие инертной массы частиц-переносчиков слабого взаимодействия (т. е. у W- и Z-бозонов) и отсутствие массы у частиц-переносчиков сильного (глюон) и электромагнитного взаимодействия (фотон). По построению хиггсовский бозон является скалярной частицей, то есть обладает нулевым спином. Его открытие завершает построение стандартной модели.

Итак, поле Хиггса составляет вездесущий и постоянный фон, в результате сильных колебаний которого и появляется бозон Хиггса. И именно благодаря этому полю элементарные частицы наделяются массой, которая определяет эффекты инерции, а не эффекты притяжения. Квантовой теории, которая связала бы и инерцию, и гравитацию, пока что нет.

Гравитоны — бозоны — кванты гравитационного поля. В квантовой теории тяготения переносчиками гравитационного взаимодействия являются гравитационные волны или *гравитоны* — безмассовые частицы $m_G = 0$. Гравитационные волны предсказываются общей теорией относительности и многими другими теориями гравитации, но ввиду их чрезвычайной малости не были зарегистрированы в течение 100 лет со времени их предсказания Эйнштейном.

Однако в 2015 г. коллаборация LIGO сообщила, что впервые наблюдала колебания пространства-времени— гравитационные волны, возникшие в результате слияния двух черных дыр массами 36 и 29 солнечных масс.

Однако, несмотря на многие усилия физиков, гравитация — единственное из фундаментальных взаимодействий, для которого пока ещё не построена общепризнанная непротиворечивая квантовая теория. При низких энергиях, в духе квантовой теории поля, гравитационное взаимодействие можно представить как обмен гравитонами — калибровочными бозонами со спином 2. Однако получающаяся теория неперенормируема, и поэтому считается неудовлетворительной.

5.4.4. Лептоны

Лептоны — это элементарные частицы, не участвующие в сильных взаимодействиях и имеющие спин, равный ½ (см. табл. 5.4.1). Все лептоны являются фермионами, которые участвуют в слабом взаимодействии, а заряженные лептоны еще в электромагнитном взаимодействии. Лептоны можно отнести к истинно элементарным частицам, поскольку у них в отличие от других элементарных частиц (адронов) внутренняя структура не обнаружена.

К числу лептонов относятся следующие частицы и их античастицы: электроны и позитроны (e^- и e^+), мюоны (μ^- и μ^+), таоны (τ^- и τ^+), а также 3 пары соответствующих нейтрино и антинейтрино $\left(\nu_e, \tilde{\nu}_e, \nu_\mu, \tilde{\nu}_\mu, \nu_\tau, \tilde{\nu}_\tau\right)$. Каждому заряженному лептону (электрон, мюон, тау-лептон) и его античастице соответствует своя пара лёгких нейтральных лептонов: нейтрино — антинейтрино. Лептон с антилептоном и соответствующая пара нейтрино образуют так называемое одно поколение лептонов. Таким образом, имеем 3 поколения лептонов, которые представлены в таблице 5.4.2.

Таблица 5.4.2

Лептоны

Частица/ античастица	**Масса mc^2 (МэВ)**	**Электр. заряд**	**Спин ($\hbar$)**	**Время жизни (с)**
электрон e^- / позитрон e^+	0,511	–1 / +1	1/2	стабилен
электронное нейтрино $\nu_e / \tilde{\nu}_e$	$< 2\ 10^{-6}$	0 / 0	1/2	стабильно
мюон μ^- / мюон μ^+	105,66	–1 / +1	1/2	$2{,}2\ 10^{-6}$
мюонное нейтрино ν_μ / $\tilde{\nu}_\mu$	< 0,19	0 / 0	1/2	стабильно
таон τ^- / антитаон τ^+	1782,0	–1 / +1	1/2	$3{,}4\ 10^{-13}$
таонное нейтрино ν_τ / $\tilde{\nu}_\tau$	< 18,2	0 / 0	1/2	

Из заряженных лептонов стабильным является только самый лёгкий из них — электрон (и его античастица — позитрон). Более тяжёлые заряженные лептоны распадаются на более лёгкие. Например, отрицательный мюон распадается на мюонное нейтрино и промежуточный W — бозон, который превращается в электрон и электронное антинейтрино, со временем жизни около 2 мкс.

$$\mu^- \to \nu_\mu + W^- \to \nu_\mu + \tilde{\nu}_e + e^- . \qquad (5.4.7)$$

Тау-лептон (время жизни около $3 \cdot 10^{-13}$ с) может распадаться с вылетом не только лептонов, но и лёгких адронов (каонов и пионов, см. табл. 5.4.4). Распад нейтрино не обнаружен, в настоящее время они считаются стабильными.

