

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»

А. А. КУЗНЕЦОВ

Ф И З И К А

Основные понятия квантовой оптики
и атомной физики. Основы квантовой
механики, физики твердого тела,
атомного ядра и элементарных частиц

Учебное пособие



Владимир 2017

УДК 53
ББК 22.3
К89

Рецензенты:

Доктор физико-математических наук
профессор кафедры инфокоммуникационных технологий
Южно-Уральского государственного университета
В. И. Тамбовцев

Доктор физико-математических наук
профессор Владимирского государственного университета
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых
В. Г. Прокошев

Доктор технических наук
профессор Владимирского государственного университета
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых
А. Г. Самойлов

Печатается по решению редакционно-издательского совета ВлГУ

Кузнецов, А. А.
К89 **ФИЗИКА. Основные понятия квантовой оптики и атомной физики. Основы квантовой механики, физики твердого тела, атомного ядра и элементарных частиц : учеб. пособие / А. А. Кузнецов ; Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых. – Владимир : Изд-во ВлГУ, 2017. – 99 с. – ISBN 978-5-9984-0767-3.**

Подготовлено в соответствии с программой курса «Общая физика» на основе лекций по физике, читаемых автором в третьем семестре обучения студентам Института информационных технологий и радиоэлектроники ВлГУ. Включает в себя материалы последних частей полного курса общей физики.

Предназначено для студентов первого и второго курсов очной формы обучения по направлениям подготовки: 13.03.02 – Электроэнергетика и электротехника, 12.03.01 – Приборостроение, 11.03.01 – Радиотехника, 12.03.04 – Биотехнические системы и технологии, 11.03.03 – Конструирование и технология электронных систем, 11.03.02 – Инфокоммуникационные технологии и системы связи.

Рекомендовано для формирования профессиональных компетенций в соответствии с ФГОС ВО.

Ил. 52. Табл. 1. Библиогр.: 8 назв.

УДК 53
ББК 22.3

ISBN 978-5-9984-0767-3

© ВлГУ, 2017

Предисловие

Принято считать, что единственно возможный алгоритм формирования научной теории следующий: постановка задачи, эксперимент, анализ данных с разрешением поставленных вопросов и далее итоговый результат в форме ясной физической идеи. При становлении квантовой теории все было ровно наоборот: построенные на смутных догадках утверждения ученых подтверждались позже. Результаты возникали раньше, чем становился понятным их смысл. Так, Планк применил квантование энергии к осциллятору, Никольсон – к атому, Эйнштейн – к излучению и упругим колебаниям. Трудность была в том, чтобы решиться на отказ от равенства частоты излучения частоте обращения электрона на орбите. Это сделал Нильс Бор в созданной им теории атома.

Нильс Бор был философом квантовой физики, т. е. обладал редким сочетанием глубины мысли, силы убеждения и душевной чистоты. Конечно, физика немислима без математических понятий и логики, но и не сводится к ним. Она развивается не на основе формул, а на их интерпретации – понимании, питающем физическую интуицию в поиске истины. Физическое и математическое описания дополнительные: первое требует пренебрежения деталями, уводя от математической точности; второе задает точность, затрудняя ясное понимание явления. Нильс Бор полагал, что законченное физическое описание предшествует математической формулировке и дополнительным понятием истины является ясность, определяющая красоту теории. Правильность такого подхода подтверждается словами Ф. М. Достоевского: «Мир спасёт красота».

Главное открытие квантовой механики – вероятностный характер законов микромира. Сформулированное Бором вероятностное толкование волновой функции было подготовлено работами Бора (1923 – 1924 гг.), где идея вероятности применялась к электронным переходам. Эта идея, в свою очередь, пришла из работы Эйнштейна (1916 г.), где впервые появилась мысль о вероятностном описании микрообъектов введением вероятности спонтанного и индуцированного переходов. Предсказания квантовой механики дают лишь вероятность того или иного результата.

В учебном пособии представлен сложный и необычный ход идей и состав экспериментов, которые привели к созданию квантовой физики.

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ КВАНТОВОЙ ОПТИКИ И АТОМНОЙ ФИЗИКИ

1.1. Тепловое излучение. Квантовая гипотеза Планка

Характеристики теплового излучения. Если на тело падает поток излучения Φ_0 (рис. 1), то часть потока $\Phi_{\text{отр}}$ отражается от поверхности тела: от гладкой поверхности зеркально, а от матовой – диффузно во все стороны; часть потока $\Phi_{\text{прох}}$ пройдет насквозь; часть потока $\Phi_{\text{погл}}$ будет поглощаться частицами тела. Общий баланс энергетических потоков

$$\Phi_0 = \Phi_{\text{отр}} + \Phi_{\text{погл}} + \Phi_{\text{прох}}, \text{ или } 1 = \Phi_{\text{отр}}/\Phi_0 + \Phi_{\text{погл}}/\Phi_0 + \Phi_{\text{прох}}/\Phi_0.$$

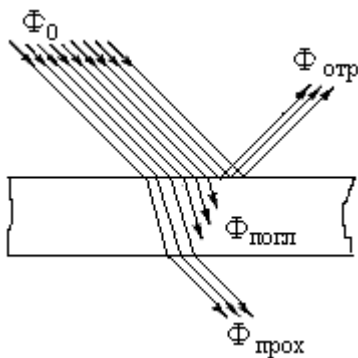


Рис. 1

Слагаемые в формах безразмерных коэффициентов отражения ρ , поглощения a и прозрачности D связаны соотношением

$$1 = \rho + a + D.$$

Поглощаемый поток излучения $\Phi_{\text{погл}}$ переходит в энергию их внутренних хаотических тепловых движений, и далее – в энергию испускаемого электромагнитного излучения. *Свечение тел при их нагревании называется тепловым излучением.*

Все остальные виды свечения, возбуждаемые за счет любого вида энергии, кроме внутренней (тепловой), объединены под общим названием «люминесценция».

Интенсивность теплового излучения характеризуется потоком энергии, а поток энергии, испускаемый единицей поверхности излучающего тела по всем направлениям, называют его энергетической светимостью. Энергетическая светимость R_T , Вт/м² является функцией температуры T , характеризует энергию электромагнитных волн разной длины ($0 < \lambda < \infty$). Энергия электромагнитных волн, испускаемая единицей поверхности излучающего тела за единицу времени, пропорциональна величине выделенного интервала длин волн (от λ до

$$\lambda + d\lambda): dR_T = r_{\lambda,T} d\lambda. \text{ Тогда для всех длин волн: } R_T = \int dR_T = \int_0^{\infty} r_{\lambda,T} d\lambda.$$

На спектральной характеристике теплового излучения $r_{\lambda,T}$ при температуре T (рис. 2) плотно заштрихованная полоска площадью $r_{\lambda,T}d\lambda$ представляет энергию dR_T , излучаемую в интервале длин волн $d\lambda$. Энергетическая светимость R_T представлена всей заштрихованной площадью. С ростом температуры увеличивается интенсивность теплового движения частиц тела и возрастает энергия, излучаемая телом с электромагнитными волнами любых λ . Поэтому при $T' > T$ вся спектральная характеристика теплового излучения приподнимается (см. рис. 2, штрих). При этом растет и площадь под кривой $r_{\lambda,T}$, т. е. энергетическая светимость тела R_T . При абсолютном нуле тепловое движение отсутствует (см. $r_{\lambda,0} \equiv 0$), и тело не может далее уменьшать энергию тепловым излучением.

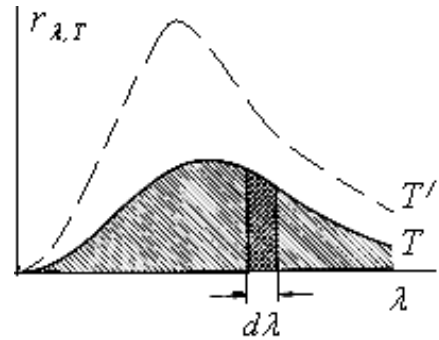


Рис. 2

Каждое тело при данной температуре характеризуется своей кривой испускательной способности $r_{\lambda,T}$ и значением энергетической светимости R_T . Жидкости и твердые тела дают сплошной спектр испускания.

Абсолютно черное тело. Равновесное излучение. Объект, который поглощает, но не отражает свет ($a = 1, \rho = 0$), представляют полостью в непроницаемых нагретых стенках с одним малым отверстием. Луч, падающий на отверстие, попадает внутрь полости и испытывает многократное отражение от стенок полости. При каждом акте отражения луча происходит частичное поглощение его энергии стенками. После многократного отражения интенсивность выходящего обратного луча практически равна нулю. Такое отверстие практически полностью поглощает все падающие на него лучи и представляется абсолютно черным телом.

Нагретые до температуры T стенки полости испускают электромагнитное излучение. В итоге многократных испусканий и поглощений электромагнитного излучения стенками полость наполнится волнами разной длины, поляризации и интенсивности, и в ней установится равновесие между испусканием и поглощением, которое фиксируется «равновесным» излучением из малого отверстия (рис. 3).



Рис. 3

Закон Кирхгофа (1859 г.): отношение испускательной и поглощательной способности для любых тел с одинаковой температурой T и для одной и той же длины волны λ одинаково и не зависит от природы этих тел. Это отношение является универсальной функцией длины волны и температуры и равно испускательной способности $r_{\lambda,T}^*$ абсолютно черного тела. При тепловом равновесии отношение излучающей способности тела к поглощающей есть универсальная функция $K(\nu, T)$ («функция Кирхгофа») от частоты и температуры. А поскольку для абсолютно черного тела $a = 1$, а для других (серых) тел

$$a_{\lambda,T} < 1, \text{ то } K(\nu, T) = \frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} = \frac{r_{\lambda,T}^*}{1} = R^*, \text{ и излучение, которое тело силь-}$$

нее поглощает, сильнее им испускается. Тепловое излучение абсолютно черного тела во всех частях спектра интенсивнее, чем серого тела той же температуры $r_{\lambda,T} = a_{\lambda,T} r_{\lambda,T}^* < R^*$.

Закон Стефана – Больцмана (1878 г., 1884 г.): энергетическая светимость абсолютно черного тела пропорциональна четвертой степени его абсолютной температуры: $R_T^* = \sigma T^4$.

Распределение энергии в спектре абсолютно черного тела. Формула Рэля – Джинса. Михельсон (1887 г.) применил статистический подход к коллективу элементарных излучателей, которым является нагретое тело. Позже более строго Рэлеем определялось число независимых мод стоячих электромагнитных волн в замкнутой полости и в данном интервале $d\lambda$. Согласно закону о равномерном распре-

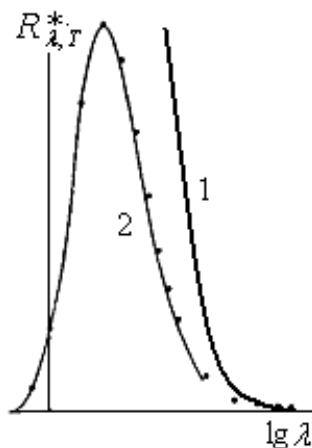


Рис. 4

делении энергии по степеням свободы каждой независимой волне (моде) приписывалась степень свободы и средняя энергия $kT/2$. В результате такого подхода Рэлей предложил форму распределения энергии в спектре абсолютно черного тела в виде

$$R_{\lambda,T}^* = \frac{2\pi ckT}{\lambda^4}. \quad (1)$$

По кривой Рэля зависимости энергетической светимости абсолютно черного тела от длины волны (рис. 4, линия 1) видно, что применение к равновесному излучению законов классической электродинамики и статистики дает правильное значение $R_{\lambda,T}^*$ в области больших длин волн. Однако, интегрируя выражение (1) по λ , получаем $R_{\lambda,T}^* \rightarrow \infty$.

Энергетическая светимость абсолютно черного тела оказывается бесконечно большой. Этот абсурдный результат, названный «ультрафиолетовой катастрофой», указывал на наличие в теории Рэля дефектов. Для коротких волн в ультрафиолетовой области и далее энергетическая светимость абсолютно черного тела не возрастает до бесконечности (см. рис. 4 по кривой 1), а напротив, убывает до нуля.

Формула Вина. Закон смещения Вина. Вильгельм Вин (1896 г.) предположил, что каждая мода колебаний является носителем энергии, но не все моды данной частоты возбуждены. Относительное число возбужденных мод определяется распределением Больцмана $\Delta N/N = e^{-E/(kT)}$. Предположив, что энергия каждой моды с частотой ω пропорциональна частоте излучения ($\omega = 2\pi c/\lambda$), Вин получил

$$R_{\lambda,T}^* = \frac{\alpha}{\lambda^5} e^{-\frac{\beta}{\lambda T}}. \quad (2)$$

Откуда следовало, что максимум лучеиспускательной способности (при $dR_{\lambda,T}^*/d\lambda = 0$) определен соотношением $\lambda_{\text{макс}} \cdot T = b$ (закон смещения Вина): с ростом температуры максимум лучеиспускательной способности абсолютно черного тела смещается в сторону коротких длин волн (см. рис. 4, линия 2). Постоянная закона смещения Вина $b = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$. Формула (2) приводила к совпадению с опытом в области коротких волн, но давала уменьшенные значения в области больших λ (см. рис. 4), что опять указывало на дефекты теории.

Квантовая гипотеза и формула Планка. М. Планк в 1900 г. показал, что правильное выражение $R_{\lambda,T}^*$ можно получить, предположив, что *излучение испускается телами не непрерывно, а в виде отдельных порций – квантов с энергией, пропорциональной их частоте: $\varepsilon = h\nu = hc/\lambda$, или $\varepsilon = \hbar\omega$, где $\omega = 2\pi\nu$, $\hbar = h/2\pi$.*

Формула Планка для лучеиспускательной способности абсолютно черного тела

$$R_{\lambda,T}^* = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} = \frac{\hbar\omega^2}{\lambda^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (3)$$

В предельном случае длинных и коротких волн формула Планка переходит в формулы Рэля (1) и Вина (2) соответственно. Сопоставляя формулу (3) с опытом, Планк определил значение постоянной $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$ ($\hbar = h/2\pi = 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$). Величины размерности постоянной Планка ($[h] = \text{Дж} \cdot \text{с}$) называют «действием», а постоянную Планка – квантом действия.

1.2. Квантовые свойства света. Фотоны

Внешний фотоэлектрический эффект и его законы. Фотоны.

Планк полагал, то что излучение отдается излучающими системами порциями энергии $h\nu$ и есть свойство излучающих систем, но само излучение может иметь любую энергию и поглощаться в любых количествах непрерывно. Эйнштейн приписал корпускулярные свойства самому излучению, предложив рассматривать его как поток материальных частиц, «квантов излучения», или «фотонов», с энергией $\varepsilon = h\nu$. Эту идею он применил к формирующейся тогда теории фотоэффекта.

Фотоэффект был обнаружен Герцем в 1887 г. при исследовании распространения электромагнитных волн. В 1888 г. А. Г. Столетов установил основные закономерности: явление вызывается преимущественно ультрафиолетовыми лучами; при освещении металлическая пластина теряет только отрицательные заряды с организацией потока отрицательно заряженных частиц; разряжающее действие лучей пропорционально мощности падающего излучения, величина электрического тока пропорциональна интенсивности излучения; момент освещения и начало разряда практически одновременны (фотоэффект безынерционен).

По идее Эйнштейна, монохроматическое излучение испускается и поглощается порциями энергии $h\nu$ и состоит всегда из целого числа фотонов. Увеличение интенсивности излучения приводит к увеличению числа падающих на вещество фотонов. При поглощении излучения частоты ν веществом каждый из электронов может поглотить один фотон, приобретая при этом энергию $h\nu$. Если энергии достаточно, чтобы электрон совершил работу выхода A ($h\nu \geq A$), будет наблюдаться фотоэффект с выходом с поверхности металла электрона с кинетической энергией $m v_{\max}^2 / 2 = h\nu - A$; при $h\nu < A$ фотоэффект не наблюдается.

Под корпускулярными свойствами фотона понимают его неделимость при любых взаимодействиях. Волна, отвечающая одному фотону, не может разделиться. Фотон как целое проходит щели дифракционной решетки, интерферируя сам с собой. Так же, как целое, он поглощается фотопластинкой, оставляя на ней след в виде черной точки, расположенной в том месте, которое указывается волновой теорией. Фотоны в разных точках пластинки создают полную картину интерференции.

Эффект Комптона и его теория. В классическом представлении энергия приходящего поля тратится на раскачивание электрона и отдается с испускаемым им излучением. Для достаточно длинных волн гармонически колеблющийся с частотой ν_0 электрон будет испускать во все стороны (рассеивать) излучение с частотой, которой он сам обладает, т. е. с частотой первичного падающего излучения ν_0 . Частота рассеянного излучения совпадает с частотой падающего ν_0 .

В области коротких волн результаты опытов А. Комптона (1923 г.) противоречили этому представлению: при рассеянии рентгеновского излучения электронами вещества частота рассеянного излучения менялась в зависимости от угла рассеяния. В рассеянных лучах с излучением первоначальной длины волны λ_0 содержались лучи большей длины волны λ .

Представим, что рассеяние света состоит в поглощении электроном падающего на него фотона и мгновенном испускании другого фотона. Энергия падающего фотона $h\nu_0$, энергия испущенного фотона $h\nu$, где ν – частота рассеянного излучения. При взаимодействии рентгеновского фотона с электроном атома электрон можно рассматривать как слабо связанный с атомом и даже свободный, так как энергия рентгеновского фотона во много раз больше энергии связи внешних электронов в атоме (1 – 10 эВ). При поглощении жестких рентгеновских лучей электрон приобретает скорость v , близкую к скорости света c . Поглотив фотон, электрон обретает его энергию и уходит за пределы атома. Поэтому энергию электрона надо рассчитывать по формулам теории относительности: полная энергия неподвижного электрона равна $m_{0e}c^2$, а движущегося $m_e c^2$, где m_{0e} – масса покоя, а

$$m_e = \frac{m_{0e}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \text{ Исходя из закона сохранения энергии при элементар-}$$

ном акте рассеяния сумма энергий падающего фотона и неподвижного электрона до рассеяния должна равняться сумме энергий рассеянного фотона и движущегося электрона:

$$h\nu_0 + m_{0e}c^2 = h\nu + m_e c^2. \quad (4)$$

Импульс фотона численно равен $p_{\text{ф}0} = m_{\text{ф}0}c = h\nu_0/c$ и направлен в сторону распространения (рис. 5), где масса падающего фотона $m_{\text{ф}0} = h\nu_0/c^2$. После взаимодействия рассеянный фотон и электрон раз-

летаются в разные стороны так, что импульсы \vec{p}_ϕ и $\vec{p}_{эл} = m_e \vec{v}$ составляют с первоначальным направлением распространения углы, соответственно равные φ и θ . Закон сохранения суммарного вектора импульса в элементарном акте рассеяния $\vec{p}_{\phi 0} = \vec{p}_\phi + \vec{p}_{эл}$.

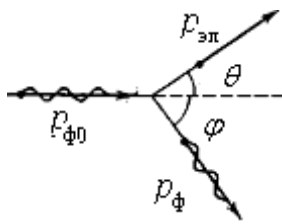


Рис. 5

Проецируя обе части этого равенства на направление первоначального распространения и направление, перпендикулярное к нему, получим два уравнения:

$$\frac{h\nu_0}{c} = \frac{h\nu}{c} \cos \varphi + m_e v \cos \theta; \quad (5)$$

$$0 = \frac{h\nu}{c} \sin \varphi - m_e v \sin \theta. \quad (6)$$

Из трех уравнений (4 – 6) можно определить частоту ν излучения, рассеянного под заданным углом φ :

$$\frac{1}{\nu} = \frac{1}{\nu_0} + \frac{h}{m_0 c^2} 2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}. \quad (7)$$

Переходя к соответствующим длинам волн ($\lambda_0 = c/\nu_0$ и $\lambda = c/\nu$) получаем

$$\lambda = \lambda_0 + \frac{h}{m_0 c} 2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}. \quad (8)$$

Из уравнений (7 – 8) видно, что частота рассеянного излучения меньше частоты исходного, а длина волны – больше. Части энергии и импульса исходного фотона получил электрон отдачи.

Увеличение длины волны излучения при рассеянии

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c} 2 \sin^2 \frac{\varphi}{2} = 2\Lambda \sin^2 \frac{\varphi}{2} = \Lambda(1 - \cos \varphi). \quad (9)$$

Для рассеяния электронами комптоновская длина волны электрона $\Lambda = \frac{h}{m_0 c} = 0,0243 \text{ \AA}$. При прямом отражении фотона электроном ($\varphi = \pi$) величина $\Delta\lambda$ максимальна: $\Delta\lambda_{\max} = 2\Lambda = 0,0486 \text{ \AA}$.

Из (9) следует, что *изменение длины волны излучения $\Delta\lambda$ при рассеянии свободным электроном не зависит от длины волны λ_0 падающего излучения*. Возрастание длины волны определяется только массой рассеивающих частиц m_0 и углом рассеяния φ . Для радиодиа-

пазона $\lambda_0 > 1$ см и $\Delta\lambda/\lambda_0 < 10^{-10}$, т. е. пренебрежимо мало. Для рентгеновских лучей с $\lambda_0 = 1 \text{ \AA}$ и это изменение – около 5 %.

Опыты Комптона подтвердили правильность формулы (9), полученной на основании квантовой теории Эйнштейна, и кванты перестали быть гипотетическими частицами.

1.3. Ядерная модель атома

Модель атома Резерфорда. К началу XX в. движение неделимых частиц (атомов) понималось как механическое перемещение. Изменение химического состава веществ трактовалось взаимным замещением при переходах атомов от одних молекулярных соединений к другим. И вот при электрическом разряде в газе были обнаружены отрицательно заряженные частицы, названные электронами. Установили, что электроны покидают атомы, которые при этом становятся положительно заряженными ионами. Так в 1909 г. опытно было доказано, что α -частицы – дважды ионизованные атомы гелия. Стало очевидным, что нейтральные атомы – это системы электрически заряженных частиц и что во всех атомах имеются «одинаковые» электроны. На наличие структуры атомов указывали и линейчатые спектры Бальмера и Лаймана (см. далее): атомы способны испускать и поглощать электромагнитные волны характерных для каждого элемента частот. Измерения удельного заряда (q/m) электронов и ионов показали, что масса электрона в тысячи раз меньше массы атомов, и положительный заряд оказался связанным с основной массой атома. Но так как его распределение внутри атома не было известно, то Д. Д. Томсон (1910 г.) предложил первую «модель» атома как сферу с равномерно распределенной положительно заряженной материей, в которой движутся отрицательно заряженные электроны.

Гейгер и Марсден исследовали рассеяние α -частиц в металлической фольге Ф (золотой, платиновой, медной, серебряной) (рис. 6) толщиной 4 мкм. Преимущество α -частиц как

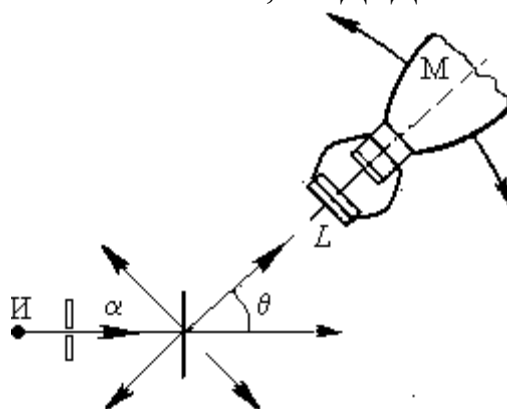


Рис. 6

инструмента в исследовании структуры атома – в их высокой монохроматичности (все α -частицы, вылетающие из атомов данного сорта,

имеют практически одну и ту же скорость) и большой массе (больше массы электрона в 7296 раз). Поэтому по их рассеянию в веществе можно судить о распределении положительно заряженной материи в атоме.

Тонкий пучок α -частиц от источника И после прохождения фольги рассеивался. Рассеянные α -частицы регистрировались по вспышкам света (сцинтилляциям) на малом экране, покрытом флуоресцирующим веществом L и укрепленном на объективе микроскопа M . Микроскоп поворачивался для определения количества частиц, рассеянных под разными углами к направлению первичного пучка. Почти все α -частицы отклонялись после прохождения фольги на небольшой угол $\theta = 2 - 3^\circ$. На угол, превышающий 90° , рассеивалась примерно одна из $2 \cdot 10^4$ частиц, но некоторые отклонялись и на 180° .

Если отклонение α -частицы объяснять электрическим отталкиванием от положительного заряда по закону Кулона, то это означало бы, что положительно заряженные массы в атоме занимают ничтожно малый объем. Резерфорд предположил, что отклонение на большой угол происходит в результате однократного взаимодействия α -частицы с положительным зарядом, связанным с большой массой в объеме, очень малом по сравнению с объемом атома. На этом основании он предложил «ядерную» модель атома, по которой в центре находится положительно заряженное «ядро» с массой, почти равной массе атома. Вокруг ядра движутся легкие электроны. Так как кулоновские силы убывают с расстоянием по тому же закону, что и силы тяготения (как $1/r^2$), то атом подобен солнечной планетарной системе. Так как атомы нейтральны, то при заряде ядра Z/e вокруг ядра должно двигаться Z электронов.

Планетарная модель Резерфорда также оказалась неудовлетворительной. Так как любому значению радиуса орбиты r соответствует определенная скорость v и энергия E электрона на данной орбите, то при бесчисленном множестве возможных орбит на различных расстояниях от ядра величины r , v и E могут меняться непрерывно. Тогда при орбитальных переходах может испускаться любая порция энергии, и спектры атомов должны быть не линейчатыми, а непрерывными.

Механически устойчивая модель Резерфорда оказалась неустойчивой и с точки зрения законов классической электродинамики. Электроны, движущиеся по круговым орбитам, обладают нормальным уско-

рением. При радиусе орбиты $r = 10^{-10}$ м ускорение составит 10^{22} м/с². При таких ускорениях электроны должны интенсивно излучать электромагнитные волны, быстро терять энергию, приближаясь к ядру. Такой атом не может существовать более 1 мкс.

Первая успешная попытка разобраться в закономерных особенностях устойчивых атомов была сделана датским физиком Нильсом Бором.

Постулаты Бора. Бор применил квантовую теорию Эйнштейна для атома, предположив, что частота излучаемого света определяется соотношением $h\nu = E_2 - E_1$, где E_2 и E_1 – два возможных значения энергии атома. Он исходил из опытного факта: атомы как элементарные излучатели отдают излучение в виде порций $\varepsilon = h\nu$. Набор возможных значений ε_i (или ν_i) образует не непрерывную последовательность, но дискретный ряд. Отсюда следовал вывод, что энергия атомов не может меняться непрерывно. Возможные состояния атома образуют дискретную последовательность, и энергии атома в этих состояниях образуют дискретный ряд $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$. Находясь в одном из таких «разрешенных» состояний, атом не испускает и не поглощает излучения, и его энергия не меняется. Изменение состояния (энергии) атома может происходить лишь в виде скачка от одного состояния к другому. Бор постулировал связь между возможными значениями энергии атома и частотами испускаемого (или поглощаемого) им излучения: $h\nu_{ik} = E_k - E_i$.

На разрешенных круговых орбитах атома водорода момент импульса электрона mvr должен быть равен целому числу $\hbar = h/2\pi$, что позволило Бору записать второй постулат в форме условия для разрешенных состояний атома применительно к модели Резерфорда:

$$mvr = n\hbar \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (10)$$

Постулаты Бора оказались несовместимыми с классической физикой. Классическая механика разрешает непрерывную последовательность орбит. Исключение большинства из них с сохранением только тех, которые удовлетворяют условию (10), не может быть ею объяснено. Возможность устойчивого движения заряженной corpusкулы по круговой орбите (т. е. с ускорением, но без излучения) исключается законами электродинамики. Необходимо было подтверждение положения о дискретности значений энергии атомов.

Опыт Франка – Герца. При абсолютно упругих столкновениях кинетическая энергия и суммарный импульс сталкивающихся частиц остаются неизменными. Но столкновение атомов с другими частицами, в том числе электронами, может быть и неупругим. Так, при столкновении электрона с атомом внутренняя энергия атома может увеличиться за счет кинетической энергии сталкивающихся частиц. Относительная скорость частиц после столкновения станет меньше, чем до него. Такие удары называют ударами первого рода. Может иметь место и обратное явление, если внутренняя энергия атома до удара не является минимальной (атом возбужден). При столкновении с электроном такой атом может не только сохранить или увеличить, но и уменьшить внутреннюю энергию. Относительная скорость и суммарная кинетическая энергия частиц после удара будут больше, чем до удара, но внутренняя энергия атома уменьшится. Такие удары называют ударами второго рода.

