ФИЗИКА
В ТЕХНИЧЕСКОМ УНИВЕРСИТЕТЕ

Л.К. Мартинсон, Е.В. Смирнов

Квантовая физика

Издательство МГТУ
имени Н.Э. Баумана

К 175-летию МГТУ им. Н.Э. Баумана

ФИЗИКА В ТЕХНИЧЕСКОМ УНИВЕРСИТЕТЕ

Серия основана в 2003 году

Научные редакторы
д-р физ.-мат. наук, проф. Л.К. Мартинсон,
д-р физ.-мат. наук, проф. А.Н. Морозов

Москва
Издательство МГТУ имени Н.Э. Баумана
2004

Л.К. Мартинсон, Е.В. Смирнов

Квантовая физика

Допущено Министерством образования Российской Федерации в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по техническим направлениям и специальностям

Москва
Издательство МГТУ имени Н.Э. Баумана
2004

УДК 539.1(075.8)
ББК 22.38
М292

Рецензенты: кафедра физики Московского авиационного института (государственного технического университета), зав. кафедрой, д-р техн. наук, проф. Г.Г. Спирин; д-р техн. наук, проф. Г.Н. Гайдуков

Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В.

М292 Квантовая физика: Учебное пособие. — М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. — 496 с.: ил. (Физика в техническом университете / Под ред. Л.К. Мартинсона, А.Н. Морозова).

ISBN 5-7038-2438-9

Подробно изложен теоретический и экспериментальный материал, лежащий в основе квантовой физики. Большое внимание уделено физическому содержанию основных квантовых понятий и математическому аппарату, используемому для описания движения микрочастиц. Решение большого количества задач не только иллюстрирует излагаемый материал, но в ряде случаев развивает и дополняет его. Рассмотрены наиболее актуальные и перспективные приложения квантовых эффектов в науке и технике.

Содержание учебного пособия соответствует курсу лекций, который авторы читают в МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Для студентов технических университетов и вузов.

УДК 539.1(075.8)
ББК 22.38

© Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В., 2004
© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004
© Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004

ISBN 5-7038-2438-9

ПРЕДИСЛОВИЕ

Все новейшие технологии, определяющие уровень научно-технического развития в конце XX — начале XXI в., основываются на квантовых явлениях. Оптический квантовый генератор, электронная лампа с холодным катодом, сканирующий туннельный микроскоп, квантовый компьютер — вот далеко не полный перечень приборов и устройств, конструирование и разработка технологий изготовления которых требуют от современного инженера глубоких знаний законов квантовой физики.

В основе квантово-механического описания движения частиц лежит идея корпускулярно-волнового дуализма материи. Наличие у частиц волновых свойств не позволяет использовать при описании их движения традиционные методы классической механики. В квантовой механике разработан принципиально новый, вероятностный способ описания движения микрочастиц с учетом их волновых свойств. Такой способ описания квантового состояния частицы основан на использовании понятия волновой функции, он не совместим с представлением о траектории движения частицы и поэтому теряет наглядность. "Квантовая механика демонстрирует триумф человеческого разума, когда человек способен понять вещи, которые он уже не в силах вообразить", — писал известный физик-теоретик, лауреат Нобелевской премии академик Л.Д. Ландау.

Прогресс в науке и технике настоятельно требует повышения уровня фундаментальной подготовки по физике выпускников технических университетов. Это возможно за счет интеграции разделов общей и теоретической физики в рамках единого курса физики.

Содержание данного учебного пособия соответствует курсу лекций, который авторы читают в МГТУ им. Н.Э. Баумана в рамках курса общей физики. В пособии наряду с углубленным изложением теории значительное внимание уделено приложениям квантовых эффектов в науке и технике, что делает представление

материала более наглядным, а также знакомит читателя с физическими явлениями, лежащими в основе современных наукоемких технологий. Большое число задач с решениями, приведенных в пособии, способствует, по мнению авторов, лучшему усвоению теоретического материала и выработке у студентов навыков проведения самостоятельных квантово-механических расчетов. Список рекомендуемой литературы включает главным образом пособия, в которых квантовая физика изложена в рамках курса общей физики, и не претендует на исчерпывающую полноту.

Большая работа по рецензированию рукописи выполнена профессором МАИ (ГТУ) Г.Г. Спириным и профессором МИЭТ (ТУ) Г.Н. Гайдуковым. Авторы благодарны рецензентам за критические замечания, способствовавшие улучшению структуры и содержания пособия.

Авторы выражают благодарность заведующему кафедрой физики МГТУ им. Н.Э. Баумана профессору А.Н. Морозову за редактирование пособия, профессорам кафедры физики МГТУ В.В. Толмачеву, А.М. Макарову и доцентам В.П. Макарову, И.В. Кириллову и Ю.М. Шаврукову за участие в обсуждении рассматриваемых вопросов, а также старшему преподавателю Н.К. Веретимус и аспиранту М.В. Лелькову за помощь в техническом оформлении материала.

Благодарим сотрудников Издательства МГТУ им. Н.Э. Баумана за большой труд по подготовке пособия к изданию.

1. КВАНТОВЫЕ СВОЙСТВА ИЗЛУЧЕНИЯ

Годом рождения квантовой физики, сыгравшей принципиально важную роль в развитии науки и техники XX столетия, справедливо считается 1900 г. В это время классическая физика столкнулась с непреодолимыми трудностями при рассмотрении проблемы электромагнитного излучения нагретых тел. Предположение о непрерывности изменения энергии излучения привело к теоретическим результатам, существенно противоречащим данным экспериментов в области коротковолнового диапазона излучения.

В решении проблемы теплового излучения тел принципиально но́вая физическая гипотеза была выдвинута М. Планком в 1900 г. Эта гипотеза предполагала дискретность энергии излучения и наличие ее минимальной порции — кванта энергии излучения. Основанная на этой гипотезе квантовая теория излучения позволила Планку непротиворечивым образом описать равновесное тепловое излучение во всем диапазоне длин волн.

Развивая гипотезу о квантах, А. Эйнштейн выдвинул корпускулярную теорию излучения, в которой электромагнитное излучение представлялось как поток частиц, названных фотонами. Фотонная теория излучения смогла объяснить явления квантовой оптики.

Естественным выводом теории явилась идея двойственной природы излучения. Как оказалось, именно эта идея объединения волновых и корпускулярных свойств излучения, получившая название корпускулярно-волнового дуализма, будучи обобщенной на все материальные объекты в природе, стала определяющей идеей всей квантовой физики.

1.1. Законы теплового излучения

Тепловое излучение. В нагретых телах часть внутренней энергии вещества может превращаться в энергию излучения. По-

этому нагретые тела являются источниками электромагнитного излучения в широком диапазоне частот. Это излучение называют *тепловым излучением*.

Эксперименты показывают, что тепловое излучение имеет непрерывный спектр. Это означает, что нагретое тело испускает некоторое количество энергии излучения в любом диапазоне частот или длин волн. Распределение энергии излучения тела по спектру зависит от температуры тела. При этом для всех тел с увеличением температуры максимум энергии излучения смещается в коротковолновый участок спектра, а общая энергия излучения возрастает. Так, если излучение батареи центрального отопления ($T \approx 350\,\text{K}$) имеет пик энергии в диапазоне невидимого инфракрасного излучения, то раскаленная поверхность Солнца ($T \approx 6 \cdot 10^3\,\text{K}$) излучает значительную часть энергии в диапазоне видимого света, а при ядерном взрыве ($T \approx 10^6\,\text{K}$) бóльшая доля энергии взрыва уносится коротковолновыми рентгеновским излучением и гамма-излучением (γ-излучением).

Если несколько нагретых излучающих тел окружить идеально отражающей, непроницаемой для излучения оболочкой (рис. 1.1), то по истечении некоторого промежутка времени в системе "излучающие тела + излучение в полости" установится термодинамическое равновесие. Это означает, что температуры всех тел станут равными, а распределение энергии между телами и излучением не будет изменяться со временем. Такое равновесное состояние системы устойчиво, т. е. после всякого его нарушения состояние равновесия вновь восстанавливается. Термодинамическое равновесие установится и в полости, стенки которой выполнены из любого реального материала и имеют одинаковую температуру.

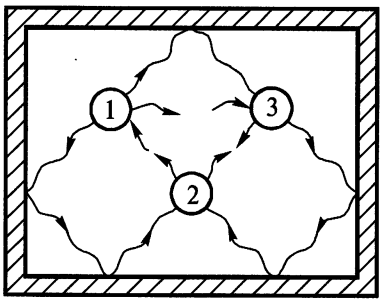


Рис. 1.1. Система тел, находящихся в равновесии с излучением

Способность теплового излучения находиться в равновесии с излучающим телом отличает тепловое излучение от других видов излучения тел. Поэтому такое излучение будем называть равновесным.

Равновесному излучению можно приписать температуру тела, с которым оно находится в равновесии, распространив при этом законы равновесной термодинамики на тепловое излучение. Это означает, что для равновесного теплового излучения можно определить и рассчитать внутреннюю энергию, давление, энтропию и другие термодинамические характеристики, которые не будут изменяться со временем.

Равновесное тепловое излучение однородно, т. е. его плотность энергии одинакова во всех точках внутри полости, где оно заключено. Такое излучение изотропно и неполяризованно — оно содержит все возможные направления распространения и направления колебаний векторов $\vec{E}$ и $\vec{H}$.

Характеристики теплового излучения. Чтобы описать спектральный состав теплового излучения, рассмотрим энергию, излучаемую единицей поверхности нагретого тела в единицу времени в узком диапазоне частот от ω до $\omega + d\omega$. Этот поток энергии излучения dR, испускаемый с единицы поверхности тела по всем направлениям, пропорционален ширине спектрального диапазона, т. е. $dR = r d\omega$. Энергию r, приходящуюся на единичный диапазон частот, называют *спектральной испускательной способностью* тела или *спектральной плотностью энергетической светимости*. Опыт показывает, что для каждого тела испускательная способность является определенной функцией частоты, вид которой изменяется при изменении температуры тела T. В дальнейшем для такой функциональной зависимости $r = r(\omega, T)$, рассматриваемой при заданном значении температуры тела как некоторая функция частоты, будем использовать принятое в теории теплового излучения обозначение: $r(\omega, T) \equiv r_{\omega, T}$.

Суммарный поток энергии излучения с единицы поверхности тела по всему диапазону частот

$$R = \int_0^\infty r_{\omega, T}\, d\omega \qquad (1.1)$$

называется *интегральной испускательной способностью* тела или его *энергетической светимостью*. В системе СИ энергетическая светимость измеряется в ваттах на квадратный метр (Вт/м^2), а

спектральная испускательная способность имеет размерность джоуля на квадратный метр (Дж/м^2).

Испускательную способность тела можно представить и как функцию длины волны излучения λ, которая связана с частотой ω через скорость света в вакууме c соотношением $\lambda = 2\pi c/\omega$. Действительно, выделяя потоки излучения, приходящиеся на интервал частот $d\omega$ и на соответствующий ему интервал длин волн $d\lambda$, и приравнивая их друг другу, находим, что

$$r_{\omega,T}\, d\omega = r_{\lambda,T}\, d\lambda . \qquad (1.2)$$

Отсюда получаем формулу связи между испускательными способностями по шкале частот и шкале длин волн

$$r_{\lambda,T} = r_{\omega,T}\frac{d\omega}{d\lambda} = r_{\omega,T}\frac{2\pi c}{\lambda^2} . \qquad (1.3)$$

Знак минус у производной $\frac{d\omega}{d\lambda}$ в (1.3) формально опущен, так как он указывает лишь на то, что с возрастанием длины волны λ частота ω убывает.

Для описания процесса поглощения телами излучения введем *спектральную поглощательную способность* тела $a_{\omega,T}$. Для этого, выделив узкий интервал частот от ω до $\omega + d\omega$, рассмотрим поток излучения $d\Phi_\omega$, который падает на поверхность тела. Если при этом часть этого потока $d\Phi'_\omega$ поглощается телом, то поглощательную способность тела на частоте ω определим как безразмерную величину

$$a_{\omega,T} = \frac{d\Phi'_\omega}{d\Phi_\omega}, \qquad (1.4)$$

характеризующую долю падающего на тело излучения частотой ω, поглощенную телом.

Опыт показывает, что любое реальное тело поглощает излучение различных частот по-разному в зависимости от его температуры. Поэтому спектральная поглощательная способность тела $a_{\omega,T}$

является функцией частоты ω, вид которой изменяется при изменении температуры тела T.

По определению поглощательная способность тела не может быть больше единицы. При этом тело, у которого поглощательная способность меньше единицы и одинакова по всему диапазону частот, называют *серым телом*.

Особое место в теории теплового излучения занимает *абсолютно черное тело*. Так Г. Кирхгоф назвал тело, у которого на всех частотах и при любых температурах поглощательная способность равна единице. Реальное тело всегда отражает часть энергии падающего на него излучения (рис. 1.2). Даже сажа приближается по свойствам к абсолютно черному телу лишь в оптическом диапазоне.