До недавнего времени считалось, что каждое поколение лептонов обладает своим дополнительным квантовым числом — лептонным зарядом. Иными словами, лептон может возникнуть только вместе с антилептоном из своего поколения, так, чтобы разность количества лептонов и антилептонов каждого поколения в замкнутой системе была постоянной. Эта разность называется электронным, мюонным или тау-лептонным числом, в зависимости от рассматриваемого поколения. Лептонное число лептона равно +1, антилептона — –1.

С открытием осцилляций нейтрино обнаружено, что это правило сохранения лептонного заряда нарушается: электронное нейтрино может превратиться в мюонное или тау-нейтрино и т. д. Таким образом, индивидуальное (для каждого поколения) лептонное число не сохраняется, однако процессов, в которых не сохранялось бы общее лептонное число (не зависящее от поколения), пока не обнаружено. Лептонное число иногда называют лептонным зарядом, хотя с ним, в отличие от электрического заряда, не связано какое-либо калибровочное поле. Закон сохранения лептонного числа является экспериментальным фактом и пока не имеет общепринятого теоретического обоснования.

Нейтрино — фундаментальная стабильная частица — также входит в группу лептонов, относится к семейству фермионов со спином $\frac{1}{2}\hbar$ и участвует в слабом и гравитационном взаимодействиях. Как видно из таблицы 5.4.2, имеется 6 частиц нейтрино: 3 частицы и 3 античастицы. Нейтрино имеют ненулевую массу, но эта масса крайне мала. Верхняя экспериментальная оценка суммы масс всех типов нейтрино составляет всего 0,28 эВ. Разница квадратов масс нейтрино разных поколений, полученная из осцилляционных экспериментов, не превышает $2{,}7 \cdot 10^{-3}$ эВ.

Нейтрино малой энергии чрезвычайно слабо взаимодействуют с веществом: так, нейтрино с энергией порядка 3–10 МэВ имеют в воде длину свободного пробега порядка 10^{18} м (около 100 световых лет). Каждую секунду через площадку на Земле площадью в 1 см² проходит около $6 \cdot 10^{10}$ нейтрино, испущенных Солнцем, однако их влияние на вещество практически никак не ощущается. В то же время нейтрино высоких энергий успешно обнаруживаются по их взаимодействию с мишенями.

С современной точки зрения электромагнитное и слабое взаимодействия представляют собой различные стороны единого *электрослабого взаимодействия*. Создана объединенная теория электрослабого взаимодействия — теория Вайнберга — Салама — Глэшоу, объясняющая с единых позиций все аспекты электромагнитных и слабых взаимодействий. Пока энергии взаимодействия достаточно малы электромагнитное и слабое взаимодействия отделены и не влияют друг на друга. С ростом энергии начинается их взаимовлияние, и при достаточно больших энергиях эти взаимодействия сливаются в единое (табл. 5.4.1). Характерная энергия объединения оценивается по порядку величины как 10^2 ГэВ = 10^{11} эВ (напомним 1 эВ = = $1{,}6 \cdot 10^{-12}$ эрг = $1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Дж). Для сравнения отметим, что энергия связи атома водорода ~ 10^{-8} ГэВ, а энергия связи атомного ядра ~ 10^{-2} ГэВ существенно меньше характерной энергии объединения. По этой причине электромагнитное и слабое взаимодействия не проявляют в обычных физических явлениях своей единой сущности.

5.4.5. Кварки и адроны

Адроны — это элементарные частицы, которые участвуют в сильном, слабом и электромагнитном взаимодействиях и имеют внутреннюю структуру, в отличие от бесструктурных лептонов. Слово «адрон» имеет греческий корень и переводится как «массивный, плотный». То есть речь идет о плотной частице материи, имеющей большую массу.

К адронам относятся сильно взаимодействующие частицы: *мезоны и барионы*. В состав ядра входят простейшие барионы — нуклоны: протоны и нейтроны. Классическая квантовая теория ядра описывала сильные взаимодействия и стабильность ядер как обмен π-*мезонами*.

Согласно *квантовой хромодинамике* все адроны являются составными частицами, они состоят из кварков. *Кварки* — элементарные частицы ненулевой массы со спином 1/2 и с дробным электрическим зарядом по отношению к электронному заряду. Кроме того, по характеру вхаимодействия между кварками они обладают дополнительными свойствами, определяемыми дополнительным квантовым числом — «цветом».