Представим одноатомный газ, атомы которого могут находиться на энергетических уровнях: E_1 (наинизший), E_2 , E_3 , Энергия теплового движения мала и недостаточна для возбуждения атомов: $3kT/2 \ll E_2 - E_1$, так что атомы находятся в невозбужденном состоянии с энергией E_1 .

В газ впускается пучок электронов, каждый из которых обладает энергией ε , одинаковой для всех электронов пучка. Если $\varepsilon < E_2 - E_1$, то при столкновениях электронов с атомами удары как первого, так и второго рода исключаются, так как при ударе электрона атом не может менять своего состояния. Масса атома превышает массу электрона в тысячи раз, поэтому при упругом соударении электрона с атомом скорость атома практически не меняется и кинетическая энергия электрона также остается неизменной. Меняется лишь направление движения электрона. Таким образом, если энергетический спектр атомов дискретен, то при энергии электронов $\varepsilon < E_2 - E_1$ соударения электронов с атомами могут изменить лишь направление движения электронов, но не энергию.

Как только кинетическая энергия электронов ε превысит $E_2 - E_1$ становятся возможными удары первого рода. При этом кинетическая энергия атома практически не изменится, а внутренняя возрастет на величину $E_2 - E_1$. Энергия электрона ε уменьшится на эту же величину и станет $\varepsilon' = \varepsilon - (E_2 - E_1)$.

Не всякий удар должен быть ударом первого рода. Некоторые электроны при столкновениях с атомами рассеются упруго, сохранив свою энергию, но часть их испытает неупругое столкновение. Если $\varepsilon < 2(E_2 - E_1)$, дальнейшая потеря энергии электронами невозможна. Если $\varepsilon > 2(E_2 - E_1)$, то электрон может испытать два неупругих соударения и т. д.

Дискретность значений энергии атома была доказана прямыми опытами Франка и Герца. На рис. 7 показана схема опыта. Электроны, эмитируемые раскаленным катодом K , ускоряются между K и сеткой C_1 . В пространстве между C_1 и C_2 электрическое поле отсутствует и электроны движутся, испытывая соударения с атомами ртути, парами которой (при давлении 1 мм рт. ст.) наполнен объем. Часть электронов диффундирует сквозь сетку C_2 и, преодолевая малый задерживающий потенциал (0,5 В), попадает на пластинку P , соединенную через гальванометр G с землей.

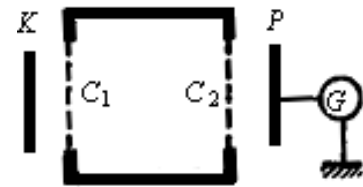


Рис. 7

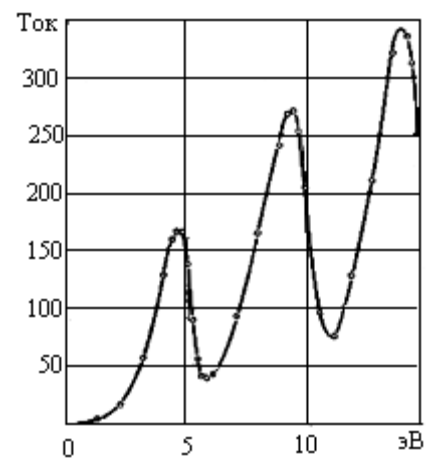


Рис. 8

На рис. 8 дан график зависимости тока G как функции начальной энергии электронов ε , выраженной в электрон-вольтах (эВ). Пики кривой тока отвечают энергии электронов, кратной 4,9 эВ, что составляет энергию возбуждения ($E_2 - E_1$) атомов ртути. Далее следует «провал» — электроны отдают порцию энергии атомам ртути и, теряя энергию, не могут преодолеть задерживающий потенциал на сетке C_2 .

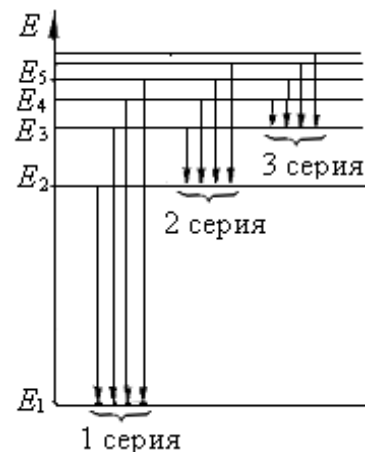


Рис. 9

Атом водорода. Рассмотрим график энергетических уровней электронов в атоме водорода (рис. 9). Частоты излучения, возникающего при переходе электрона на основной, невозбужденный уровень E_1 с других, более высоких, образуют первую серию частот в спектре испускания. Переходы на следующий уровень E_2 порождают вторую серию, на E_3 — третью серию и т. д. Отметим у частоты ν пер-

вым индексом n номер серии, вторым k – номер уровня, с которого совершил переход электрон при испускании фотона. В общем виде $h\nu_{n,k} = E_k - E_n$.

Для частоты первой серии, возникшей при переходе $E_5 \rightarrow E_1$, имеем $h\nu_{1,5} = E_5 - E_1$; для фотона третьей серии перехода $E_6 \rightarrow E_3$ имеем $h\nu_{3,6} = E_6 - E_3$ и т. д. Значения частот первой серии:
$$\nu_{1,2} = \frac{E_2 - E_1}{h}, \quad \nu_{1,3} = \frac{E_3 - E_1}{h}, \dots, \quad \nu_{1,k} = \frac{E_k - E_1}{h}.$$

Возьмем разность двух частот этого ряда, вычтя из большей меньшую. Тогда при $k > n$ имеем $\nu_{1,k} - \nu_{1,n} = \frac{E_k - E_1}{h} - \frac{E_n - E_1}{h} = \frac{E_k - E_n}{h} = \nu_{n,k}$.

Разность двух частот первой серии дает частоту одной из последующих серий. Легко видеть, что, вычитая из ν_{12} последовательно ν_{13} , ν_{14} , ..., получаем частоты второй серии; вычитая из ν_{13} частоты ν_{14} , ν_{16} , ..., получаем третью серию и т. д. Например, разности частот третьей серии дадут частоты последующих: четвертой, пятой, других серий и т. д. (комбинационный принцип Ритца).

В атоме водорода возможны переходы с орбиты 4 на 1, а также «по ступенькам»: $4 \rightarrow 2$, затем $2 \rightarrow 1$; $4 \rightarrow 3$, $3 \rightarrow 1$ и, наконец, $4 \rightarrow 3$, $3 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$. Разным вариантам переходов отвечают определенные фотоны, и в спектрах они наблюдаются. Однако, интенсивность их разная, т. е. некоторых фотонов испускается больше, что указывает на предпочтительность соответствующих переходов. И если постулаты Бора и позволили толковать закономерности простейшего водородного спектра, то порядок и причина орбитальных переходов оставались не ясными.

2. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

2.1. Волновые свойства микрочастиц

Гипотеза де Бройля. Экспериментальное подтверждение волновых свойств микрочастиц. Опыты Резерфорда показали «ажурное» строение атома. Однако ускоренный заряд непрерывно испускает электромагнитные волны и, теряя энергию, должен монотонно приближаться к ядру. Значит, в устойчивой системе атома движение электронов не подчиняется законам классической механики и электродинамики.

Де Бройль (1924 г.) предположил двойственную природу электрона, сопоставив его движению волновой процесс, т. е. «приписав» электрону некую волну. Связь импульса фотона с длиной волны излучения

$$p = m_{\phi}c = \frac{m_{\phi}c^2}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}, \text{ или} \\ \lambda = \frac{h}{p}. \quad (11)$$

Де Бройль постулировал справедливость соотношения (11) и для электронов. Электрон движется со скоростью $v < c$ и его импульс

$$\vec{p} = m_e \vec{v}, \text{ где } m_e = m_{0e} / \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}.$$

Электрону с импульсом \vec{p} сопоставляется длина волны

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v}. \quad (12)$$

Соотношения энергии и импульса отражают связь между корпускулярными и волновыми свойствами частиц и называются уравнениями де Бройля:

$$E = \hbar\omega; \quad (13)$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}. \quad (14)$$

При ускорении электрона в электрическом поле с разностью потенциалов U , не превышающей 10^4 В, масса электрона m_e практически не отличается от массы покоя m_{0e} . Кинетическая энергия, приобретаемая электроном в ускоряющем поле $m_{0e}v^2/2 = eU$, а скорость

$v = \sqrt{\frac{2eU}{m_{0e}}}$. Используя соотношение (12), получаем

$$\lambda = \frac{h}{m_{0e} \sqrt{\frac{2eU}{m_{0e}}}} = \frac{h}{\sqrt{2em_{0e}U}} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} U}} = \frac{1,23 \cdot 10^{-9}}{\sqrt{U}}, \text{ м, или}$$

$$\lambda = \frac{12,3}{\sqrt{U}} \text{ \AA}.$$

В ускоряющих полях электронных приборов ($1 \div 10^4$ В) соответствующие длины волн электронов составляют $10 \div 0,1 \text{ \AA}$, т. е. в диапазоне длин волн рентгеновских лучей. При размерах приборов $l \approx 10$ см волновые свойства для электронного пучка не заметны, так как

$\lambda \ll l$. Но они могут проявляться на дифракционной решетке с постоянной $\sim \lambda$, например на естественной кристаллической решетке.

Такие опыты были проведены в 1927 г. Джермером и Дэвисоном. Пучок монохроматических электронов падал на поверхность кристалла никеля с известной по данным рентгеноструктурного анализа структурой. Соединенный с гальванометром приемник электронов мог перемещаться, улавливая рассеиваемые от кристалла электроны. При энергии электронов в 54 эВ получался острый максимум для угла отражения $\theta = 50^\circ$, что отвечало по формуле Вульфа – Брэгга длине волны 1,67 Å. Тот же результат давало уравнение $\lambda = \frac{12,3}{\sqrt{U}} = 1,67 \text{ Å}$, что и подтвердило гипотезу де Бройля.

Дифракция одного электрона не дает всей системы точек, которая получается в результате дифракции потока электронов. След от одного электрона, прошедшего дифракционную решетку кристалла, окажется лишь в одной из тех точек, которые разрешаются условиями дифракции. Этим проявляется корпускулярная сторона природы электрона – он не может «расплываться». В каком из возможных направлений проявится его действие, определено вероятностью проявления действия электрона в той или иной точке пластинки.

Формула де Бройля (12) применима к любым частицам, но их волновые свойства можно и не заметить, так как длина волны де Бройля обратно пропорциональна их массе. Например, для электрона с энергией 1 эВ получается величина $\lambda = 12,3 \text{ Å}$, для протона той же энергии она составляет 0,28 Å, а для молекулы кислорода при комнатной температуре – 0,14 Å. Ясно, что реализовать условия наблюдения дифракции для макроскопических частиц невозможно.

Принцип неопределенностей. Соотношение неопределенностей. Перепишем второй закон динамики $m \frac{d^2x}{dt^2} = F_x$ в виде двух

уравнений с учетом соотношений $v_x = dx/dt$ и $a_x = dv_x/dt = d^2x/dt^2$:

$$\frac{dp_x}{dt} = F_x \quad \text{и} \quad \frac{dx}{dt} = \frac{1}{m} p_x. \quad (15)$$

Уравнения (15) представляют принцип причинности в классической механике: действующие на материальную точку известные силы определяют импульс, определяющий координату в последо-

вательные промежутки времени. Материальная точка, обладая одно- временно определенными значениями координаты x и импульса p_x , образует последовательность положений – траекторию.

Волна – протяженный пространственный объект, характеризуемый волновой функцией $\psi = \psi(x, t)$. Значения величины ψ различны в точках с разными координатами x и меняются с течением времени t . Так монохроматическая волна ($\lambda = \text{const}$), распространяющаяся вдоль оси OX , описывается волновой функцией

$$\psi = A \sin\left(2\pi \frac{vt - x}{\lambda}\right), \quad (16)$$

где λ – длина волны, v – скорость ее распространения.

Интервал Δx , в котором заключен волновой объект, равен бесконечности. Монохроматической волне отвечает определенное значение импульса $p = h/\lambda$ частицы, и интервал Δp , составляющий возможные значения импульса частицы, равен нулю. Это значит монохроматическая волна характеризуется $\Delta x = \infty$ и $\Delta p = 0$, и такой волновой объект имеет определенный импульс и неограниченную область локализации.

Теперь рассмотрим пример волны, локализованной в интервале Δx . Для того чтобы волновая функция была отлична от нуля внутри этого интервала и практически равнялась нулю вне его, она должна представляться суперпозицией монохроматических волн (16) с разными значениями λ . На рис 10, а показан набор таких волн разных амплитуд и с длинами волн в интервале от λ до $\lambda + \Delta\lambda$, а на рис. 10, б – результат их сложения – волновой пакет. Результирующая волновая функция ψ отлична от нуля в интервале Δx . Но при такой пространственной локализации волны теряют определенность понятия длины волны λ , а значит, и импульса p .

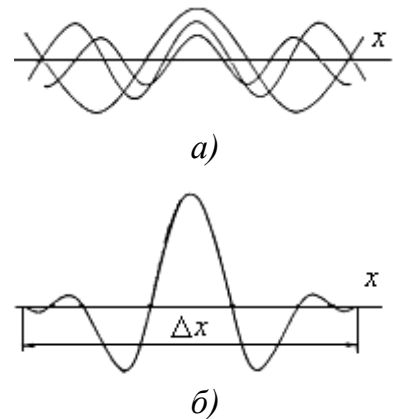


Рис. 10

Чем в более узком интервале Δx локализована волна, тем более широкий интервал $\Delta\lambda$ длин интерферирующих волн входит в пакет и представляет эту волну. Увеличение определенности в локализации волны (уменьшение Δx) связано с одновременным возрастанием неопределенности импульса Δp . В пределе имеем

$$\Delta x = 0, \quad \Delta p \rightarrow \infty. \quad (17)$$

Если положение электрона в данный момент времени определено в пространстве (бесконечно узкий волновой пакет (17)), то в силу полной неопределенности импульса его положение в следующий момент времени неоднозначно, и траектория электрона – приближенное понятие.

В отличие от материальной частицы (корпускулы), электрон и фотон не могут иметь одновременно определенную координату x и импульс p_x .

Соотношение между величинами Δx и Δp_x проанализировал В. Гейзенберг, обнаруживший, что условия, благоприятные для измерения положения, затрудняют нахождение импульса, и наоборот. Рассмотрим один из мысленных опытов Гейзенберга. Чтобы определить положение и импульс электрона, нужно «осветить» его и получить хотя бы один рассеянный при столкновении фотон. Вследствие дифракции точность в определении координаты электрона не может быть больше длины волны излучения: $\Delta x \approx \lambda$. Чем точнее нужно измерить положение электрона, тем меньше должно быть λ . Но при рассеянии фотона электрон получает отдачу и его импульс меняется на величину Δp_x порядка импульса фотона $p_\phi = h/\lambda$, что составляет погрешность в его определении. Получаем «соотношение неопределенностей»: $\Delta x \Delta p_x \geq \lambda h / \lambda = h$.

С учетом других координат

$$\Delta x \Delta p_x \geq h, \Delta y \Delta p_y \geq h, \Delta z \Delta p_z \geq h. \quad (18)$$

Положение волнового пакета характеризуется областью занимаемого им пространства. Величины Δx , Δy и Δz характеризуют размер области. Величины Δp_x , Δp_y и Δp_z характеризуют спектральный состав монохроматических волн, формирующих волновой пакет. И никакой «неопределенности» или «неточности» здесь нет. Следовательно, «соотношения неопределенностей» Гейзенберга (18) характеризуют особенности корпускулярно-волновой двойственности частиц. В указанном смысле понятия координаты и импульса дополнительны друг другу. Соотношение неопределенностей было количественным воплощением общего принципа дополнительности, сформулированного Бором в 1927 г.

Для произведения неопределенности энергии ΔE и времени Δt взаимодействия объекта с измерительным прибором существует и соотношение неопределенностей Бора $\Delta E \Delta t > h$. Определение энергии с

точностью ΔE занимает интервал времени не менее $h/\Delta E$. Из принципа дополнительности вообще и из боровского толкования процесса измерения в частности следуют все непривычные особенности квантовой теории.

Разумеется, есть свойства, не зависящие от способа наблюдения: масса, заряд, спин частицы, магнитный момент... Но всякий раз, когда одновременно измеряются дополнительные друг другу величины, результат измерения зависит от способа наблюдения, т. е. от того, как и что измерять в одной и той же системе координат.

2.2. Волновая функция. Уравнение Шредингера

Волновая функция: свойства и статистический смысл. Для представления частицы корпускулой необходимо, чтобы область локализации ее волнового пакета была относительно мала и чтобы частица двигалась в соответствии с классическими законами для материальных точек. При этом понятия координат и импульсов имеют смысл, если можно было говорить об определенном значении действующей силы на частицу. Если градиент потенциальной энергии частицы во внешнем поле – медленно меняющаяся функция координат, то можно говорить о силе, действующей на всю частицу как на целое, если во всей области локализации частицы Δx эта величина постоянна:

$$f(r) \Big|_{\text{в области } \Delta x \Delta y \Delta z} \approx \text{const.} \quad (19)$$

Для классических объектов эти закономерности сформулированы в виде принципа причинности (15) и в макроскопических электромагнитных полях электронных приборов условие (19) соблюдается. Рассмотрим пример, показывающий, при каких условиях можно пользоваться приближенным понятием траектории и представлять электрон в виде корпускулы. Пусть электрон движется в электронно-лучевой трубке. Рассмотрим волновой пакет, у которого неопределенность импульса не превышает 1 % ($\Delta p \approx 0,01 p$). Из (19) следует, что электрон в каждый данный момент локализован в области $\Delta x \approx 100\lambda$. При $v = 10^6$ м/с, длине волны электрона $\lambda = h/p \approx 10^{-9}$ м область локализации $\Delta x \approx 10^{-7}$ м, что во много раз меньше размеров трубки. Тогда по отношению к прибору разумным приближением является электрон – материальная точка.

В случае же движения электрона в атоме напряженность электрического поля атомного ядра сильно меняется на расстояниях порядка длины волны де Бройля λ . При величинах λ , Δx диаметр атома одного порядка, область локализации электронов составляет весь объем атома. Условие (19) применимости к электрону классических представлений о траектории в атоме не соблюдено, и представление об электроне-корпускуле в атоме бессмысленно. Все затруднения планетарной модели атома связаны с тем, что электрон представлялся точечным зарядом, движущимся по определенной орбите. Причины наличия в атоме «разрешенных» энергетических уровней и объяснение постулатов Бора следует искать в волновых свойствах реальных «не точечных» электронов. Для этого следует найти принцип причинности для ψ -функции, позволяющий рассчитывать $\partial\psi/\partial t$ в любой точке.

Значения величин, характеризующих состояние частицы, должны находиться с помощью такой волновой функции. Однако динамические переменные могут не иметь определенных значений, поэтому задачу о движении частицы невозможно сформулировать в виде связывающих их величины дифференциальных уравнений (15). Задача состоит в том, чтобы сначала суметь рассчитать $\partial\psi/\partial t$ для любых значений x , y , z и t , и только потом определить значения динамических переменных по известной ψ -функции.

Обратим внимание, что соотношения (18) «неопределенностей» не содержат. Величина Δx была бы неопределенностью в координате электрона x , если бы его пространственная локализация была точечной, а Δx – мерой ошибки в определении координаты x . В действительности электрон описывается волной де Бройля, локализованной в области пространства Δx . Точно так же Δp_x было бы неопределенностью в составляющей импульса p_x , если бы электрон описывался всегда монохроматической волной с определенным значением λ_x . В действительности ограниченный волновой пакет содержит составляющие с разными значениями λ , а значит и p_x , и электрон описывается не одним значением p_x , а рядом значений в пределах от p_{1x} до p_{2x} , так что

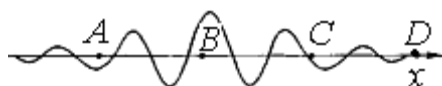


Рис. 11

$$\Delta p_x = p_{2x} - p_{1x}.$$

Но все же эти соотношения обуславливают некоторые неопределенности. Пусть, например, волновой пакет (рис. 11) описывает движущийся электрон, а в точках A , B , C , D находятся ионы. Электрон может захватываться

каким-то ионом с излучением разности энергий свободного электрона и электрона на орбите. В рассматриваемый момент времени захват ионом D исключен, так как в области D электронная волна равна нулю. В местах расположения ионов A, B, C электронная волна не равна нулю, указывая на присутствие электрона, поэтому эти ионы могут претендовать на захват электрона с вероятностью, определяемой ψ -функцией.

То же относится и к возможным значениям импульса электрона. При дифракции волнового пакета на дифракционной решетке (кристалле) волны с разными λ пойдут по разным направлениям. Но электрон из-за корпускулярных свойств разделиться не может, и в результате дифракции след электрона на фотопластинке будет обнаружен в одной из точек, отвечающих значению λ из волнового пакета. При неоднозначности проявления на опыте составляющих волнового пакета можно указать лишь вероятности того, что электрон продифрагирует с тем или иным значением λ , т. е. p . Величины вероятностей определяются амплитудами волнового пакета ψ -функции. Вид волны де Бройля, т. е. ψ -функции, не позволяет судить о направленности возможных процессов, определяя лишь вероятность реализации каждого процесса. Значит, ψ -функция состояния одной заряженной частицы обретает объективный статистический смысл и по форме записи должна быть комплексная.

Сопоставим толкования ψ -функции и электромагнитной волны. Математическая волна любой природы в однородной среде описывается волновым уравнением $\nabla^2 \Phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Phi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0$.

Для электромагнитной волны Φ – любая из проекций напряженности электрического и магнитного полей на оси декартовой системы координат. При гармонической зависимости $\Phi(\vec{r}, t)$ от времени, одинаковой для всех точек пространства: $\Phi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r})e^{-i\omega t}$. Подставив это решение в волновое уравнение, получим уравнение Гельмгольца, описывающее волны постоянной частоты в однородных средах и вакууме:

$$\nabla^2 \Phi(\vec{r}) + k^2 \Phi(\vec{r}) = 0, \text{ где } k = \omega/v = 2\pi/(vT) = 2\pi/\lambda.$$

Здесь постоянство длины волны не предполагается. Поэтому резонно применение этого уравнения для описания волн де Бройля, ха-

рактически волновые свойства корпускул. Условие $\omega = \text{const}$ приводит к $E = \text{const}$ (см. (13)). Это означает, что уравнение Гельмгольца можно применить для волн де Бройля при описании движения корпускул в потенциальных полях, когда их полная энергия $E = K + U = \text{const}$, где кинетическая энергия $K = p^2 / (2m)$ и U – потенциальная энергия корпускулы. С учетом соотношения де Бройля (14) имеем $k^2 = (2m/\hbar^2)(E - U)$. Подставим это выражение в уравнение Гельмгольца и получим стационарное уравнение Шредингера:

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + (2m/\hbar^2)(E - U)\Psi(\vec{r}) = 0. \quad (20)$$

Уравнение (20) в частных производных имеет решение для непрерывной однозначной и конечной во всех точках функции $\psi(r)$ лишь при определенных значениях E , названных собственными.

Плотность энергии электромагнитной волны пропорциональна квадрату напряженности электрического и магнитного полей. Если и функцию $\Psi(\vec{r})$ интерпретировать так же, то при соответствующей нормировке квадрат модуля волновой функции $|\psi|^2$ толкуется как плотность вероятности обнаружения электрона. Произведение $|\psi|^2 dV$ физически толкуется как вероятность того, что действие электрона будет обнаружено в элементе объема dV . Интегральная сумма величин $|\psi|^2 dV$ по всему пространству есть вероятность обнаружения в нем частицы. Если частица существует – она достоверно обнаружится. Вероятность достоверного события равна единице, и условие нормировки для ψ -функции

$$\int |\psi|^2 dV = 1. \quad (21)$$

Область обнаружения электрона действием не следует путать с областью локализации электрона, определяемой ψ -функцией. Если электрон обнаруживается в объеме действием, то это не значит, что он сосредоточен («находится») в этом объеме. Область действия электрона много меньше области локализации ψ -функции.

Если известна ψ -функция состояния, то известны вероятности поведения частиц, движущихся в одинаковых условиях. Так, если ψ -функция описывает электрон, находящийся на пятой ступеньке возбуждения в атоме водорода, то можно оценить вероятности того или иного маршрута при переходе в нормальное состояние ($E_5 \rightarrow E_1$ с излучением одного фотона, либо $E_5 \rightarrow E_4 \rightarrow E_1$, $E_5 \rightarrow E_3 \rightarrow E_1$ и т. д.). Если возбуждать множество водородных атомов потоком электронов, спо-

собных передать атомам энергию, не меньшую, чем $E_5 - E_1$, множество электронов совершает переходы по разным маршрутам. В результате испускаются все линии спектра, отвечающие всевозможным переходам.

Волновая функция есть максимально полное допустимое описание состояния частицы. Она заменяет классическое состояние, задаваемое координатами и скоростями. Из максимально полно определенного начального состояния однозначно следует единственно возможное конечное состояние. Изменился только смысл слова «состояние». Волновая функция – не физическое поле, а поле информации.

Нестационарное уравнение Шредингера. Для определения по известной ψ -функции величины или вероятности обнаружения того или иного значения динамической переменной, каждой динамической переменной сопоставляется математическая операция над ψ -функцией. Значение каждой переменной определяется соответствующим оператором.

Пусть частица свободно движется вдоль оси x с точно определенным импульсом $p_x = p$. Это значит, что она не локализована в пространстве и описывается монохроматической волной с фазой $\varphi = 2\pi(vt - x/\lambda)$ или с учетом $E = h\nu$ и $p = h/\lambda$:

$$\varphi = \frac{2\pi}{h}(Et - px) = \frac{1}{\hbar}(Et - px).$$

Комплексная ψ -функция имеет вид

$$\psi = a(\cos \varphi - i \sin \varphi) = ae^{-i\varphi} = ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}. \quad (22)$$

Продифференцируем ее форму по координате x :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= \frac{i}{\hbar} p a e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} = \frac{i}{\hbar} p \psi = -\frac{1}{i\hbar} p \psi \text{ и получаем} \\ & -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = p \psi. \end{aligned} \quad (23)$$

Искомая динамическая переменная $p_x = p$ получается в виде множителя при ψ , если применить к ψ -функции математическую операцию

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}_x, \quad (24)$$

где \hat{p}_x – принятое обозначение оператора, представляющего p_x .

В принятых обозначениях перепишем уравнение (23):

$$\hat{p}_x \psi = p\psi. \quad (25)$$

Из равноправия осей следует, что операторы, соответствующие составляющим импульса по осям y и z : $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ и $\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$.

Применим один из этих операторов к ψ -функции (22):

$$\hat{p}_y \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} a e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} = 0 = 0\psi \quad \text{и, аналогично: } \hat{p}_z \psi = 0\psi.$$

Такая ψ -функция состояния с определенным (собственным) значением импульса $p_x = p$ называется собственной функцией импульса.

Теперь продифференцируем ψ -функцию (22) по времени:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} E a e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} = \frac{1}{i\hbar} E \psi.$$

Исходя из формы (24), находим выражение для оператора энергии

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (26)$$

Представим оператор энергии в иной форме. Вспомним, что полная энергия частицы равна сумме кинетической и потенциальной:

$$E = K + U = \frac{mv^2}{2} + U(x, y, z) = \frac{p^2}{2m} + U(x, y, z),$$

где $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$.

Подставляя вместо p_x , p_y и p_z соответствующие операторы, получим оператор полной энергии \hat{H} (оператор Гамильтона), применение которого к ψ должно дать тот же результат, что и применение оператора (26). При подстановке имеем в виду, что

$$\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad \hat{p}_y^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2}; \quad \hat{p}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Таким образом, оператор кинетической энергии обретает вид

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad \text{где } \Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Потенциальная энергия $U(x, y, z)$ задана и не содержит импульсы, поэтому оператор Гамильтона

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z). \quad (27)$$

Применение к ψ -функции оператора (27) дает тот же результат, что и применение оператора (26), что приводит к уравнению $\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$.