Абсолютно черное тело является эталонным телом в теории теплового излучения. И хотя в природе нет абсолютно черного тела, достаточно просто реализовать модель, для которой поглощательная способность на всех частотах будет пренебрежимо мало отличаться от единицы. Такую модель абсолютно черного тела можно изготовить в виде замкнутой полости (рис. 1.3), снабженной малым отверстием, диаметр которого значительно меньше поперечных размеров полости. При этом полость может иметь практически любую форму и быть изготовленной из любого непрозрачного материала.

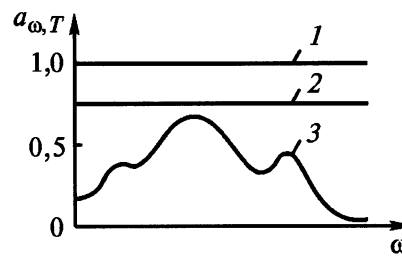


Рис. 1.2. Спектральная поглощательная способность тел:
1 — абсолютно черное тело; *2* — серое тело; *3* — реальное тело

Малое отверстие обладает свойством почти полностью поглощать падающее на него излучение, причем с уменьшением размера отверстия его поглощательная способность стремится к единице. Действительно, излучение через отверстие попадает на стенки полости, частично поглощаясь ими. При малых размерах отверстия луч должен претерпеть множество отражений, прежде чем он сможет выйти из отверстия, т. е., формально говоря, отразиться от него. При многократных повторных переотражениях на стенках полости излучение, попавшее в полость, практически полностью поглотится.

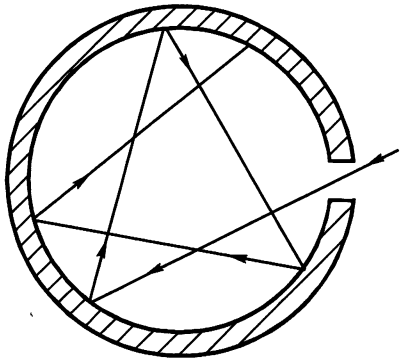


Рис. 1.3. Модель абсолютно черного тела

В рассмотренной модели можно считать, что излучение, падающее на отверстие, не отражается, а полностью поглощается. Поэтому именно малому отверстию в полости и приписывается свойство абсолютно черного тела.

Отметим, что если стенки полости поддерживать при некоторой температуре T, то отверстие будет излучать, и это излучение с большой степенью точности можно считать излучением абслютно черного тела, имеющего температуру T. Исследования распределения энергии этого излучения по спектру (С. Ленгли, Э. Прингсгейм, О. Люммер, Ф. Курлбаум и другие), позволяют экспериментально определить испускательные способности абсолютно черного тела $r^*_{\omega,T}$ и $r^*_{\lambda,T}$ [1)]. Результаты таких экспериментов при различных значениях температуры приведены на рис. 1.4.

Закон Кирхгофа. Между испускательными и поглощательными свойствами любого тела должна существовать связь. Ведь в опыте с равновесным тепловым излучением (см. рис. 1.1) равновесие в системе может установиться только в том случае, если каждое тело будет излучать в единицу времени столько же энергии, сколько оно поглощает. Это означает, что тела, интенсивнее поглощающие излучение какой-либо частоты, будут это излучение интенсивнее и испускать.

[1)] Далее звездочкой отмечены характеристики теплового излучения абсолютно черного тела.

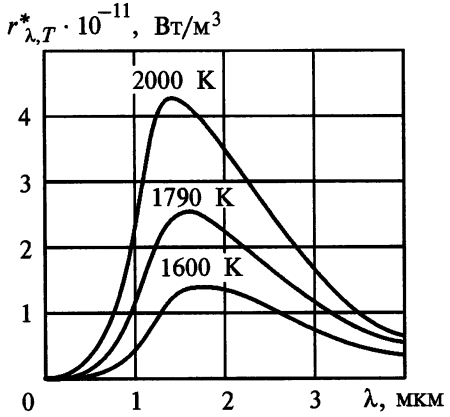


Рис. 1.4. Испускательная способность абсолютно черного тела при различных температурах

Поэтому в соответствии с таким принципом детального равновесия отношение испускательной и поглощательной способностей одинаково для всех тел в природе, включая абсолютно черное тело, и при данной температуре является одной и той же универсальной функцией частоты (длины волны).

Этот закон теплового излучения, установленный в 1859 г. Г. Кирхгофом при рассмотрении термодинамических закономерностей равновесных систем с излучением, можно записать в виде соотношения

$$\left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}}\right)_1 = \left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}}\right)_2 = \left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}}\right)_3 = \ldots = \frac{r^*_{\omega,T}}{1} = f(\omega,T) \qquad (1.5)$$

или

$$\left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}}\right)_1 = \left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}}\right)_2 = \left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}}\right)_3 = \ldots = \frac{r^*_{\lambda,T}}{1} = \varphi(\lambda,T), \qquad (1.6)$$

где индексы 1, 2, 3, ... соответствуют различным реальным телам.

Из закона Кирхгофа следует, что универсальные функции $f(\omega,T)$ и $\varphi(\lambda,T)$ есть спектральные испускательные способно-

сти $r^*_{\omega,T}$ и $r^*_{\lambda,T}$ абсолютно черного тела по шкале частот или шкале длин волн соответственно. Поэтому связь между ними определяется формулой (1.3).

Излучение абсолютно черного тела имеет универсальный характер в теории теплового излучения. Реальное тело излучает при любой температуре всегда меньше энергии, чем абсолютно черное тело. Зная испускательную способность абсолютно черного тела (универсальную функцию Кирхгофа) и поглощательную способность реального тела, из закона Кирхгофа можно определить энергию, излучаемую этим телом в любом диапазоне частот или длин волн.

Закон Стефана — Больцмана. Экспериментальные (Й. Стефан, 1879) и теоретические (Л. Больцман, 1884) исследования позволили доказать важный закон теплового излучения абсолютно черного тела. Этот закон утверждает, что энергетическая светимость абсолютно черного тела пропорциональна четвертой степени его абсолютной температуры, т. е.

$$R^* = \sigma T^4. \tag{1.7}$$

Согласно современным измерениям, постоянная Стефана — Больцмана $\sigma = 5,6686 \cdot 10^{-8}$ Вт/(м$^2 \cdot$ К^4).

Для реальных тел закон Стефана — Больцмана выполняется лишь качественно, т. е. с ростом температуры энергетическая светимость всех тел увеличивается. Однако для реальных тел зависимость энергетической светимости от температуры уже не описывается простым соотношением (1.7), а имеет вид

$$R = A_T R^* = A_T \sigma T^4. \tag{1.8}$$

Коэффициент $A_T < 1$ в (1.8) можно назвать *интегральной поглощательной способностью* тела. Значения A_T, в общем случае зависящие от температуры, известны для многих технически важных материалов. Так, в достаточно широком диапазоне температур для металлов $A_T = 0,1...0,4$, а для угля и оксидов металлов $A_T = 0,5...0,9$.

Для реальных тел можно ввести понятие эффективной радиационной температуры $T_р$, которая определяется как температура

абсолютно черного тела, имеющего такую же энергетическую светимость, как и реальное тело. Радиационная температура тела $T_р$ всегда меньше истинной температуры тела T. Действительно, для реального тела $R = \sigma T_р^4 = A_T \sigma T^4$. Отсюда находим, что $T_р = T\sqrt[4]{A_T}$, т. е. $T_р < T$, так как у реальных тел $A_T < 1$.

Радиационную температуру сильно нагретых (раскаленных) тел можно определить с помощью радиационного пирометра (рис. 1.5), в котором изображение достаточно удаленного нагретого источника И проецируется с помощью объектива L на приемник П так, чтобы изображение излучателя полностью перекрывало приемник. Для оценки энергии излучения, попавшего на приемник, обычно используются металлические или полупроводниковые болометры или термоэлементы. Действие болометров основано на изменении электрического сопротивления металла или полупроводника при изменении температуры, вызванном поглощением падающего потока излучения. Изменение температуры поглощающей поверхности термоэлементов приводит к появлению в них термоЭДС.

Показание прибора, подсоединенного к болометру или термоэлементу, оказывается пропорциональным энергии излучения, попавшей на приемник пирометра. Проградуировав предварительно пирометр по излучению эталона абсолютно черного тела при различных температурах, можно по шкале прибора измерить радиационные температуры различных нагретых тел.

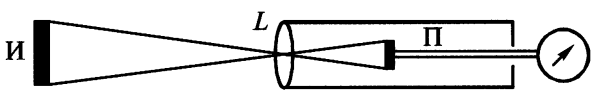


Рис. 1.5. Схема радиационного пирометра

Зная интегральную поглощательную способность материала излучателя, можно перевести измеренную радиационную температуру излучателя $T_р$ в его истинную температуру T по формуле

$$T = \frac{T_р}{\sqrt[4]{A_T}}.$$

В частности, если радиационный пирометр покажет температуру $T_{\text{р}} = 933$ K при наблюдении раскаленной поверхности вольфрамового излучателя ($A_T = 0{,}15$), то ее истинная температура $T = 1500$ K.

Закон смещения Вина. В 1893 г. немецкий физик В. Вин теоретически рассмотрел термодинамический процесс сжатия излучения, заключенного в полости с идеально зеркальными стенками. С учетом изменения частоты излучения за счет эффекта Доплера при отражении его от движущегося зеркала Вин пришел к выводу, что испускательную способность абсолютно черного тела можно описать следующим образом:

$$r^*_{\omega, T} = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right), \tag{1.9}$$

где f — некоторая функция, конкретный вид которой термодинамическими методами установить нельзя.

Переходя в этой формуле Вина от частоты к длине волны в соответствии с правилом (1.3), получим

$$r^*_{\lambda, T} = \frac{(2\pi c)^4}{\lambda^5} f\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right). \tag{1.10}$$

Как видно, в выражение для испускательной способности $r^*_{\lambda, T}$ температура входит лишь в виде произведения λT. Уже это обстоятельство позволяет предсказать некоторые особенности функции $r^*_{\lambda, T}$. В частности, эта функция достигает максимума при определенной длине волны λ_m. Эта длина волны при изменении температуры тела T меняется так, что выполняется условие $\lambda_m T = \text{const}$.

Таким образом, В. Вин сформулировал закон теплового излучения, согласно которому длина волны λ_m, на которую приходится максимум испускательной способности абсолютно черного тела, обратно пропорциональна его абсолютной температуре. Этот закон можно записать в виде

$$\lambda_m = \frac{b}{T}. \qquad (1.11)$$

Значение константы в этом законе, полученное из экспериментов, оказалось равным $b = 2{,}898 \cdot 10^{-3}$ м · К.

Закон Вина называют законом смещения, подчеркивая тем самым, что при повышении температуры абсолютно черного тела положение максимума его испускательной способности смещается в область коротких длин волн. Результаты экспериментов (см. рис. 1.4), подтверждают этот вывод не только качественно, но и количественно, строго в соответствии с формулой (1.11).

Для реальных тел закон Вина выполняется лишь качественно. С ростом температуры любого тела длина волны, вблизи которой тело излучает больше всего энергии, также смещается в сторону коротких длин волн. Это смещение, однако, уже не описывается простой формулой (1.11), которую для излучения реальных тел можно использовать только в качестве оценочной.

Ночное видение. Ночью при отсутствии солнечного света человек в темноте перестает видеть окружающие его предметы. Однако все они, имея ненулевую температуру, испускают электромагнитное тепловое излучение и ночью. С помощью закона Вина (1.11) можно оценить длину волны, на которую приходится максимум испускательной способности тела, если известна его температура. Из этой оценки следует, что при средней температуре тел примерно 300 К основная энергия их теплового излучения приходится на инфракрасное излучение с длиной волны около 10 мкм. Излучение в видимой области спектра (0,4 мкм $< \lambda <$ 0,7 мкм) при таких температурах имеет слишком малую энергию и не может быть обнаружено невооруженным глазом.

Равновесие между телами у поверхности Земли и их излучением не устанавливается, так как в сторону неба система наземных тел не является замкнутой. Поэтому все тела, температура которых несколько больше, чем температура земной поверхности, могут быть зафиксированы в микроволновом диапазоне как излучающие объекты.

Такие источники инфракрасного излучения можно увидеть только с помощью специальных приборов, в которых микроволновое излучение, невидимое глазом, регистрируется датчиками инфракрасного излучения и преобразуется в модулированные электрические сигналы. Эти сигналы управляют электронным пучком, дающим на экране кинескопа видимое изображение предметов.

В конце XX в. произошло качественное изменение техники ночного видения, связанное с созданием электронно-оптических преобразователей нового типа. С помощью современных биноклей и прицелов ночного видения наблюдатель может получить в темноте изображение человека на расстоянии нескольких сот метров или движущегося танка на расстоянии нескольких километров. А пилотажные очки ночного видения позволяют эксплуатировать вертолеты в условиях ограниченной видимости практически круглые сутки.

Задача 1.1. Покажите, что если излучение происходит из объема достаточно толстого слоя любого вещества, имеющего на единицу толщины испускательную способность $E_{\omega, T}$ и поглощательную способность $A_{\omega, T}$, то поверхность этого слоя излучает как абсолютно черное тело. При расчетах ограничиться рассмотрением излучения, распространяющегося в направлении, перпендикулярном поверхности слоя.