Адроны делятся на две основные группы в соответствии с их кварковым составом: мезоны и барионы. Основные характеристики кварков и основных адронов представлены в таблицах 5.4.3 и 5.4.4.

Перейдем к краткому рассмотрению свойств кварков.

Кварк — это фундаментальная частица в стандартной модели, обладающая спином равным ½, электрическим зарядом, кратным $e/3$. и не обнаруженная в свободном состоянии.

Кварки, как гипотетические частицы, образующие все адроны, появились впервые в 1964 г. в работах Гелл-Манна и, независимо, Цвейга. В дальнейшем многочисленные экспериментальные данные получают свое объяснение в рамках этой модели и тем самым подтверждают справедливость такого представления.

Кварки обладают различными внутренними свойствами, включая электрический заряд, массу, цветовой заряд и спин (см. табл. 5.4.3). Это единственные элементарные частицы в стандартной модели физики элементарных частиц, которые участвуют во всех четырёх фундаментальных взаимодействиях (электромагнитном, гравитационном, сильном и слабом), а также единственные известные частицы, электрические заряды которых не являются целыми числами, кратными элементарному заряду (электрона).

Таблица 5.4.3

Кварки

Тип (ароматы) кварков									
Частица	**Масса (МэВ/с²)**	***J***	***B***	***Q* (*e*)**	I_3	***C***	***S***	***T***	***B′***
Первое поколение									
Верхний *u*	2,3	1/2	+1/3	+2/3	+1/2	0	0	0	0
Нижний *d*	4,8	1/2	+1/3	−1/3	–1/2	0	0	0	0
Второе поколение									
Очарованный *c*	1275	1/2	+1/3	+2/3	0	+1	0	0	0
Странный *s*	95	1/2	+1/3	−1/3	0	0	−1	0	0
Третье поколение									
Истинный *t*	173 210	1/2	+1/3	+2/3	0	0	0	+1	0
Прелестный *b*	4180	1/2	+1/3	−1/3	0	0	0	0	−1
J — полный угловой момент, *B* — барионное число, *Q* — электрический заряд, I_3 — изоспин, *C* — очарование, *S* — странность, *T* — истинность, *B′* — прелесть, красота.									

Поскольку кварки — фермионы, то они подчиняются принципу Паули, согласно которому никакие два идентичных фермиона не могут одновременно занимать одно и то же квантовое состояние. В отличие от лептонов кварки обладают *цветовым зарядом*, который заставляет их вступать в сильное взаимодействие. В результате притяжения между различными «разноцветными» кварками образуются составные частицы — адроны. Соответственно, наука, которая изучает взаимодействие кварков, называется *квантовая хромодинамика*. Сам «цвет» кварка, так же как потенциал, физического значения не имеет, и он не наблюдаем. Наблюдаемо только изменение «цвета» от точки к точке. Эти слова имеют чёткое математическое воплощение, которое однозначно фиксирует, как конкретно кварки взаимодействуют с глюонами, а те между собой.

Кварки имеют дробные значения электрического заряда: «–1/3» или «+2/3» элементарного электрического заряда электрона *e*, в зависимости от аромата. Верхние, очарованные и истинные кварки (см. табл. 5.4.3) имеют заряд +2*e*/3; нижние, странные и прелестные кварки имеют заряд –*e*/3. Антикварки имеют заряд, противоположный соответствующим им кваркам;

верхние антикварки имеют заряды $-2e/3$, и нижние антикварки имеют заряды $+1/3e$. Поскольку электрический заряд адрона представляет собой сумму зарядов составляющих его кварков, все адроны имеют целочисленные заряды: сочетание трёх кварков для барионов, трёх антикварков для антибарионов или кварка и антикварка для мезонов всегда приводит к заряду, выражаемому целым числом. Например, адронные составляющие атомных ядер, нейтроны и протоны, имеют заряды $0e$ и $+1e$ соответственно; нейтрон состоит из двух нижних кварков и одного верхнего кварка, а протон — из двух верхних кварков и одного нижнего кварка.

Кварки, как уже упоминалось в первом пункте этого параграфа, формируются в три пары (дублеты) и записываются парами в виде (5.4.6):

$$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix}.$$

Первая пара кварков u (up) и d (down) — это легкие кварки — самые распространенные в природе (см. табл. 5.4.3). Именно из них состоят протоны, нейтроны, переносчики ядерных сил, пи-мезоны (см. табл. 5.4.4). И именно эта пара легких кварков составляет кварки первого поколения.