Уравнение Шредингера в развернутом виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z) \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (28)$$

позволяет найти изменение волновой функция частицы $\psi(x, y, z, t)$ с течением времени $\partial \psi / \partial t$ в заданном внешнем поле.

В стационарном состоянии энергия E частицы неизменна с течением времени, и волновая ψ -функция – собственная функция оператора \hat{E} . Применение оператора \hat{E} эквивалентно $E\psi$. Тогда уравнение Шредингера принимает вид (см. (20)), представленное в принятых обозначениях:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z) \right] \psi = E\psi. \quad (29)$$

Частица в потенциальной яме. Результирующая сила, действующая на свободный электрон (в металле) со стороны ионов и остальных электронов, в среднем равна нулю. Значит, потенциальная энергия электрона внутри металла постоянна, и ее можно назначить $U_{\text{внутр}} = 0$. На границах металла расположен двойной электрический слой, для преодоления которого нужно затратить работу выхода A . Поэтому потенциальная энергия электрона вне металла $U_{\text{внеш}} = A > 0$.

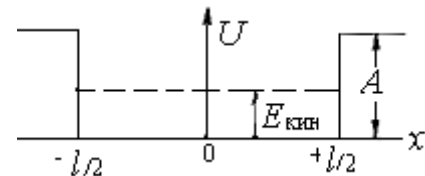


Рис. 12

В рамках одномерной задачи направим ось x с началом координат 0 в центре бруска перпендикулярно его границам длиной l . Потенциальная энергия U как функция координаты x показана на рис. 12. Пока кинетическая энергия электрона в металле мала по сравнению с высотой стенок «потенциальной ямы» ($E_{\text{кин}} \ll A$), электронные волны будут испытывать на границах потенциальной ямы полное внутреннее отражение.

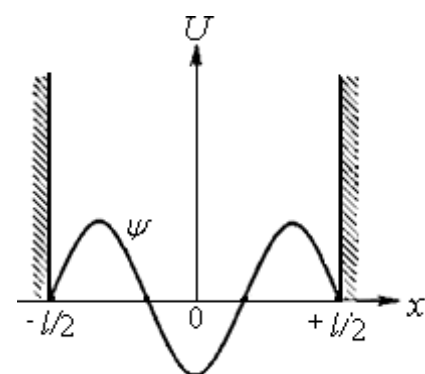


Рис. 13

В приближении движения свободных электронов в металле рассмотрим одномерный «ящик» (рис. 13) с энергетически бесконечно высокими стенками ($A \rightarrow \infty$). Внутри ящика

ψ -функция не равна нулю, но за его пределами и на границе электрон не может быть обнаружен ($\psi = 0$).

Двигаясь свободно ($U = 0$) внутри ящика, электрон сохраняет свой импульс $p_x = \text{const} = p$ и описывается плоской волной. Но его свободное движение ограничено стенками одномерного «ящика». Функция ψ перестает быть собственной функцией оператора импульса (уравнение (25) не выполняется). Теперь ψ -функция электрона представляет волновой пакет, каждая составляющая ψ_i которого – плоская волна, отвечающая определенному значению импульса p_i , т. е. является собственной функцией оператора: $\hat{p}_x \psi_i = p_i \psi_i$. Волновой пакет $\psi = \sum_i c_i \psi_i$, где в общем случае коэффициенты c_i , тоже комплексные и характеризуют относительный вес собственных функций ψ_i в пакете.

Итак, при столкновении со стенкой «ящика» импульс меняет свой знак на обратный. Вероятности обоих значений импульса $\pm \bar{p}$ одинаковы, и ψ -функция электрона – суперпозиция двух плоских волн типа (22) с противоположными знаками у p_x и одинаковыми квадратами амплитуд $|c_1|^2 = |c_2|^2$, т. е. $c_1 = \pm c_2$. Поэтому

$$\psi = \psi_1 \pm \psi_2 = c \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \pm e^{-\frac{i}{\hbar}(Et + px)} \right\} = c e^{-\frac{2\pi i}{h}Et} \left\{ \frac{\cos}{\sin} \right\} \left(\frac{2\pi px}{h} \right). \quad (30)$$

Это частное решение уравнения Шредингера (29) для рассматриваемого случая, когда в области, где $\psi \neq 0$, потенциальная энергия $U(x, y, z) = 0$. Комплексный множитель показывает, что волновая ψ -функция есть периодическая функция времени и частоты $\nu = E/h$. Но непосредственный физический смысл имеет квадрат модуля $|\psi|^2$.

Квадрат модуля комплексного множителя есть постоянная

$$c e^{-\frac{2\pi i}{h}Et} c^* e^{+\frac{2\pi i}{h}Et} = c c^* = |c|^2.$$

Следовательно, функция (30) описывает стационарное состояние, в котором распределение вероятности обнаружения электрона в разных участках внутри ящика $|\psi|^2$ остается неизменным с течением времени. Второй сомножитель в (30), \cos (или \sin) от аргумента $\frac{2\pi px}{h} = 2\pi \frac{x}{\lambda}$ характеризует стоячую волну с длиной $\lambda = h/p$, образовавшуюся в результате наложения двух противоположно направленных

ных бегущих волн (22). На стенках ящика ψ -функция должна обращаться в нуль, и эти точки должны быть узлами стоячей волны. Для удовлетворения этого условия на длине l ящика должно укладываться целое число ($n = 1, 2, 3, \dots$) полуволн, т. е. $l = n\lambda_n/2$, или $\lambda_n = 2l/n$. На рис. 14 жирными линиями показаны лишь три волны, соответствующие состояниям ψ -функции с $n = 1$, $n = 2$ и $n = 3$. Тонкими линиями показана плотность вероятности ($|\psi|^2$) обнаружения электрона, описываемого ψ -функцией, в разных точках внутри ящика.

Каждой длине волны λ_n отвечает значение импульса $p_n = \frac{h}{\lambda_n} = n \frac{h}{2l}$ и полная энергия $E_n = \frac{p_n^2}{2m} = n^2 \frac{h^2}{8ml^2}$. С ростом n

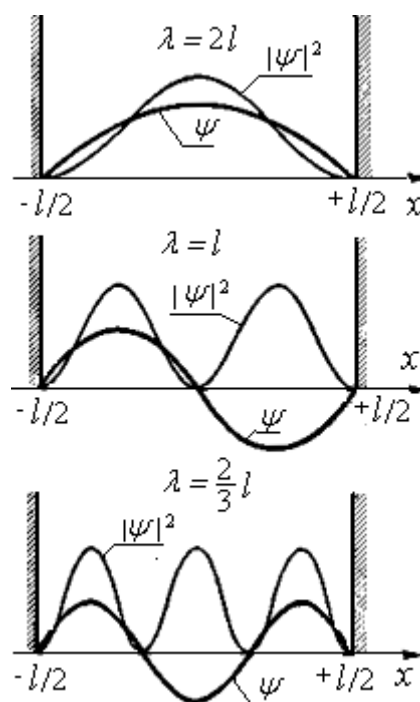


Рис. 14

расстояния между энергетическими уровнями растут (рис. 15). Числа n называют «квантовыми» – определяющими номер уровня энергии электрона.

Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер. Рассмотрим одномерное движение с потенциальным барьером прямоугольной формы (рис. 16). *Потенциальным барьером* называется область пространства, где потенциальная энергия больше, чем в окружающих областях пространства. В областях I ($-\infty < x < 0$) и III ($a < x < \infty$) потенциальную энергию частицы назначают равной нулю. Область II ($0 < x < a$) с потенциальной энергией U_0 называют потенциальным барьером.

Пусть частица с энергией E движется в области I в положительном направлении оси Ox к потенциальному барьеру. В классической теории при $E < U_0$ частица его не преодолет – отразится от потенциального барьера, изменив на обратное направление своего движения. При $E > U_0$

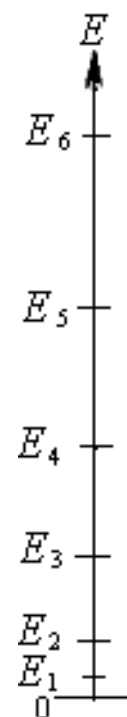


Рис. 15

частица наверняка преодолет потенциальный барьер и попадет в область III, где будет продолжать двигаться с прежней энергией в положительном направлении оси Ox .

В случае $E < U_0$ существует определенная вероятность проникновения частицы через потенциальный барьер из области I в область III, а для $E > U_0$ существует определенная вероятность отражения частицы от потенциального барьера. Явление проникновения частицы через потенциальный барьер называют *туннельным эффектом*.

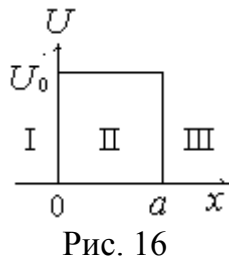


Рис. 16

Квантовый гармонический осциллятор. Гармонический осциллятор с массой m обладает кинетической и потенциальной энергией. В классической механике потенциальная энергия одномерного осциллятора $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$, а его кинетическая энергия $K = \frac{p^2}{2m}$.

Осциллятор совершает гармонические колебания с собственной частотой $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$. Амплитуда колебаний A и полная энергия $E \sim A^2$ могут принимать любые значения от 0 до ∞ . В квантовой механике ψ -функция и возможные значения энергии определяются из уравнения Шредингера

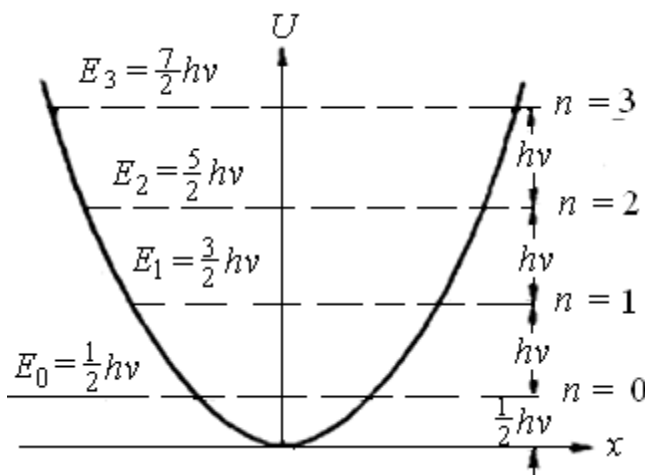


Рис. 17

При решении уравнения энергии осциллятора принимает лишь дискретные значения

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \psi = E \psi.$$

(рис. 17, пунктир): $E_n = (n + \frac{1}{2})h\nu, n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Минимальная энергия осциллятора $E_0 = \frac{1}{2}h\nu$ и не равна нулю, как в классической механике, а все энергетические ступеньки одинаковые: $E_{n+1} - E_n = (n + 1 + \frac{1}{2})h\nu - (n + \frac{1}{2})h\nu = h\nu$.

Квантовый электрический осциллятор (диполь) может при взаимодействии с электромагнитным полем переходить лишь на соседние уровни – вверх (с поглощением фотона) или вниз (с испусканием). Частота фотона равна собственной частоте осциллятора ν , а его

энергия равна разности энергий между двумя соседними уровнями осциллятора, т. е. $h\nu$. Таким образом, осциллятор частоты ν испускает излучение той же частоты ν , как и в классической теории. Но классический осциллятор испускает излучение непрерывно, постепенно затухая при этом. Квантовый осциллятор в стационарном состоянии не излучает. Излучение возникает при переходе осциллятора из энергетического состояния в ближайшее нижнее одним фотоном. Это же относится и к поглощению.

2.3. Атом водорода

Уравнение Шредингера для электрона в атоме водорода. Рассмотрим движение электрона с зарядом $-e$ в поле ядра с зарядом $+Ze$. Атому водорода H соответствует $Z = 1$. Значение $Z = 2$ соответствует однократно ионизованному иону гелия He^+ , значение $Z = 3$ – дважды ионизованному атому лития Li^{2+} и т. д. Такой атом (ион) называется водородоподобным атомом – атомом с одним электроном. Масса ядра значительно больше массы электрона, поэтому ядро можно считать в первом приближении неподвижным. Размеры ядра ($10^{-14} - 10^{-15}$ м) во много раз меньше размеров атома (10^{-10} м), и ядро в системе атома можно трактовать точечным зарядом $+Ze$, создающим вокруг себя электрическое поле с началом координат в указанной точке.

Потенциал ϕ поля на расстоянии r от ядра равен $\phi = kZe/r$. Потенциальная энергия электрона на расстоянии r от ядра и с учетом $U(\infty) = 0$:

$$U(r) = -e\phi = -\frac{kZe^2}{r}. \quad (31)$$

Подставляя это выражение для потенциальной энергии в уравнение Шредингера (29), находят волновые функции и значения энергии в стационарных состояниях атома. Ограничимся упрощенной картиной, заменив истинную пространственную электронную волну линейной – вдоль замкнутой орбиты. Будем считать областью локализации электрона всю окружность радиуса r с центром в ядре. При круговой скорости v электрона по орбите движется волна де Бройля (рис. 18, пунктир).

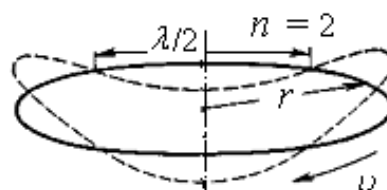


Рис. 18

Представим натянутую струну с закрепленными концами. Концы струны – узлы стоячей волны, следовательно, вдоль струны должно укладываться целое число полуволн. Теперь представим струну длины l , не закрепленной на концах, а согнутой в кольцо с соединенными концами. Теперь концы струны замыкают узлы и должны колебаться одинаково. Следовательно, устойчивое волновое движение на кольцевой струне возможно, если вдоль струны укладывается целое число волн $n\lambda$. В стационарном состоянии длина волны $\lambda = h/mv$ должна укладываться целое число $n = 1, 2, 3, \dots$ вдоль орбиты длиной $2\pi r$, и $2\pi r = n \frac{h}{mv}$ или

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar. \quad (32)$$

Условие (32) тождественно постулату Бора. Но для нахождения неизвестных величин v и r нужно еще одно условие. Вдоль орбиты $r = \text{const}$ и значение электрического потенциала одинаково. Следовательно, условие (20) соблюдено, и можно пользоваться вторым законом динамики. При движении вдоль окружности со скоростью v центростремительное ускорение равно v^2/r . Произведение массы частицы m на это ускорение должно быть равно силе, испытываемой ею со стороны заряженного ядра: kZe^2/r^2 . Второе условие принимает вид $Ze^2/r^2 = mv^2/r$, или

$$\frac{kZe^2}{r} = mv^2. \quad (33)$$

Решая совместно (32) и (33), находим $kZe^2/r = n^2\hbar^2/(m^2r^2)$, или

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{kmZe^2} = n^2 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}, \quad (34)$$

где r обретает индекс n , так как r есть функция только n (множитель при n^2 – постоянная величина), принимающего значения $1, 2, 3, \dots$. Получаем дискретный ряд возможных орбит, которые называют разрешенными.

Радиус первой наименьшей разрешенной орбиты атома водорода ($Z = 1$) $r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{kmZe^2} = \frac{(1,054 \cdot 10^{-34})^2}{9 \cdot 10^9 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, и диаметр атома водорода при $n = 1$ составляет около 1 \AA .

В уравнении (33) величина, стоящая справа, – удвоенная кинетическая энергия K электрона. Согласно (31) левая часть представляет собой потенциальную энергию электрона $U(r)$ с обратным знаком. Значит, соотношение (33) для электрона на орбите представляется в виде $-U = 2K$, или $K = (-1/2)U$. Тогда полная энергия электрона $E = K + U = (-1/2)U + U = (1/2)U$. Подставляя сюда значение U из (31), находим: $E = -kZe^2 / 2r$. Таким образом, энергия электрона, движущегося стационарно в поле ядра, фиксируется значениями радиуса r его разрешенных орбит. Но радиусы стационарных («разрешенных») орбит образуют дискретную последовательность (34), поэтому и значения энергий электрона, движущегося стационарно в поле ядра, образуют соответствующий дискретный ряд:

$$E_n = -\frac{kZe^2}{2r_n} = -\frac{k^2 m Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{1}{n^2} Z^2 \frac{k^2 m e^4}{2\hbar^2} = -\frac{1}{n^2} Z^2 21,76 \cdot 10^{-19} \text{ Дж},$$

или

$$E_n = -\frac{1}{n^2} Z^2 = 13,598 \text{ эВ}. \quad (35)$$

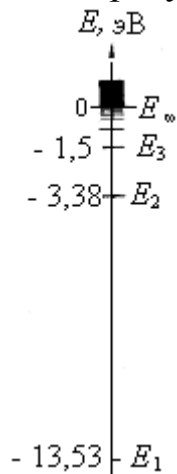
Если учитывать движение ядра относительно центра тяжести системы «ядро – электрон», вместо массы электрона следует использовать приведенную массу электрона ($m/(1 + m/M)$), где M – масса ядра. В этом случае числовой множитель в (35) равен 13,53 эВ.

При выбранной в (31) нормировке потенциальной энергии ($U = 0$, при $r = \infty$) возможные значения полной энергии в стационарных состояниях атома E отрицательны. Низшему значению энергии электрона E_1 отвечает орбита с минимальным радиусом r_1 , соответствующая невозбужденному состоянию атома. С ростом r (или n), или иначе – с переходом электрона на дальние орбиты, его энергия растет. При $n \rightarrow \infty$ $r_n \rightarrow \infty$ получаем состояние, в котором электрон бесконечно удален от ядра и не связан с ним: $E_n \rightarrow 0$. Энергия, необходимая для удаления электрона от атома с первой орбиты на бесконечность: $E_\infty - E_1 = Z^2 \cdot 13,53$ эВ.

Для водорода ($Z = 1$) величина 13,53 эВ представляет энергию ионизации невозбужденного атома.

Формула (35) позволяет вычислить минимальную энергию, необходимую для перевода атома в возбужденное состояние (энергию возбуждения) только для водорода и одноэлектронных ионов. Для водорода $E_2 - E_1 = (1 - 1/4)13,53 = 10,15$ эВ.

Если атом водорода при столкновении получает энергию меньше 10,15 эВ, его внутренняя энергия не может измениться: удар будет упругим. Так при комнатной температуре средняя кинетическая энергия движения частиц $-(3/2)kT \approx 0,04$ эВ много меньше не только энергии возбуждения водорода, но и иных атомов, что допускает представление атомов в виде упругих шариков при не слишком высоких температурах.



Дискретность состояний атома и дискретность его спектра энергий являются следствием волновых свойств электрона. При $E < 0$ (отрицательных энергиях, отвечающих связанному электрону) это дискретный спектр, в котором отдельные значения располагаются все гуще при приближении к границе $E_\infty = 0$, отвечающей бесконечно удаленной орбите. Далее следует непрерывный спектр положительных энергий свободного электрона (рис. 19), так как оторванный от ядра электрон может иметь любое положительное значение кинетической энергии.

Рис. 19 Легко представить также, почему электрон, находясь на разрешенной орбите, не излучает. Действительно, движению на разрешенной орбите отвечает стационарная волна, амплитуда которой остается со временем неизменной. Очевидно, что неизменной волне должно отвечать неизменное распределение заряда. Значит, движение электрона вдоль орбиты следует уподоблять не вращению заряженной дробинки, а замкнутому постоянному электрическому току I . Вращающийся заряженный «обруч» обладает механическим моментом импульса с проекцией на ось вращения $L_{\text{мех}} = mvr = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$ (см. (32)) и постоянным магнитным моментом, направленным в противоположную сторону (так как заряд электрона отрицательный):

$$p_m = \frac{e\upsilon r}{2} = \frac{e}{2m} L = n\hbar \frac{e}{2m}, \quad (36)$$

кратным элементарному магнитному моменту – «магнетону Бора»:

$$\mu_B = \hbar \frac{e}{2m} = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ А} \cdot \text{м}^2. \quad (37)$$

Микроскопический замкнутый ток создает постоянное магнитное поле. Отдельные заряженные элементы обруча вращаются, но распределение заряда в пространстве остается неизменным, так что

электрическое поле электрона также постоянно. Следовательно, электрон, находящийся на стационарной орбите, создает в пространстве постоянное электромагнитное поле, а потому – не излучает.

Отношение магнитного момента элементарной частицы к ее механическому моменту называется магнитомеханическим (или гиромангнитным) соотношением. Для электрона оно равно: $\frac{p_m}{L} = -\frac{e}{2m}$.

Главное, орбитальное и магнитное квантовые числа. Квантование энергии электрона в атоме водорода. Электрон, движущийся по круговой орбите, обладает одной степенью свободы (угол поворота φ) и его состояние определено одним квантовым числом n . Такое представление наглядно, но неверно, так как описывающая его движение в атоме ψ -функция представляет не одномерную, а пространственную волну, соответствующую трем степеням свободы электрона.

На наличие трех степеней свободы (трех квантовых чисел) указывала и теория Бора, где наряду с круговыми орбитами рассматривалась система эллиптических орбит с учетом ориентации их плоскостей в пространстве. Главное квантовое число n характеризовало диаметр орбиты, азимутальное l – степень ее вытянутости, а магнитное m – ориентацию нормали к плоскости орбиты и вектора ее магнитного момента p_m в пространстве. При данном радиусе (полной энергии E_n) существовала группа орбит разной степени эллиптичности l и ориентации m .

Стационарные состояния с постоянным распределением заряда в пространстве соответствуют пространственным стоячим волнам. Каждая стоячая волна имеет систему узловых поверхностей и характеризуется тремя квантовыми числами. Волновая функция в пространстве характеризуется тремя системами узловых поверхностей ($\psi(r, \varphi, \theta) = 0$): сферы постоянного радиуса $r = \text{const}$, конуса постоянного угла раствора с $\theta_l = \text{const}$ и плоскости $\varphi_m = \text{const}$ (рис. 20).

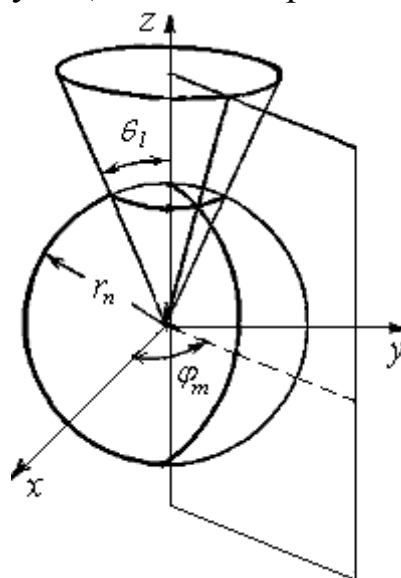


Рис. 20

Каждая из этих систем характеризуется своим квантовым числом n , l и m , а волновая функция $\psi_{n, l, m}(r, \varphi, \theta)$ и энергия $E_{n, l, m}$ электрона в по-

ле ядра зависят от трех квантовых чисел. Теперь главное квантовое число n характеризует уже не номера орбит, а номера слоев орбит – групп состояний, в каждом из которых иные квантовые числа принимают разные значения. Состояния электрона с данным n , но с разными l и m отвечают очень близким значениям энергии (см. (35)).

Определим то, что характеризуют l и m . Начнем с числа l . Найдем энергию вращательного движения одномерного ротатора. Представим частицу массой m , обладающую одной степенью свободы и способную вращаться со скоростью v по окружности постоянного радиуса r , т. е. ротатор. Если частица квантовая, то по этой окружности будет распространяться волна де Бройля. Ее ψ -функция зависит от угла φ поворота по окружности: $\psi = Ae^{il\varphi}$.

Поворот на 2π возвращает ψ -функцию к исходному значению с выполнением $e^{il(\varphi+2\pi)} = e^{il\varphi}$ или $e^{i2\pi l} = 1$. Так как $e^{i2\pi l} = \cos(l2\pi) + i \sin(l2\pi)$, то два равенства $\cos(l2\pi) = 1, \sin(l2\pi) = 0$ выполняются одновременно, если l целое число: $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$.

При указанном вращении корпускулы вектор импульса не является постоянным – все время поворачивается, но вектор момента импульса остается неизменным. Поэтому для решения квантовой задачи о ротаторе нужно получить выражение оператора момента импульса \hat{L} , который позволит с помощью ψ -функции найти численные значения величины момента импульса квантовой частицы. Оператор \hat{L} , точнее, оператор проекции момента, получится, если в классическом выражении для момента импульса L корпускулы $L = rmv = rp$ заменить величину p ее известным оператором (см. (24)):

$$\hat{L}_s = r\hat{p}_s = r\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial s}\right).$$

Путь s , проходимый частицей по ее траектории, связан с углом поворота φ равенством $s = r\varphi$, что соответствует форме $\frac{\partial}{\partial s} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}$.

$$\text{Получаем окончательно } \hat{L}_\varphi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (38)$$

Значение момента импульса ротатора получим, действуя оператором на волновую функцию ротатора (38): $\hat{L}_\varphi \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (Ae^{il\varphi}) = l\hbar \psi$.

При $\hat{L}_\varphi \psi = L_\varphi \psi$ момент импульса одномерного ротатора $L_\varphi = l\hbar$.

В классическом случае энергия ротатора $E = \frac{mv^2}{2} = \frac{L^2}{2mr^2} = \frac{L^2}{2I}$, где момент инерции ротатора $I = mr^2$. Переходя к квантовому рассмотрению, подставляем в уравнение для энергии возможные значения момента импульса жесткого одномерного ротатора: $E_l = l^2 \frac{\hbar^2}{2I}$.

Более точный расчет, следующий из решения уравнения Шредингера для пространственного ротатора, показывает, что следует учитывать состояние с $l = 0$ и вместо l^2 в уравнении для E_l писать $l(l+1)$:

$$E_l = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} = \frac{L^2}{2I}.$$

Из этого соотношения вытекают два следствия. Во-первых, подставим в выражение для момента инерции $J = mr^2_n$ значение r_n из (32):

$$E_l = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m} \left(\frac{mv}{n\hbar}\right)^2 = \frac{mv_n^2}{2} \frac{l(l+1)}{n^2}.$$

Получается, что квантовые числа не независимые. Покажем это. Пусть электрон движется по замкнутой траектории переменного радиуса, совершая одновременно вращательное и колебательное движения. Кинетическая энергия вращения E_l не может превышать суммарную кинетическую энергию обоих движений $mv^2/2$, значит, второй множитель справа $l(l+1)/n^2 \leq 1$. Тогда при заданном значении n квантовое число l не может быть больше $n-1$ (при $l = n$ это выражение будет больше единицы). Значит, с заданным слоем орбит n могут быть состояния, характеризуемые значениями $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

Во-вторых, момент импульса электрона $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$, а не $n\hbar$ по теории Бора. На нижнем энергетическом уровне $n = 1$ имеем для l единственное возможное значение $l = 1 - 1 = 0$. Электрон в этом состоянии не имеет ни механического, ни магнитного орбитального момента.

Орбитальное (азимутальное) квантовое число l характеризует величину момента импульса электрона L . Три составляющие вектора момента импульса частицы по координатным осям не имеют одновременно точных значений (как не имеют их одновременно x и p_x). В данном стационарном состоянии, кроме величины вектора L , имеет вполне определенное значение лишь проекция его на одно какое-нибудь направление в пространстве, например L_z . Величина проекции

совпадает со значением момента импульса одномерного ротатора: $L_z = m\hbar$.

Магнитное квантовое число m может принимать любые целые значения, не превышающие по абсолютной величине l : $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. Тогда данному l отвечает $2l + 1$ разных значений m . Ограничение m объясняется тем, что проекция вектора момента не может превышать длины самого вектора.

Величина и форма электронной волны $\psi_{n,l,m}$ в основном определяются значениями квантовых чисел n и l . Квантовое число m характеризует ориентацию орбиты в пространстве, задавая «пространственное квантование». При сферически симметричном электрическом поле энергия электрона может зависеть только от n и l , определяющих форму электронного облака, но не от m . Зависимость энергии от m возникает, если атом находится во внешнем магнитном поле или если магнитное поле порождается ядром и другими электронами атома.