Решение. Пусть слой вещества, занимающего полупространство $x > 0$, имеет температуру T (рис. 1.6). Выделим тонкий слой вещества с координатами от x до $x + dx$. На частоте ω этот тонкий слой излучает по направлению к поверхности поток энергии с единицы площади $dr_{\omega, T} = E_{\omega, T}\, dx$.

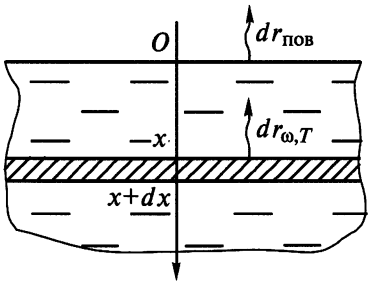


Рис. 1.6. Объемное излучение слоя нагретого вещества

До выхода с поверхности слоя это излучение проходит слой поглощающего вещества толщиной x. По закону Бугера поток энергии излучения уменьшается экспоненциально и при выходе на поверхность $x = 0$ становится равным

$$dr_{\text{пов}} = dr_{\omega,T}\exp\left(-A_{\omega,T}\,x\right) = E_{\omega,T}\exp\left(-A_{\omega,T}\,x\right)dx.$$

Суммируя излучения всех слоев, находим испускательную способность поверхности слоя

$$r_{\text{пов}} = \int_0^\infty E_{\omega,T}\exp\left(-A_{\omega,T}x\right)dx = \frac{E_{\omega,T}}{A_{\omega,T}}\int_0^\infty \exp\left(-\xi\right)d\xi = \frac{E_{\omega,T}}{A_{\omega,T}}.$$

Но по закону Кирхгофа $\dfrac{E_{\omega,T}}{A_{\omega,T}} = r^*_{\omega,T}$, где $r^*_{\omega,T}$ — испускательная способность абсолютно черного тела. Поэтому $r_{\text{пов}} = r^*_{\omega,T}$, и мы тем самым доказали, что поверхность слоя излучает как абсолютно черное тело.

Этот важный вывод поясняет, например, почему излучение с поверхности достаточно большого объема высокотемпературной плазмы, и в частности с поверхности Солнца, близко по спектральному составу к излучению абсолютно черного тела.

Задача 1.2. Максимум испускательной способности Солнца приходится на длину волны $\lambda_m = 0{,}48$ мкм. Считая излучение Солнца близким к излучению абсолютно черного тела, оцените суммарную площадь панелей солнечной батареи электрической мощностью $P_{\text{эл}} = 10$ кВт на орбитальной околоземной космической станции. КПД солнечной батареи примите равным $\eta = 20\,\%$. Значения астрономических величин возьмите из таблиц.

Решение. Из закона смещения Вина (см. формулу (1.11)) определим температуру поверхности Солнца

$$T = \frac{b}{\lambda_m} = \frac{2{,}9\cdot 10^{-3}}{0{,}48\cdot 10^{-6}} \approx 6000\,\text{K}.$$

Теперь по закону Стефана — Больцмана находим энергетическую светимость Солнца $R = \sigma T^4$ и полную мощность излучения с его поверхности

$$W = R\cdot 4\pi R_{\text{C}}^2 = 4\pi\sigma T^4 R_{\text{C}}^2.$$

Здесь $R_С = 6,95 \cdot 10^8$ м — радиус Солнца.

Считая, что Солнце излучает по всем направлениям изотропно, находим солнечную постоянную С, равную потоку энергии излучения через единицу поверхности сферы, радиус которой равен среднему расстоянию от Солнца до Земли $R_{СЗ} = 1,49 \cdot 10^{11}$ м. При этом

$$С = \frac{W}{4\pi R_{СЗ}^2} = \sigma T^4 \left(\frac{R_С}{R_{СЗ}} \right)^2 = 1,6 \cdot 10^3 \text{ Вт/м}^2.$$

Итак, в космическом пространстве вблизи Земли на каждый квадратный метр поверхности, перпендикулярной солнечным лучам, за 1 с падает 1,6 кДж энергии солнечного излучения. Часть этой энергии в солнечной батарее превращается в электрическую энергию. С учетом КПД солнечной батареи находим ее электрическую мощность

$$P_{эл} = \eta С S.$$

Отсюда определяем площадь панелей солнечной батареи

$$S = \frac{P_{эл}}{\eta С} = \frac{10^4}{0,2 \cdot 1,6 \cdot 10^3} = 31,2 \text{ м}^2.$$

1.2. Квантовая теория излучения

Объемная плотность энергии равновесного излучения. Рассмотрим основные положения теории равновесного теплового излучения. Для этого, не ограничивая общности выводов, предположим, что полость с идеально отражающими стенками имеет форму куба с ребром l. Поместим в эту полость малое по размерам абсолютно черное тело, имеющее температуру T. За счет испускания и поглощения электромагнитных волн этим телом полость равномерно заполнится равновесным тепловым излучением с определенной объемной плотностью энергии $u(T)$, зависящей от температуры. Эту *интегральную объемную плотность энергии* теплового излучения можно разложить по спектру частот, т. е. представить в виде

$$u(T) = \int_0^\infty u_{\omega, T}\, d\omega. \qquad (1.12)$$

Здесь функция $u_{\omega, T} \equiv u(\omega, T)$ определяет объемную плотность энергии излучения, приходящуюся на единичный интервал частот вблизи частоты ω. Назовем ее *спектральной плотностью энергии* теплового излучения при данной температуре T.

Очевидно, что спектральная плотность энергии теплового излучения связана с испускательной способностью абсолютно черного тела, находящегося в равновесии с этим излучением. Эту связь можно установить, рассмотрев излучение вблизи элементарной площадки ΔS, выделенной на поверхности абсолютно черного тела (рис. 1.7).

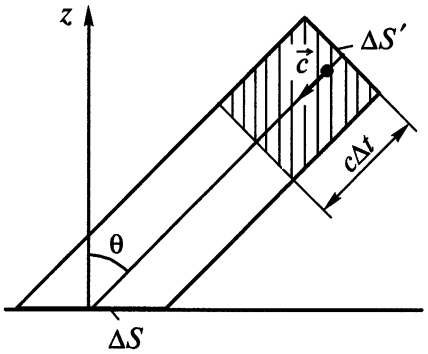


Рис. 1.7. Поток энергии излучения, падающий на элементарную площадку

Тепловое излучение в любой точке пространства вблизи выделенной площадки равномерно распределено по всевозможным направлениям в пределах телесного угла 4π. Поэтому плотность энергии излучения, приходящегося на телесный угол $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$, т. е. падающего на площадку ΔS под углом θ к ее нормали, можно записать в виде

$$d\tilde{u} = u(T)\frac{d\Omega}{4\pi}. \qquad (1.13)$$

Но если излучение с такой плотностью энергии, распространяясь со скоростью света в вакууме c, падает на площадку ΔS под

углом θ к нормали, то за время Δt на эту площадку попадает вся энергия излучения, заключенная в заштрихованном на рис. 1.7 объеме, т. е.

$$dw = d\tilde{u}c\Delta t\Delta S' = d\tilde{u}c\Delta t\Delta S\cos\theta = \frac{c}{4\pi}u(T)\cos\theta\sin\theta d\theta d\varphi\Delta S\Delta t. \quad (1.14)$$

Суммируя энергии излучений, падающих под всевозможными углами, находим полный поток энергии Φ излучения, падающего на единицу поверхности в единицу времени:

$$\Phi = \frac{c}{4\pi}u(T)\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos\theta\cdot\sin\theta d\theta = \frac{c}{4}u(T). \quad (1.15)$$

В состоянии термодинамического равновесия такой же поток энергии излучения должен испускаться с единицы поверхности абсолютно черного тела. Но этот поток энергии, по определению, есть энергетическая светимость абсолютно черного тела. Поэтому

$$R^* = \frac{c}{4}u(T), \text{ или } u(T) = \frac{4}{c}R^*. \quad (1.16)$$

Проведенные выше выкладки справедливы и для каждой спектральной составляющей излучения частотой ω. Поэтому аналогичным соотношением связаны спектральная испускательная способность абсолютно черного тела $r^*_{\omega,T}$ и спектральная объемная плотность энергии равновесного теплового излучения $u_{\omega,T}$:

$$r^*_{\omega,T} = \frac{c}{4}u_{\omega,T}, \text{ или } u_{\omega,T} = \frac{4}{c}r^*_{\omega,T}. \quad (1.17)$$

Формула Рэлея — Джинса. В рассмотренной выше полости кубической формы с идеально отражающими стенками тепловое излучение как электромагнитное поле может существовать только в виде суперпозиции прямых и отраженных волн, т. е. в виде стоячих электромагнитных волн, имеющих узлы на стенках полости.

Направим оси декартовой системы координат вдоль трех взаимно перпендикулярных ребер кубической полости (рис. 1.8) и обозначим через $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$ и $\vec{e}_z$ единичные орты вдоль соответствующих осей координат. Тогда для волны, распространяющейся строго вдоль оси x, условие образования стоячей волны имеет вид

$$l = n_1 \frac{\lambda}{2}, \quad n_1 = 1, 2, 3, \ldots, \tag{1.18}$$

т. е. на длине l между отражающими стенками должно укладываться целое число длин полуволн. Так как для такой волны волновой вектор $\vec{\mathrm{k}} = \mathrm{k}_x \vec{e}_x$, где $\mathrm{k}_x = \frac{2\pi}{\lambda}$, то условие образования стоячей волны в направлении оси x можно записать и как условие на волновое число:

$$\mathrm{k}_x = n_1 \frac{\pi}{l}, \quad n_1 = 1, 2, 3, \ldots \tag{1.19}$$

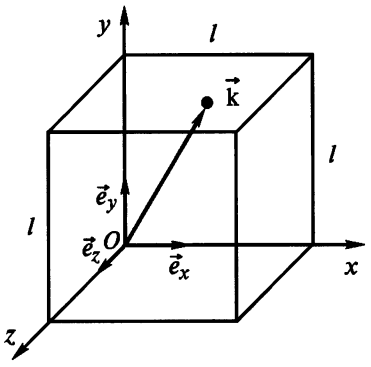


Рис. 1.8. Кубическая полость с тепловым излучением

Аналогичные рассуждения для волн, распространяющихся вдоль осей y и z, позволяют сформулировать общий вывод о том, что для стоячей волны, являющейся суперпозицией прямых и отраженных волн, распространяющихся в кубической полости в произвольном направлении, задаваемом волновым вектором

$$\vec{\mathrm{k}} = \mathrm{k}_x \vec{e}_x + \mathrm{k}_y \vec{e}_y + \mathrm{k}_z \vec{e}_z,$$

должны выполняться условия

$$\mathrm{k}_x = n_1 \frac{\pi}{l}, \quad \mathrm{k}_y = n_2 \frac{\pi}{l}, \quad \mathrm{k}_z = n_3 \frac{\pi}{l}. \tag{1.20}$$

Здесь n_1, n_2 и n_3 — целочисленные параметры, принимающие независимо друг от друга значения 0, 1, 2 и т. д.

Условия (1.20) можно записать как условия на волновые числа волн в полости

$$k = |\vec{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{\pi}{l}\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2},$$

$$n_1,\ n_2, n_3 = 0, 1, 2, \ldots \qquad (1.21)$$

Так как $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c}$, то равновесное тепловое излучение в кубической полости можно рассматривать как совокупность стоячих электромагнитных волн различных частот, значения которых определяются соотношением

$$\omega = \frac{\pi c}{l}\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}, \quad n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \ldots \qquad (1.22)$$

Каждой тройке целых неотрицательных чисел (n_1, n_2, n_3) соответствует одна стоячая волна. Общее число таких стоячих волн бесконечно велико.

Определим число стоячих электромагнитных волн в полости с частотами, которые не превышают заданного значения ω. Для этого рассмотрим дискретное трехмерное пространство Z^3 (рис. 1.9), в котором каждая точка с целочисленными неотрицательными координатами n_1, n_2 и n_3 соответствует отдельной стоячей электромагнитной волне в полости с равновесным тепловым излучением. Эти точки разбивают пространство Z^3 на ячейки единичного объема.

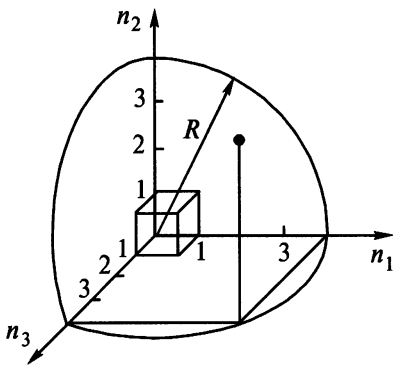


Рис. 1.9. Дискретное трехмерное пространство для подсчета числа стоячих электромагнитных волн

Представим теперь условие (1.22) в виде уравнения сфери-

ческой поверхности в пространстве Z^3:

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2, \tag{1.23}$$

где $R = \dfrac{\omega l}{\pi c}$ — радиус сферы.

Теперь число $\tilde{N}$ стоячих волн в полости, частоты которых не превосходят значения ω, можно определить, подсчитав число изображающих точек из положительного октанта пространства Z^3, попавших в шар радиуса R. Так как с каждой точкой в пространстве Z^3 связана ячейка единичного объема, то объем 1/8 части шара радиуса R и определяет искомое число точек (стоячих волн). Поэтому

$$\tilde{N} = \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{1}{6} \frac{\omega^3 l^3}{\pi^2 c^3} = \frac{1}{6} \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} V. \tag{1.24}$$

Здесь $V = l^3$ — объем полости, в которой заключено рассматриваемое равновесное тепловое излучение.