Следующая пара кварков: s — странный (strange) и c — очарованный (charmed) кварки — составляют более тяжелые частицы и в некоторых отношениях (время жизни) ведут себя иначе, чем u и d кварки. В частности, частицы, содержащие такие кварки (например, очарованные адроны), тяжелее своих легких собратьев и живут недолго, порядка одной пикосекунды в системе покоя частицы.

Прелестный кварк b еще тяжелее, его масса около 5 ГэВ, однако время жизни его даже больше, чем у c-кварка — около 1,5 пс. Из-за того, что масса b-кварка намного больше адронного масштаба масс (несколько сотен МэВ), становится очень удобно описывать прелестные адроны как связанную систему тяжелого и легкого кварка; многие успехи в теоретическом описании «прелестных» адронов связаны именно с этим простым фактом. Истинный t-кварк, или *top*-кварк, является наиболее массивным среди всех частиц. Ввиду короткого времени жизни он не успевает после возникновения стать частью адрона и ведёт себя как виртуальный кварк, распадаясь почти всегда слабым распадом на b-кварк и W-бозон.

Переносчиками сильного взаимодействия в квантовой хромодинамике являются *глюоны* (от glue — клей). Эти изначально безмассовые частицы со спином 1 электрически нейтральны, но несут цветной заряд. Фотоны являются квантами электромагнитного поля, а глюоны — это кванты цветного калибровочного поля. Термин «глюоны» появился потому, что эти глюоны, а их восемь штук, склеивают кварки внутри протона и нейтрона, т. е. они ответственны за удержание кварков внутри адронов.

Взаимодействие кварков связано с обменом цветом. Поэтому каждый глюон имеет составной цвет, состоящий из цвета и антицвета, например, красный-антисиний. Такой глюон меняет цвет кварка: при испускании он

отнимает у кварка красный цвет и передает ему синий, при поглощении — наоборот.

Все попытки обнаружить хотя бы один свободный кварк с дробным электрическим зарядом или выбить его из адронов оканчивались неудачей. Но, несмотря на это, кварковая гипотеза стала общепринятой. Это связано с тем, что кроме систематики частиц, имеется еще ряд твердо установленных фактов, свидетельствующих в ее пользу. Фактически, в рамках кварковой модели получила объяснение вся совокупность большого числа опытных данных о структуре и свойствах адронов, об их распадах и превращениях. Кварковая гипотеза превратилась в Стандартную модель фундаментальных частиц и взаимодействий. Наиболее прямым экспериментальным подтверждением кварковой модели служат процессы глубоко неупругого рассеяния электронов и других частиц на протонах и процессы с рождением адронных струй.

В масштабах адрона кварки ведут себя как свободные частицы, а при попытке разорвать адрон сила их взаимного притяжения резко возрастает. И все попытки получить кварк-глюонную плазму, «разбив» протоны в ускорителе на встречных пучках, наталкиваются на большие технические трудности. Этот парадоксальный закон квантовой хромодинамики и получил название *асимптотической свободы*, а удержание цветных кварков внутри «бесцветных» адронов именуется *конфайнментом* (от *англ.* confinement — ограничение). Открытие асимптотической свободы объясняло, почему кварки ведут себя как квазисвободные частицы на малых расстояниях (при высоких энергиях) и сильно взаимодействуют на больших расстояниях. Любая попытка «выбить» кварк из адронов приводит к рождению им большого числа частиц, — так называемой, адронной струи. Это явление и называют пленением или конфайнментом кварков, а отсутствие свободных кварков и глюонов — невылетанием цвета.

Таким образом, кварки и глюоны не существуют в свободном состоянии, и тогда из сильно взаимодействующих частиц только адроны существуют в свободном состоянии с соответствующими временами жизни, показанными в таблице 5.4.4. Рассмотрим кратко их свойства.

Адроны обладают сохраняющимися в процессах сильного взаимодействия характеристиками — квантовыми числами: странностью S, очарованием C, прелестью B и истинностью T. По кварковому составу они подразделяются на два класса сильно взаимодействующих частиц (табл. 5.4.1 и 5.4.4): мезоны, состоящие из пары кварк-антикварковых частиц, и барионы, состоящие из комбинации трех кварковых частиц. Адроны характеризуются также *барионным зарядом* (или числом), который для барионов и антибарионов равен 1 и –1 соответственно, а для мезонов равен нулю. Барионное число сохраняется во всех трёх взаимодействиях Стандартной модели.