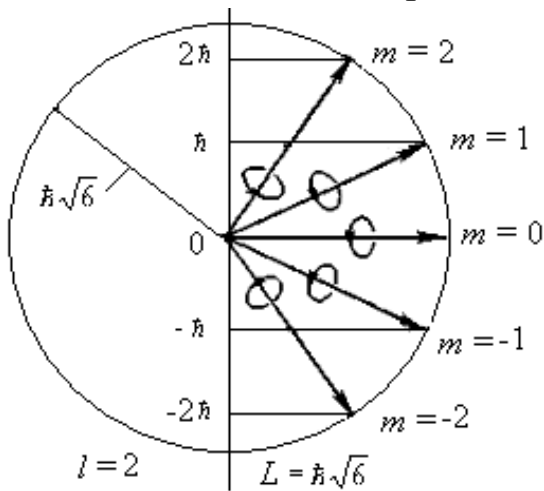


Рис. 21

Различные ориентации орбиты (т. е. вектора момента импульса L относительно оси z) показаны для случая $l = 2$ (рис. 21): возможные значения L – жирными стрелками, кружками около них – ориентации соответствующих орбит.

Поскольку зависимость E от l и m слабая, то можно считать, что каждый из уровней (35) при данном n расслаивается на ряд близких уровней. Каждому значению l соот-

ветствует $2l + 1$ уровней с разными значениями магнитного квантового числа m . При данном n число l может меняться от 0 до $n - 1$. Поэтому общее число «орбит» с разными значениями l или m при данном n составит

$$\sum_{l=0}^{l=n-1} (2l + 1) = \frac{1 + [2(n - 1) + 1]}{2} n = n^2. \quad (39)$$

Состояниям движения электрона с разными моментами импульса приданы специальные названия. Если квантовое орбитальное число l равно нулю, то говорят, что электрон находится в s -состоянии, при $l = 1$ – в p -состоянии, при $l = 2$ – в d -состоянии, при $l = 3$ – в f -состоянии, при $l = 4$ – в g -состоянии.

Поэтому говорят об s -электронах, p -электронах, d -электронах и так далее с орбитальными квантовыми числами 0, 1, 2 и т. д. Говоря о p -состоянии, d -состоянии и так далее, пользуются наглядным представлением об электроны как электронном облачке с заданной орбитальным квантовым числом формой и с распределенным зарядом плотностью $-e|\psi|^2$.

Спектр атома водорода. Определим энергии и частоты фотонов спектра атомарного водорода. Пусть электрон переходит с n -й орбиты на k -ю ($n > k$ и $E_n > E_k$). При этом излучается фотон энергии $\epsilon_{k,n}$ и частоты $\nu_{k,n}$. Имеем $E_n - E_k = h\nu_{k,n}$, или $\nu_{k,n} = \frac{E_n - E_k}{h} = \frac{E_n - E_k}{2\pi\hbar}$.

Подставляя значения E_i из (35), находим $\nu_{k,n} = \frac{mk^2Z^2e^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right)$, где «постоянная Ридберга» $R = \frac{mk^2e^4}{4\pi\hbar^3} = 3,28985 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ или $R/c = 1,1 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$.

Значение постоянной Ридберга получено в предположении, что ядро неподвижно, т. е. масса его равна бесконечности. Учет конечного значения массы ядра сводится к коррекции массы электрона приведенной массой m^* (см. выше). Точное значение постоянной Ридберга для водорода составляет $R_H = 3,28805 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$. Тогда $\nu_{k,n} = R_H \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right)$. При $Z \neq 1$ имеем $\nu_{k,n} = R_A Z^2 \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right)$, где R_A взято в соответствии с массой атомного ядра. Фиксируя значение k и меняя n , получаем набор частот, носящий название «спектральной серии». Так, при $k = 1$ и $n = 2, 3, 4, \dots$ получаем частоты $\nu_{1,2}, \nu_{1,3}, \nu_{1,4}$ и так далее, отвечающие переходу электрона со второго, третьего, четвертого и так далее слоев орбит на орбиту первого слоя:

$$\nu_{1,2} = \left(1 - \frac{1}{4}\right)R = \frac{3}{4}R, \quad \nu_{1,3} = \left(1 - \frac{1}{9}\right)R = \frac{8}{9}R, \quad \dots, \quad \nu_{1,\infty} = \left(1 - \frac{1}{\infty}\right)R = R.$$

Фотоны первой серии имеют энергию от 10,15 эВ и выше – все они лежат в ультрафиолетовой области спектра. С ростом n соседние частоты все меньше и меньше отличаются друг от друга. Линии в спектре дискретно-монотонно сгущаются, накапливаясь у предельной частоты дискретного спектра $\nu_{1,\infty} = R$, задаваемой переходом электрона на первую орбиту с бесконечно удаленной орбиты, на которой его кинетическая энергия равна нулю (рис. 22). Но на этом спектр не кон-

чается. Удаленный от ядра электрон может иметь любую положительную энергию. При его переходе на первую орбиту испускается фотон энергии $\varepsilon = E - E_1 > E_\infty - E_1$ и частоты $\nu = \frac{E - E_1}{h} > \nu_{1,\infty}$. Эти пе-



Рис. 22

реходы легко проследить по графику энергий протон-электрон (см. рис. 22). Все линии этой серии (серии Лаймана) лежат в ультрафиолетовой области спектра от $\lambda_{1,2} = \frac{c}{\nu_{1,2}} = \frac{4c}{3R} = 1215,68 \text{ \AA}$ до грани-

цы серии $\lambda_{1,\infty} = \frac{c}{\nu_{1,\infty}} = \frac{c}{R} = 911,23 \text{ \AA}$, и далее – переходы на первый

уровень свободного электрона с $E > 0$.

Полагая $k = 2$ и $n = 3, 4, \dots$, получаем частоты второй серии, возникающей при переходе электрона на вторую устойчивую орбиту:

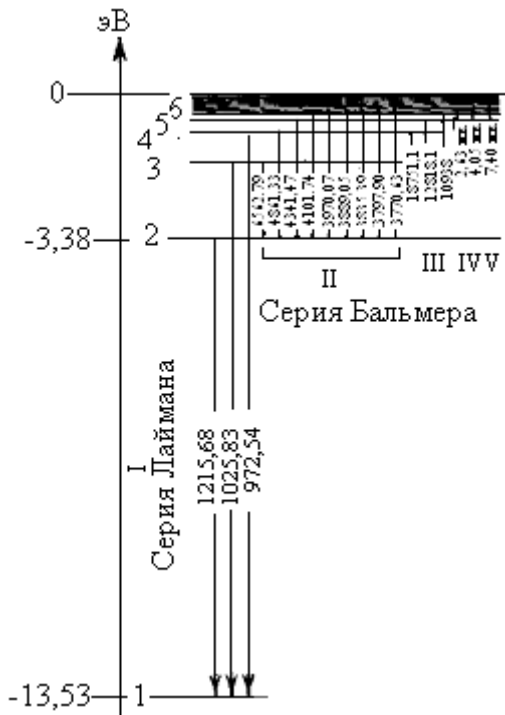
$$\nu_{2,3} = \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{9}\right)R = \frac{5}{36}R,$$

$$\nu_{2,4} = \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{16}\right)R = \frac{3}{16}R,$$

$$\dots, \nu_{2,\infty} = \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{\infty}\right)R = \frac{1}{4}R,$$

и затем $\nu > \nu_{2,\infty}$ (сплошной спектр).

Первые четыре линии бальмеровской серии лежат в видимой области спектра. Остальные линии серии, начиная с $\lambda_{2,7} = 3970,1 \text{ \AA}$, расположены в ультрафиолетовой области. Граница серии $\lambda_{2,\infty} = 3646 \text{ \AA}$, а далее – сплошной спектр.



В общем виде любая частота в спектре одноэлектронного атома представляется: $\nu_{k,n} = \frac{RZ^2}{k^2} - \frac{RZ^2}{n^2} = T_k - T_n$, где T_k, T_n – величины спектральных термов для орбит с номерами k и n , соответственно. Разность термов двух орбит k и n дает частоту спектральной линии, возникающей при переходе электрона с одной орбиты на другую.

Перейдем к спектрам поглощения. Переход электрона на более удаленные от ядра орбиты связан с увеличением энергии атома и может происходить только при поглощении энергии. Так, для перехода с первой орбиты на третью атом должен поглотить количество энергии, равное $E_3 - E_1 = h\nu_{1,3}$. Именно эту энергию атом и отдает с испускаемым фотоном при переходе с третьей орбиты на первую. Атом способен поглощать лишь те частоты, которые испускает сам.

Спектр поглощения возникает при прохождении потока излучения с непрерывным спектром через толщу газа. Атомы газа поглощают излучение только характерных частот, поэтому относительная интенсивность этих частот в спектре будет убывать, и на соответствующих местах непрерывного спектра энергии возникнут пустые «темные» линии.

Можно считать, что у щелочного металла с порядковым номером Z устойчивую структуру образуют $Z - 1$ электронов с электронной оболочкой, подобной оболочке предшествующего по таблице атома инертного газа. В поле такого иона движется один электрон, подобно одному электрону атома водорода. Однако для щелочных металлов была замечена необъяснимая в рамках указанных представлений особенность: ряд линий спектра расщепляется, образуя спектральные дублеты.

Собственный механический момент импульса электрона (спин). Спиновый магнитный момент электрона. Спиновое и магнитное спиновое квантовые числа. Вращающийся вокруг ядра электрон подобен волчку, что предопределяет магнитомеханические явления: намагничивание магнетика приводит к его вращению, а вращение магнетика вызывает его намагничивание. Существование первого явления было доказано экспериментально Эйнштейном и де Хаасом, второго – Барнеттом.

Механическую модель опыта Эйнштейна – де Хааса можно представить, посадив человека с вращающимся массивным колесом

на скамью Жуковского. Повернув колесо осью вверх, человек приходит во вращение в сторону, противоположную направлению вращения колеса. Повернув колесо осью вниз, человек вращается в другую сторону.

Если намагнитить стержень из магнетика, то магнитные моменты электронов установятся по направлению поля, а механические моменты – против поля. В результате суммарный механический момент электронов ΣL_i станет отличным от нуля (первоначально вследствие хаотической ориентации отдельных моментов он был равен нулю). Момент импульса системы стержень + электроны должен остаться без изменений. Поэтому стержень обретает момент импульса, равный ΣL_i , т. е. приходит во вращение. Изменение направления намагниченности приводит к изменению направления вращения стержня.

Тонкий железный стержень подвешивался на упругой нити и помещался внутрь соленоида (рис. 24). Закручивание нити при намагничивании стержня постоянным магнитным полем получалось малым. Для усиления эффекта соленоид запитывался переменным током с частотой, равной собственной частоте механических колебаний системы. Амплитуда колебаний достигала значений, которые можно было наблюдать по смещению светового зайчика, отраженного от укрепленного на нити зеркала.

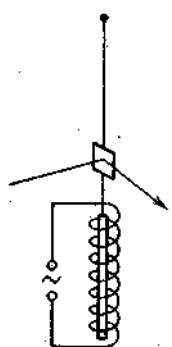


Рис. 24

Таким образом, знак заряда носителей, создающих молекулярные токи, совпал со знаком заряда электрона, но результат превысил магнитомеханическое отношение в два раза.

Барнетт приводил железный стержень в очень быстрое вращение вокруг его оси и измерял возникающее при этом намагничивание. Из результатов этого опыта Барнетт также получил величину магнитомеханического отношения, превышающую в два раза значение собственного магнитного момента электрона, равного магнетону Бора.

В 1925 г. Гаудсмит и Уленбек показали, что эта особенность, как и особенность спектров поглощения, может быть объяснена, если принять, что электроны обладают собственными (не связанными с орбитальными) механическими и магнитными моментами. Это требовало проверки.

Опыт Штерна и Герлаха. Экспериментальная проверка была проведена Штерном и Герлахом (1926 г.). Источником атомного пучка служила электропечь с веществом, подлежащим изучению. С помощью системы диафрагм выделялся тонкий пучок атомов, пропускался при отсутствии магнитного поля в вакууме и осаждался на холодной пластине тонким штрихом (след атомарного пучка). Картинка штриха не менялась, если пучок атомов проходил в вакууме сквозь однородное магнитное поле. Если же такой пучок пропускался сквозь сильно неоднородное магнитное поле, штрих (след) расслаивался.

Если магнитный диполь находится в однородном магнитном поле, то на него действует момент сил, но результирующая сила равна нулю. При движении в таком поле диполь ориентируется по полю, но траектория его движения не меняется. Если же диполь находится в неоднородном поле, то на его полюсы действуют разные силы с нулевой результирующей. В таком поле траектория движения диполя будет зависеть от направления его дипольного момента. Экспериментальная трудность состояла в необходимости реализации магнитного поля с неоднородностью, ощутимой на расстояниях порядка размеров атомов (1 \AA). Преодолеть это удалось с помощью магнитов с полюсными наконечниками (рис. 25).

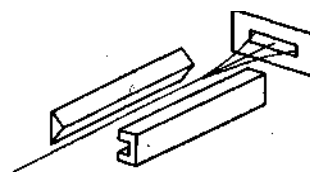


Рис. 25

Вспомним, что в помещенном в нестационарное магнитное поле контуре со свободными носителями электрического заряда возникает электродвижущая сила, равная $\mathcal{E} = \cos\alpha \partial B / \partial t$. Умножим обе части равенства на $I \partial t / \partial x$. В левой части получим градиент потенциальной энергии, определенный вдоль оси x силой F . Тогда на «электронные контуры» атомов пучка должна действовать сила $F = p_m \frac{dB}{dx} \cos\alpha$, величина и знак которой зависят от угла α между вектором p_m и направлением поля. При хаотическом распределении векторов моментов атомов в пучке имеются частицы, для которых значения α меняются от 0 до π . Поэтому и предполагалось, что узкий пучок атомов после прохождения между полюсами образует на экране сплошной растянутый след, края которого соответствуют атомам с ориентациями магнитных моментов под углами $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi$ (рис. 26). Но опыт дал странный результат: вместо сплошного распределенного следа полу-

чилились отдельные штрихи, симметричные относительно следа пучка, полученного в отсутствие поля. Литий, калий, натрий, серебро, атомарный водород давали всегда двойной след (см. рис. 26).

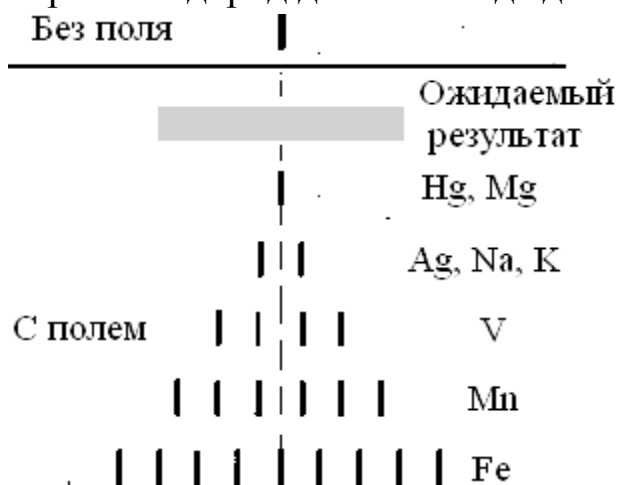


Рис. 26

Магнитный момент орбитального движения электрона атома водорода и каждого из трех электронов лития равен нулю. Также равен нулю суммарный магнитный момент орбитального движения всех электронов атома серебра. Значит, расщепление в магнитном поле пучка атомов этих элементов можно объяснить только двумя

возможными ориентациями собственного (спинового) магнитного момента валентного электрона. Тогда число штрихов равно числу возможных значений проекции магнитного момента на направление магнитного поля. Для атомов серебра, алюминия, меди и щелочных металлов оно равно двум, для ванадия, азота и галогенов – четырем, для кислорода – пяти, марганца – шести, железа – девяти, кобальта – десяти и т. д. Это означает, что углы, под которыми ориентируются магнитные моменты атомов по отношению к магнитному полю, принимают дискретные значения, т. е. что проекция магнитного момента на направление поля квантуется. Атомы ртути и магния не обнаружили отклонения (см. рис. 26), что указывало на отсутствие у них магнитного момента.

Опыт Штерна и Герлаха показал, что электрон обладает собственными механическим L_s и магнитным p_{ms} моментами, для которых магнитомеханическое отношение равно $-e/m$. В применении квантовой механики вращающееся тело может наклоняться только под углами, кратными величине \hbar . Это явление названо пространственным квантованием.

Представление электрона вращающимся шариком наглядно. Вращение зарядов обусловили бы круговые токи с появлением магнитного момента. Отсюда название свойства – спин (англ. *spin* – веретено). Но такое представление неверно, так как магнитомеханическое отношение в два раза больше, чем для орбитальных моментов. По-

этому просто полагают наличие внутренне присущего электрону спина как неотъемлемого свойства электрона, подобно массе и заряду.

Собственный момент импульса электрона определяется так же, как и для орбитального движения с результатом $L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)}$, где s – спиновое квантовое число. Число различных проекций механического момента L_{sz} на ось z равно $2s+1$. Для объяснения расщепления спектральных линий на два подуровня с помощью спина остается предположить, что $2s+1=2$ и спиновое квантовое число $s=1/2$.

Ясно, что собственный механический момент электрона L_σ может иметь лишь одно-единственное значение: $L_s = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)} = \hbar\sqrt{\frac{3}{4}}$.

Проекция момента на ось z не может превышать величину вектора и может принимать лишь два отличающихся знаком значения:

$$L_{sz} = \pm \frac{1}{2} \hbar = s\hbar.$$

Собственный магнитный момент электрона:

$$\mu_s = -\frac{e}{m_e} L_s = -\frac{e\hbar}{m_e} \sqrt{s(s+1)} = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)} = -\mu_B \sqrt{3}.$$

Знак минус указывает, что механический и магнитный моменты электрона направлены в противоположные стороны.

Проекция собственного магнитного момента электрона на ось z :

$$\mu_{sz} = -\frac{e}{m_e} L_{sz} = -\frac{e\hbar}{m_e} s = -\frac{e\hbar}{m_e} (\pm \frac{1}{2}) = \mp \mu_B.$$

Иные элементарные частицы также обладают спином, который оказывается целым или полуцелым – кратным величины \hbar . Таким образом, \hbar представляет естественную единицу момента импульса, подобно тому, как элементарный заряд e является естественной единицей заряда.

К квантовым числам n , l и m , характеризующим «форму» и ориентацию орбиты в пространстве, добавляется спиновое квантовое число s , характеризующее независимую ориентацию собственных моментов электрона. Четверка квантовых чисел n , l , m и s характеризует состояние одного электрона в поле атомного ядра. Именно поэтому результат формулы (39), определяющий число N_n различных состояний, отвечающих данному значению n , требуется скорректировать к виду $N_n = 2n^2$.

В любой момент времени любое возможное состояние либо вакантно, либо занято одной частицей. В применении к электронам в атоме принцип Паули утверждает: *никакие два электрона в атоме не могут быть одновременно в одном и том же состоянии и потому не могут обладать одинаковыми значениями всех четырех квантовых чисел.*

Многоэлектронные атомы и периодический закон Менделеева. С учетом принципа Паули рассмотрим многоэлектронный атом, заряд ядра которого равен Ze . Электроны будут занимать в соответствии с запретом Паули разные «орбиты» – состояния, характеризующиеся квантовыми числами n, l, m, s . Слоям орбит (электронным оболочкам) приданы наименования (см. таблицу): *K*-оболочка ($n = 1$), *L*-оболочка ($n = 2$), *M*-оболочка ($n = 3$), *N*-оболочка ($n = 4$), *O*-оболочка ($n = 5$), *P*-оболочка ($n = 6$), *Q*-оболочка ($n = 7$).

Обозначение состояний с разными значениями l

Оболочка (слой орбит)	n	$l = 0$ s	1 p	2 d	3 f	4 g	Максимальное число электронов $2n^2$
<i>K</i>	1	2					2
<i>L</i>	2	2	6				8
<i>M</i>	3	2	6	10			18
<i>N</i>	4	2	6	10	14		32
<i>O</i>	5	2	6	10	14	18	50

Правило отбора. При расчете частот водородного спектра учитывался закон сохранения энергии. Закон сохранения импульса выполнялся автоматически: атом получает отдачу при испускании фотона, так как импульс фотона весьма мал и отдача атома ничтожна и может не учитываться. Но остается неучтенным закон сохранения момента импульса.

Спиновый момент импульса фотона по величине вдвое больше спинового момента импульса электрона, т. е. равен \hbar . Как и спиновый момент электрона, он может давать на выделенное направление лишь две проекции $\pm\hbar$. Испуская или поглощая фотон, атом отдает или получает энергию, меняя свой момент импульса на величину спина фотона – на \hbar . Этому изменению момента атома отвечает изменение азимутального квантового числа электрона, совершающего переход

на единицу ($l' = l \pm 1$), что указывает на возможные переходы электрона с испусканием (или поглощением) фотона и называется правилом отбора. Переходы с излучением (поглощением), при которых соблюдаются правило отбора для l , называются разрешенными; в иных случаях – запрещенными.

2.4. Вынужденное излучение. Лазеры

Поглощение, спонтанное и индуцированное излучение. При излучении спонтанные (самопроизвольные) переходы с более высоких на более низкие уровни приводят к спонтанному испусканию атомами фотонов. Поглощение излучения веществом обуславливает вынужденные переходы на более высокие уровни. Этого оказалось недостаточно для объяснения равновесия между излучением и веществом, так как вероятность спонтанных переходов определяется лишь внутренними свойствами атомов и не зависит от интенсивности падающего излучения, а вероятность «поглощательных» переходов зависит как от свойств атомов, так и от интенсивности падающего излучения. Для установления равновесия при произвольной интенсивности падающего излучения необходимо допустить существование «испускательных» переходов, вызываемых излучением, вероятность которых возрастала бы с увеличением интенсивности излучения. Возникающее в результате таких переходов излучение назвали вынужденным индуцированным.

Эйнштейн доказал, что вероятность вынужденных переходов, сопровождающихся излучением, должна быть равна вероятности вынужденных переходов, сопровождающихся поглощением света. Таким образом, вынужденные переходы могут с равной вероятностью происходить как в одном, так и в другом направлении.

Направление распространения вынужденного излучения в точности совпадает с направлением распространения вызвавшего переход вынуждающего внешнего излучения. Поскольку уровни энергии атомных систем стабильны и резки, то соответствующие частоты оказываются постоянными. Вынужденное и вынуждающее излучения оказываются строго когерентными, что позволяет атомным системам обретать качество усилителей монохроматических электромагнитных волн. Такие процессы реализуются в квантовых усилителях и оптических квантовых генераторах, излучающих в диапазоне видимого, инфракрасного (лазер) и микроволнового (мазер) излучения.

Рассмотрим условия, при которых такое усиление возможно. Для определенности возьмем в качестве рабочего вещества атомарный газ, так что элементарными поглотителями и излучателями световых квантов будут свободные атомы. Обозначим через 1 и 2 энергетические уровни атома, переход между которыми отвечает частоте усиливаемого излучения ν , так что $E_2 - E_1 = h\nu$. Переход 1→2 может произойти только при поглощении фотона в результате взаимодействия между атомом и излучением. Переход 2→1 с излучением фотона может произойти спонтанно – независимо от действия излучения, и индуцировано – как результат воздействия проходящего потока излучения.

Если бы спонтанное излучение отсутствовало, то это означало бы, что равновесие между излучением и газом возможно при равном числе атомов в состояниях 1 и 2: $N_2 = N_1$. Наличие спонтанного излучения означает добавочную возможность переходов 2→1, так что равновесие становится возможным только при $N_1 > N_2$.

При термодинамическом равновесии распределение атомов по различным энергетическим состояниям E_1, E_2, \dots определяется законом Больцмана: $N_i \propto e^{-\frac{E_i}{kT}}$, откуда следует, что заселенность уровня (количество атомов в данном состоянии) с увеличением энергии состояния уменьшается. Число переходов между двумя уровнями пропорционально населенности исходного уровня: $\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}}$. По-

скольку $E_2 > E_1$, то $N_1 > N_2$ при любой возможной температуре $T > 0$. Следовательно, в системе атомов, находящейся в термодинамическом равновесии, поглощение падающей световой волны будет преобладать над вынужденным излучением, так что падающая волна при прохождении через вещество ослабляется в полном соответствии с законом Бугера: $I(l) = I_0 e^{-k\lambda l}$, определяющего ослабление интенсивности $I(l)$ пучка монохроматического света начальной интенсивностью I_0 , падающего на слой вещества толщиной l . Показатель поглощения $k\lambda$ различен для разных длин волн, но не зависит от интенсивности пучка и ее изменения. Плотность потока по мере прохождения света в среде падает экспоненциально в результате вынужденных пе-

переходов атомов с нижнего энергетического уровня на верхний. При переходе атомов с верхнего на нижний уровень в поток возвращаются кванты, испущенные лишь при вынужденных переходах. Кванты, испущенные спонтанно, в поток не возвращаются. Это и является причиной уменьшения плотности (интенсивности) потока пучка.

Создание инверсной заселенности. При спонтанном излучении фотон имеет произвольное направление вектора импульса. Лишь индуцированное излучение может вызывать усиление направленного потока излучения, которое будет тем больше, чем больше будет число индуцированных переходов $2 \rightarrow 1$ (пропорциональное N_2) и чем меньше будет поглощение, т. е. число переходов $1 \rightarrow 2$ (пропорциональное N_1). Условие усиления проходящего через среду излучения состоит в том, чтобы заселенность уровня 2 была бы больше заселенности уровня 1 ($N_2 > N_1$). Значит, для того чтобы получить усиление падающей волны, нужно обратить заселенность энергетических уровней, т. е. сделать так, чтобы в состоянии с большей энергией E_2 находилось большее число атомов, чем в состоянии с меньшей энергией E_1 . Такая возможность появляется, если систему открыть притоку энергии извне и отдаче энергии, т. е. привести систему атомов в неравновесное состояние и сильно нарушить распределение Больцмана. Достаточно большая плотность потока энергии извне может практически сравнять заселенности двух уровней ($N_2 = N_1$), но не может создать инверсную (по сравнению с равновесной) заселенность между ними. Создание инверсной заселенности уровней называется накачкой. Создание лазера стало возможным после того, как были найдены способы накачки. При взаимодействии излучения с веществом оказались возможными процессы, при которых поток излучения, проходя через активную среду, не ослабляется, а усиливается.

Итак, требуется большая плотность потока и активная среда – среда с инверсной заселенностью, способная усиливать проходящий поток. Наиболее простой путь создания инверсной заселенности – использование трехуровневой системы (рис. 27, а). Распределение заселенностей в равновесном состоянии качественно меняется при переводе системы в неравновесное состояние. При воздействии на систему излучения большой мощности с частотой накачки $\nu_n = (E_2 - E_0)/h$ заселенности уровней E_2 и E_0 практически сравниваются (рис. 27, б).

Допустим, что время жизни атомов на уровне E_2 очень мало и они спонтанно переходят на уровень E_1 , время жизни на котором у

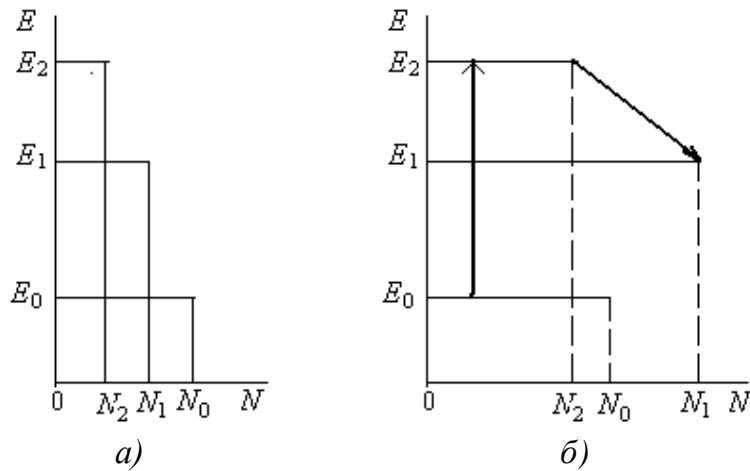


Рис. 27

них достаточно для накопления на нем. Именно в таком случае и создается инверсная заселенность между уровнями E_1 и E_0 (см. рис. 27, б). Этот переход может быть использован для усиления света с частотой $\nu = (E_1 - E_0)/h$.

Принцип действия лазеров. В построенном Мейманом первом лазере рабочим телом был цилиндрический стержень диаметром до 1 см и длиной около 5 см из розового рубина. Рубин представляет собой окись алюминия Al_2O_3 , в которой некоторые из атомов алюминия замещены атомами хрома. Торцы стержня были тщательно отполированы, представляя строго параллельные друг другу зеркала. Один торец покрывался непрозрачным слоем серебра, другой торец – слоем серебра, пропускающим до 8 % упавшей на него энергии.