Следует учесть, что электромагнитные волны — поперечные волны и в каждом направлении $\vec{k}$ в полости в общем случае могут распространяться две волны, поляризованные во взаимно перпендикулярных плоскостях. Поэтому число стоячих волн с частотой, не превышающей заданного значения ω, следует определить как

$$N = 2\tilde{N} = \frac{1}{3} \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} V. \tag{1.25}$$

Дифференцируя (1.25) по частоте, найдем число стоячих волн в полости, попадающих в интервал частот от ω до $\omega + d\omega$:

$$dN = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} V. \tag{1.26}$$

Если теперь через $\langle\varepsilon\rangle$ обозначить среднюю энергию стоячей электромагнитной волны частоты ω, то, согласно определению спектральной плотности энергии равновесного теплового излучения, имеем

$$u_{\omega,T}\,d\omega = \frac{dN\langle\varepsilon\rangle}{V}.$$

Отсюда, с учетом (1.26), находим, что

$$u_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}\langle\varepsilon\rangle. \qquad (1.27)$$

Развивая теорию теплового излучения, Д. Рэлей (1900) и Д. Джинс (1905) предложили рассмотреть каждую стоячую электромагнитную волну как объект с двумя степенями свободы, одна из которых — электрическая, а другая — магнитная.

Согласно классической теореме о равномерном распределении энергии по степеням свободы, в состоянии термодинамического равновесия на каждую степень свободы системы приходится в среднем энергия, равная $\frac{1}{2}kT$, где $k = 1{,}38\cdot 10^{-23}$ Дж/К — постоянная Больцмана. Поэтому для равновесного теплового излучения при температуре T на каждую стоячую электромагнитную волну частотой ω приходится в среднем энергия

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{1}{2}kT + \frac{1}{2}kT = kT. \qquad (1.28)$$

Из (1.27) получаем

$$u_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}kT. \qquad (1.29)$$

С помощью соотношений (1.17) это выражение для спектральной плотности энергии равновесного теплового излучения можно преобразовать в формулу Рэлея — Джинса для испускательной способности абсолютно черного тела:

$$r^*_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT\,. \qquad (1.30)$$

Формула Рэлея — Джинса достаточно хорошо согласуется с экспериментальными данными об излучении абсолютно черного тела в области малых частот или больших длин волн и резко расходится с опытом для больших частот или малых длин волн излучения. Кроме того, интегрируя (1.29) и (1.30) по всем частотам, мы получаем бесконечные значения для интегральной плотности энергии равновесного теплового излучения $u(T)$ и для энергетической светимости абсолютно черного тела R^*. Действительно,

$$u(T) = \frac{4}{c} R^* = \int_0^\infty u_{\omega,T}\, d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega \to \infty.$$

Таким образом, из классической теории теплового излучения следует вывод о том, что при конечных значениях энергии излучения равновесие между веществом и излучением невозможно, но он противоречит опыту.

Этот противоречивый результат, содержащийся в формуле Рэлея — Джинса, вывод которой с точки зрения классической теории не вызывал сомнений, П. Эренфест назвал *"ультрафиолетовой катастрофой"*.

Гипотеза о квантах. Формула Планка. "Ультрафиолетовая катастрофа" показала, что классическая физика содержит ряд принципиальных внутренних противоречий, которые проявились в теории теплового излучения и разрешить которые можно только с помощью принципиально новых физических идей.

Такая физическая идея была сформулирована в 1900 г. М. Планком в виде гипотезы о квантах. Согласно этой гипотезе, излучение испускается и поглощается веществом не непрерывно, а конечными порциями энергии, которые Планк назвал *квантами*. Энергия кванта зависит от частоты излучения и определяется по формуле

$$E = h\nu, \quad \text{или} \quad E = \hbar\omega. \qquad (1.31)$$

Здесь $h = 2\pi\hbar$ — новая фундаментальная физическая константа, которую называют постоянной Планка. Экспериментально определенное с большой точностью значение этой константы в соответствии с современными данными равно

$$h = (6{,}62618 \pm 0{,}00004) \cdot 10^{-34}\ \text{Дж} \cdot \text{с}.$$

Так как размерность этой постоянной "энергия × время" совпадает с размерностью величины, которую в механике называют действием, то постоянную Планка называют также квантом действия.

Гипотеза Планка о квантах нарушила "незыблемое" правило классической физики о том, что любая физическая величина, в том числе и энергия, изменяется непрерывным образом и за бесконечно малый промежуток времени ее изменение всегда бесконечно мало́. Эта гипотеза оказала огромное влияние на последующее развитие физики. Именно развитие гипотезы Планка о квантах, высказанной в начале XX в., привело к появлению квантовой механики — современной физической теории, в которой идея квантования, или дискретности, распространяется на различные физические величины, характеризующие состояние системы. В этом смысле 1900 г. можно назвать годом рождения квантовой физики, которая за последующие сто лет бурно развивалась и позволила создать законченную и непротиворечивую картину микромира на уровне атомных явлений.

На первом этапе с помощью гипотезы о квантовании энергии излучения Планку удалось дать исчерпывающее теоретическое описание равновесного теплового излучения, сняв все противоречия классической теории.

Основное отличие квантовой теории излучения от классической обнаруживается уже при расчете средней энергии излучения частотой ω. С учетом гипотезы Планка среднюю энергию излучения определяют по формуле

$$\langle \varepsilon \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} P_n \varepsilon_n. \qquad (1.32)$$

Здесь $\varepsilon_n = n\hbar\omega$ — возможные значения энергии излучения; P_n — вероятность того, что в состоянии термодинамического равновесия при температуре T излучение будет иметь энергию ε_n. Эту

вероятность можно оценить с помощью распределения Больцмана, записав ее с точностью до некоторой константы в виде

$$P_n = \mathrm{A}e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}. \tag{1.33}$$

Если учесть, что $\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1$, то для константы A получим значение

$$\mathrm{A} = \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}} \right)^{-1}.$$

Таким образом, в квантовой теории излучения среднее значение энергии излучения частотой ω определяется из следующего выражения:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\hbar\omega e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}} = \hbar\omega \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n\xi}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\xi}}, \tag{1.34}$$

где $\xi = \frac{\hbar\omega}{kT}$.

Сумму, стоящую в знаменателе выражения (1.34), определим по формуле геометрической прогрессии

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\xi} = \frac{1}{1 - e^{-\xi}}. \tag{1.35}$$

Формально дифференцируя это соотношение по ξ, находим сумму ряда, стоящего в числителе формулы (1.34):

$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n\xi} = -\frac{dS}{d\xi} = \frac{e^{-\xi}}{\left(1 - e^{-\xi}\right)^2}. \tag{1.36}$$

Подставляя найденные значения сумм в (1.34), получаем окончательно выражение для средней энергии излучения частотой ω в квантовой теории

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \qquad (1.37)$$

Заметим, что на малых частотах, когда $\frac{\hbar\omega}{kT} << 1$ и $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{kT}$, из (1.37) получаем формулу классической теории: $\langle \varepsilon \rangle = kT$. Однако в области больших частот отличие средней энергии излучения, рассчитанной по формулам (1.28) и (1.37), становится существенным. Но именно в этой области частот классическая теория излучения приводит к "ультрафиолетовой катастрофе". Квантовая теория излучения разрешает это противоречие теории и эксперимента. Действительно, подставляя (1.37) в (1.27), получаем известную формулу Планка для спектральной плотности энергии равновесного теплового излучения

$$u_{\omega, T} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \qquad (1.38)$$

Формула связи (1.17) позволяет также записать *функцию Планка*

$$r^*_{\omega, T} \equiv f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}, \qquad (1.39)$$

описывающую испускательную способность абсолютно черного тела во всем диапазоне частот.

Функция Планка находится в соответствии с результатами экспериментальных исследований излучения абсолютно черного тела на всех частотах и при всех температурах. При малых частотах формула (1.39) квантовой теории излучения переходит в формулу

$(1+\alpha)^x \approx 1+x\alpha$ $\qquad e^x \approx 1+x$

(1.30) Рэлея — Джинса классической теории. При больших частотах, когда $\hbar\omega >> kT$, с высокой точностью $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} >> 1$. В этом случае формула (1.39) переходит в соотношение

$$f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}, \qquad (1.40)$$

структуру которого предсказал еще в 1893 г. В. Вин.

Отметим, что вывод формулы Планка в квантовой теории излучения может быть проведен различными способами. Некоторые из них будут рассмотрены в последующих главах.

□ **Задача 1.3.** Используя основные соотношения квантовой теории излучения, выведите закон Стефана — Больцмана и определите значение постоянной Стефана — Больцмана.

Решение. Интегрируя функцию Планка (1.39) по всем частотам, находим энергетическую светимость абсолютно черного тела. В результате интегрирования имеем

$$R^* = \int_0^\infty r^*_{\omega, T}\, d\omega = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \int_0^\infty \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = \frac{k^4 T^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Полученное соотношение соответствует закону Стефана — Больцмана (1.7), так как оно может быть записано в виде $R^* = \sigma T^4$, где

$$\sigma = \frac{k^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Значение несобственного интеграла

$$I = \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \int_0^\infty \frac{x^3 e^{-x} dx}{1 - e^{-x}}$$

вычислим, разложив в ряд его знаменатель

$$\left(1 - e^{-x}\right)^{-1} = 1 + e^{-x} + e^{-2x} + \ldots$$

▽

∇ и проинтегрировав почленно это выражение. В результате получим

$$I=\int_0^\infty x^3e^{-x}\left(1+e^{-x}+e^{-2x}+...\right)dx=\sum_{n=1}^\infty\int_0^\infty x^3e^{-nx}dx=\sum_{n=1}^\infty\frac{3}{n}\int_0^\infty x^2e^{-nx}dx=$$

$$=\sum_{n=1}^\infty\frac{6}{n^2}\int_0^\infty xe^{-nx}dx=\sum_{n=1}^\infty\frac{6}{n^3}\int_0^\infty e^{-nx}dx=\sum_{n=1}^\infty\frac{6}{n^4}=6\sum_{n=1}^\infty\frac{1}{n^4}=6\frac{\pi^4}{90}=\frac{\pi^4}{15}.$$

Поэтому значение постоянной Стефана — Больцмана можно представить через универсальные константы k, c и $\hbar$:

$$\sigma=\frac{\pi^2k^4}{60c^2\hbar^3}=5{,}67\cdot10^{-8}\ \text{Вт}\cdot\text{м}^{-2}\cdot\text{К}^{-4}.$$

Следует отметить, что сам Планк, пользуясь экспериментальным значением σ, по этой формуле впервые определил значение постоянной $\hbar$. ■

□ **Задача 1.4.** С помощью функции Планка для испускательной способности абсолютно черного тела определите значение постоянной b в законе Вина для теплового излучения.

Решение. По формуле (1.3) с помощью замены переменной $\omega=\dfrac{2\pi c}{\lambda}$, преобразуя функцию Планка (1.39), находим испускательную способность абсолютно черного тела как функцию длины волны:

$$r^*_{\lambda,T}\equiv\varphi(\lambda,T)=\frac{4\pi^2c^2\hbar}{\lambda^5}\frac{1}{\left[\exp\left(\dfrac{2\pi c\hbar}{\lambda kT}\right)-1\right]}.$$

Вводя обозначение $z=\dfrac{2\pi c\hbar}{\lambda kT}$, представляем функцию φ в виде

$$\varphi=A\frac{z^5}{e^z-1},\quad A=\text{const}.$$

Найдем, при каком значении $z=z_m$ функция φ имеет максимум. Для этого, взяв производную ∇

$$\frac{d\varphi}{dz} = A\frac{5z^4\left(e^z-1\right)-z^5e^z}{\left(e^z-1\right)^2}$$

и приравняв ее нулю, получим для экстремального значения $z = z_m$ трансцендентное уравнение

$$5\left(e^{z_m}-1\right)-z_m e^{z_m} = 0,$$

или

$$z_m = 5\left(1-e^{-z_m}\right).$$

Решение этого уравнения можно найти методом последовательных приближений, считая, что $e^{-z_m} << 1$. Тогда в первом приближении получаем $z_m^{(1)} = 5$. Во втором приближении искомый корень уравнения находим из соотношения

$$z_m^{(2)} = 5\left(1-e^{-5}\right) = 4{,}966.$$

Это значение можно взять в качестве приближенного решения рассматриваемого трансцендентного уравнения.

Следовательно, испускательная способность абсолютно черного тела достигает максимума при длине волны $\lambda = \lambda_m$, для которой

$$\frac{2\pi c\hbar}{\lambda_m kT} = 4{,}966.$$

Отсюда находим, что

$$\lambda_m T = \frac{2\pi c\hbar}{4{,}966k} = 2{,}9\cdot 10^{-3}\ \text{м}\cdot\text{К}.$$

Обозначив константу в правой части этого равенства через b, получим закон смещения Вина: $\lambda_m T = b$, в котором постоянная b выражена через универсальные константы k, c и $\hbar$.