Сильно взаимодействующие частицы, относительно близкие по своим физическим свойствам, можно разбить на группы, называемые *изотопическими мультиплетами*. В каждом мультиплете, если отвлечься от электро-

магнитных и слабых взаимодействий, частицы одинаковым образом участвуют в сильных взаимодействиях, имеют примерно равные массы и одинаковые характеристики: барионный заряд, спин, четность, странность. По существу, получаем изотопическую независимость сильных взаимодействий. Так, благодаря схожести протона и нейтрона, за исключением электромагнитного взаимодействия, их можно рассматривать как два состояния одной и той же частицы — нуклона. По аналогии с обычным спином каждому зарядовому мультиплету приписывают определенное значение *изоспина*. Отдельным частицам мультиплета приписывают различные значения проекции I_3 на ось z в изотопическом пространстве.

С изотопическим спином связан закон сохранения: при сильных взаимодействиях сохраняется как сам изоспин, так и его проекция I_3 (табл. 5.4.4). При электромагнитных взаимодействиях сохраняется только проекция I_3.

Мезоны — сильно взаимодействующие *нестабильные* частицы, состоящие из одного кварка и одного антикварка. Основные характеристики наиболее легких мезонов и нескольких более тяжелых представлены в таблице 5.4.4. Мезоны квалифицируются по кварковому составу, по электрическому заряду, угловому моменту, четности, времени жизни и другими свойствами. Барионный заряд мезонов $B = 0$, спин всех мезонов равен нулю или целому числу, иначе говоря, они являются *бозонами*.

Мезоны обладают не только слабым и электромагнитным (в том случае, когда они заряжены), но также и сильным взаимодействием, проявляющемся при взаимодействиях их между собой и с барионами. Именно для объяснения сильного взаимодействия Хидэки Юкава в 1935 г. в теоретической работе предсказал, что существуют частицы, переносящие сильное взаимодействие, — мезоны.

Все мезоны нестабильны, однако время жизни мезонов с малой массой обычно больше, чем у более массивных мезонов (см. табл. 5.4.4). Заряженные мезоны имеют тенденцию распадаться, образуя заряженные мюоны и нейтрино, в то время как незаряженные мезоны с подавляющей вероятностью распадаются с образованием фотонов.

К числу самых легких относятся π-мезоны (пионы, π^+, π^-, π^0), которые при обычных условиях отвечают за взаимодействие между нуклонами и ядрами. Эти три мезона образуют изотопический триплет. Заряженные π-мезоны имеют по ядерным меркам относительно большое время жизни и с подавляющей вероятностью имеют следующие каналы распада:

$$\pi^+ \to \mu^+ + \nu_\mu \quad \text{и} \quad \pi^- \to \mu^- + \tilde{\nu}_\mu . \tag{5.4.8}$$

Нейтральный π^0-мезон имеет немного меньшую массу, чем заряженные мезоны, и распадается на два фотона: $\pi^0 \to 2\gamma$.

К наиболее долгоживущим относятся также K-мезоны (каоны, K^+, K^-, K^0 и $\tilde{K}^0$), причем заряженные π^-- и K^--мезоны являются античастицами по отношению к π^+ и K^+. В структуре K-мезонов появляется «странный» кварк s. Странный K^0-мезон распадается на первом этапе на два π-мезона.

Таблица 5.4.4

Адроны

Частица		Состав	Масса, МэВ	Q (e)	B	I	S	I_3	τ (c)
Мезоны	π^0	$u\tilde{u}$, $d\tilde{d}$	135	0	0	0	0	0	$0{,}8\cdot10^{-16}$
	π^{+-}	$u\tilde{s}$	139,6	+1	0	0	0	1	$2{,}5\cdot10^{-8}$
	K^+	$u\tilde{s}$	493,8	+1	0	0	+1	1/2	$1{,}2\cdot10^{-8}$
	K^0	$d\tilde{s}$	497,8	0	0	0	–1	1/2	$5{,}8\cdot10^{-8}$
	η	$u\tilde{u}, d\tilde{d}, s\tilde{s}$	549	0	0	0	0	0	$2{,}4\cdot10^{-19}$
	φ	$s\tilde{s}$	1019	0	0	1	0	0	$\sim 10^{-19}$
	J/ψ	$c\tilde{c}$	3097	0	0	1	0	0	$7{,}2\cdot10^{-21}$
Барионы	p	uud	938,3	+1	+1	1/2	0	1/2	—
	n	udd	939,5	0	+1	1/2	0	1/2	$0{,}93\cdot10^{3}$
	Λ	uds	1117	0	+1	1/2	–1	0	$2{,}5\cdot10^{-10}$
	Σ^+	uus	1189	+1	+1	1/2	–1	1	$0{,}8\cdot10^{-10}$
	Σ^0	uds	1193	0	+1	1/2	–1	1	$\sim 10^{-14}$
	Ξ^0	uss	1315	0	+1	1/2	–2	1/2	$3\cdot10^{-10}$
	Ω^-	sss	1672	–1	+1	3/2	–3	0	$0{,}8\cdot10^{-10}$

Электрический заряд Q (e). Барионное число B. Спин I. Странность S. Изотопический спин I_3. Время жизни τ.