Рубин освещается импульсной ксеноновой лампой (рис. 28), которая дает свет с широкой полосой частот. При достаточной мощно-

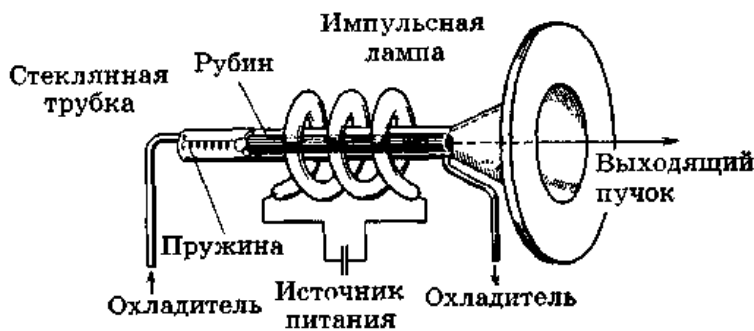


Рис. 28

сти лампы большинство ионов хрома Cr^{3+} (в таком виде хром находится в кристалле рубина) переводится в возбужденное состояние. Процесс сообщения рабочему телу лазера энергии для пере-

вода атомов в возбужденное состояние называется накачкой. Обратный переход в основное состояние происходит в два этапа. На первом этапе возбужденные ионы отдают часть своей энергии кристаллической решетке и переходят в метастабильное состояние. Переход из метастабильного состояния в основное запрещен правилами отбора.

Поэтому среднее время жизни иона в метастабильном состоянии (~ 1 мс) примерно в 10^5 раз превосходит время жизни в обычном возбужденном состоянии. На втором этапе ионы из метастабильного состояния переходят в основное, излучая фотон с $\lambda = 6943 \text{ \AA}$. На схеме уровней иона хрома Cr^{3+} (рис. 29) уровень 3 представляет собой полосу, образованную совокупностью близко расположенных уровней.

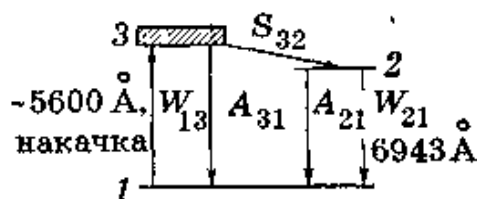


Рис. 29

Возбуждение ионов за счет накачки изображено стрелкой W_{13} . Время жизни уровня 3 очень мало ($\sim 10^{-8}$ с). В течение этого времени некоторые ионы перейдут спонтанно из полосы 3 на основной уровень 1. Такие переходы показаны стрелкой A_{31} . Однако вероятность перехода, изображенного стрелкой S_{32} , значительно больше, чем перехода A_{31} и большинство ионов перейдет на метастабильный уровень 2. При достаточной мощности накачки число ионов хрома, находящихся на уровне 2, становится больше числа ионов на уровне 1. Следовательно, возникает инверсия заселенностей уровней 1 и 2.

Стрелка A_{21} изображает спонтанный переход с метастабильного уровня на основной. Излученный при этом фотон может вызвать вынужденное испускание дополнительных фотонов (переход W_{21}), которые в свою очередь вызовут вынужденное излучение, и т. д. В результате образуется каскад фотонов. Напомним, что фотоны, возникающие при вынужденном излучении, летят в том же направлении, что и падающие фотоны. Фотоны, направление движения которых образуют малые углы с осью кристаллического стержня, испытывают многократные отражения от торцов образца. Поэтому путь их в кристалле будет очень большим, так что каскады фотонов в направлении оси получают развитие. Фотоны, испущенные спонтанно в других направлениях, выходят из кристалла через боковую поверхность.

Процесс образования каскада изображен схематически на рис. 30. До начала импульса ионы хрома находятся в основном состоянии (черные кружки на рис. 30, а). Свет накачки (сплошные стрелки на рис. 30, б) переводит большинство ионов в возбужденное состояние (светлые кружки). Каскад начинает развиваться, когда возбужденные ионы спонтанно излучают фотоны (штриховые стрелки на рис. 30, в) в направлении, параллельном оси кристалла (фотоны, испущенные по другим направлениям, выходят из кристалла).

Фотоны размножаются за счет вынужденного излучения. Этот процесс развивается (рис. 30, *з, д*), так как фотоны многократно проходят вдоль кристалла, отражаясь от его торцов. При каждом отражении от частично прозрачного торца небольшая доля (8 %) светового пучка выходит из кристалла (рис. 30, *е*). Поэтому после каждого акта накачки возникает вспышка лазерного излучения, состоящая из ряда импульсов, общая продолжительность которых равна нескольким микросекундам.

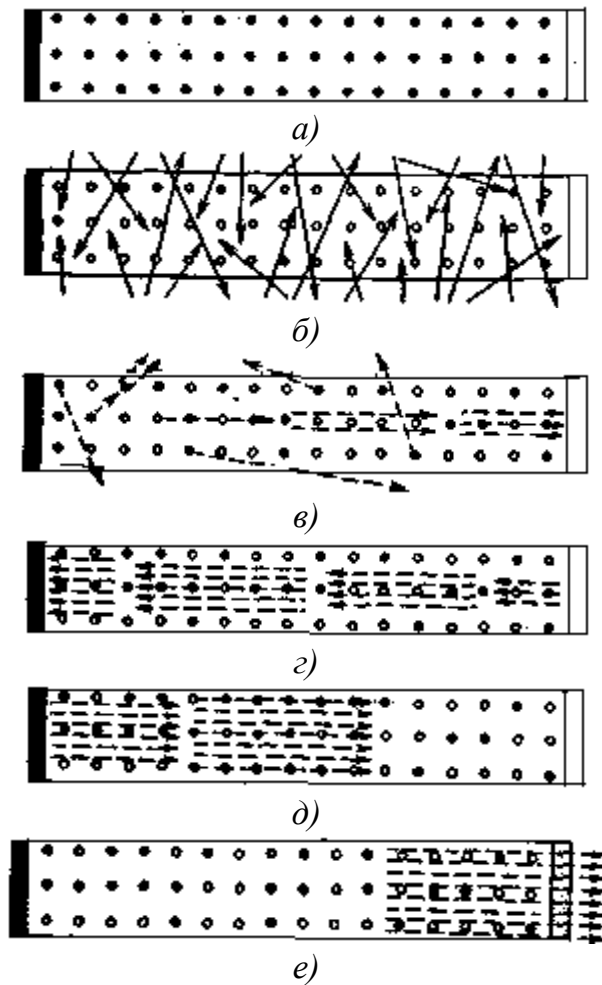


Рис. 30

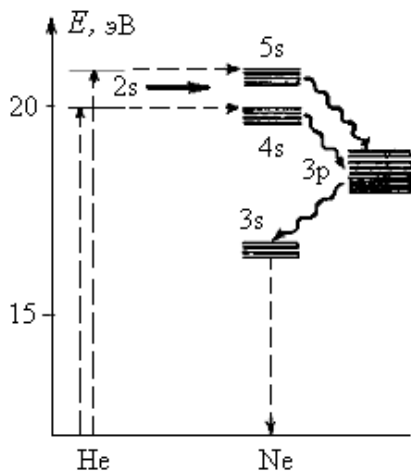


Рис. 31

Рассмотрим газовый лазер на смеси гелия и неона с непрерывным режимом работы (Джаван, 1961). На рис. 31 показаны первые возбужденные уровни He и Ne. У гелия два уровня 2s (отвечающие двум различным взаимным ориентациям спинов электронов). Эти уровни не могут быть возбуждены оптически, так как переход $1s \rightarrow 2s$ с поглощением фотона запрещен. Возбуждение достигается при газовом разряде за счет неупругих соударений с электронами (удары первого рода показаны вертикальными пунктирными стрелками). Состояния 2s – метастабильные, так как переходы $2s \rightarrow 1s$ с излучением фотона запрещены. У неона состояния 4s и 5s очень близки к указанным состояниям 2s гелия.

Поскольку передача энергии при столкновении для гелия в 2s-состоянии – единственный способ отдачи энергии, то эта энергия передается атомам неона, переходящим в состояния 4s и 5s (см. рис. 31, жирная стрелка). Из этих состояний разрешены переходы с излучением в состояние 3p. Разрешены опти-

чески и следующие переходы с $3p$ на нижние s -уровни. Так как на уровнях $4s$ время жизни $\sim 10^{-6}$ с, на уровнях $3p$ время жизни $\sim 10^{-8}$ с, то в газовом разряде, при непрерывной подкачке энергии, т. е. пополнении уровней $4s$ и $5s$, создается стационарная инверсная населенность уровней $Ne - 4s, 5s$ и $3p$.

Используются переходы $5s \rightarrow 3p$ – видимое излучение (см. рис. 31, верхняя волнистая стрелка) и $4s \rightarrow 3p$ – инфракрасное излучение (средняя волнистая стрелка). Переходы $3p \rightarrow 3s$ (нижняя волнистая стрелка) существенны лишь постольку, поскольку они «очищают» уровни $3p$.

Вероятность индуцированного перехода пропорциональна плотности имеющегося излучения. Для того чтобы индуцированное излучение значительно превышало «ненужное» спонтанное излучение, необходимо добиться высокой плотности усиливаемого излучения в веществе. Для этого каждый фотон вынуждается к прохождению вещества лазера в среднем не один, а несколько раз. Газ заключен в длинную трубку, замкнутую по торцам зеркалами. Газовый разряд поддерживается высокочастотным генератором. Одно из зеркал полупрозрачное и пропускает от процента до долей процента, отражая остальной поток обратно. В результате каждый фотон, прежде чем он успевает «прорваться» сквозь полупрозрачное зеркало, проходит вещество несколько раз.

По мере увеличения плотности движущихся вдоль оси лазера квантов число индуцированных переходов и появление новых квантов нарастают лавинообразно. Такой рост плотности излучения возможен лишь в первые моменты: часть излучения уходит сквозь полупрозрачное зеркало, населенность уровня N_2 уменьшается, а N_1 – возрастает, замедляя развитие процесса. При работе в непрерывном режиме устанавливается баланс, при котором убыль населенности уровня 2 непрерывно пополняется за счет соударений с атомами гелия, возбужденными до метастабильного состояния в газовом разряде.

Индуцированное излучение представляет собой результат резонансной раскачки электрона электрическим полем проходящего фотона. Это и объясняет когерентность проходящего и излучаемого с его помощью фотонов. А так как фотон проходит между зеркалами несколько раз, необходимо, чтобы фаза его при прохождении той же точки пространства (где находится «раскачиваемый» электрон) изменилась на величину, меньшую π , иначе раскачка сменится торможением.

Для лазеров характерны: строгая монохроматичность ($\Delta\lambda \sim 0,1 \text{ \AA}$), высокая временная и пространственная когерентность, большая интенсивность и узость пучка.

3. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

3.1. Теплоемкость кристаллов. Фононы

Классическая теория теплоемкости. Закон Дюлонга и Пти. В кристаллическом твердом теле атомы в узлах кристаллической решетки колеблются около положений равновесия в трех ортогональных направлениях, представляя независимо по каждому из них линейный осциллятор. Каждый осциллятор имеет энергию колебания kT , состоящую из кинетической $kT/2$ и потенциальной $kT/2$ энергий. Таким образом, тело, состоящее из n атомов, вследствие теплового движения обладает энергией $U = 3nkT$ и постоянной теплоемкостью $C_V = (\partial U/\partial T)_V = 3nk$.

Для моля вещества $n = N_A$ и $nk = R$. Тогда молярная теплоемкость равна $3R$ и не зависит от температуры, что является содержанием закона Дюлонга и Пти.

Экспериментальная зависимость теплоемкости неметаллических твердых тел от температуры, у которых единственной энергией, связанной с тепловым движением, является энергия колебаний атомов в узлах кристаллической решетки представлена на рис. 32. При приближении температуры к 0К теплоемкость стремится к нулю по степенному закону $C_V \sim T^3$. У металлических тел имеются свободные электроны, которые также участвуют в тепловом движении и дают вклад в теплоемкость.

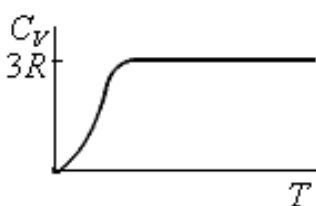


Рис. 32

К теплоемкости за счет колебаний кристаллической решетки добавляется теплоемкость за счет свободных электронов металла. Однако этот вклад невелик, поскольку в тепловом движении участвует лишь небольшая доля электронов, энергии которых лежат вблизи энергии поверхности Ферми (см. далее). Решеточная теплоемкость убывает $\sim T^3$, а электронная — $\sim T$, поэтому с понижением температуры ее роль нарастает и при низкой температуре электронная теплоемкость превалирует.

Квантовая теория теплоемкости и модель Эйнштейна. Для объяснения зависимости теплоемкости от температуры А. Эйнштейн (1907 г.) предложил воспользоваться соображениями о дискретном характере энергий осцилляторов, подобно тому как это было сделано М. Планком для излучения абсолютно черного тела.

Элементарную порцию энергии E линейного осциллятора свяжем с частотой его колебаний соотношением связи энергии фотона с частотой: $E = \hbar\omega$. Тогда возможные энергии осциллятора $E_n = E_0 + nE$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) представляются с учетом его минимальной энергии E_0 .

Вероятность состояния осциллятора с энергией E_n определяется формулой Больцмана

$$P_n = A \exp[-E_n / (kT)] = A \exp[-(E_0 + nE) / kT], \quad (40)$$

где постоянная A определяется условием нормировки $\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1$ и

$$A = \frac{1}{\exp[-E_0 / (kT)] \sum_{n=0}^{\infty} \exp[-nE / (kT)]}.$$

Вычислим среднюю энергию осциллятора:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} E_n P_n = \sum_{n=0}^{\infty} (E_0 + nE) P_n = E_0 \sum_{n=0}^{\infty} P_n + E \sum_{n=0}^{\infty} n P_n = E_0 + E \sum_{n=0}^{\infty} n A \exp[-(E_0 + nE) / kT]; \\ \langle E \rangle &= E_0 + EA \exp\left[-E_0 / (kT) \sum_{n=0}^{\infty} n \exp[-nE / (kT)]\right]; \\ \langle E \rangle &= E_0 + \frac{E \sum_{n=0}^{\infty} n \exp[-nE / (kT)]}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp[-nE / (kT)]}. \end{aligned} \quad (41)$$

Рассмотрим числитель и знаменатель дроби в уравнении (41) раздельно. К знаменателю применим формулу суммы убывающей (так как $\exp(-E/kT) < 1$) геометрической прогрессии (прил. 1.):

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp[-nE / (kT)] = \frac{e^{-\frac{E}{kT}n} - 1}{e^{-\frac{E}{kT}} - 1} = \frac{1}{1 - \exp[-E / (kT)]}. \quad (42)$$

Перепишем (42) в виде $\sum_{n=0}^{\infty} \exp[-nE / (kT)] = \{1 - \exp[-E / (kT)]\}^{-1}$.

Дифференцируя обе части этого равенства по E , получим

$$\sum_{n=0}^{\infty} n \exp[-nE / (kT)] = \frac{e^{-\frac{E}{kT}}}{\left(e^{-\frac{E}{kT}} - 1\right)^2}. \quad (43)$$

При подстановке (42) и (43) выражение (41) принимает вид

$$\langle E \rangle = E_0 + \frac{E}{\exp[E/(kT)] - 1}. \quad (44)$$

Для энергии колебаний одного моля осцилляторов получаем $U = 3N_A \langle E \rangle = 3N_A E_0 + \frac{3N_A E}{\exp[E/kT] - 1}$ и формулу Эйнштейна теплоемкости

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3N_A k \left(\frac{E}{kT} \right)^2 \frac{\exp[E/(kT)]}{\{\exp[E/(kT)] - 1\}^2}. \quad (45)$$

«Элементарная порция энергии» E зависит от свойств вещества и характеризуется соотношением $k\Theta_E = E$, где Θ_E – температура Эйнштейна. В новых обозначениях формула (45) переписется в виде

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3R \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 \frac{\exp(\Theta_E/T)}{[\exp(\Theta_E/T) - 1]^2}.$$

При большой температуре ($T \rightarrow \infty$) отношение $\Theta_E/T \rightarrow 0$. Около этой точки линейные члены разложения экспоненциальной функции в ряд Маклорена (прил. 2): $e^x \approx 1 + x$. Тогда $C_V \approx 3R \frac{(\Theta_E/T)^2 \exp(\Theta_E/T)}{(\Theta_E/T)^2}$

и $C_V \rightarrow 3R \exp(0) \rightarrow 3R$.

При $T \rightarrow 0\text{K}$ экспоненциальный множитель стремится к нулю значительно быстрее, чем степенной множитель – к бесконечности, поэтому $C_V = 3R \left(\frac{E}{kT} \right)^2 \exp[-E/(kT)] \rightarrow 0$.

Формула (45) при приближении к 0К, предсказывая экспоненциальное уменьшение теплоемкости $C_V \sim \exp[-E/(kT)]$, а эксперимент дает степенное уменьшение $C_V \sim T^3$. Кроме этого принимается, что твердое тело есть совокупность независимых линейных осцилляторов, т. е. движения атомов в твердом теле считаются независимыми друг от друга. Но это заведомо неверно, так как удержание атомов около положений равновесия – результат коллективного взаимодействия атомов.

Теория теплоемкости Дебая. Фононы. Чтобы проанализировать теплоемкость вблизи 0К, необходимо найти энергии, которые может иметь система атомов вблизи 0К. Пусть некоторый атом в результате сообщения ему энергии извне выдвинулся из положения

равновесия. Этот атом взаимодействует с соседними атомами, которые его отталкивают в положение равновесия и в свою очередь выталкиваются сами из положений равновесия. Коллективное движение атомов, при котором смещение атома передается соседнему, затем следующему и так далее, есть не что иное, как звуковая волна в твердом теле, и элементарные возбуждения – звуковые колебания.

Система атомов рассматривается как совокупность связанных осцилляторов, а любое движение такой системы представляется суперпозицией нормальных (главных) колебаний или нормальных мод. Каждая из нормальных мод характеризуется энергией $E_i = \hbar\omega_i$. Если в твердом теле возбуждено n колебаний данной моды, то полная энергия этих n колебаний $E_{in} = n\hbar\omega_i$.

Вероятностную связь данной моды с полной энергией E_{in} описывает распределение Больцмана: $P_n = A \exp[-E_{in}/(kT)] = A \exp[-n\hbar\omega/(kT)]$. Алгоритм определения средней энергии, приходящейся на данную моду, аналогичен формальному алгоритму (40 – 44):

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{\exp[\hbar\omega/(kT)] - 1}, \quad (46)$$

но теперь носителем энергии является не отдельный осциллятор, а нормальная мода колебаний системы в целом, которая рассматривается как квазичастица, называемая фононом.

Теория теплоемкости Дебая основывается на расчете числа длинноволновых мод звуковых колебаний твердого тела, поскольку частоты колебаний вблизи температуры 0К должны быть малыми, соответствуя достаточно малым энергиям возбуждения.

Выведем волновое уравнение для продольных волн, распространяющихся вдоль оси X . Рассмотрим простой случай изотропного твердого тела, когда вычисление числа мод для каждой поляризации одинаково.

Возьмем тонкий цилиндр с площадью основания S и высотой Δx . Обозначим: $\rho(x, t)$ – плотность вещества, а $p(x, t)$ – давление, которое в нем возникает в результате изменения плотности; $u(x, t)$ – скорость колебаний частиц вещества вдоль оси X .

Напишем уравнение сохранения массы в объеме в форме определения и в форме уравнения неразрывности:

$$\frac{dm}{dt} = - \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV \quad \text{и} \quad \frac{dm}{dt} = \int_{S'} \rho u dS' \quad \text{или} \quad \frac{dm}{dt} = \int_V \text{div}(\rho u) dV,$$

где S' – площадь поверхности, стягивающей объем V .

Сопоставляя формы записи и с учетом выбранного направления вдоль оси X , получаем

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0. \quad (47)$$

Сила, действующая на массу в рассматриваемом объеме и в том же направлении, обуславливается разностью давлений p на стенки цилиндра. Следовательно, уравнение Ньютона $dp_x / dt = F_x$ принимает вид

$$\rho S \Delta x \frac{\partial u}{\partial t} = S[p(x) - p(x + \Delta x)] \text{ или } \rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x}, \text{ или}$$

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0. \quad (48)$$

Изменения плотности и давления в среде следует считать малыми:

$$\rho = \rho_0 + \rho', \quad p = p_0 + p', \quad (49)$$

где ρ_0 и p_0 – постоянные плотность и давление в среде при отсутствии волны; ρ' и p' – изменения плотности и давления, связанные с волной.

Дальнейшие вычисления проводятся с сохранением лишь величин первого порядка малости по ρ' и p' . Подставляя (49) в уравнения (47) и (48) и сохраняя лишь линейные по ρ' и p' члены, получаем

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \text{и} \quad \rho_0 \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial p'}{\partial x} = 0. \quad (50)$$

Этих двух уравнений недостаточно для определения трех неизвестных величин ρ' , p' , u . Добавим уравнение состояния, связывающее давление и плотность:

$$p' = p'(\rho') \quad \text{и} \quad \frac{\partial p'}{\partial x} = \frac{\partial p'}{\partial \rho'} \frac{\partial \rho'}{\partial x}, \quad \text{где в заданном направлении } \frac{\partial p'}{\partial \rho} = v^2.$$

Примечание: $\frac{\partial p'}{\partial \rho} = v^2$, так как левая часть равна RT/M , а $\langle v_{\text{КВ}} \rangle = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$ по трем ортогональным направлениям. В выбранном направлении $\langle v_{\text{КВ}} \rangle = \sqrt{\frac{RT}{M}}$. Как будет видно из дальнейшего, v является скоростью распространения волн.

Перепишем уравнения (50) с подстановкой $\frac{\partial p'}{\partial \rho} = v^2$:

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \text{и} \quad \rho_0 \frac{\partial u}{\partial t} + v^2 \frac{\partial \rho'}{\partial x} = 0. \quad (51)$$

Продифференцировав первое из уравнений (51) по t , а второе по x и вычитая первое уравнение из второго, находим

$$\frac{\partial^2 \rho'}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \rho'}{\partial t^2} = 0. \quad (52)$$

Дифференцируя первое из уравнений (51) по x , а второе по t и вычитая одно из другого, получаем

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0. \quad (53)$$

Решением уравнений (52) и (53) является любая функция $f(t - x/v)$, поэтому они описывают волну, распространяющуюся вдоль оси X со скоростью v распространения фронта волны. Фронт волны задается условием $t - x/v = \text{const}$, из которого следует, что $\partial x / \partial t = v$.

Решение уравнений (52) и (53) будем искать в виде

$$\rho' = \rho_0 \exp[i(\omega t - kx)] \text{ и } u = u_0 \exp[i(\omega t - kx)]. \quad (54)$$

Подставляя (54) в (51), получаем уравнения определения ρ_0 и u_0 :

$$-i\omega\rho_0 + ik\rho_0 u_0 = 0;$$

$$ikv^2\rho_0 - i\omega\rho_0 u_0 = 0.$$

Эта однородная система имеет ненулевые решения для ρ_0 и u_0 , если определитель коэффициентов уравнений равен нулю, т. е.

$$\begin{vmatrix} i\omega & ik\rho_0 \\ ikv^2 & -i\omega\rho_0 \end{vmatrix} = \omega^2 - k^2v^2\rho_0 = 0. \text{ Откуда} \quad (55)$$

$$\omega = \pm vk$$

Дисперсионное соотношение (55) позволяет определить частоты (энергии) мод по их волновым числам.

Возьмем тело в виде куба объемом L^3 и поместим начало координат в одну из вершин. В теле конечного размера возникают стоячие волны. Рассмотрим плоские стоячие волны по оси X . Для стационарных решений вида $A \sin kx$ или $B \cos kx$ необходимо положить $A = 0$, а на k наложить условие $kL = n\pi$ при $n = 1, 2, \dots$. Оно определяет дискретный набор волновых чисел, при которых возможно существование стоячих волн. Аналогичные формулы находятся и для других осей координат. Получаем наборы волновых чисел, каждому из которых соответствует стоячая волна, представляющая моду колебаний:

$$k_x = \pi n_x / L \quad (n_x = 1, 2, \dots);$$

$$k_y = \pi n_y / L \quad (n_y = 1, 2, \dots);$$

$$k_z = \pi n_z / L \quad (n_z = 1, 2, \dots).$$

Числа n_x, n_y, n_z пробегают все возможные значения независимо. Подсчет числа мод сводится к определению числа различных троек (n_x, n_y, n_z) , или, иными словами, к подсчету числа точек, декартовы координаты которых равны (n_x, n_y, n_z) . Число этих точек в объеме с длинами сторон $\Delta n_x, \Delta n_y$ и Δn_z равно $\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z$. Значит, число мод, соответствующее этим числам,

$$dN = \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = (L^3 / \pi^3) dk_x dk_y dk_z, \quad (56)$$

где $\Delta n_x = (L/\pi) dk_x$ и т. д. В правой части (56) написаны дифференциалы dk_x, dk_y, dk_z , так как $L \gg \lambda$.

Для подсчета dN удобнее перейти к сферическим координатам пространства волновых чисел k_x, k_y, k_z , принимая во внимание, что они имеют лишь положительное значение (в части 1/8 сферы). Это означает, что в (56) надо положить $dk_x dk_y dk_z = (4\pi/8) k^2 dk$. В результате для числа мод в интервале волновых чисел от k до $k + dk$ из (56) получаем $dN = \frac{4\pi L^3}{(2\pi)^3} k^2 dk$. Из (55) следует, что $k^2 dk = (1/v^3) \omega^2 d\omega$. Тогда

число мод с частотой колебаний между ω и $\omega + d\omega$:

$$dN = \frac{4\pi L^3}{(2\pi)^3 v^3} \omega^2 d\omega. \quad (57)$$

Формула (57) справедлива и для каждой из поперечных мод. Обозначив скорости продольной и поперечной мод соответственно $v_{пр}$ и $v_{пн}$ и полагая, что в изотропном случае скорости поперечных мод одинаковы, получим

$$dN = \frac{4\pi L^3}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{v_{пр}^3} + \frac{2}{v_{пн}^3} \right) \omega^2 d\omega = \frac{12\pi L^3}{(2\pi)^3 \langle v \rangle^3} \omega^2 d\omega \quad (58)$$

при $\frac{1}{v_{пр}^3} + \frac{2}{v_{пн}^3} = \frac{3}{\langle v \rangle^3}$, где $\langle v \rangle$ – средняя скорость звука.

Полная энергия всех мод колебаний с учетом (46) и (58)

$$U = \int_0^\infty \langle E \rangle dN = \frac{12\pi L^3}{(2\pi)^3 \langle v \rangle^3} \int_0^\infty \frac{\hbar \omega \omega^2 d\omega}{e^{\hbar \omega / kT} - 1}.$$

После замены переменной $\xi = \hbar \omega / kT$ и простых преобразований имеем

$$U = \frac{12\pi L^3 \hbar}{(2\pi)^3 \langle v \rangle^3} \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \int_0^\infty \frac{\xi^3 d\xi}{e^\xi - 1}, \quad (59)$$

где табличный интеграл равен $\pi^4/15$. Это позволяет определить зависимость теплоемкости $C_V(T)$: $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V \propto T^3$.

Полученную на основе дисперсионного соотношения формулу (58) применим для частотного диапазона $0 - \omega_{\text{макс}}$, где $\omega_{\text{макс}}$ определим из равенства полного числа мод максимальному числу мод $3N_A$:

$$3N_A = \int_0^{\omega_{\text{макс}}} dN = \frac{12\pi L^3}{(2\pi)^3 \langle v \rangle^3} \int_0^{\omega_{\text{макс}}} \omega^2 d\omega = \frac{4\pi L^3 \omega_{\text{макс}}^3}{(2\pi)^3 \langle v \rangle^3}, \quad (60)$$

откуда $\frac{3N_A}{\omega_{\text{макс}}^3} = \frac{L^3}{2\pi^2 \langle v \rangle^3}$, где максимальную частоту ($\omega_{\text{макс}} = \omega_D$)

выражают через температуру Дебая Θ_D : $\hbar\omega_{\text{макс}} = k\Theta_D$. После замен в формуле (59) и простых преобразований получим

$$U = 9RT \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \frac{\xi^3 d\xi}{e^\xi - 1}.$$

При $T \gg \Theta_D$ величина $\xi \rightarrow 0$, и $e^\xi \approx 1 + \xi$, поэтому формула примет вид:

$$U = 9RT \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \xi^2 d\xi = 3RT \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^3 = 3RT,$$

а $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = 3R$ в соответствии с законом Дюлонга и Пти. При

$T \ll \Theta_D$ формула примет вид: $U = 9RT \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^\infty \frac{\xi^3 d\xi}{e^\xi - 1} = 9RT \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \frac{\pi^4}{15}$.