1.3. Фотонный газ и его свойства

Фотонная теория излучения. Развивая гипотезу М. Планка о квантах, А. Эйнштейн в 1905 г. предположил, что квантовые свойства излучения (света) проявляются не только при испускании и поглощении его веществом, но и при распространении излучения в пространстве. Возрождая корпускулярную теорию света, предложенную И. Ньютоном еще в начале XVIII в., А. Эйнштейн выдвинул гипотезу, согласно которой излучение можно представить состоящим из большого числа частиц, каждая из которых, обладая квантом энергии, движется в пространстве со скоростью света в вакууме $c = 3 \cdot 10^8$ м/с. Рассмотрим свойства таких частиц.

Частица излучения, которую назвали *фотоном*, представляет собой ультрарелятивистскую незаряженную частицу. Свойства фотона могут быть описаны только с использованием основных соотношений специальной теории относительности. В частности, из этой теории следует, что фотон является уникальной элементарной частицей, имеющей нулевую массу покоя. Это означает, что фотон всегда движется со скоростью c и не может находиться в состоянии покоя. Если при неупругом столкновении с другой элементарной частицей фотон "останавливается", то он исчезает, передавая всю свою энергию этой частице.

Значения энергии фотона

$$\varepsilon_ф = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \tag{1.41}$$

лежат в широком диапазоне от нескольких электрон-вольт для видимого света ($\lambda \sim 500$ нм), до миллионов электрон-вольт для коротковолнового (жесткого) γ-излучения ($\lambda \sim 10^{-3}$ нм).

Для фотона, так же как для любой материальной частицы, можно определить релятивистскую массу $m_ф$. Она связана с энергией фотона известным релятивистским соотношением: $m_ф c^2 = \varepsilon_ф$. Отсюда, с учетом (1.41), находим, что

$$m_ф = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{h}{c\lambda}. \tag{1.42}$$

В частности, в гравитационном поле фотон ведет себя как частица с гравитационной массой $m_G = m_\text{ф}$.

Движущийся со скоростью c фотон обладает импульсом, величина которого связана с его энергией релятивистским соотношением $p_\text{ф} = \varepsilon_\text{ф}/c$, учитывающим, что масса покоя фотона равна нулю. Отсюда следует, что

$$p_\text{ф} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}. \qquad (1.43)$$

Для фотона, направление распространения которого задается волновым вектором $\vec{\mathrm{k}}$, с модулем $\mathrm{k} = \frac{2\pi}{\lambda}$, формулу (1.43) можно записать в векторном виде

$$\vec{p}_\text{ф} = \hbar\vec{\mathrm{k}}. \qquad (1.44)$$

Опыт Боте. Можно ли экспериментально обнаружить отдельный фотон излучения? Очевидно, что сделать это будет легче, если фотон будет иметь достаточно большую энергию. Как следует из (1.41) — (1.43), таким фотоном будет фотон коротковолнового электромагнитного излучения, например рентгеновского излучения.

Эксперимент по обнаружению фотонов рентгеновского излучения был проведен В. Боте в 1925 г. В этом опыте тонкую металлическую фольгу Ф (рис. 1.10, *а*) облучали рентгеновским излучением. При этом фольга становилась сама источником слабого вторичного излучения.

Согласно волновым представлениям, энергия даже столь слабого излучения должна распределяться в пространстве равномерно влево и вправо. В этом случае левый и правый счетчики $\mathrm{C_Л}$ и $\mathrm{C_П}$ должны срабатывать практически одновременно, а самописцы Л и П, связанные со счетчиками, должны оставлять метки на движущейся ленте друг против друга.

С точки зрения корпускулярной фотонной теории излучения, при малой энергии вторичного излучения, сравнимой с энергией одного фотона, фотоны должны излучаться фольгой либо только

вправо, либо только влево. Поэтому метки на ленте от самописцев Л и П не должны совпадать.

Опыт (рис. 1.10, *б*) подтвердил вывод фотонной теории излучения и тем самым явился первым экспериментальным доказательством существования фотонов.

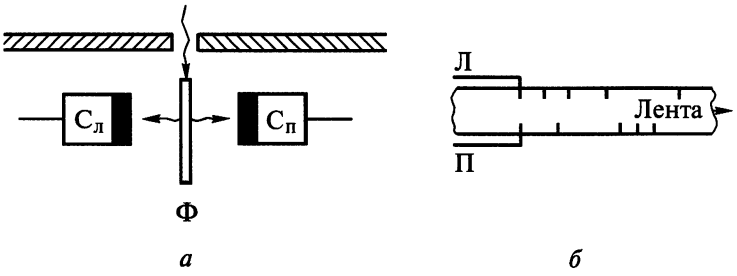


Рис. 1.10. Опыт Боте:
а — схема установки; *б* — лента с записью регистрации фотонов

В опытах, проведенных под руководством С.И. Вавилова, было установлено, что человеческий глаз может реагировать на свет при попадании всего лишь нескольких сотен фотонов в секунду. Поэтому в слабых световых потоках флуктуации, связанные с изменением числа излучаемых фотонов, могут быть обнаружены даже визуально.

Единичные фотоны с энергией порядка 0,1 эВ (инфракрасное излучение) были зарегистрированы детекторами на основе сверхпроводящего нитрида ниобия.

Уравнение состояния фотонного газа. С точки зрения фотонной теории равновесное тепловое излучение можно представить в виде фотонного газа, заполняющего полость, частицы которого движутся хаотически, т. е. равновероятно по всем направлениям.

Очевидно, что газ фотонов не может быть описан как классический идеальный газ. Частицы фотонного газа не имеют распределения по скоростям, а их распределение по энергиям не описывается классическим распределением Максвелла — Больцмана. Это распределение фотонов по энергиям будет выведено после детального обсуждения квантовой теории систем тождественных частиц. Сейчас же мы ограничимся обсуждением некоторых свойств фотонного газа, вытекающих из общих термодинамических законов и соотношений, примененных к равновесному тепловому излучению.

Прежде всего получим уравнение состояния фотонного газа, связывающее его термодинамические параметры: давление, объем и температуру. Для этого, как и в молекулярно-кинетической теории газов, выведем формулу для давления фотонного газа, рассмотрев процесс передачи импульса стенке сосуда падающими на нее фотонами.

Из всей совокупности фотонов выделим сначала фотоны, соответствующие излучению частотой ω, для чего введем их объемную концентрацию n_ω. Рассматривая три взаимно перпендикулярных равноправных направления движения частиц, будем считать, что в направлении, перпендикулярном поверхности стенки сосуда с фотонным газом, движется одна треть всех фотонов. Из них лишь половина движется к стенке, а другая половина — от стенки. Поскольку фотоны движутся со скоростью c, то число фотонов, падающих на единицу поверхности в единицу времени, запишем как

$$N = \frac{1}{6} n_\omega c.$$

Если поглощательную способность вещества стенки обозначить $a_{\omega,T}$, то из N падающих фотонов $N_1 = a_{\omega,T} N$ поглотится стенкой, а $N_2 = \left(1 - a_{\omega,T}\right) N$ отразится. Очевидно, что $N_1 + N_2 = N$ (рис. 1.11).

Условие термодинамического равновесия системы вещество — излучение требует, чтобы число фотонов N_3, испускаемых с единицы поверхности в единицу времени, было равно числу поглощенных фотонов N_1. Только при $N_3 = N_1$ внутренняя энергия тела не будет изменяться со временем, как и не будет изменяться со временем энергия излучения.

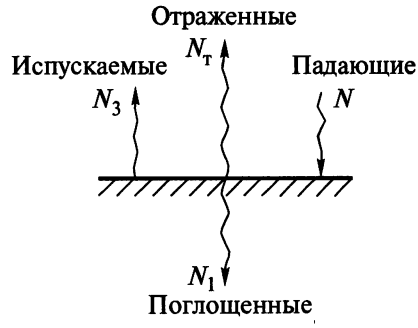


Рис. 1.11. Баланс фотонов вблизи поверхности тела

Любой поглощенный и излученный фотон передает стенке импульс $p_ф$, величина которого определяется формулой (1.43). Отраженный фотон, изменяя направление своего движения на противоположное, передает стенке удвоенный импульс $2p_ф$. Следовательно, за единицу времени единице поверхности стенки сообщается импульс, равный

$$N_1 p_ф + N_2 2p_ф + N_3 p_ф = 2(N_1 + N_2) p_ф = 2Np_ф.$$

По второму закону Ньютона этот переданный стенке импульс определяет давление P_ω, которое оказывает на стенку сосуда излучение частотой ω. Следовательно,

$$P_\omega = 2Np_ф = \frac{1}{3} n_\omega c p_ф = \frac{1}{3} n_\omega \varepsilon_\phi = \frac{1}{3} u_\omega, \qquad (1.45)$$

где u_ω — плотность энергии излучения с частотой ω.

Суммируя воздействие на стенку фотонов излучения различных частот, получаем формулу для результирующего давления фотонного газа, находящегося в равновесии при температуре T:

$$P = \frac{1}{3} \int_0^\infty u_{\omega, T}\, d\omega = \frac{1}{3} u(T). \qquad (1.46)$$

Здесь $u(T)$ — интегральная плотность энергии излучения всевозможных частот. Так как с учетом (1.7) и (1.16)

$$u(T) = \frac{4}{c} R^* = \frac{4\sigma}{c} T^4, \qquad (1.47)$$

то окончательно для давления фотонного газа получаем формулу

$$P = \frac{4\sigma}{3c} T^4. \qquad (1.48)$$

Здесь σ — постоянная Стефана — Больцмана; c — скорость света в вакууме.

Итак, давление, которое оказывает фотонный газ, пропорционально четвертой степени его абсолютной температуры и не зависит от объема полости, в которой заключен фотонный газ, моделирующий в корпускулярной теории тепловое излучение, заполняющее полость. В частности, подставляя в (1.48) $T = 10^3$ K, получаем $P = 2{,}5 \cdot 10^4$ Па. С повышением температуры давление фотонного газа резко возрастает и при температуре $T = 10^8$ K достигает значения $P = 2{,}5 \cdot 10^{16}$ Па $= 2{,}5 \cdot 10^{11}$ атм.

Термодинамические характеристики фотонного газа. Определим теперь внутреннюю энергию фотонного газа, заполняющего при температуре T полость объема V. С учетом формулы (1.47) находим

$$U = u(T)V = \frac{4\sigma}{c} T^4 V. \tag{1.49}$$

Поэтому для теплоемкости фотонного газа при постоянном объеме V получаем выражение

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V=\text{const}} = \frac{16\sigma}{c} T^3 V. \tag{1.50}$$

Отметим, что в отличие от классического идеального газа, теплоемкость которого не зависит от температуры, теплоемкость фотонного газа пропорциональна кубу его абсолютной температуры. Применяя к фотонному газу известное термодинамическое соотношение $dQ = TdS = dU + PdV$, с учетом (1.48) и (1.49) получаем

$$dS = \frac{dU + PdV}{T} = \frac{16\sigma}{c} T^2 V dT + \frac{16\sigma}{3c} T^3 dV = d\left(\frac{16\sigma}{3c} T^3 V\right).$$

Отсюда, считая, что $S \to 0$ при $T \to 0$, находим энтропию фотонного газа:

$$S = \frac{16\sigma}{3c} T^3 V. \tag{1.51}$$

Полученные термодинамические соотношения позволяют рассмотреть различные процессы, в которых может участвовать фотонный газ. В частности, из (1.48) следует, что для фотонного газа изотермический процесс ($T = \text{const}$) является одновременно и изобарическим процессом ($P = \text{const}$).

Если при сжатии или расширении фотонного газа его энтропия не изменяется ($S = \text{const}$), то в таком процессе газ не обменивается теплотой с окружающими телами ($dQ = 0$) и такой процесс является адиабатическим. Из (1.51) следует, что уравнение адиабатического процесса для фотонного газа имеет вид

$$T^3 V = \text{const}. \tag{1.52}$$

С учетом (1.48) это соотношение преобразуем к виду

$$PV^{4/3} = \text{const}. \tag{1.53}$$

Тепловое излучение Вселенной. Из анализа соотношения (1.49) следует, что энергия излучения дает существенный вклад во внутреннюю энергию термодинамической системы при больших температурах. Одной из таких систем является высокотемпературная плазма. В таком состоянии вещества фотонный газ (излучение) наряду с газом частиц (электронов, ионов и др.) должен быть включен в рассмотрение как равноправный элемент системы. Многие свойства высокотемпературной плазмы можно объяснить, изучая взаимодействие фотонного газа с газом частиц.

Интересный пример такого взаимодействия можно найти в современной космологической теории, описывающей ранние стадии эволюции Вселенной. Эта теория утверждает, что вся Вселенная возникла приблизительно 10 — 20 млрд. лет назад в результате Большого взрыва.

Взрыв образовал в очень малом объеме пространства горячий "котел", в котором при фантастически больших плотностях и температурах находилось все вещество Вселенной. По оценкам Г. Гамова, через 100 с после взрыва плотность вещества была в тысячи раз больше плотности воды, а температура ($T \sim 10^9$ K) значительно превышала температуру в центре термоядерного взрыва.