В таблице 5.4.4 представлены характеристики нескольких более тяжелых мезонов, таких как η-мезон, φ-мезон, J/ψ-мезон (*джей-пси-мезон*). Последний J/ψ-мезон состоит из «очарованных» кварков и носит название чармоний. Частицы, которые совпадают по свойствам со своими «античастицами», такие как фотон, π^0-бозон, η-мезон, называются абсолютно нейтральными. Последние частицы не способны к аннигиляции.

Помимо мезонов, получаемых из различных комбинаций кварков, существует множество мезонных резонансов, т. е. возбужденных состояний мезонов со временем жизни $\sim 10^{-23}$ с.

Согласно квантовой хромодинамике известно, что сильное взаимодействие осуществляется посредством глюонов. Тем не менее можно сформулировать так называемую эффективную теорию взаимодействия внутриядерных частиц, в которой переносчиками ядерных сил взаимодействия являются пионы. Силы взаимодействия, переносимые пионами, в частности, ядерные силы, связывающие нуклоны в атомном ядре, можно компактно описать при помощи потенциала Юкавы. Несмотря на то, что эта теория, предложенная Юкавой, верна только в определённом диапазоне энергий, она позволяет проводить в ее рамках упрощённые вычисления и получить наглядные представления как о структуре ядра, так и различных процессах с ядрами.

Барионы — сильно взаимодействующие частицы, состоят из трёх кварков трёх различных цветов, образуя так называемую бесцветную комбинацию (табл. 5.4.4). Подавляющая часть наблюдаемого нами вещества состоит из наиболее легких барионов — нуклонов, которые представлены протоном и нейтроном (p, n) и которые входят в состав стабильных ядра атомов.

Барионы являются фермионами, их спин равен 1/2 или 3/2, т. е. они подчиняются статистике Ферми — Дирака, что определяет их поведение при образовании ядер. В 2015 г. было также доказано существование аналогичных частиц из 5 кварков, названных пентакварками. Каждый барион имеет соответствующую ему античастицу (антибарион), в которой антикварки заменяют кварки этого бариона.

В состав нуклонов входят наиболее легкие кварки. Так, протон состоит из двух верхних кварков и одного нижнего — *uud*, а нейтрон — из одного верхнего и двух нижних — *udd* (см. (5.4.6) и табл. 5.4.3–5.4.4). Сильное взаимодействие зарядонезависимое, т. е. оно одинаковое для протонов и нейтронов. Независимость сильного взаимодействия от электрического заряда частиц позволяет группировать частицы в изотопические мультиплеты.

Помимо легких нуклонов к барионам относятся также многочисленные гипероны — более тяжёлые и нестабильные частицы, содержащие как минимум один «странный» кварк. Такие частицы обычно получают на ускорителях элементарных частиц. Гипероны — нестабильные частицы с массой большей массы нуклонов. Часть гиперонов с их характеристиками представлена в таблице 4.4: лямбда (Λ), сигма ($\Sigma^{\pm}$, Σ^{0}), кси (Ξ^{-}, Ξ^{0}) и омега (Ω^{-}) — гипероны. Помимо барионов, представленных в таблице 4.4, существует также широкий спектр короткоживущих возбуждённых состояний этих барионов.

Барионы участвуют во всех известных элементарных взаимодействиях: сильном, электромагнитном, слабом и гравитационном. За исключением протона все барионы нестабильны (см. табл. 5.4.4). Из основных частиц, составляющих ядра, протон (насколько это сегодня известно), как самый лёгкий из барионов, стабилен как в свободном, так и связанном состояниях. Нейтрон стабилен при нахождении в атомных ядрах. Однако в свободном состоянии нейтрон испытывает бета-распад (5.2.8) с временем жизни, близким к 1000 с. Более тяжёлые барионы распадаются за время от 10^{-23} до 10^{-10} с.