Тогда теплоемкость в расчетной форме $C_V = 233R(T/\Theta_D)^3$. Свойства материалов учитываются значением температуры Дебая Θ_D , а кривая теплоемкости – функции отношения T/Θ_D является универсальной (рис. 33). Обычно температура Дебая лежит в пределах от 100 до 1000 К: для меди она равна 340 К, а для алмаза – около 2000 К.

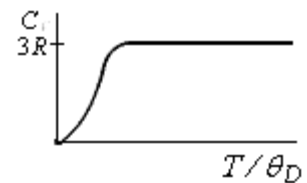


Рис. 33

3.2. Элементы квантовой статистики

Квантовые статистики. Бозоны и фермионы. Число микросостояний различных частиц подчиняется распределению Максвелла – Больцмана. Случаи неразличимых частиц, когда при обмене их местами физическая ситуация не меняется, рассматриваются моделями Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. В модели Бозе – Эйнштейна в каждом квантовом состоянии может находиться любое число частиц, а в модели Ферми – Дирака – не более одной.

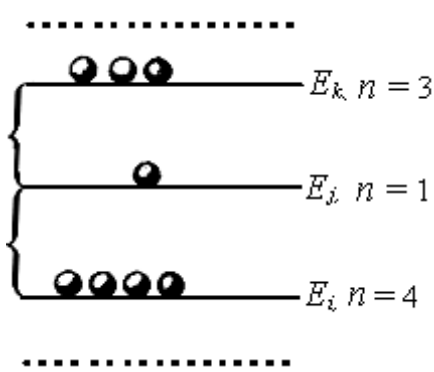


Рис. 34

Частицы с целым спином (бозоны) подчиняются статистике Бозе – Эйнштейна, а частицы с полуцелым спином (фермионы) – статистике Ферми – Дирака.

Пусть имеется большое число n частиц, каждая из которых может иметь дискретный набор равновероятных значений энергии E_i . Обозначим число частиц n_i с энергией E_i (рис. 34).

Полная энергия E всех частиц и общее число n частиц постоянны:

$$E = \sum_i n_i E_i = \text{const}; \quad (61)$$

$$n = \sum_i n_i = \text{const}. \quad (62)$$

Из теории размещений (прил. 3) известно число способов, которыми можно выбрать n_i различных частиц из n различных частиц:

$$\Gamma_i = \frac{n!}{n_i!(n - n_i)!}. \quad (63)$$

Необходимо найти число способов, которыми частицы могут быть распределены по энергиям E_i . Поскольку микросостояния независимы между собой, то полное число Γ микросостояний, реализующих распределение частиц по энергиям E_i , равно произведению числа микросостояний (63), в которых n_i частиц находятся на уровне с энергией E_i :

$$\Gamma = \prod_i \Gamma_i = \prod_i \frac{n!}{n_i!(n - n_i)!},$$

где i пробегает значения, соответствующие всем доступным для частиц энергиям.

Энергия не единственная характеристика, и частица данной энергии может находиться в разных квантовых состояниях. Частицы

неразличимы, но распределяются в соответствии с «правилами поведения» по различным квантовым состояниям. В итоге образуется распределение по энергиям. «Конкуренция» между частицами при занятии состояний в статистике Ферми – Дирака очень высока, так как занятое частицей состояние запрещено для других частиц. «Конкуренция» в статистике Ферми – Дирака ослабевает, когда число состояний много больше числа частиц. В статистике Бозе – Эйнштейна конкуренция отсутствует – частица может занять состояние независимо от того, занято оно другими частицами или свободно. При малом среднем числе частиц, приходящихся на одно квантовое состояние, распределения Ферми – Дирака, Бозе – Эйнштейна и Максвелла – Больцмана совпадают по форме.

Распределение Ферми – Дирака. Для наглядности в модели распределения частиц по квантовым состояниям представим разные энергетические уровни большими ящиками, а разные состояния в пределах одной и той же энергии – малыми ящиками внутри больших (рис. 35). Число больших ящиков равно числу i уровней энергии E_i , а число малых ящиков в большом i -м ящике обозначим g_i . Частицы в форме неразличимых шаров размещаются по малым ящикам. В модели Ферми – Дирака в каждый малый ящик можно поместить лишь один шар.

В каждом из больших ящиков может находиться n_i шаров, при $n_i \leq g_i$. Число способов, сколькими n_i неразличимых между собой шаров могут быть размещены по g_i местам, дается формулой

$$\Gamma_i = \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}.$$

В каждом из больших ящиков микросостояния независимы, и не играет роли, какие из n частиц находятся в каком-то ящике. Поэтому полное число состояний в совокупности всех больших ящиков равно произведению числа микросостояний в отдельных больших ящиках:

$\Gamma = \prod_i \Gamma_i = \prod_i \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}$, где i в произведении учитывает все большие ящики.

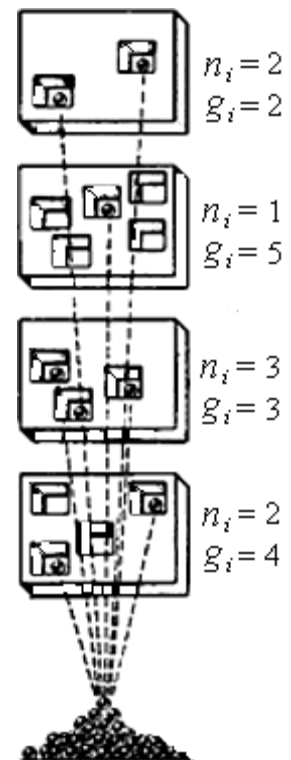


Рис. 35

Наиболее вероятное равновесное состояние требует максимума числа Γ . При анализе удобно исследовать не Γ , а $\ln\Gamma$. Тогда

$$\ln\Gamma = \sum_i \ln\Gamma_i = \sum_i \ln\left[\frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}\right].$$

Экстремум находится методом неопределенных множителей Лагранжа, учитывающих краевые условия (см. (61) и (62)). Зависимость Γ от этих условий неизвестна, поэтому вводятся множители $(-\beta)$ и $(-\alpha)$ в равенства (61) и (62). Вариации около экстремальной точки и постоянных значений должны быть равны нулю. Получаем

$$\begin{aligned} \delta\ln\Gamma &= \sum_i \delta\ln\Gamma_i = \sum_i \frac{\partial\ln\Gamma_i}{\partial n_i} \delta n_i = 0, \quad -\beta\delta E = \sum_i (-\beta E_i \delta n_i) = 0, \\ -\alpha\delta n &= \sum_i (-\alpha \delta n_i) = 0. \end{aligned}$$

Очевидно, что $\delta\ln\Gamma - \beta\delta E - \alpha\delta n = \sum_i \left[\left(\frac{\partial\ln\Gamma_i}{\partial n_i} - \beta E_i - \alpha \right) \delta n_i \right] = 0$ и

$$\frac{\partial\ln\Gamma_i}{\partial n_i} - \beta E_i - \alpha = 0, \quad \text{где } \Gamma_i = \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}.$$

С помощью приближения Стирлинга (прил. 4) имеем

$$\frac{\partial\ln\Gamma_i}{\partial n_i} = \frac{\partial}{\partial n_i} \left[\ln \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!} \right] = \frac{\partial}{\partial n_i} [\ln g_i! - \ln n_i! - \ln(g_i - n_i)!] = -\frac{\partial}{\partial n_i} [\ln n_i! + \ln(g_i - n_i)!];$$

$$\frac{\partial\ln\Gamma_i}{\partial n_i} = -\frac{\partial}{\partial n_i} [n_i \ln n_i - n_i + (g_i - n_i) \ln(g_i - n_i) - (g_i - n_i)];$$

$$\frac{\partial\ln\Gamma_i}{\partial n_i} = -[\ln n_i + 1 - 1 + (-1) \ln(g_i - n_i) + \frac{(g_i - n_i)}{(g_i - n_i)} (-1) + 1]$$

$$\text{или } \frac{\partial\ln\Gamma_i}{\partial n_i} = \ln\left(\frac{g_i}{n_i} - 1\right).$$

Тогда с учетом независимости вариаций δn_i получаем

$$\ln\left(\frac{g_i}{n_i} - 1\right) - \beta E_i - \alpha = 0; \quad (64)$$

$$\frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{\exp(\alpha + \beta E_i) + 1}, \quad (65)$$

где n_i/g_i – число частиц с энергией E_i , приходящихся на одно квантовое состояние. Формула (65) называется *распределением Ферми – Дирака*.

Распределение Бозе – Эйнштейна. Используем модель больших и малых ящиков и шаров (см. рис. 35), но в каждом квантовом состоянии может находиться произвольное число неразличимых частиц.

Распределение шаров n_i по малым ящикам g_i проведем, представляя все малые ящики g_i и шары n_i и $n_i + g_i$ различимыми предметами. Берем любое конкретное распределение $n_i + g_i$ предметов. В ящик g_i помещаем все шары n_i , которые в этом распределении расположены между ним и следующим за ним ящиком. В последний в данном распределении ящик помещаем все шары, которые расположены после него, плюс все шары, которые в начале этого распределения расположены перед первым ящиком. Ясно, что таким способом мы все шары n_i поместим в ящики g_i , а, перебрав всевозможные распределения, проведем всевозможные способы распределения шаров n_i по ящикам g_i , считая шары и ящики различимыми предметами и принимая, что порядок следования предметов существен. Число таких распределений равно $(n_i + g_i)$. Для распределения неразличимых шаров порядок ящиков несуществен, поэтому Γ_i различных распределений n_i шаров по g_i ящикам определяется в форме $\Gamma_i = \frac{(n_i + g_i)!}{n_i!g_i!}$. Общее

$$\text{число микросостояний } \Gamma = \prod_i \Gamma_i = \prod_i \frac{(n_i + g_i)!}{n_i!g_i!}.$$

Дальнейшие рассуждения полностью аналогичны вышеприведенным при выводе формул (64) и (65), но с иным результатом:

$$\ln\left(\frac{g_i}{n_i} + 1\right) - \beta E_i - \alpha = 0 \text{ и}$$

$$\frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{\exp(\alpha + \beta E_i) - 1}. \quad (66)$$

Формула (66) называется *распределением Бозе – Эйнштейна*.

При очень малых значениях n_i/g_i экспоненциальный член в знаменателе правой части обеих распределений (65 и 66) значительно больше единицы. Пренебрегая единицей в знаменателе и при $A = e^{-\alpha}$, получаем распределение в виде $n_i = A g_i e^{-\beta E_i}$.

Для непрерывного спектра энергий имеем экспоненциальное распределение Максвелла – Больцмана с известным $\beta = 1/(kT)$. Пара-

метр α определяется из условия сохранения числа частиц (62) в распределении Ферми – Дирака (см. (65)) в форме

$$n = \sum_i n_i = \sum_i \frac{g}{\exp(\alpha + \beta E_i) + 1}.$$

Электронный газ. Уровень и энергия Ферми. Электропроводность металлов обусловлена наличием в них «свободных» электронов, т. е. электронов, не связанных с конкретным атомом. Эти электроны слабо взаимодействуют и с совокупностью атомов металла. Они движутся в области пространства всего объема металла без существенного ограничения направлений импульсов. По аналогии с движением молекул в газе совокупность таких электронов называют электронным газом. Число свободных электронов в металлах различно, но обычно близко к соотношению 1 электрон/атом. Поэтому число свободные электроны принимают равным числу атомов.

Не вдаваясь в технику математических расчетов, приведем оценку числа α : $\alpha = -\frac{2\pi\hbar^2}{m_e kT} \left(\frac{3\rho\sqrt{\pi}}{4gm_a}\right)^{\frac{2}{3}}$. Подставляя значения плотности

меди $\rho = 8,8 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, массы атома меди $m_a = M/N_A = 0,063/6 \cdot 10^{23} \text{ кг}$ (M – молярная масса), $g = 2$ (спин может принимать два значения) и при температуре $T = 300\text{К}$, находим $\alpha = -271$. Это означает, что экспоненциальный член в знаменателе формулы распределения Ферми – Дирака (см. (65)) пренебрежимо мал вплоть до очень больших энергий электронов (до 7 эВ), сопоставимых с работой выхода. В металле немногие свободные электроны могут иметь или превосходить такую энергию. Поэтому для подавляющего числа электронов экспоненциальный член в знаменателе распределения Ферми – Дирака полагают равным нулю.

Введем величину $\mu = -\alpha kT$ в форму распределения (65):

$$\frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{\exp[(E_i - \mu)/kT] + 1}.$$

При $E_i < \mu$ и $T \rightarrow 0$ получим $\exp[(E_i - \mu)/kT] \rightarrow 0$ и $n_i/g_i \rightarrow 1$, т. е. в каждом квантовом состоянии с энергией меньше μ будет находиться по одной частице. При $E_i > \mu$ и при $T \rightarrow 0$, получим $\exp[(E_i - \mu)/kT] \rightarrow \infty$ и $n_i/g_i \rightarrow 0$, т. е. такие квантовые состояния свободны. Вид распределения Ферми – Дирака при $T \rightarrow 0$ показан на рис. 36.

Такое распределение требует минимальной полной энергии при соблюдении принципа Паули. Это означает, что электроны заполняют квантовые состояния с самого нижнего энергетического уровня, последовательно занимая квантовые состояния: по одному – на состояние. Последний электрон занимает уровень с максимальной энергией. Этот уровень называется уровнем Ферми с энергией Ферми (μ).

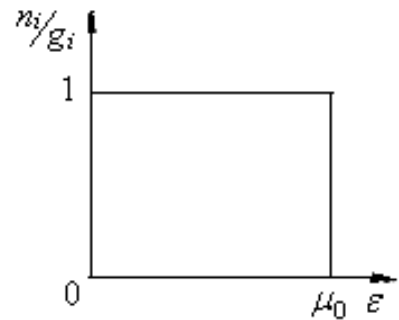


Рис. 36

Такое наглядное определение имеет смысл лишь в применении к свободным электронам в металле. В диэлектрике энергия Ферми приходится примерно на середину запрещенной зоны, и заведомо нет электронов, обладающих такой энергией. Поэтому более общее определение гласит: энергией Ферми (μ) называется такая энергия, при которой распределение Ферми – Дирака принимает значение 1/2.

При $T > 0$ К распределение Ферми – Дирака размывается в окрестности уровня Ферми μ в области порядка kT (рис. 37). При $T = 0$ распределение показано сплошной линией, при $T \neq 0$ – пунктиром. Энергия Ферми сводится к определению параметра α :

$$\mu = \mu_0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu_0} \right) + \dots \right], \text{ и, в первом приближении, } \mu_0 = -\alpha kT.$$

Зависимость энергии Ферми от температуры становится существенной, когда второй член в скобках правой части приближается к единице, т. е. при характеристической температуре Ферми $T_F = \mu_0/k$. Величины T_F всех металлов имеют порядок 10^4 . Так как температуры плавления подавляющего числа металлов на порядок ниже, то в твердом состоянии $T \ll T_F$ и в качестве энергии Ферми принимают μ_0 . Распределение электронного газа в них слабо отличается от распределения Ферми – Дирака при 0К. Такой газ называют сильно вырожденным ферми-газом.

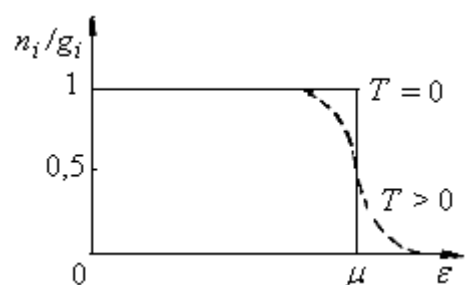


Рис. 37

3.3. Зонная теория

Обменное взаимодействие и природа химической связи.

Пусть два электрона локализованы в различных областях пространства. Их волновые функции отличны от нуля в разных областях пространства (рис. 38, а). При значениях плотностей зарядов $\rho_1 = e|\psi_1|^2$

и $\rho_2 = e|\psi_2|^2$ энергия их взаимодействия
$$dW = e^2 \frac{|\psi_1|^2 |\psi_2|^2}{r_{1,2}} dV_1 dV_2.$$

Классическое рассмотрение электрического взаимодействия зарядов сводится к взаимодействию точечных зарядов без взаимного проникновения. Реальные электроны, обладающие волновыми свойствами, «проницаемы». Волновая функция внешних электронов атома при увеличении расстояния от центра атома убывает быстро, но постепенно. При сближении атомов электронные облака внешних электронов частично перекрываются и деформируются, образуя область пространства «смешанной плотности заряда», в которой обе ψ -функции отличны от нуля (рис. 38, б). При перекрытии волновых функций электронов возникают добавочные силы: при параллельных спинах – отталкивание, при антипараллельных спинах – притяжение. Очевидно, возникает добавочная (сверх кулоновской) энергия взаимодействия (обменная энергия). Она положительна, если спины взаимодействующих электронов параллельны, и отрицательна, если спины электронов антипараллельны. Электроны стремятся занимать состояния парно – с противоположными спинами, так как при этом энергия системы убывает, поэтому химически активными («валентными») являются электроны, не имеющие парных по спину (не насыщенные по спину).

Два атома лития могут образовать молекулу, объединяя электроны L -слоя в одну оболочку. Но K -оболочки будут отталкиваться, так как оба электрона описываются одинаковыми квантовыми числами (n, l, m) и оболочка насыщена по спину. По тем же причинам атомы гелия не соединяются ни друг с другом, ни с другими атомами.

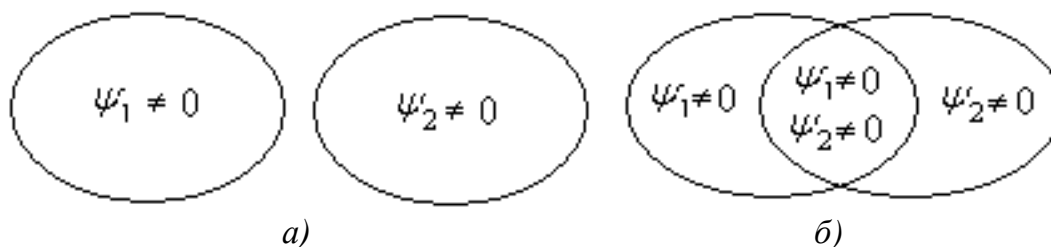


Рис. 38

Энергетические зоны в кристаллах. Обозначим через E_0 энергию электронных конфигураций в двух независимых атомах. При сближении атомов в зависимости от взаимной ориентации спинов дополнительная обменная энергия может иметь разные знаки, поэтому уровень E_0 расщепляется на два (рис. 39).

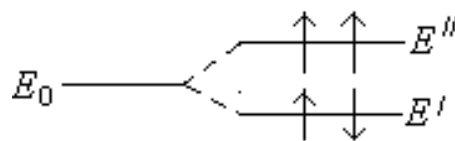
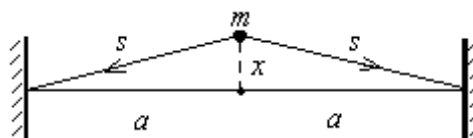
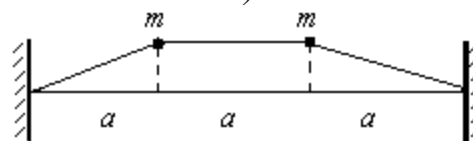


Рис. 39

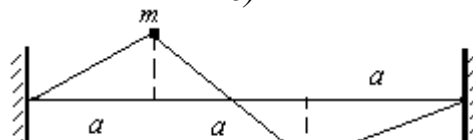
Для пояснения рассмотрим механическую аналогию упругой натянутой закрепленной по концам струны с закрепленным посередине шариком массой m (рис. 40, а). При смещении шарика на малое расстояние x он будет совершать гармонические колебания с собственной частотой ν_0 .



а)



б)



в)

Рис. 40

На такой же струне на тех же расстояниях поместим два одинаковых шарика той же массы m . Система из двух связанных шариков может совершать два типа независимых колебаний с разными частотами: симметричное колебание, когда оба шарика движутся одинаково (рис. 40, б), и антисимметричное колебание (рис. 40, в). Наименьшей частотой обладает симметричное колебание.

Колебания системы из n одинаковых шариков на струне расщепляются на n типов собственных колебаний с вариационным рядом частот по порядку величин близким к частоте собственных колебаний ν_0 одиночного шарика.

Так при сближении атомов водорода внешние электроны образуют систему, которая обязана описываться единой (системной) волновой функцией, удовлетворяющей принципу запрета Паули. При объединении n одинаковых атомов в молекулу или кристалл происходит расщепление энергетических уровней на группы (энергетические зоны) из n близких уровней (см. рис. 39).

Рассмотрим соединение атомов лития. Атом Li имеет K -оболочку из двух s -электронов и один s -электрон на внешней L -оболочке, которая содержит несколько возможных разных состояний (s и p). При образовании молекулы Li_2 эти состояния (энергетические вакансии) соответственно объединяются. Число объединяющихся s -состояний в каждом атоме равно двум (с учетом ориентации спина).

Значит, при образовании Li_2 возникают две энергетические зоны s и p , энергетические уровни которых расщепляются на два подуровня (рис. 41). Каждый из подуровней может заполняться двумя электронами

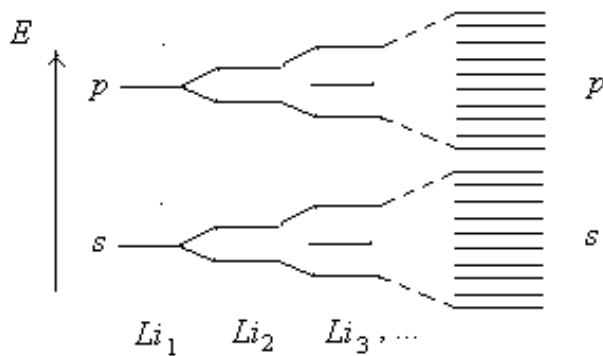


Рис. 41

с антипараллельными спинами. В молекуле лития Li_2 в общей электронной оболочке заняты лишь два s -состояния из четырех возможных состояний нижней зоны, а p -уровни полностью свободны (как у одиночных атомов).

При соединении трех атомов три их валентных электрона сольются в одну электронную оболочку, близкие уровни которой, как и в случае двух атомов, будут заполнены имеющимися электронами лишь частично (см. рис. 41). То же произойдет при дальнейшем увеличении числа атомов в цепочке и, далее, при соединении таких цепочек в единую трехмерную решетку. Средняя энергия связи атома лития в молекуле составляет 0,56 эВ, а в кристалле металлического лития в три раза больше из-за взаимодействия с соседними атомами. Любой кусок металла можно рассматривать как гигантскую молекулу с нелокализованными связями, так как электроны обладают подвижностью во всей толще металла.

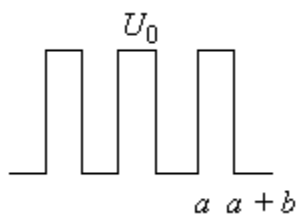


Рис. 42

Упорядоченно расположенные в узлах кристаллической решетки ядра атомов по модели Кронига – Пенни создают для движущихся электронов кристалла упорядоченную систему потенциальных ям (рис. 42). При наличии N потенциальных ям каждый энергетический уровень электрона расщепляется на N подуровней (энергетических вакансий). Если атом находится в кристалле, содержащем N атомов, каждое квантовое состояние изолированного атома расщепляется на N квантовых состояний. Тогда каждый энергетический уровень (изолированного атома) превращается в зону энергетических уровней кристалла. С учетом ориентировки спина в N квантовых состояниях зоны могут находиться не более $2N$ электронов (рис. 43).



Рис. 43

С учетом ориентировки спина в N квантовых состояниях зоны могут находиться не более $2N$ электронов (рис. 43).

Классификация твердых тел на проводники и диэлектрики.

Самая высоко лежащая из полностью заполненных электронами зон называется основной (валентной). Следующая зона проводимости может быть частично заполненной электронами или не содержать их совсем. Валентной зоной кристаллической решетки натрия (рис. 44) является $2p$ -зона. Она полностью заполнена. На уровне $3s$ у натрия имеется один электрон. В $3s$ -зоне кристалла натрия может быть $3N$ электронов, если N – число атомов натрия в кристалле. Но число электронов в этой зоне равно N , и она не полностью заполнена. Значит, это зона проводимости.



Рис. 44

Пусть зона проводимости не содержит ни одного электрона. Подействуем внешним электрическим полем на электроны основной зоны и других нижних зон, все энергетические уровни которых заполнены электронами. Принцип Паули запрещает электрону перейти в занятое другим электроном квантовое состояние, и, несмотря на наличие электрического поля, переходы электронов в основной зоне отсутствуют, никакой асимметрии распределения скоростей электрона не возникает и не возникает электрического тока. Единственная остающаяся возможность – переходы электронов с уровней основной зоны на уровни зоны проводимости. Но если разность энергий ΔW между зоной проводимости и основной зоны значительна (см. рис. 44), такой переход в не очень сильных электрических полях невозможен. Внешнее электрическое поле не вызывает появления электрического тока. Диэлектриками являются кристаллы, у которых отсутствуют электроны в зоне проводимости. Электропроводимость идеальных диэлектриков в не очень сильных полях близка к нулю ($10^{-12} \div 10^{-20} \text{ (Ом} \cdot \text{м)}^{-1}$).

Пусть зона проводимости частично заполнена. Под влиянием внешнего электрического поля электроны зоны проводимости имеют возможность переходить на другие уровни той же зоны, так как расстояние между разными подуровнями одной и той же зоны мало. При этих переходах образуется преимущественное направление ориентации импульсов электронов, соответствуя появлению электрического тока. Проводники – кристаллы, у которых в зоне проводимости имеются электроны.

Тепловое движение атомов проводника препятствует ориентирующему действию внешнего электрического поля, поэтому с увеличением температуры электропроводность проводника уменьшается.

Полупроводники. Собственная и примесная проводимости. Полупроводниками называют кристаллы, величина проводимости которых лежит в интервале $(10^4 \div 10^{-7}) (\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$ между проводимостью проводников и диэлектриков.

Пусть энергетический интервал ΔW между дном зоны проводимости и верхом основной зоны невелик (см. рис. 44), а в зоне проводимости электроны отсутствуют. Этот кристалл должен быть диэлектриком. Однако ввиду малости энергетического интервала между зонами часть электронов под влиянием теплового движения и перераспределения энергии может быть переведена из основной зоны в зону проводимости, и рассматриваемый кристалл поведет себя как проводник. Проводники, у которых электропроводность определяется таким механизмом, называют естественными полупроводниками (германий, кремний). Электропроводность будет тем больше, чем больше электронов переведено в зону проводимости. Это число растет с температурой, и электропроводность естественных полупроводников возрастает с температурой.

В результате перевода электронов в зону проводимости на их местах в основной зоне появляются незаполненные вакансии («дырки»). Электроны в пределах основной зоны обретают возможность перераспределять свои импульсы. Поэтому при наличии внешнего электрического поля возникает асимметрия распределения импульсов электронов в основной зоне и электрический ток. Перераспределение электронов в основной зоне сопровождается соответствующим перераспределением дырок. Дырка ведет себя как положительно заряженная частица. Возникающую проводимость в результате перераспределения дырок называют дырочной проводимостью. Естественные полупроводники обладают собственной электронной и дырочной проводимостью.