В горячем огненном шаре материя существовала в виде высокотемпературной плазмы, состоящей из протонов, нейтронов, электронов, фотонов, нейтрино и их античастиц. Вещество в таком состоянии было непрозрачно для излучения, и излучение находилось в "плену" у вещества.

Согласно теории А.А. Фридмана, высказанной еще в 1922 г., после взрыва Вселенная начала расширяться. В результате расширения Вселенной температура вещества и излучения уменьшалась и через тысячу лет после взрыва достигла значения $T_* = 3000$ K. Плотность вещества во Вселенной к этому времени уменьшилась до значения порядка $\rho_* = 10^{-17}$ кг/м^3. В этих условиях электроны, протоны и нейтроны объединяются, образуя атомы водорода, гелия и других легких элементов. Среда, состоящая из таких нейтральных атомов, становится прозрачной для излучения, и оно "отрывается" от вещества. Начиная с этого момента фотонный газ занимает весь объем Вселенной и расширяется вместе с ней. Это расширение фотонного газа можно считать адиабатическим.

Из соотношения (1.52) следует, что по мере роста объема расширяющейся Вселенной температура фотонного газа, заполняющего ее, будет уменьшаться. Простой расчет (см. задачу 1.6) показывает, что в результате такого процесса вся Вселенная к настоящему времени должна быть заполнена равновесным излучением с температурой около 3 K. Так как это тепловое космическое излучение представляет собой первичное излучение, зародившееся на ранней стадии эволюции Вселенной, то оно было названо известным астрофизиком И.С. Шкловским *реликтовым* (от лат. *relictus* — оставленный). Оценки показывают, что сейчас в каждом кубическом сантиметре Вселенной находится порядка 700 фотонов реликтового излучения.

В 1965 г. американские инженеры А. Пензиас и Р. Вилсон при отладке приемника радиотелескопа обнаружили слабый фоновый радиошум, приходящий из космоса в виде равномерно распределенного по небесной сфере излучения с максимумом энергии на длине волны λ_m = 0,96 мм. Закон Вина (1.11) позволяет определить, что на такой длине волны находится максимум энергии равновесного теплового излучения при температуре $T = 3$ K. Так, в какой-то мере случайно, было обнаружено реликтовое тепловое излучение как след процессов, происходивших во Вселенной в далеком прошлом.

Открытие реликтового излучения (Нобелевская премия по физике, 1978 г.) является важным достижением современной науки. Оно подтверждает правильность теории "горячей" расширяющейся Вселенной, описывающей эволюцию Вселенной в течение десятков миллиардов лет. Из этой теории следует, что на ранней стадии эволюции Вселенная существенно отличалась от современной и представляла собой сгусток сверхплотной плазмы и излучения очень высокой температуры, рожденных в момент Большого взрыва. Таким образом, физические законы, открытые в земных условиях, справедливы и для явлений в космических масштабах. Значимость такого вывода очень велика.

Отметим также, что реликтовое излучение можно рассматривать как своеобразную выделенную систему отсчета во Вселенной, причем движение Солнечной системы относительно реликтового излучения может быть обнаружено экспериментально. Такая возможность обусловлена тем, что вследствие эффекта Доплера реликтовые фотоны, летящие навстречу наблюдателю, кажутся более энергичными, т. е. соответствуют излучению большей частоты, чем фотоны, догоняющие движущегося наблюдателя. Экспериментально установлено, что Солнце движется относительно фона реликтового излучения со скоростью примерно 400 км/с в направлении созвездия Льва.

□ **Задача 1.5.** Определите число фотонов в единице объема пространства, заполненного равновесным тепловым излучением при температуре T.

Решение. Если ввести объемную концентрацию n_ω фотонов излучения из интервала частот от ω до $\omega + d\omega$, то искомая концентрация фотонов излучения всевозможных частот определится как

$$n_\Phi = \int_0^\infty n_\omega d\omega.$$

По определению, спектральная объемная плотность энергии излучения $u_{\omega, T} = \hbar\omega n_\omega$. Поэтому, с учетом формулы Планка (1.38), находим, что

$$n_\Phi = \int_0^\infty \frac{u_{\omega, T}}{\hbar\omega}\, d\omega = \frac{1}{\pi^2}\left(\frac{kT}{\hbar c}\right)^3 \int_0^\infty \frac{\xi^2 d\xi}{\exp\xi - 1} = \frac{1}{\pi^2}\left(\frac{kT}{\hbar c}\right)^3 I.$$

▽

▽ Несобственный интеграл I может быть вычислен. Его приближенное значение равно 2,4. Поэтому окончательно для расчета концентрации фотонов получаем формулу

$$n_{\text{ф}} = \frac{2,4}{\pi^2}\left(\frac{kT}{\hbar c}\right)^3.$$

По этой формуле находим, в частности, что $n_{\text{ф}} = 9\cdot 10^9$ м$^{-3}$ при $T = 10$ К и $n_{\text{ф}} = 9\cdot 10^{16}$ м$^{-3}$ при $T = 1000$ К. Такая зависимость концентрации частиц от температуры является характерной особенностью фотонного газа. ■

□ **Задача 1.6.** В теории "горячей" Вселенной считается, что "отрыв" излучения от вещества на ранней стадии эволюции Вселенной произошел при температуре $T_* = 3000$ К и плотности вещества $\rho_* = 10^{-17}$ кг/м^3. Считая, что в настоящее время плотность вещества во Вселенной $\rho_0 = 10^{-26}$ кг/м^3, оцените температуру реликтового излучения на современном этапе эволюции Вселенной.

Решение. Предположим, что излучение, заполняющее всю Вселенную, расширяется вместе с ней адиабатно. Тогда, с учетом (1.52), находим, что

$$T_*^3 V_* = T_0^3 V_0,$$

где T_0 — искомая температура реликтового излучения в настоящее время, а V_* и V_0 — объемы расширяющейся Вселенной соответственно на ранней и современной стадиях ее эволюции.

Считая массу вещества Вселенной неизменной и равной M, определим плотности вещества $\rho_* = \dfrac{M}{V_*}$ и $\rho_0 = \dfrac{M}{V_0}$. Тогда

$$T_0^3 = \frac{V_*}{V_0} T_*^3 = \frac{\rho_0}{\rho_*} T_*^3.$$

▽ Отсюда получаем

$$T_0 = T_* \sqrt[3]{\frac{\rho_0}{\rho_*}}.$$

Подставляя значения плотностей ρ_* и ρ_0, находим, что

$$T_0 = 10^{-3} T_* = 3\,\text{K}.$$

До такой температуры "остыло" излучение в расширяющейся Вселенной к настоящему времени. ■

1.4. Квантовая оптика

В соответствии с основными положениями квантовой теории Планка и Эйнштейна излучение, и в частности видимый свет, обладает корпускулярными свойствами. Очевидно, что при определенных условиях эти свойства должны проявляться в оптических экспериментах.

Класс оптических явлений, для объяснения которых следует использовать представления о квантах энергии излучения и их носителях — фотонах, получил название явлений квантовой оптики. Такие явления связаны прежде всего с взаимодействием излучения с веществом, которое удается описать как взаимодействие частиц излучения (фотонов) с частицами вещества. Рассмотрим два таких явления квантовой оптики.

Фотоэффект. Определим *внешний фотоэффект* как явление испускания электронов вещества под действием излучения. Впервые фотоэффект был открыт в 1887 г. Г. Герцем, который обнаружил, что искровой разряд между двумя металлическими шариками происходит значительно интенсивнее, если один из шариков освещать ультрафиолетовым излучением. Измерение удельного заряда частиц, вылетающих из металла под действием излучения, позволило установить, что эти частицы являются электронами (Ф. Ленард, Дж. Дж. Томсон, 1899).

Хотя эмиссия электронов под действием излучения наблюдается практически у всех веществ, наиболее часто фотоэффект связывают с металлами, в которых существуют оторванные от атомов "свободные" электроны, удерживаемые внутри металла некоторым энергетическим барьером вблизи его поверхности. Преодолевая этот барьер при вылете из металла, электрон совершает работу

выхода, затрачивая на нее часть своей кинетической энергии. *Работа выхода* $A_в$ электронов из металлов имеет значение порядка нескольких электрон-вольт.

Детальное экспериментальное исследование закономерностей внешнего фотоэффекта для металлов было выполнено в 1888 г. А.Г. Столетовым на установке с фотоэлементом (рис. 1.12.) Фотоэлемент в виде вакуумной двухэлектродной лампы имеет металлический катод К, который при освещении его через кварцевое окошко видимым светом или ультрафиолетовым излучением испускает электроны. Вылетевшие из катода фотоэлектроны, достигая анода А, обеспечивают протекание в цепи электрического тока, который фиксируется гальванометром или миллиамперметром. Специальная схема подключения источника позволяет изменять полярность напряжения, подаваемого на фотоэлемент.

Качественный вид вольт-амперной характеристики такого фотоэлемента, т. е. зависимости фототока I от напряжения U между катодом и анодом для случая неизменного светового потока, падающего на катод, представлен на рис. 1.13.

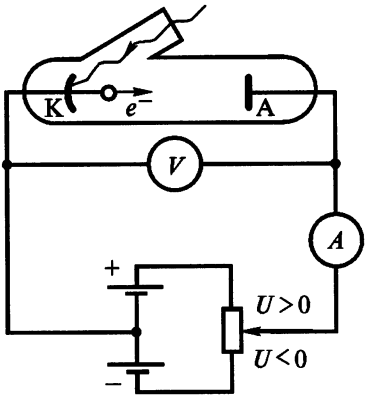


Рис. 1.12. Схема установки Столетова для изучения фотоэффекта

Положительное напряжение соответствует ускоряющему электрическому полю, в которое попадают вылетающие из катода электроны. Поэтому в области положительных напряжений все испускаемые катодом электроны достигают анода, обусловливая фототок насыщения $I_{нас}$.

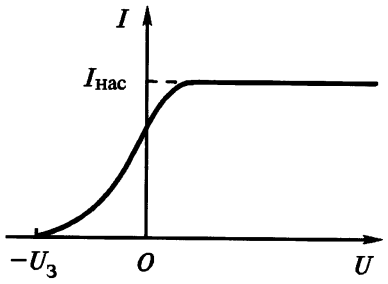


Рис. 1.13. Вольт-амперная характеристика фотоэффекта

Небольшой спад фототока при малых положительных напряжениях, который наблюдается в опытах, связан с контактной разностью потенциалов между катодом и анодом. Далее при обсуждении закономерностей фотоэффекта мы будем пренебрегать влиянием контактной разности потенциалов.

При отрицательном напряжении ($U < 0$) испущенный катодом электрон попадает в тормозящее электрическое поле, преодолеть которое он может, лишь имея определенный запас кинетической энергии. Электрон с малой кинетической энергией, вылетев из катода, не может преодолеть тормозящее поле и попасть на анод. Такой электрон возвращается на катод, не давая вклада в фототок. Поэтому плавный спад фототока в области отрицательных напряжений указывает на то, что вылетающие из катода фотоэлектроны имеют разные значения кинетической энергии.

При некотором отрицательном напряжении, модуль которого $U_З$ называют задерживающим напряжением (потенциалом), фототок становится равным нулю. Соответствующее тормозящее электрическое поле при этом задерживает все вылетающие из катода электроны, включая электроны с максимальной кинетической энергией E_m.

Измерив задерживающее напряжение, можно определить эту максимальную энергию или максимальную скорость v_m фотоэлектронов из соотношения

$$E_m = \frac{1}{2} m_0 v_m^2 = eU_З. \qquad (1.54)$$

Экспериментально были установлены следующие основные законы фотоэффекта.

1. Для монохроматического света определенной длины волны фототок насыщения пропорционален световому потоку, падающему на катод.

2. Максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов не зависит от величины светового потока, а определяется лишь частотой излучения.

3. Для каждого вещества катода существует своя граничная частота $\nu_к$, такая, что излучение с частотой $\nu < \nu_к$ фотоэффекта не вызывает. Эту граничную частоту называют частотой красной границы фотоэффекта. По шкале длин волн ей соответствует длина волны красной границы $\lambda_к$, такая, что эмиссию электронов из данного металла вызывает излучение лишь с меньшей длиной волны ($\lambda < \lambda_к$).

Попытки объяснить закономерности фотоэффекта используя классическую волновую теорию, в которой излучение рассматривалось как электромагнитные волны, приводили к выводам, противоположным наблюдаемым в эксперименте. Действительно, поскольку согласно этой теории вырывание электронов из металла обусловлено силовым воздействием на них со стороны электрического поля волны, то максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов должна определяться световым потоком, падающим на катод. Наличие красной границы у фотоэффекта также противоречило выводам волновой теории.

Именно для объяснения экспериментов по фотоэффекту в 1905 г. А. Эйнштейн предложил концепцию фотонов как частиц излучения, несущих квант энергии. Рассмотрев процесс взаимодействия излучения с металлом как процесс неупругого соударения фотона со свободным электроном металла, Эйнштейн легко объяснил закономерности фотоэффекта. Действительно, в таком процессе электрон получает всю энергию от фотона, которая пропорциональна частоте излучения. Число же вырванных из металла электронов и, следовательно, фототок насыщения пропорциональны числу падающих на металл фотонов, которое определяется величиной потока энергии излучения.