При распаде бариона помимо других частиц обязательно образуется барион. Это следствие *закона сохранения барионного заряда*. Всем барионам приписывается барионный заряд $B = +1$, а антибарионам — барионный заряд $B = -1$, в то время как все остальным частицам соответствует барионный заряд равный $B = 0$. Таким образом, для всех процессов с участием барионов или антибарионов характерно сохранение барионного заряда, аналогично тому, как сохраняется электрический заряд в электромагнтных процессах. Закон сохранения барионного заряда обуславливает стабильность наиболее легкого бариона — протона. В самом деле, этот закон запрещает процесс распада протона (или другого бариона) на позитрон (другой лептон) и несколько нейтрино.

Рождение гиперонов происходит при столкновениях адронов при высоких энергиях, т. е. их рождение связано с сильным взаимодействием. Характерное время для процессов, обусловленных сильным взаимодействием должно быть порядка 10^{-23} с. Однако время жизни гиперонов оказалось существенно больше (см. табл. 4.4). Оказалось, что дело в странности гиперонов. В сильных взаимодействиях странность сохраняется, но за счет слабого взаимодействия происходят распады частиц с нарушением закона сохранения странности, что на много порядков замедляет время их распада и увеличивает время жизни.

Квантовые числа, такие как очарование, прелесть и истинность, присущи немногим, довольно экзотическим мезонам и барионам, которые содержат соответствующие кварки. Здесь отметим только, что эти квантовые числа, которые в чем-то аналогичны странности, сохраняются в сильных и электромагнитных взаимодействиях.

В классе адронов, кроме нуклонов и гиперонов, обнаружено большое число сильно взаимодействующих короткодействующих частиц, которые получили название резонансов. Эти частицы представляют собой резонансные состояния, образованные двумя или большим числом элементарных частиц. Время жизни резонансов составляет ~ 10^{-22}...10^{-23} с. Резонансы с целочисленным спином, являющиеся бозонами, относятся к классу мезонов, а другие резонансы с полуцелым спином — фермионы, относящиеся к классу гиперонов.

Примечание 51. Марри Гелл-Ман, американский физик-теоретик, 1929–201; Нобелевская премия по физике за фундаментальный вклад в физику элементарных частиц (1969).

Джордж Цвейг, американский физик и нейробиолог, 1937.

Лиза Мейтмер, австрийский физик и радиохимик, 1878–1968.

Отто Роберт Фриш, английский физик-ядерщик, 1904–1979.

Стивен Вайнберг, американский физик, 1933–2021; Нобелевская премия по физике (1979) за вклад в объединённую теорию слабых и электромагнитных взаимодействий.

Мухаммад Абдус Салам, пакистанский физик-теоретик, 1926–1996; Нобелевская премия по физике (1979).

Шелдон Ли Глэшоу, американский физик, 1932; Нобелевская премия по физике (1979).

Питер Уэр Хиггс, британский физик-теоретик, 1929; Нобелевская премия по физике (2013) за предсказание бозона Хиггса.

Карло Руббиа, итальянский физик, 1934; Нобелевская премия по физике (1984).

Симон ван дер Меер, нидерландский физик, 1925–2011; Нобелевская премия по физике (1984).

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Абсолютно черное тело *15*
Адроны *235*, *237*, *243*
– мезоны *235*, *248*
– барионы, нуклоны и гипероны *235*, *248*, *249*
Античастицы *236*, *241*, *245*
Аромат кварка *235*, *244*
Атом Бора *69*

Барьер потенциальный *125*
– прямоугольный *126*
– произвольной формы *132*
Бозоны *234*, *239*

Вероятности плотность тока *99*
Взаимодействия фундаментальные
– гравитационное *232*
– слабое *233*
– электромагнитное *234*
– сильное *235*
Волна де Бройля *74*
Волновая функция *98*
– стационарных состояний *96*
– радиальной части в центральном поле *163*

Гамильтониан *103*, *105*
Гамильтониан электрона в магнитном поле *196*
Гипероны *235*, *237*, *250*

Дифракция электронов *79*
Дифракция атомов *84*
Длина волны де Бройля *75*

Закон
– Стефана — Больцмана *18*
– смещения Вина *21*
– Релея — Джинса *23*, *27*
– Бугера — Ламберта *39*
– радиоактивного распада *217*

Излучение
– вынужденное *33*
– равновесное *11*

– спонтанное *32*
– тепловое *11*
– тормозное рентгеновское *55*
Инверсная заселенность *42*
Интерпретация волн де Бройля *87–88*

Квазиклассическое приближение *133*
Квантования уровней энергии
– одномерная яма *115*
– одномерная яма с конечными стенками *119*
– атом водорода *170*
Квантовая хромодинамика *231*, *235*, *245*
Квантовые состояния в центральном поле *159*
Квантовые числа электронов в атоме *181*
Кварки *235*, *243–244*
Конфигурация электронов *182*
Коэффициенты Эйнштейна *34*