В реальной решетке кристалла всегда имеются локальные дефекты: отсутствие ионов или атомов в некоторых узлах решетки; наличие лишних атомов между узлами решетки; некоторые узлы решетки заняты атомами иного вещества (примеси). Пространственная периодичность распределения потенциала нарушается вблизи каждо-

го дефекта, вследствие чего изменяется состояние электронов. В областях отсутствия дефектов энергии группируются в зоны идеального кристалла, и соответствующие состояния электронов называют зонными состояниями. В области, близкой к дефекту, распределение вероятностей локализовано вблизи дефекта в очень малой области пространства: электроны не в состоянии покинуть эту область своей локализации. Такого рода состояния называют локальными. Локальные уровни энергии $W_{\text{лок}}$ лежат в области запрещенных для идеального кристалла значений энергии – между энергетическими зонами идеального кристалла (рис. 45). Число локальных уровней равно числу дефектов кристалла. При этом общее число состояний не изменяется, т. е. сумма числа зонных и

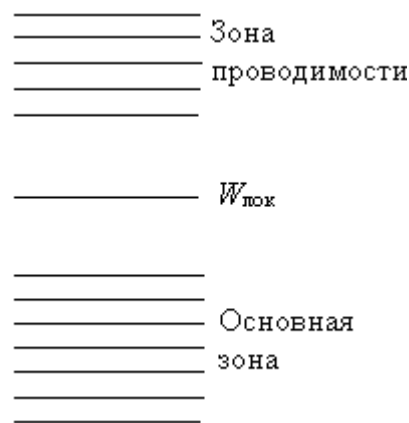


Рис. 45

локальных состояний равна числу состояний идеального кристалла. Поэтому локальные состояния как бы отщепляются от какой-либо зоны и могут быть или занятыми электронами, или свободными. В обоих случаях эти локальные уровни определяют возникновение электропроводности. При низких температурах преобладает примесная проводимость. При повышении температуры концентрация примесных носителей тока быстро достигает насыщения. При высоких температурах преобладает собственная проводимость, обусловленная переходом электронов непосредственно из валентной зоны в зону проводимости.

Пусть локальные уровни вместе с соответствующими электронами отщепились от основной зоны и находятся между основной зоной и зоной проводимости. Энергетические расстояния между дном зоны проводимости и локальными уровнями меньше, чем расстояние между дном зоны проводимости и верхом основной зоны. С таких донорных локальных уровней электронам легче перейти в зону проводимости. Соответствующий кристалл ведет себя как *n*-полупроводник, в котором ток, осуществляется электронами зоны проводимости.

Если локальные уровни отщепились от пустой зоны проводимости диэлектрика, то они свободны. Однако расстояние между локальными и верхними уровнями основной зоны меньше, чем расстояние между нижними уровнями зоны проводимости и верхними уровнями

основной зоны, что делает возможными переходы электронов из основной зоны на локальные акцепторные уровни с образованием в основной зоне дырок. Эти дырки обуславливают проводимость кристалла за счет перераспределения импульсов электронов (и дырок) в основной зоне. Такой кристалл обладает дырочной проводимостью. Электронные полупроводники, в которых ток осуществляется движением дырок, называют *p*-полупроводниками.

Полупроводниковые диоды. В системе контакта двух металлов с разной энергией Ферми, происходит изменение относительного расположения энергетических зон. При неравновесном состоянии поток электронов посредством туннельного эффекта устремится от металла с более высоким уровнем Ферми к металлу с более низким уровнем

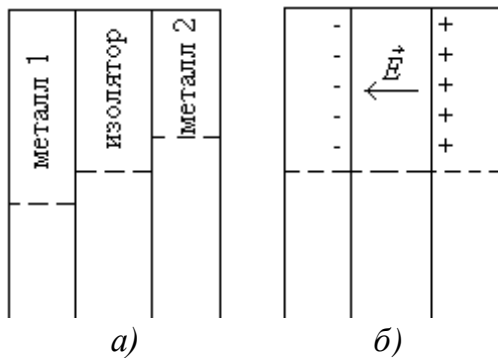


Рис. 46

Ферми: от металла 2 к металлу 1 (рис. 46, *а*). В итоге уровень Ферми в металле 2 понижается, а в металле 1 повышается. Перераспределение электронов прекратится, когда уровни Ферми сравняются. В металле 2 будет нехватка электронов, а в металле 1 – избыток; возникнет разность потенциалов (рис. 46, *б*).

Этот эффект можно усилить, если контактный слой создавать на границе раздела полупроводников с разным типом проводимости. В этом случае границу между электронной и дырочной областями называют электронно-дырочным *n-p*-переходом.

В дырочной области – избыток дырок, а в электронной области – избыток электронов. Электроны из электронной области стремятся перейти в дырочную область и занять места дырок. Поэтому число дырок в дырочной области уменьшается, а соответствующее число дырок в электронной области образуется вновь. Электроны стремятся диффундировать из электронной области в дырочную, а дырки – из

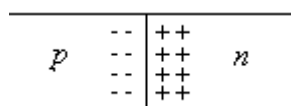


Рис. 47

дырочной области в электронную. В результате этой диффузии дырочная область заряжается отрицательно, а электронная – положительно (рис. 47).

Электронно-дырочный переход обретает внутреннюю разность потенциалов и является полупроводниковым выпрямителем (диодом).

Вольт-амперная характеристика полупроводникового диода (рис. 48) показывает, что ток насыщения $I_{\text{нас}}$ достигается при внешнем поле, совпадающем с внутренним полем электронно-дырочного перехода. В этом случае высота потенциального барьера между электронной и дырочной областями увеличивается, и поток электронов, проникающих через потенциальный барьер из электронной области в дырочную, уменьшается. Уже при внешнем потенциале несколько десятых вольта поток электронов из электронной области в дырочную практически прекращается. Поток электронов из дырочной области в электронную область практически не меняется, так как для него отсутствует потенциальный барьер. Всякий электрон, оказывающийся в результате теплового движения вблизи запирающего слоя, увлекается им в электронную область.

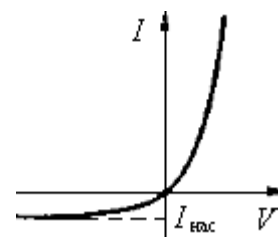


Рис. 48

4. ОСНОВЫ ФИЗИКИ АТОМНОГО ЯДРА

4.1. Радиоактивность

Альфа-, бета- и гамма-излучение. Изучая люминесценцию веществ, А. Беккерель в 1896 г. обнаружил, что соли урана излучают и без предварительного их освещения. Излучение оказалось большой проникающей силы, способной воздействовать на завернутую в черную бумагу фотографическую пластинку. Проведя разделение компонент урановой руды в 1898 г., Мария Склодовская-Кюри и Пьер Кюри установили, что, кроме урана, излучают и имеющиеся в нем примеси. Были выделены два элемента (радий и полоний), излучающие в миллионы раз интенсивнее, чем сам уран. Методом отклонения в магнитном поле Резерфорд разделил радиоактивные излучения на три компоненты, получившие названия: α (положительно заряженных), β (отрицательно заряженных) и γ (нейтральных) лучей:

1) α -лучи. При ударе об экран из сернистого цинка каждая α -частица вызывает «сцинтилляцию». Измеряя их число за единицу времени (ΔN), определили число a α -частиц, испускаемых одним граммом радия в выделенном телесном угле $\Delta\omega$:

$$a = \frac{\Delta N}{\Delta t} \frac{4\pi}{\Delta\omega} \approx 3,7 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}.$$

Измерение суммарного заряда, приходящего на экран за 1 с, позволило определить его отношение с их количеством, определив заряд одной α -частицы как положительный, равный по величине двум зарядам электрона. По отклонению α -частиц в магнитном поле определили отношение заряда к массе. Рассчитанная масса α -частицы оказалась равна массе ядра атома гелия.

В воздухе при нормальных условиях испускаемые радием α -частицы создают около $1,3 \cdot 10^5$ пар ионов. Средняя энергия, теряемая α -частицей на каждый акт ионизации, составляет 33 эВ. Двигаясь в веществе, α -частица растрчивает свою энергию и, пройдя пробег R , останавливается, захватывает два электрона, превращаясь в атом гелия. Величина R обратно пропорциональна числу встречных атомов (плотности вещества), и для полной остановки α -частиц оказалось достаточным на их пути поставить металлическую фольгу толщиной не более 0,1 мм;

2) β -лучи. Измерения удельного заряда показали, что β -частицы являются электронами больших скоростей (до 0,999 с). При прохождении через вещество β -частицы рассеиваются на значительные углы, обретая извилистые траектории. Благодаря большой скорости β -частица пролетает мимо атома вещества за время в 10 – 15 раз более короткое, чем α -частица той же энергии. При сокращении времени взаимодействия со встречными атомами уменьшается вероятность ионизации при столкновении. Поэтому число пар ионов, образуемых β -частицей на единице пути в воздухе, в сотни раз меньше удельной ионизации от α -частиц, а толщина слоя проникновения в десятки раз превышает пробег α -частиц;

3) γ -лучи. Отсутствие отклонения в магнитном поле и огромная проникающая способность γ -лучей, задерживаемых лишь сантиметровыми толщинами свинца, указывало на аналогию с рентгеновскими. Однако при дифракции γ -лучей на кристаллических решетках их длина волны оказалась порядка 1 пм, т. е. в десятки раз меньше, чем у жестких рентгеновских лучей.

Законы радиоактивного распада. Энергия α -, β -частиц и γ -фотонов достигает 10 МэВ, превышая в 10^6 раз энергии связи внешних электронов (6 – 10 эВ) и химических превращений (2 – 5 эВ), и поэтому не может быть связана со структурой электронных оболочек. Покидая ядро, α -, β - и γ -частицы являются продуктами его радиоак-

тивного превращения. Поскольку α - и β -частицы заряжены, то при их вылете меняются заряд и атомный номер ядра. Ядро обретает качество иного химического элемента. При α -распаде «материнское» ядро X испускает α -частицу, превращаясь в «дочернее» ядро элемента Y . С учетом сохранения заряда и массы реакция записывается в форме: $X_Z^A \rightarrow Y_{Z-2}^{A-4} + \alpha_2^4$. Дочерний элемент Y имеет атомный номер на две единицы меньше и сдвинут относительно X на две клетки влево по таблице Менделеева.

Уравнение β -распада: $X_Z^A \rightarrow Y_{Z+1}^A + e_{-1}^0$. При испускании электрона заряд и номер (Z) дочернего элемента Y увеличиваются на единицу, и он сдвигается относительно X на одну клетку вправо по таблице Менделеева с сохранением массового числа A .

Радиоактивностью называется самопроизвольное превращение одних атомных ядер в другие, сопровождаемое испусканием элементарных частиц. Естественный процесс радиоактивного распада ядер протекает самопроизвольно с постоянной скоростью, характеризуемой периодом полураспада T , в течение которого половина наличных ядер испытывает радиоактивный распад. Например, период полураспада полония равен 140 дням. Значит, от 1 г полония через 140 дней останется 0,5 г. От 0,5 г полония останется половина (0,25 г) ровно через 140 дней. Через 560 дней от исходного грамма останется 1/16 г полония, которые абсолютно ничем не отличаются от 1/16 г исходного грамма полония. Тогда при неизменности свойств радиоактивных ядер во времени число распадающихся ядер пропорционально числу наличных.

Обозначим число ядер данного типа в момент t через $N(t)$. Убыль ядер dN за время dt пропорциональна числу наличных ядер N , т. е.

$$-dN = \lambda N dt, \quad (67)$$

где постоянная величина λ названа постоянной распада.

Перепишем уравнение (67) в виде $\frac{dN}{N} = -\lambda dt$ и проинтегрируем обе части $\int_{N_0}^N \frac{dN}{N} = -\lambda \int_0^t dt$ с решением $\ln \frac{N}{N_0} = -\lambda t$ или

$$N = N_0 e^{-\lambda t}, \quad (68)$$

где N_0 – начальное число распадающихся атомов, т. е. N при $t = 0$.

Число $N(t)$ распадающихся ядер данного сорта убывает со временем по экспоненциальному закону (рис. 49). Число распадов в единицу времени называется активностью данного препарата:

$$A = -dN/dt = \lambda N. \quad (69)$$

Единица активности 1 Кюри = $3,7 \cdot 10^{10}$ распад/с и определена активностью 1 г радия без учета продуктов его распада. Из (68) и (69) следует, что активность препарата убывает со временем соответственно убыли числа не распавшихся ядер.

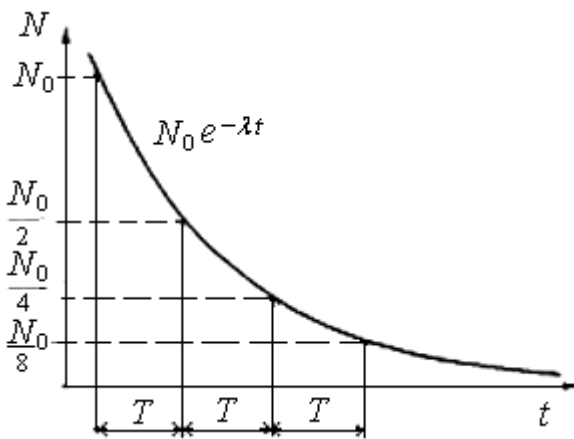


Рис. 49

Найдем связь постоянной распада λ с периодом полураспада T . Из N_0 наличных ядер через время T остается половина, следовательно: $N(T) = N_0 e^{-\lambda T} = \frac{1}{2} N_0$, и

$$e^{-\lambda T} = \frac{1}{2}, \text{ или}$$

$$T = -\frac{1}{\lambda} \ln \frac{1}{2} = \frac{\ln 2}{\lambda} \approx \frac{0,693}{\lambda}. \quad (70)$$

Характеристикой скорости распада является среднее время жизни τ . Количество ядер, испытывающих превращение за промежуток времени от t до $t + dt$ определится модулем выражения (67): $dN(t) = \lambda N_0 e^{-\lambda t} dt$. Если время жизни каждого из этих ядер равно t , то сумма времен жизни всех изменившихся ядер получается интегрированием выражения $t dN(t)$. Среднее время жизни радиоактивного ядра $t dN(t)/N_0$. Проинтегрировав по всем t (от 0 до ∞), получим

$$\tau = \frac{1}{N_0} \int_0^{\infty} t \lambda N_0 e^{-\lambda t} dt = \lambda \int_0^{\infty} t e^{-\lambda t} dt = 1/\lambda.$$

Интеграл берется по частям при замене переменной $x = \lambda t$ (прил. 5). Тогда величина λ равна вероятности распада одного ядра за единицу времени. Уравнение (68) примет вид $N = N_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$, а если в него ввести T , то $N = N_0 2^{-\frac{t}{T}}$. Отсюда с учетом (70) следует $T = \ln 2 \cdot \tau \approx 0,693 \cdot \tau$.

Обозначим для материнских ядер X_1 постоянную распада λ_1 ; дочерних $X_2 - \lambda_2$. Согласно уравнению (67) убыль первых за dt будет определяться $-dN_1 = \lambda_1 N_1 dt$ и будет в точности равна прибыли дочерних ядер X_2 . Обозначая прибыль ядер элемента X_2 через $d^{(+)}N_2$, имеем: $d^{(+)}N_2 = \lambda_1 N_1 dt$. С другой стороны, дочерние сами будут распадаться, причем убыль $d^{(-)}N_2$ определяется постоянной распада λ_2 и $d^{(-)}N_2 = -\lambda_2 N_2 dt$. Равновесие наступит, когда прибыль и убыль сравняются, т. е. когда будет иметь место соотношение $d^{(+)}N_2 = d^{(-)}N_2$, т. е. $\lambda_1 N_1 = \lambda_2 N_2$.

Если элемент X_2 в свою очередь распадается, порождая элемент X_3 , элемент $X_3 \rightarrow X_4$ и так далее, то равновесное соотношение между числами ядер N_1, N_2, N_3, \dots определится аналогично: $\lambda_1 N_1 = \lambda_2 N_2, \lambda_2 N_2 = \lambda_3 N_3, \lambda_3 N_3 = \lambda_4 N_4, \dots$, т. е. когда $\lambda_1 N_1 = \lambda_2 N_2 = \lambda_3 N_3 = \dots = \lambda_k N_k$.

При равновесии активности $A_i = \lambda_i N_i$ всех исходных и промежуточных продуктов одинаковы, а общая активность препарата равна активности исходного продукта, умноженной на число наличных звеньев. Конечным продуктом цепочки радиоактивных превращений является устойчивый изотоп, содержание которого нарастает по мере распада исходного радиоактивного элемента.

4.2. Ядерные реакции

Модель атомного ядра. Нейтрино. Жесткие рентгеновские лучи обладают энергией кванта, достаточной для воздействия на электроны внутренних оболочек, но недостаточной для воздействия на ядро. Проникнуть внутрь ядра позволили α -частицы. Резерфорд в 1919 г. впервые осуществил искусственное превращение ядер азота, бомбардируя их α -частицами с энергией 7,58 МэВ. При поглощении α -частиц ядрами атомов азота возникали атомы изотопа кислорода и быстрые протоны с энергией 6 МэВ.

При обстреле бериллия α -частицами было зафиксировано новое сильно проникающее излучение. Чэдвик предположил, что это поток незаряженных частиц с массой близкой к массе протонов, названных им нейтронами. Из-за отсутствия электрического заряда нейтроны электрически не взаимодействуют ни с электронной оболочкой встречающихся атомов, ни с атомными ядрами, что и обусловило и высокую проникающую способность, и возможность их содержания в ядрах. Д. Д. Иваненко и Е. Н. Гапон высказали гипотезу, что ядра атомов состоят только из протонов и нейтронов. По этой модели число

нуклонов A , число протонов Z , а число нейтронов $N = (A - Z)$, и изотопы отличаются числом нейтронов в ядре. Такая протонно-нейтронная модель ядра могла быть принята, если бы смогла объяснить изменение состава ядра при β -распаде.

Все три частицы (нейтрон, протон и электрон) обладают одинаковыми по величине спиновыми моментами, равными $\hbar/2$. При превращении нейтрона со спином $\hbar/2$ в две частицы (протон и электрон) суммарный момент последних может равняться либо \hbar (если их спины параллельны), либо нулю (если они антипараллельны). Чтобы выполнялся закон сохранения момента количества движения, В. Паули предположил, что кроме электрона при β -распаде вылетает третья незаряженная частица очень малой массы со спином $\hbar/2$, названная позже нейтрино.

Превращение протона в нейтрон по реакции $p_1^1 \rightarrow n_0^1 + e_{+1}^0 + \nu_0^0$, где ν_0^0 – нейтрино, позитрон e_{+1}^0 – частица с массой покоя электрона, спином $\hbar/2$ и несущая такой же по величине, но положительный электрический заряд $+e$.

Ядерные силы. Масса и энергия связи ядра. Измерения масс ядер, проведенные отклонением пучков ионов в магнитном поле, показали, что масса ядер M_Z^A всегда меньше суммы масс всех составляющих их частиц. Если бы протоны и нейтроны не взаимодействовали, масса ядра должна была бы равняться: $M_0 = Zm_{0p} + (A - Z)m_{0n} = Am_{0n} - Z(m_{0n} - m_{0p})$.

Устойчивость ядер указывает, что между нуклонами действуют короткодействующие силы сильного взаимодействия вне зависимости от того, обладают частицы электрическим зарядом или нет.

Для расщепления ядра на составляющие нуклоны нужно увеличить его массу, компенсируя дефект массы ядра $\Delta M = M_0 - M_Z^A > 0$, а следовательно, и энергию связи на величину $\Delta E = \Delta M c^2$. При соединении нуклонов в ядро энергия ΔE выделяется в виде квантов излучения, уносящих с собой массу ΔM .

При превращении атомных ядер энергия связи, приходящаяся в среднем на один нуклон, меняется. Это означает, что возможно получение атомной энергии за счет двух типов превращений: при синтезе легких ядер и при делении тяжелых ядер.

Ядерные реакции. Наличие в системе запаса энергии (которая может быть отдана при превращении системы) не указывает на ее неустойчивость. Например, ружейный патрон обладает запасом энергии, но может находиться в равновесии сколь угодно долго. Чтобы произвести выстрел, необходимо произвести работу, нарушающую это равновесие (удар бойка о капсюль). Аналогична ситуация с тяжелым ядром. Оно претерпит деление, если нарушить его равновесие. Минимальную энергию, необходимую для деления ядра, называют энергией активации. Часть энергии идет на «нагревание» ядра – сообщение отдельным нуклонам добавочной энергии внутренних движений, другая часть идет на возбуждение степеней свободы, отвечающих коллективному движению частиц ядра, приводящему к его деформации. При деформации половинки ядра удаляются друг от друга, попадают в область кулоновского взаимодействия и отделяются, разлетаясь с огромными скоростями.

Известно, что процентное содержание нейтронов в устойчивых ядрах падает с уменьшением A . Но получившиеся при делении ядра имеют содержание нейтронов, отвечающее исходному значению A . Следовательно, при новом, примерно вдвое меньшем массовом числе, они перегружены нейтронами и выбрасывают («испаряют») по 1 – 2 нейтрона.

Цепная реакция деления ядер. Приблизившийся к ядру нейтрон притягивается к нему ядерными силами. Произведенная этими силами работа равна энергии связи нейтрона в ядре (около 7 МэВ). Если энергия активации образовавшегося ядра меньше этой величины (энергии связи поглотившегося нейтрона), то ее достаточно для деления ядра.

С ростом числа нуклонов в ядре (с ростом A) энергия связи убывает медленно, а энергия активации – быстро, поэтому ядра с необходимыми для деления свойствами существуют. Для практического использования необходимо, чтобы они были устойчивы, т. е. с большим периодом полураспада, например: U_{92}^{235} , Pu_{94}^{239} , U_{92}^{233} . При их делении источник нейтронов не требуется. Раз начавшаяся реакция может продолжаться до тех пор, пока делящиеся ядра генерируют поток нейтронов. Нейтроны, выделяющиеся при делении первых ядер, делят другие, отдающие большее число нейтронов, часть которых вызывает деление следующих. Такие реакции называют цепными.

Уравнение баланса нейтронов. Пусть дано общее число нейтронов N в объеме V к моменту времени t , $(f + 1)$ – число нейтронов, выбрасываемых в среднем одним разделившимся ядром, τ – среднее время от возникновения нового нейтрона до его последующего поглощения. На каждом звене цепи задается число образующихся fN ответвлений, а fN/τ – число новых нейтронов, возникающих в объеме в единицу времени.

Пусть g – число образующихся нейтронов, поглощаемых неделяющимися ядрами примесей в ядерном горючем или ядрами накапливающихся продуктов деления. Число нейтронов, затрачиваемых на процессы обрыва цепей за ту же единицу времени, будет gN/τ .

Часть нейтронов выходит за время τ из объема V со скоростью $N/\tau = ND/D\tau = uN/D$, где u – средняя скорость ухода нейтронов, D – характерный линейный размер объема V (объема ядерного горючего).

Тогда, уравнение баланса нейтронов в объеме V принимает вид

$$\frac{dN}{dt} = \frac{fN}{\tau} - \frac{gN}{\tau} - \frac{uN}{D} = \frac{f - g - \frac{u\tau}{D}}{\tau} N = \frac{K}{\tau} N. \quad (71)$$

Если величина $K = f - g - u\tau/D$ отрицательна, то вероятность разветвления f меньше вероятности обрыва цепей в объеме g и ухода нейтронов через поверхность $u\tau/D$. Интегрируем уравнение (71) и по-

лучаем $N(t) = N_0 e^{-\frac{|K|}{\tau} t}$, т. е. число нейтронов, первоначально находившихся в объеме, непрерывно уменьшается, и цепная реакция затухает (рис. 50, кривая I). Скорость процесса убывает вдвое за время

$$T = \frac{\tau}{|K|} \ln 2 \approx \frac{0,693\tau}{|K|}.$$

При $g > f$ цепная реакция не может поддерживаться, какие бы ни были размеры D . Если же $g < f$, то условия затухания зависят только от D . Действительно, $K < 0$ при $\frac{u\tau}{D} > f - g$ и $D < \frac{u\tau}{f - g}$. Величина

критического размера $D_k = u\tau/(f - g)$ зависит от свойств ядерного горючего, примесей и геометрической формы, т. е. от опущенных при анализе факторов, характеризующих отношение поверхности к объе-

му. Если $D < D_K$, то цепная реакция затухает. Время затухания тем дольше, чем ближе D к D_K :
$$T = \frac{\ln 2\tau}{\frac{v\tau}{D} - (f - g)} \approx \frac{0,7D\tau}{(f - g)(D_K - D)}.$$

Если размер куска ядерного горючего превысит D_K , то $K > 0$ и интегрирование уравнения (71) дает зависимость $N(t) = N_0 e^{\frac{K}{\tau}t}$. Количество нейтронов N и число производимых ими за единицу времени реакций деления экспоненциально растет (см. рис. 50, кривая II). Время ускорения реакции вдвое: $T \approx \frac{0,7\tau}{K} = \frac{0,7D\tau}{(f - g)(D - D_K)}$, и сколь

мало ни будет начальное число нейтронов N_0 , начавшаяся цепная реакция окажется неуправляемой. Именно такая реакция использована в атомных бомбах.

Управляемая цепная реакция может осуществляться в ядерных реакторах, если число реакций деления в единицу времени поддерживается на постоянном уровне (см. рис. 50, кривая III, $K = 0$).

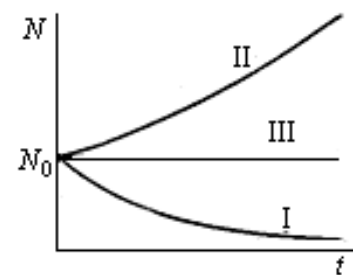


Рис. 50

Реакция синтеза атомных ядер. Термоядерная реакция — реакция синтеза атомных ядер. При образовании ядра гелия из двух дейтронов выделяется энергия 24 МэВ. Для слияния дейтронов необходимо их сближение до расстояния $r \sim 3 \cdot 10^{-15}$ м, на котором потенциальная энергия взаимодействия (работа сближения) составит: $U = kq^2/r = 7,7 \cdot 10^{-14}$ Дж, или $4,8 \cdot 10^5$ эВ. Если работа производится двумя сталкивающимися дейтонами, то кинетическая энергия каждого должна составлять половину этой величины: $7,7 \cdot 10^{-14}/2 = 3kT/2$, или $T \approx 2 \cdot 10^9$ К. Для водородной бомбы необходима температура несколько миллиардов градусов.

Легче всего идёт реакция: $H_1^3 + H_1^2 \rightarrow He_2^4 + n_0^1 + 17,5$ МэВ. Поэтому заряд водородной бомбы представляет смесь тяжелых изотопов водорода — дейтерия и трития. Высокая температура для эффективного протекания реакции достигается взрывами одной или нескольких обычных атомных бомб (взрывателей), содержащихся в водородной бомбе.

5. ОСНОВЫ ФИЗИКИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Виды взаимодействий. Взаимодействие между нуклонами называют сильным. Не центральные (из-за спина частиц) ядерные силы действуют лишь на расстояниях порядка 10^{-15} м.

Электромагнитное взаимодействие меньше сильного на два порядка. С расстоянием оно меняется медленнее, как $1/r^2$.

Взаимодействия, обусловленные участием в реакциях нейтрино, названы «слабыми». Радиус их действия – как у сильного взаимодействия, но по порядку величины они слабее сильных в 10^{14} раз.

Гравитационное взаимодействие слабее сильного в 10^{38} раз. С расстоянием гравитационные силы убывают столь же медленно, как и электромагнитные, так что их радиус действия также бесконечен.

Для реакции при сильном взаимодействии требуется время 10^{-23} с; электромагнитное взаимодействие требует $\sim 10^{-21}$ с, слабое взаимодействие требует $\sim 10^{-9}$ с.

Частицы и античастицы. Уравнение Шредингера (28) описывает микрочастицы любой природы без учета требований теории относительности. В 1928 г. английский физик П. А. Дирак показал вид уравнения микрочастицы, удовлетворяющего требованиям теории относительности и описывающего квантовомеханическое поведение свободного релятивистского электрона во внешних полях. При решении уравнения Дирака выяснилось, что наряду с решениями, отвечающими положительной полной энергии свободной частицы

$E = + \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}}$, меняющейся в пределах $m_0 c^2 \leq E \leq +\infty$, имеются

решения с отрицательной энергией $E = - \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}}$, меняющейся в

пределах $-\infty \leq E \leq -m_0 c^2$. Но свободные электроны с отрицательной энергией никогда не наблюдались. Уменьшение энергии может происходить только до $+m_0 c^2$. Дальнейшее уменьшение может произойти только скачком, на величину, не меньшую $2m_0 c^2$ (от $+m_0 c^2$ до $-m_0 c^2$, что для электрона составляет 1,024 МэВ).