Если в такой модели процесса пренебречь потерями энергии электрона при его движении внутри металла по направлению к поверхности, то из закона сохранения энергии следует соотношение

$$h\nu = A_в + E_m, \qquad (1.55)$$

которое называют *уравнением Эйнштейна для внешнего фотоэффекта*. Здесь $E_m = \frac{m_0 v_m^2}{2}$ — максимальная кинетическая энергия нерелятивистских фотоэлектронов.

Из этого уравнения непосредственно вытекают второй и третий законы фотоэффекта. Действительно, из (1.55) следует, что максимальная энергия фотоэлектронов зависит от частоты падающего на металл излучения. Кроме того, если $h\nu < A_в$, то фотоэффект не должен наблюдаться. Отсюда для частоты и длины волны красной границы фотоэффекта получаем простые формулы

$$\nu_к = \frac{A_в}{h} \quad и \quad \lambda_к = \frac{hc}{A_в}, \qquad (1.56)$$

из которых следует, что эти характеристики полностью определяются значением работы выхода электрона из металла.

Таким образом, квантовая теория излучения в отличие от волновой теории с успехом объясняет явление фотоэффекта. Единственным возражением против квантового объяснения мог бы стать известный (см. задачу 1.7) вывод теории о том, что свободный электрон не может поглотить фотон, ибо такой процесс противоречит законам сохранения энергии и импульса. Это возражение, однако, снимается, если учесть, что в металле электрон взаимодействует с атомами кристаллической решетки. Поэтому при поглощении электроном фотона часть импульса фотона может быть передана кристаллической решетке металла.

Квантовую природу фотоэффекта подтверждают также опыты Э. Майера и В. Герлаха, которые в 1914 г. исследовали фотоэлектрический эффект на мельчайших частицах металлической пыли. В этих опытах удалось оценить время, за которое частица получает энергию от излучения, достаточную для эмиссии электрона. Оно оказалось значительно меньше времени, которое необходимо для накопления энергии пылинкой, если считать, что энергия накапливается за счет поглощения электромагнитной волны.

Важной количественной характеристикой фотоэффекта является квантовый выход Y, определяющий число вылетевших электронов, приходящихся на один падающий на металл фотон. Вбли-

зи красной границы для большинства металлов квантовый выход составляет порядка 10^{-4} электрон/фотон. Малость квантового выхода обусловлена тем, что энергию, достаточную для выхода из металла, сохраняют только те электроны, которые получили энергию от фотонов на глубине от поверхности, не превышающей 0,1 мкм. Кроме того, поверхность металлов сильно отражает излучение. С увеличением энергии фотонов, т. е. с уменьшением длины волны излучения, квантовый выход увеличивается, составляя 0,01...0,05 электрон/фотон для энергии фотонов порядка одного электрон-вольта. Для рентгеновского излучения с энергией фотонов $E_\nu = 10^3$ эВ уже практически на каждые десять падающих на поверхность фотонов приходится один вылетевший из металла электрон.

Фотоэффект нашел широкое применение в науке и технике. Так, записав уравнение Эйнштейна (1.55) в виде

$$eU_з = h\nu - A_в, \qquad (1.57)$$

можно заметить, что график зависимости задерживающего напряжения от частоты излучения должен иметь вид прямой линии, наклон которой определяется значением постоянной Планка. Измерив этот наклон экспериментально для натрия, магния, меди и алюминия, Р. Милликен в 1914 г. с хорошей точностью вычислил значение постоянной Планка. В 1923 г. за работы в области элементарных зарядов и фотоэлектрического эффекта Милликен был удостоен Нобелевской премии по физике.

Приборы, в основе устройства которых лежит фотоэффект, называют фотоэлементами. Обычный вакуумный фотоэлемент выполнен в виде вакуумированной колбы, у которой внутреннюю поверхность, за исключением небольшого окошечка для доступа света, покрывает тонкая пленка из металла с малой работой выхода (цезий, калий, натрий). Анод представляет собой проволочное кольцо в центре колбы. Между катодом и анодом прикладывается ускоряющее напряжение 80...100 В. Фотоэлементы широко применяются в технике (фотореле, люксметры, системы звукозаписи на пленку и др.). В последнее время с вакуумными фотоэлементами конкурируют фоторезисторы, работа которых основана на использовании внутреннего фотоэффекта в полупроводниках.

Внешний фотоэффект используется также в фотоэлектронных умножителях (ФЭУ) — современных электронных приборах для регистрации и преобразования слабых световых сигналов. Такие приборы широко применяются в астрономии, прикладной оптике, ядерной физике. В ФЭУ фотоэлектронная эмиссия сочетается с системой умножения количества электронов, действие которой основано на явлении вторичной электронной эмиссии.

Эффект Комптона. При большой энергии фотонов, в частности в случае рентгеновского излучения ($E \sim 0{,}01$ МэВ), процесс поглощения фотонов электронами вещества становится маловероятным. В этом случае при взаимодействии электромагнитного излучения с веществом наблюдается его рассеяние с изменением направления распространения.

В 1923 г. А. Комптон, изучая рассеяние рентгеновского излучения на парафине, обнаружил, что длина волны рассеянного излучения λ' больше, чем длина волны падающего излучения λ. Такой эффект увеличения длины волны излучения вследствие рассеяния его веществом получил название эффекта Комптона. В 1927 г. за открытие и объяснение этого эффекта квантовой оптики А. Комптон был удостоен Нобелевской премии по физике.

Схематически экспериментальная установка Комптона изображена на рис. 1.14. Рентгеновская трубка РТ была смонтирована на вращающейся платформе, что позволяло при ее повороте изменять угол рассеяния θ рентгеновского излучения, попадающего после мишени-рассеивателя в измерительный блок установки.

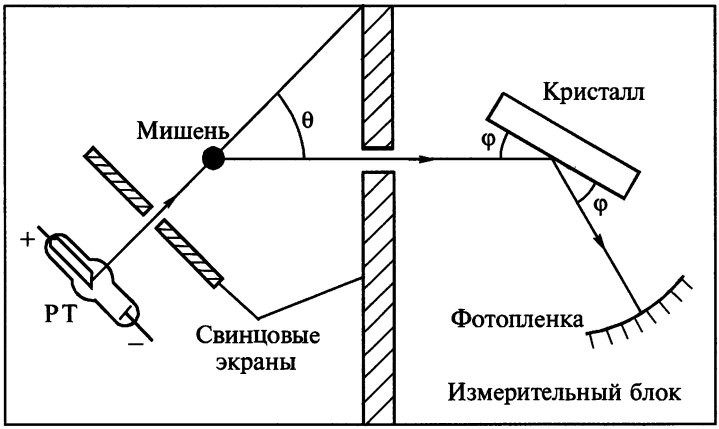


Рис. 1.14. Схема установки для наблюдения эффекта Комптона

Длина волны рассеянного излучения определялась с помощью дифракции его на кристалле. Согласно дифракционной теории, при выполнении условия Брэгга — Вульфа

$$2d \sin\varphi = n\lambda', \; n = 1, 2, ..., \qquad (1.58)$$

где d — расстояние между атомными плоскостями кристалла, а φ — угол скольжения падающего излучения, наблюдается интенсивное отражение от кристалла рассеянного рентгеновского излучения. Поэтому, зная параметры кристаллической решетки d и измерив угол φ для максимума отражения n-го порядка, можно рассчитать длину волны λ' рентгеновского излучения, рассеянного мишенью. Соответствие угла φ и длины волны λ', вытекающее из (1.58), позволяло нанести на фотопленку шкалу длин волн и по положению на фотопленке засвеченной полоски определить длину волны рассеянного рентгеновского излучения. В первых опытах Комптона вместо фотопленки использовалась подвижная ионизационная камера, позволяющая по значению тока в приборе фиксировать отраженное от кристалла рентгеновское излучение.

Как установил экспериментально Комптон, длина волны рассеянного излучения оказалась больше длины волны падающего излучения, причем изменение длины волны не зависело от материала рассеивателя, а определялось только величиной угла рассеяния θ. Опытным путем Комптон показал, что

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \Lambda_K (1 - \cos\theta). \qquad (1.59)$$

Это соотношение называют формулой Комптона. Значение постоянной $\Lambda_K = 2{,}426 \cdot 10^{-12}$ м Комптон определил экспериментально.

Увеличение длины волны излучения при его рассеянии необъяснимо с точки зрения волновой теории электромагнитного излучения. Дж. Дж. Томсон показал, что в классической теории рассеяние можно рассматривать как процесс, в котором электрон совершает вынужденные колебания под действием электрического поля падающей волны. При этом электрон сам как антенна начинает излучать вторичные (рассеянные) сферические электромагнитные волны на частоте падающего излучения.

Таким образом, эффект Комптона относится к явлениям квантовой оптики. Фотонная теория излучения объясняет этот эффект

как следствие упругого рассеяния фотона $\Phi \to \Phi'$ на свободном электроне вещества (рис. 1.15). Формула Комптона (1.59) при этом оказывается следствием законов сохранения энергии и импульса при упругом соударении фотона и электрона.

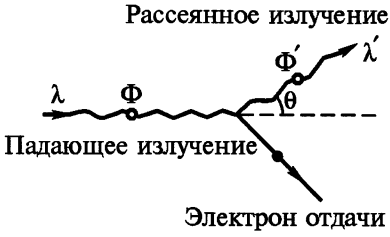


Рис. 1.15. Рассеяние излучения на свободном электроне

Действительно, в системе отсчета, в которой свободный электрон первоначально покоился, закон сохранения энергии с учетом возможных релятивистских скоростей электрона после удара может быть записан в виде

$$\frac{hc}{\lambda} + m_0 c^2 = \frac{hc}{\lambda'} + mc^2. \qquad (1.60)$$

Здесь m_0 — масса покоя электрона; $m = \gamma m_0$ — масса движущегося электрона, который называют электроном отдачи; $\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$ — релятивистский множитель; v — скорость электрона после столкновения с фотоном.

Заметим, что уже закон сохранения энергии (1.60) объясняет эффект Комптона качественно. Действительно, так как $m > m_0$, то из (1.60) следует, что $\lambda' > \lambda$.

При упругом столкновении фотона с электроном выполняется также закон сохранения импульса, который с учетом (1.44) можно записать в виде

$$\hbar \vec{k} = \hbar \vec{k}' + m\vec{v}. \qquad (1.61)$$

Здесь $k = 2\pi/\lambda$, $k' = 2\pi/\lambda'$, $\left(\hat{\vec{k}}, \vec{k}'\right) = \theta$ — угол рассеяния.

Построив векторную диаграмму импульса с учетом закона сохранения (рис. 1.16), из треугольника импульсов находим, что

$$(mv)^2 = \hbar^2 k^2 + \hbar^2 k'^2 - 2\hbar^2 kk' \cos\theta,$$

или

$$(mv)^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2\frac{h^2}{\lambda\lambda'}\cos\theta. \qquad (1.62)$$

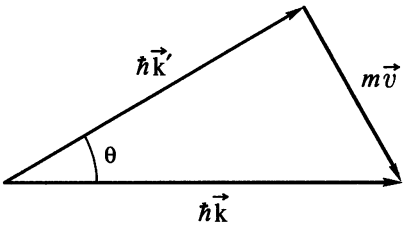


Рис. 1.16. Диаграмма импульсов при рассеянии фотона на свободном электроне

Преобразовав (1.60) к виду

$$mc = m_0 c + \frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}$$

и возведя это равенство в квадрат, получим

$$(mc)^2 = (m_0 c)^2 + 2m_0 ch\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) + \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2. \qquad (1.63)$$

Учитывая, что $(mc)^2 - (m_0 c)^2 = (mv)^2$, запишем (1.63) в виде

$$(mv)^2 = 2m_0 ch\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} + \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2. \qquad (1.64)$$

Из законов сохранения энергии (1.64) и импульса (1.62) в рассматриваемом процессе упругого столкновения фотона излучения со свободным электроном вещества следует соотношение

$$2m_0ch\left(\frac{1}{\lambda}-\frac{1}{\lambda'}\right)=\frac{2h^2}{\lambda\lambda'}(1-\cos\theta). \qquad (1.65)$$

Отсюда получаем формулу Комптона

$$\Delta\lambda=\lambda'-\lambda=\frac{h}{m_0c}(1-\cos\theta)=\Lambda_K(1-\cos\theta). \qquad (1.66)$$

Величину $\Lambda_K=\dfrac{h}{m_0c}$ называют комптоновской длиной волны частицы, масса покоя которой равна m_0. В нашем случае комптоновская длина волны электрона $\Lambda_K=2{,}42\cdot10^{-12}$ м.

Сравнение (1.66) с (1.59) показывает прекрасное совпадение выводов квантовой теории излучения и эксперимента. Из этих формул следует, что максимальное изменение длины волны излучения наблюдается для угла рассеяния $\theta=180^\circ$ и оно равно $\Delta\lambda_m=2\Lambda_K$. В силу малости значения Λ_K практически изменение длины волны при рассеянии на свободных электронах можно обнаружить лишь в экспериментах с коротковолновым рентгеновским или γ-излучением.