Лазеры *42*
Лептоны *240*
– электроны и позитроны *240*
– мюон и таон *240*
– нейтрино *241*

Мезоны *235*, *246–247*
Момент импульса *150*, *152–153*
– многоэлектронного атома *189*
– орбитальный *150*
– полный момент импульса *188*
– сложение двух моментов импульса *184*
– спиновый *179*

Нейтрино *233*, *240*
Нейтрон *211*
Нормировка собственных функций *110*

Операторы *103*
– квадрата момента импульса *155*
– коммутирующие *106*
– момента импульса *150*
– проекции момента импульса *150*
– самосопряженные (эрмитовы) *108*
– собственные функции и собственные значения *104*
– средние значения *113*

Опыт
– Дэвиссона и Джермера *80*
– Резерфорда *65–66*
– Томсона и Тартаковского *83*
– Франка — Герца *72*
Осциллятор
– классический *136*
– квантовый *137*

Переносчики взаимодействий *237*
– гравитоны *233, 239*
– фотоны *46–47, 234, 238*
– $W^{\pm}$, Z^0 — бозоны *234, 238*
– глюоны *235, 239*
– бозон Хиггса *239*
Правило отбора оптических переходов
– для полного момента импульса *195*
– для чисел *L* и *S* и их проекций *196*
– для одного электрона *196*
Правило Хунда *192*
Приближение квазиклассическое *133*
Принцип Паули *182*
Протон *211*

Радиоактивность
– α-распад *218*
– β-распад *219*
– γ-излучение *220*
– спонтанное деление ядер *221*
Распределение электронов в атоме *182*

Скорость волн де Бройля
– групповая *77*
– фазовая *76*
Соотношения неопределенностей *89*
Спектральная плотность энергии излучения *12*
Спектры
– оптические спектры атомов *196*
– собственных значений оператора *104*
– собственных значений оператора квадрата МИ *157*
– энергий атома водорода *68–69*
Спин электрона *176*
Стандартная модель *238, 240*

Теория
– Релея — Джинса *26*
– Бора *69–70*
Термоядерный синтез *228*
Термы атомов *189*
Токамак *230*

Уравнение
– Шредингера *94*
– Шредингера стационарное *97*
– неразрывности *101*
– для радиальной части в центрально поле *149*
– для угловой части в центральном поле *149*

Фермионы *234, 248*
Формула
– Бальмера *68*
– Планка *29, 37*
Фотоны *46*
Фотоэффект *48*
Фундаментальные постоянные *233*
Функция
– волновая *96*
– полиномы Эрмита *141*
– радиальная атома водорода *170*
– сферические или шаровые функции *158*

Частица в одномерной потенциальной яме *114*
Четность состояний *120*

Элементарные частицы *236, 237*
Энергии
– уровней атома водорода *71, 170*
– одномерного осциллятора *141*
Эффект
– Комптона *58*
– туннельный *130*
– Зеемана простой *198*
– Зеемана сложный *201*
– Штарка *206*
Эффективное сечение ядерных процессов *223*

Ядерные модели *215*
Ядерные силы *214*
Ядро атома *211*

Вадим Константинович ИВАНОВ

ФИЗИКА.
ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ

Учебное пособие

Зав. редакцией физико-математической
литературы *О. Е. Гайнутдинова*
Ответственный редактор *Н. С. Захарова*
Корректор *Е. А. Дмитриева*
Выпускающий *Е. С. Шумская*

ЛР № 065466 от 21.10.97
Гигиенический сертификат 78.01.10.953.П.1028 от 14.04.2016 г.,
выдан ЦГСЭН в СПб

Издательство «ЛАНЬ»
lan@lanbook.ru; www.lanbook.com
196105, Санкт-Петербург, пр-кт Ю. Гагарина, д. 1, лит. А.
Тел./факс: (812) 336-25-09, 412-92-72.
Бесплатный звонок по России: 8-800-700-40-71

Подписано в печать 10.12.24.
Бумага офсетная. Гарнитура Школьная. Формат 70×100 1/16.
Печать офсетная/цифровая. Усл. п. л. 20,80. Тираж 30 экз.

Заказ № 1373-24.

Отпечатано в полном соответствии
с качеством предоставленного оригинал-макета
в АО «Т8 Издательские Технологии».
109316, г. Москва, Волгоградский пр-кт, д. 42, к. 5.