Дирак предложил свою интерпретацию таких состояний: изменение знака энергии свободного электрона обусловлено изменением знака его массы покоя m_0 , а вектор скорости частицы с отрицательной массой покоя и вектор ее импульса противоположны. Дирак

объяснял это так. Электроны подчиняются запрету Паули – в каждом состоянии может находиться только один электрон. Предположим, что все состояния, отвечающие отрицательным энергиям свободных электронов, заняты (рис. 51). Отнесем такое распределение электронов к каждой точке пространства (вакууму). Это означает, что в каждой точке пространства должна быть бесконечно большая плотность электронов с отрицательной массой покоя, а значит, и бесконечно большой отрицательный электрический заряд. Однако это удивительное распределение ускользает от непосредственного наблюдения, так как плотность «вакуумных» электронов совершенно одинакова во всех точках пространства. Отдельные точки пространства в этом смысле физически неразличимы. Согласно Дираку, вакуум означает не отсутствие электронов, но такое их распределение, при котором все состояния с положительной собственной энергией – вакантны, а состояния с отрицательной собственной энергией – заняты.

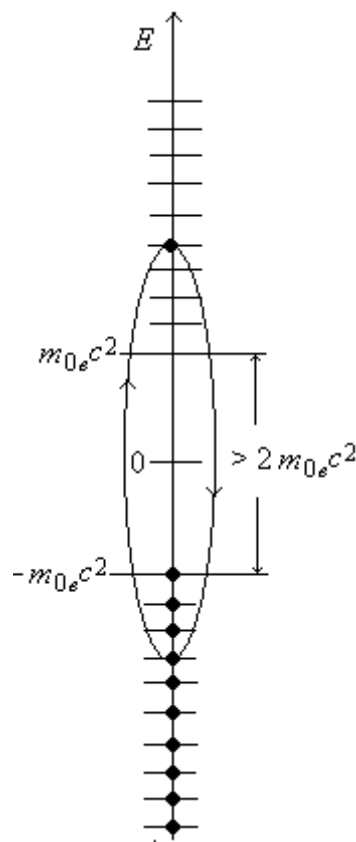


Рис. 51

Если в результате взаимодействия один из вакуумных электронов получит энергию, превышающую $2m_0e c^2$ (см. рис. 51), то он перейдет в состояние с положительной энергией, и после перехода появится:

- 1) один обычный электрон с положительной энергией;
- 2) неоднородность в распределении «вакуумных» электронов, так как одно из мест окажется вакантным, и «дырка» станет наблюдаемой. Отсутствие отрицательной массы проявится наличием равной ей по величине положительной массы. Отсутствие отрицательного заряда будет эквивалентно наличию положительного заряда такой же величины. Следовательно, «дырка» в распределении вакуумных электронов обретает свойства частицы с положительной массой покоя, равной массе покоя электрона, но с обратным по знаку зарядом.

Процесс, при котором один из вакуумных электронов переходит в обычное состояние, означает возникновение пары электрон-позитрон. Заметим, что собственная энергия каждой из этих частиц

равна m_0ec^2 , поэтому для образования пары необходима энергия, не меньшая $2m_0ec^2$. Именно такая энергия и должна быть затрачена, по Дираку, для «подъема» вакуумного электрона (см. рис. 51, стрелка слева). При обратном переходе (см. рис. 51, стрелка справа) обычный электрон замещает дырку в распределении вакуумных электронов и «исчезает» (как наблюдаемая частица), а вместе с ним исчезает и неоднородность в распределении вакуумных электронов – дырка, т. е. позитрон. Этот процесс наблюдается как аннигиляция пары с выделением энергии $>2m_0ec^2$ (см. рис. 51). При отсутствии других частиц эта энергия отдается в виде двух или трех фотонов (в зависимости от относительного направления спинов частиц).

Интерпретация Дирака состояний свободной частицы с отрицательной собственной энергией показала связь этих состояний с существованием «антиэлектрона», или позитрона, открытого экспериментально К. Андерсоном в 1932 г.

Космические лучи. Космические лучи как поток частиц большой энергии (от 10^9 до 10^{18} эВ на частицу), приходящих на Землю, были обнаружены по вызываемой ими ионизации сухого воздуха.

Исходным источником космических частиц являются взрывы звезд, при которых их светимость в течение нескольких десятков часов возрастает в $10^5 - 10^7$ раз, убывая до начального уровня за годы. В космическом пространстве имеются гигантские облака межзвездного газа, с которыми связано слабое магнитное поле. Отклоняясь в этом поле, электроны испускают тормозное излучение малой частоты – радиоизлучение постепенно теряют энергию. В этих же условиях протоны и тяжелые ядра, обладая большой массой, энергии на тормозное излучение практически не теряют, а даже постепенно ускоряются (Э. Ферми). Быстрые протоны, ядра гелия и в небольшом числе более

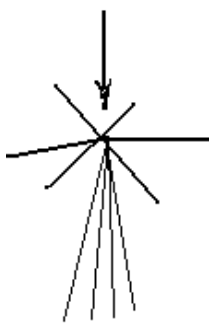


Рис. 52

тяжелые ядра определены первичной компонентой космических лучей.

Частицы первичной компоненты испытывают столкновения с ядрами атомов атмосферы на высоте в десятки километров. Ядро, претерпевшее удар, мгновенно испаряется. Быстрые протоны, нейтроны, а иногда и более тяжелые осколки разлетаются в разные стороны. Заряженные частицы оставляют жирные следы, образующие характерную фигуру «звезды» (рис. 52). При этом в малом телесном углу в

направлении движения первичной частицы видны следы нескольких «новорожденных» частиц – π -мезонов (пионов). Это кванты ядерного поля, излучаемые при ускорении ядерных частиц – носителей ядерного заряда, наподобие того, как фотоны – кванты электромагнитного поля – излучаются при ускорении частиц, несущих электрический заряд. Различие в том, что масса покоя фотона равна нулю, поэтому фотоны могут обладать любой, сколь угодно малой энергией. Масса же покоя пиона превышает массу покоя электрона в 270 раз, так что для рождения пиона нужна энергия более 140 МэВ.

Превращения и классификация элементарных частиц. Все пионы, как электрически заряженные, π^+ и π^- (частица и античастица), так и нейтральные π^0 , имеют нулевой спин и «сильно» взаимодействуют с нуклонами – захватываются ядрами. Вероятность захвата пиона возрастает с уменьшением его энергии и зависит от знака его электрического заряда. Медленные π^+ -мезоны не имеют возможности подойти к ядру близко, а π^- -мезоны притягиваются ядрами и на излете поглощаются.

В самом ядре квант ядерного поля как частица не существует (как не существует фотон в электронной оболочке поглотившего его атома). Его энергия распределяется между частицами ядра. В результате возникает небольшая звезда, связанная с первой – следом пиона (см. рис. 52). Потерявший свою энергию на ионизацию и на излете потерявший возможность поглотиться ядром, π^+ -мезон распадается на две частицы: мюон μ и мюонное нейтрино (ν_μ). Если π^- -мезон не поглотится ядром, то его ожидает та же участь. Среднее время жизни неподвижного π^\pm -мезона $2,55 \cdot 10^{-8}$ с. Так как π^+ - и π^- -мезоны относятся друг к другу как частица и античастица, при распаде π^- -мезона появятся частицы μ^- и $\bar{\nu}_\mu$.

Мюон и мюонное нейтрино вместе с электроном и электронным нейтрино образуют группу фермионов – лептонов со спином $\hbar/2$. Среднее время жизни мюона составляет $2,21 \cdot 10^{-6}$ с.

Частицы, образующиеся в результате ударов космических частиц, составляют вторичное космическое излучение. Мюоны представляют его «жесткую» часть с высокой проникающей способностью, при большой скорости достигая поверхности земли и проникая под землю и под воду на сотни метров.

Электроны, позитроны и фотоны составляют мягкую компоненту вторичного космического излучения, генерируемую γ -квантами

больших энергий, образующихся при распаде π^0 -мезонов. Масса π^0 -мезона меньше массы заряженных пионов, среднее время жизни 10^{-16} с. Распадается он на два γ -кванта или на γ -квант и электрон-позитронную пару.

В ускорителях получают потоки пионов большой энергии. При их столкновениях с n и p получают неустойчивые частицы – K -мезоны (каоны), а также неустойчивые фермионы – гипероны (Σ , Λ , Ξ , Ω , Δ). Гипероны вместе с нуклонами составляют класс барионов, несущих барионный заряд. Фотон и гравитон в электромагнитных и гравитационных взаимодействиях играют ту же роль, что и пионы и каоны в сильных. В класс мезонов включены все частицы с целочисленным спином – бозоны, не подчиняющиеся запрету Паули. Среди бозонов абсолютно устойчивы лишь фотон и гравитон.

Приведем величины, систематизирующие микрочастицы:

1. Массовое, или барионное, число A – характеризует наличие у частицы барионного заряда. У всех барионов $A = 1$, у всех антибарионов $A = -1$. Кратными значениями барионного числа обладают сложные частицы, например, для ядра или атома кислорода $A = 16$. У всех мезонов и лептонов $A = 0$.

2. Электрический заряд Q представляет собой число единиц электрического заряда (в единицах положительного заряда протона) частицы. Эта величина маркировочная, представляющая «электрическое число».

3. Изотопический спин I (изоспин) характеризует мультиплетность группы. Каждой группе частиц, обладающих близкими массами и схожими свойствами, присваивают обычно общее наименование. Число частиц в группе (мультиплетность) может быть разным: нуклоны образуют дублет (нейтрон, протон), Σ -гипероны – триплет (Σ^- , Σ^0 , Σ^+) и т. д. Как и в случае нуклона, можно считать, что речь идет об одной и той же частице, которая может находиться в разных квантовых состояниях.

4. Гиперзаряд Y и странность S . Удвоенный средний электрический заряд мультиплета называют гиперзарядом ($Y = 2\langle Q \rangle$). Для нуклонного дублета средний электрический заряд $\langle Q \rangle = (1/2)(Q_{\text{прот}} + Q_{\text{нейтр}}) = 1/2$. Поэтому протону и нейтрону приписывают гиперзаряд $Y = 2(1/2) = 1$. Для триплета Σ -гиперонов $\langle Q \rangle = (1/3)(Q_{\Sigma^-} + Q_{\Sigma^0} + Q_{\Sigma^+}) = 0$ и гиперзаряд равен нулю. Странность $S = Y - A$.

5. Спин. Характеризует спиновый момент импульса.

6. Четность P . Внутреннее свойство частицы, связанное с ее симметрией по отношению к правому и левому (прил. 6).

Кварки. Идея о том, что сильно взаимодействующие частицы состоят из нескольких частиц того же «сорта», перестала быть популярной. С одной стороны, нарастающее число элементарных частиц породило сомнения в их элементарности. С другой стороны, масса структурных элементов микрочастицы должна быть больше массы самой частицы. С третьей стороны, каждая из сильно взаимодействующих частиц характеризуется тремя независимыми аддитивными квантовыми числами: зарядом Q , гиперзарядом Y и барионным зарядом B . Поэтому появилась гипотеза, что все частицы построены из трех фундаментальных частиц – «кварков» – носителей этих зарядов. В модели трех кварков (Гелл-Манн и Цвейг, 1964), обозначаемых буквами: u (*up*), d (*down*) и s (*strange*), этим частицам приписывают дробные квантовые числа, в частности электрический заряд, равный $+2/3$, $-1/3$ и $-1/3$.

Мезоны образуются из пары кварк-антикварк, а барионы – из трех кварков. Однако связанные состояния из трех кварков типа uuu , ddd , sss противоречат принципу Паули, так как спин кварков одинаков и равен $1/2$, а в одной системе не может быть не только трех, но даже и двух кварков с одинаковым набором квантовых чисел. Поэтому было введено понятие цвета кварков, понимая под этим, что каждый кварк может существовать в трех «окрашенных» формах: желтой, синей и красной. Антикварк принимается окрашенным в дополнительный цвет, дающий вместе с цветом кварка «нулевой» белый цвет. Частицы, переносчики взаимодействия (цвета) между кварками, названы глюонами (англ. *glue* – клей). Они удерживают в результате обменного взаимодействия кварки вместе.

На данный момент модель кварков включает шесть сортов (ароматов) (u , d , s , c , b , t), каждый из которых существует в трех цветовых разновидностях. «Очарованный» c -кварк (англ. *charmed*) имеет квантовое число C – очарования. В состав «неочарованных» частиц (мезонов и барионов) c -кварк не входит. Для описания ипсилон-частицы, открытой в 1976 г., пришлось ввести b -кварк (англ. *bottom* – нижний, или *beauty* – прелестный). Эти кварки описывают свойства частиц с массами $3 - 11$ ГэВ. Последний и самый массивный t -кварк (англ. *truth* – истинный).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Учебное пособие создано на базе авторских конспектов лекций семестрового (17 – 18 лекций) теоретического материала по завершающим частям курса общей физики, предназначенного для самостоятельной подготовки студентов к рейтингам и экзаменам (прил. 7). Оно полностью соответствует требованиям общеобразовательного стандарта и рабочей программе в части теоретического материала по курсу общей физики по профилям подготовки студентов ФРЭМТ ВлГУ или Института информационных технологий и радиоэлектроники ВлГУ в новом названии с 2016 года.

Библиографический список не претендует на полноту охвата вопросов и не содержит всех первоисточников, но приведенные в списке работы имеют обширную библиографию, используя которую можно найти необходимые первоисточники.

Автор благодарит рецензентов и членов методической комиссии кафедры общей и прикладной физики за ценные замечания и рекомендации.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение 1

По формуле для геометрической прогрессии $a = a_1 q^{i-1}$, где $i = 1, 2, 3, \dots, n$. Сумма ряда геометрической прогрессии $s = a_1 \frac{q^n - 1}{q - 1}$. Если $q < 0$, то прогрессия убывающая. Для бесконечного ряда убывающей геометрической прогрессии $q_n \rightarrow 0$ и $s = a_1 \frac{-1}{q - 1} = a_1 \frac{1}{1 - q} = a_1 (1 - q)^{-1}$.

Приложение 2

Разложение функции $f(x)$ в ряд Тейлора вблизи точки $x = x_0$:

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)(x - x_0)}{1!} + \frac{f''(x_0)(x - x_0)^2}{2!} + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)(x - x_0)^n}{n!}.$$

Разложение функции $f(x)$ в ряд по степеням при $x_0 = 0$ (ряд Маклорена): $f(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!} x + \frac{f''(0)}{2!} x^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n$.

Например, функция e^x разлагается в ряд Маклорена при всех значениях x , и с учетом $(e^x)' = e^x$ получаем $e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!}$.

Приложение 3

Пример. В театре с n стульями можно разместить n разных людей. Одного человека можно разместить n способами, второго – $(n - 1)$ способами, третьего – $(n - 2)$ способами и т. д. Общее число комбинаций размещений составит $n(n - 1)(n - 2)(n - 3) \dots = n!$. Заполним один ряд из n_i стульев и повторим размещение числа $(n - n_i)$ людей. Число способов комбинаций составит $n!/[n_i!(n - n_i)!]$, т. е. без учета числа комбинаций размещений $(n_i!)$ в выбранном i -ом ряду.

Приложение 4

Дано: $\ln n! = \ln 1 + \ln 2 + \dots + \ln n$ при $n = 1, 2, \dots, n$. Тогда при $\Delta n \ll n$ (шаг $\Delta n = 1$) можно записать формулу приближения Стирлинга:

$$\ln n! = \sum_n \ln n \Delta n \approx \int_1^n \ln n dn = n \ln n - n.$$

Приложение 5

$$\begin{aligned} \tau &= \lambda \int_0^{\infty} t e^{-\lambda t} dt = \lambda \int_0^{\infty} \frac{x}{\lambda} e^{-x} d\left(\frac{x}{\lambda}\right) = \frac{1}{\lambda} \int_0^{\infty} x e^{-x} dx = \left. \begin{aligned} d(xe^{-x}) &= e^{-x} dx - xe^{-x} dx; \\ xe^{-x} dx &= e^{-x} dx - d(xe^{-x}) \end{aligned} \right|_* = \\ &= \frac{1}{\lambda} \left[\int_0^{\infty} e^{-x} dx - \int_0^{\infty} d(xe^{-x}) \right] = \frac{1}{\lambda} \left(-\frac{1}{e^x} \Big|_0^{\infty} - \frac{x}{e^x} \Big|_0^{\infty} \right) = \frac{1}{\lambda} (0 + 1 - 0 + 0) = \frac{1}{\lambda}. \end{aligned}$$

Принятое обозначение $=*|...|_*$ использовано для проведения промежуточных подготовительных процедур применения интегрирования по частям.

Приложение 6

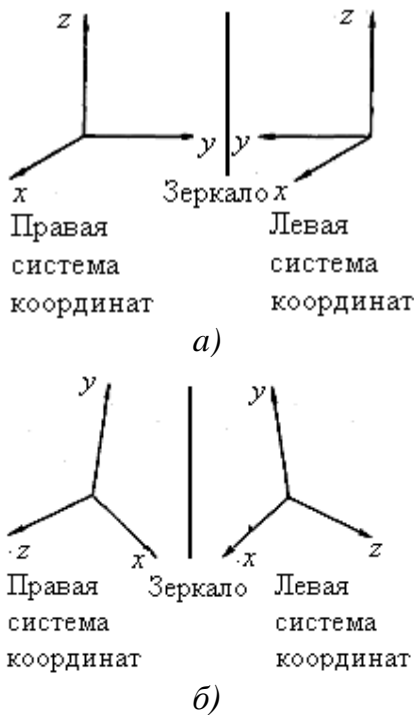


Рис. П1

Известно, что правая система отсчета переходит в левую при зеркальном отражении. Из рис. П1, а видно, что зеркальное отражение меняет направление одной из осей. Рис. П1, б поясняет, что превращение правой системы в левую при зеркальном отражении не зависит от выбранной ориентации осей системы отсчета по отношению к зеркалу. Тот же результат имеет место при инверсии (изменении направления) не одной, а всех трех координатных осей – нечетном числе отражений. Подчеркнем, что переход от правой системы к левой (и обратный) или нечетное число инверсий не могут быть заменены непрерывными преобразованиями координат – поворотами.

Не существует поворотов, с помощью которых могли бы быть совмещены правая и левая системы координат.

Поясним, в чем могло бы заключаться физическое различие между правым и левым, простым примером. На рис. П2, *а* изображена частица со спином («вращающаяся частица») *A*, испускающая частицу *B* в направлении своего спина. Спин показан горизонтальной стрелкой, указывающей направление вращения. «Зеркальный» процесс состоит в выбрасывании частицей *A* частицы *B* против направления своего спина (рис. П2, *б*). Если в природе нет различия между правым и левым, то оба случая распада должны наблюдаться одинаково часто. В такой равноценности правого и левого усомнились Янг и Ли, а Ву показала, что при β^- -распаде ядер Co_{27}^{60} электроны выбрасываются преимущественно против спина ядра.

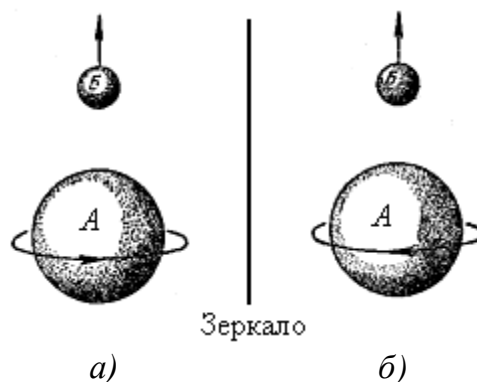


Рис. П2

Формально четность описывается так: если при инверсии пространственных осей волновая функция частицы не меняет знак, то четность ее положительна ($P = +1$). Если при инверсии пространственных осей волновая функция меняет знак, то четность отрицательна ($P = -1$).

Приложение 7

Экзаменационные вопросы по дисциплине

1. Тепловое излучение. Равновесное излучение. Характеристики теплового излучения. Абсолютно черное тело. Закон Кирхгофа. Закон Стефана – Больцмана.

2. Распределение энергии в спектре абсолютно черного тела. Подход Михельсона. Формула Рэля – Джинса. Ультрафиолетовая катастрофа.

3. Формула Вина и закон Вина. Квантовая гипотеза и формула Планка.

4. Внешний фотоэлектрический эффект и его законы. Фотоны.

5. Эффект Комптона и его теория.

6. Модель атома Резерфорда. Постулаты Бора.

7. Опыт Франка – Герца.

8. Атом водорода. Комбинационный принцип Ритца.
9. Гипотеза де Бройля. Экспериментальное подтверждение волновых свойств микрочастиц.
10. Соотношение неопределенностей.
11. Волновая функция: свойства и статистический смысл.
12. Нестационарное уравнение Шредингера.
13. Стационарное уравнение Шредингера. Частица в потенциальной яме.
14. Прохождение частицы через потенциальный барьер. Квантовый гармонический осциллятор.
15. Уравнение Шредингера для электрона в атоме водорода.
16. Главное, орбитальное и магнитное квантовые числа.
17. Спектр атома водорода. Орбитальный и магнитный моменты электрона.
18. Магнитомеханические явления. Опыты Эйнштейна – де Хааса и Барнетта.
19. Собственный механический момент импульса электрона (спин). Спиновый магнитный момент электрона. Спиновое и магнитное спиновое квантовые числа. Опыт Штерна и Герлаха.
20. Принцип запрета Паули. Периодическая система элементов Менделеева. Правило отбора.
21. Поглощение, спонтанное и индуцированное излучение.
22. Создание инверсной заселенности. Лазеры.
23. Классическая теория теплоемкости. Закон Дюлонга и Пти. Квантовая теория теплоемкости Эйнштейна. Температура Эйнштейна.
24. Модель Дебая. Элементарные возбуждения. Фононы. Дисперсионное соотношение.
25. Теория теплоемкости Дебая. Определение числа мод. Температура Дебая.
26. Квантовые статистики. Бозоны и фермионы.
27. Распределения Ферми – Дирака и Бозе – Эйнштейна.
28. Уровень и энергия Ферми.
29. Зонная теория. Обменное взаимодействие и природа химической связи. Энергетические зоны в кристаллах. Распределение электронов по энергетическим зонам.

30. Классификация твердых тел на металлы, полупроводники и диэлектрики. Температурная зависимость электропроводности металлов и полупроводников.

31. Собственная и примесная проводимости полупроводников. Контакт двух металлов. *P-n* переход. Полупроводниковые диоды.

32. Радиоактивность. Альфа-, бета- и гамма-излучение. Законы радиоактивного распада.

33. Модель атомного ядра. Нейтрино.

34. Ядерные силы. Масса и энергия связи ядра. Ядерные реакции.

35. Реакция деления ядер. Цепная реакция деления. Реакция синтеза атомных ядер.

36. Виды взаимодействий. Теория Дирака по интерпретации вакуума. Частицы и античастицы.

37. Космические лучи. Превращения и классификация элементарных частиц. Кварки.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Зисман, Г. А. Курс общей физики. В 3 т. Т. 3. Оптика. Физика атомов и молекул. Физика атомного ядра и микрочастиц / Г. А. Зисман, О. М. Тодес. – Изд. четвертое, стер. – М. : Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1970. – 496 с.

2. Матвеев, А. Н. Атомная физика : учеб. пособие для студентов вузов / А. Н. Матвеев. – М. : Высш. шк., 1989. – 439 с.

3. Мигдал, А. Б. Квантовая физика и Нильс Бор / А. Б. Мигдал. – М. : Знание, 1987. – 64 с. – (Новое в жизни, науке, технике. Сер. «Физика». № 3).

4. Савельев, И. В. Курс общей физики : учеб. пособие для вузов. В 5 кн. Кн. 5. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц / И. В. Савельев. – М. : Астрель : АСТ, 2001. – 361 с.

5. Савельев, И. В. Курс общей физики : учеб. пособие для вузов. В 3 т. Т. 2. Электричество и магнетизм. Волны. Оптика / И. В. Савельев. – М. : Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988. – 496 с.

6. Суханов, А. Д. Лекции по квантовой физике : учеб. пособие для вузов / А. Д. Суханов. – М. : Высш. шк., 1991. – 383 с.

7. Фейман, Р. Феймановские лекции по физике. Современная наука о природе. Законы механики. Пространство. Время. Движение : пер. с англ. / Р. Фейман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – М. : Мир, 1976. – Т. 1 – 2. – 440 с.

8. Юкава, Х. Лекции по физике : пер. с яп. / Х. Юкава ; предисл. акад. М. А. Маркова. – М. : Энергоиздат, 1981. – 128 с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Предисловие</i>	3
1. Основные понятия квантовой оптики и атомной физики	4
1.1. Тепловое излучение. Квантовая гипотеза Планка	4
Характеристики теплового излучения. Абсолютно черное тело. Равновесное излучение. Распределение энергии в спектре абсолютно черного тела. Формула Рэлея – Джинса. Формула Вина. Закон смещения Вина. Квантовая гипотеза и формула Планка.	
1.2. Квантовые свойства света. ФОТОНЫ.....	8
Внешний фотоэлектрический эффект и его законы. Фотоны. Эффект Комптона и его теория.	
1.3. Ядерная модель атома.....	11
Модель атома Резерфорда. Постулаты Бора. Опыт Франка – Герца. Атом водорода.	
2. Элементы квантовой механики	16
2.1. Волновые свойства микрочастиц.....	16
Гипотеза де Бройля. Экспериментальное подтверждение волновых свойств микрочастиц. Принцип неопределенностей. Соотношение неопределенностей.	
2.2. Волновая функция. Уравнение Шредингера	21
Волновая функция: свойства и статистический смысл. Нестационарное уравнение Шредингера. Частица в потенциальной яме. Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер. Квантовый гармонический осциллятор.	
2.3. Атом водорода	31
Уравнение Шредингера для электрона в атоме водорода. Главное, орбитальное и магнитное квантовые числа. Квантование энергии электрона в атоме водорода. Спектр атома водорода. Собственный механический момент импульса электрона (спин). Спиновый магнитный момент электрона. Спиновое и магнитное спиновое квантовые числа. Опыт Штерна и Герлаха. Многоэлектронные атомы и периодический закон Менделеева. Правило отбора.	
2.4. Вынужденное излучение. Лазеры.....	47
Поглощение, спонтанное и индуцированное излучение. Создание инверсной заселенности. Принцип действия лазеров.	
3. Основные понятия физики твердого тела	54
3.1. Теплоемкость кристаллов. Фононы.....	54
Классическая теория теплоемкости. Закон Дюлонга и Пти. Квантовая теория теплоемкости и модель Эйнштейна. Теория теплоемкости Дебая. Фононы.	

3.2. Элементы квантовой статистики	62
Квантовые статистики. Бозоны и фермионы. Распределение Ферми – Дирака. Распределение Бозе – Эйнштейна. Электронный газ. Уровень и энергия Ферми.	
3.3. Зонная теория.....	68
Обменное взаимодействие и природа химической связи. Энергетические зоны в кристаллах. Классификация твердых тел на проводники и диэлектрики. Полупроводники. Собственная и примесная проводимости. Полупроводниковые диоды.	
4. Основы физики атомного ядра.....	75
4.1. Радиоактивность	75
Альфа-, бета- и гамма-излучение. Законы радиоактивного распада.	
4.2. Ядерные реакции	79
Модель атомного ядра. Нейтрино. Ядерные силы. Масса и энергия связи ядра. Ядерные реакции. Цепная реакция деления ядер. Уравнение баланса нейтронов. Реакция синтеза атомных ядер.	
5. Основы физики элементарных частиц	84
Виды взаимодействий. Частицы и античастицы. Космические лучи. Превращения и классификация элементарных частиц. Кварки.	
<i>Заключение</i>	90
<i>Приложения</i>	91
<i>Библиографический список</i>	96

Учебное издание

КУЗНЕЦОВ Артемий Артемьевич

ФИЗИКА

Основные понятия квантовой оптики и атомной физики.
Основы квантовой механики, физики твердого тела,
атомного ядра и элементарных частиц

Учебное пособие

Редактор Е. В. Невская

Технический редактор С. Ш. Абдуллаева

Корректоры Е. С. Глазкова, В. С. Теверовский

Компьютерная верстка Л. В. Макаровой

Подписано в печать 06.10.17.

Формат 60×84/16. Усл. печ. л. 5,81. Тираж 130 экз.

Заказ

Издательство

Владимирского государственного университета
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых.
600000, Владимир, ул. Горького, 87.