Следует заметить, что значительная часть электронов вещества не является свободной, а связана с атомами. Если энергия кванта излучения велика по сравнению с энергией связи электрона, то рассеяние на таком электроне происходит как на свободном электроне. В противном случае, рассеиваясь на связанном электроне, фотон обменивается энергией и импульсом фактически со всем атомом в целом. При таком рассеянии для расчета изменения длины волны излучения также можно применить формулу (1.66), где, однако, под m_0 следует понимать уже массу всего атома. Это изменение оказывается настолько малым, что его нельзя практически обнаружить экспериментально.

В реальных опытах по рассеянию излучения веществом часть электронов ведет себя как свободные, а часть — как связанные.

Поэтому в рассеянном излучении наблюдается как смещенная (комптоновская) линия, так и несмещенная (томсоновская) линия. С увеличением атомного номера рассеивателя относительная доля связанных электронов увеличивается, что приводит к ослаблению интенсивности комптоновской линии в спектре рассеянного излучения и к росту интенсивности томсоновской линии.

В диапазоне энергий квантов 0,1...10 МэВ комптон-эффект является основным физическим механизмом энергетических потерь γ-излучения при его распространении в веществе. Поэтому комптоновское рассеяние широко используется в исследованиях γ-излучения атомных ядер. Оно лежит в основе принципа действия некоторых гамма-спектрометров.

Задача 1.7. Покажите, что поглощение фотона при его неупругом соударении со свободным электроном — процесс, запрещенный законами сохранения.

Решение. В системе отсчета, в которой до столкновения с фотоном электрон покоился, закон сохранения энергии при неупругом столкновении запишем в виде

$$E_0 + h\nu = E.$$

Здесь $E_0 = m_0 c^2$ — энергия покоящегося электрона; $E = c\sqrt{m_0^2 c^2 + p^2}$ — энергия движущегося электрона, который после поглощения фотона приобрел импульс p.

Из закона сохранения импульса имеем

$$p = \frac{h\nu}{c}.$$

Возведя полученные соотношения в квадрат, получим

$$2m_0 c^2 h\nu + (h\nu)^2 = c^2 p^2, \quad c^2 p^2 = (h\nu)^2.$$

При $m_0 \neq 0$ эти равенства несовместны, что соответствует выводу о том, что свободный электрон не может поглотить фотон. Такой процесс может произойти лишь при наличии третьей частицы, которая способна взять на себя часть энергии и часть импульса фотона. ■

Задача 1.8. Определите изменение длины волны излучения при рассеянии его на пучке релятивистских электронов, считая, что в результате упругого столкновения с фотоном электрон останавливается (рис. 1.17). ▽

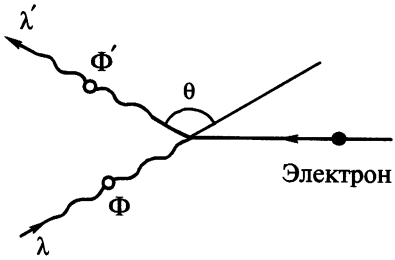


Рис. 1.17. Столкновение фотона с движущимся электроном

Решение. В системе отсчета, в которой после столкновения с фотоном электрон покоится, закон сохранения энергии запишем в виде

$$mc^2 + \frac{hc}{\lambda} = m_0c^2 + \frac{hc}{\lambda'}.$$

Так как сумма импульсов электрона и падающего фотона **Ф** должна быть равна импульсу рассеянного фотона **Ф′**, то из векторной диаграммы импульсов (рис. 1.18) следует, что

$$p_э^2 = p_ф^2 + p_{ф'}^2 \quad -2p_ф p_{ф'} \cos\theta$$

или

$$(mv)^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2\frac{h^2}{\lambda\lambda'}\cos\theta.$$

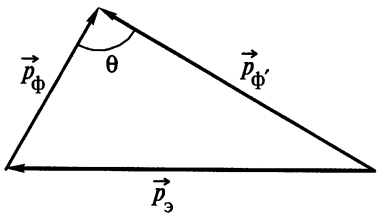


Рис. 1.18. Диаграмма импульсов для обратного комптон-эффекта

Анализируя полученные соотношения, замечаем, что они переходят в соотношения (1.60) и (1.62) при замене λ на λ'. Но тогда, не

▽ повторяя выкладок, проведенных выше, запишем окончательную формулу для изменения длины волны рассеянного излучения

$$\lambda - \lambda' = \Lambda_K (1 - \cos\theta).$$

Из этой формулы следует, что длина волны рассеянного на электроне излучения уменьшилась (!), так как при таком столкновении с движущимся релятивистским электроном фотон излучения получает дополнительную энергию.

Такой эффект получил название обратного комптон-эффекта. Именно обратным комптон-эффектом удается, в частности, объяснить ■ рентгеновское излучение космических объектов.

1.5. Корпускулярно-волновой дуализм света

Понимая под светом все виды излучения — видимого, инфракрасного, ультрафиолетового, рентгеновского и др., отметим, что важность света как объекта окружающего нас мира содержится еще в древнем библейском изречении "Да будет свет!". Что же такое свет?

Он только тем и луч.
Он только тем и свет.
Что шепотом могуч
И лепетом согрет.

Такое определение света находим мы в поэзии О. Мандельштама. Но какова же физическая природа света? Ответ на этот вопрос является принципиально важным как для понимания свойств окружающей природы, так и для развития физики в целом.

В конце XIX в. казалось, что ответ на вопрос о природе света найден и обоснован экспериментально: свет есть распространяющиеся в пространстве электромагнитные волны. Волновая теория света, исходя из этого представления о природе света, на основе общих свойств волновых процессов объяснила такие оптические явления, как интерференция света, дифракция света, поляризация света и др. Однако уже в начале XX в. при исследовании взаимодействия света с веществом были обнаружены другие оптические явления, например фотоэффект, эффект Комптона, фотохимические реакции. При объяснении этих явлений представления о том, что свет есть распространяющиеся в пространстве электромагнитные волны, оказались несостоятельными. Предсказания волновой теории света пришли в противоречие с наблюдаемыми в экспери-

ментах закономерностями явлений квантовой оптики. Объясняя эти явления, А. Эйнштейн выдвинул корпускулярную теорию света, которая, развивая идеи И. Ньютона о световых корпускулах, рассматривала свет как поток большого числа частиц, названных фотонами. Фотонная теория света легко объяснила все качественные и количественные закономерности явлений квантовой оптики.

Возникла ситуация, которую Г. Брэгг удачно описал следующим шутливым высказыванием: "Свет ведет себя подобно волнам по понедельникам, средам и пятницам, подобно частицам по вторникам, четвергам и субботам и ни с чем не сравним по воскресеньям".

Итак, на первый взгляд казалось, что теперь, объединив электромагнитные волны и фотоны в одном объекте, можно ответить на вопрос о природе света: свет есть волны и частицы. Однако критическое изучение такого ответа показало несостоятельность простого механического объединения волн и частиц. Оказалось, что представления об электромагнитной волне и о потоке частиц исключают друг друга.

Световая волна представляет собой нелокализованное электромагнитное поле, распределенное в пространстве. Объемная плотность энергии электромагнитного поля волны, пропорциональная квадрату ее амплитуды, может изменяться на сколь угодно малую величину, т. е. непрерывно.

В отличие от волны фотон как световая частица в данный момент времени локализован вблизи некоторой точки пространства и со временем перемещается в пространстве. Световая энергия в такой модели изменяется не непрерывно, а только дискретно, оставаясь всегда кратной минимальной порции (кванту) энергии, которую несет одиночный фотон.

Как же непротиворечивым образом в одном материальном объекте объединить противоположности, казалось бы исключающие друг друга? Ответ на этот вопрос содержался еще в работах крупнейших философов, которые пришли к выводу о том, что материальные объекты природы могут обладать внутренними противоречиями, объединяя в себе противоположные качества. Так, например, идея о единстве и борьбе противоположностей составляет основу диалектики Гегеля.

Именно так, диалектически, современная физика отвечает на вопрос о природе света. Свет есть материальный объект, обладающий как волновыми, так и корпускулярными свойствами. В различных физических процессах эти свойства могут проявляться

в разной степени. При определенных условиях, т. е. в ряде оптических явлений, свет проявляет свои *волновые свойства*. В этих случаях свет необходимо рассматривать как электромагнитные волны. В других оптических явлениях свет проявляет свои *корпускулярные свойства*, и тогда его следует представлять как поток фотонов. Иногда оптический эксперимент можно организовать так, что свет будет проявлять как волновые, так и корпускулярные свойства. Действительно, в опыте Комптона (см. рис. 1.14) на первом этапе рассеяния излучения на мишени оно ведет себя как поток фотонов, но в измерительном блоке это же излучение испытывает дифракцию на кристаллической решетке как электромагнитная волна.

Существуют оптические явления, которые могут быть объяснены качественно и количественно как волновой, так и корпускулярной теориями света. Так, например, обе эти теории приводят к одинаковым соотношениям для давления, оказываемого светом при падении его на вещество. Это объясняется тем, что любая модель, и волновая и корпускулярная учитывает наличие у света таких материальных характеристик, как энергия, масса, импульс.

Итак, в результате углубления представлений о природе света выяснилось, что свет обладает двойственной природой, получившей название *корпускулярно-волнового дуализма света*. С некоторыми объектами свет взаимодействует как волна, с другими — подобно потоку частиц. Однако "ни одна из этих картин (корпускулярная или волновая) не может сказать нам всей правды о природе света" — писал Д. Джинс. И хотя эти картины даже противоположны друг другу, одна картина дополняет другую. "Противоположности не противоречия, а дополнения" — гласит девиз Н. Бора.

Спор волновой и корпускулярной теорий света не привел ни к окончательной победе, ни к поражению какой-либо одной из них. В этом споре родилось качественно новое понимание природы света, объединяющее эти теории и отвечающее на вопрос: "Что такое свет?" — диалектически.

В физике свет оказался первым объектом, у которого была обнаружена двойственная корпускулярно-волновая природа. Дальнейшее развитие физики значительно расширило класс таких объектов.

В заключение укажем, что волны и частицы света можно связать еще более тесно, если предположить, что движение фотона подчиняется статистическим вероятностным законам, которые определяются волновым электромагнитным полем. Действитель-

но, будем считать, что квадрат амплитуды электромагнитной волны, т. е. ее интенсивность, определяет в каждой точке пространства вероятность попадания в нее фотона и, следовательно, концентрацию фотонов в этой точке светового потока. Тогда явление интерференции света, проходящего через экран с двумя щелями, можно объяснить и с точки зрения корпускулярной теории света. При падении на экран одной световой волны вероятность попадания фотона в различные точки экрана одинакова, и мы наблюдаем равномерную освещенность экрана. При прохождении света через две щели вероятность попадания фотона в различных точках экрана изменяется. В местах интерференционных максимумов эта вероятность резко увеличивается, а в местах интерференционных минимумов — уменьшается. Это означает, что поток фотонов перераспределяется в пространстве и этим перераспределением управляет волновое поле.

Такой способ объединения корпускулярных и волновых свойств материальных объектов, когда с помощью волн мы описываем движение частиц, лежит в основе квантовой механики, основные положения которой изложены в дальнейших главах.

Отметим, что корпускулярно-волновой дуализм света является далеко не тривиальным свойством этого физического объекта. При первом знакомстве с проблемой дуализма света возникают естественные вопросы: как представить себе объект, обладающий взаимоисключающими свойствами? Как такие свойства могут объединяться и дополнять друг друга?

Посмотрите на рис. 1.19. Что вы на нем видите? Можно предсказать два различных ответа на этот вопрос. Первый ответ: "Я вижу белую фигурную вазу на темном фоне". Второй ответ: "Я вижу темные силуэты двух лиц, сближающихся в поцелуе".

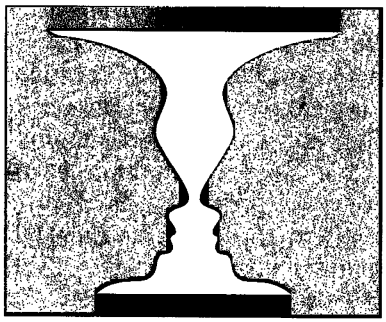


Рис. 1.19. Дуальные свойства изображения

Значит, может (!) один рисунок содержать два различных изображения, проявляя либо одно из них, либо другое. Этот пример наглядно демонстрирует возможность дуальных свойств у одного объекта.

2. ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ЧАСТИЦ

Согласно гипотезе Луи де Бройля, движение каждой частицы можно описать волновым процессом. Наличие у частиц наряду с корпускулярными волновых свойств определяет двойственную, корпускулярно-волновую природу материи и приводит к тому, что поведение микрочастицы может существенным образом отличаться от поведения макроскопических тел.

Опыты по дифракции микрочастиц на кристаллах, а также опыты по прохождению электронов через инертные газы (эффект Рамзауэра) подтвердили наличие у частиц волновых свойств и показали, что в области микромира существует принципиально новый вид физических объектов, которые в одних случаях проявляют корпускулярные свойства, а в других ведут себя как волны.

Такая двойственность приводит к существенным отличиям в описании движения микрочастиц в квантовой механике по сравнению с классической механикой, в частности к отказу от описания движения частицы с помощью траектории. Представление о траектории движения частицы предполагает возможность одновременного точного измерения координаты и скорости частицы, что противоречит одному из фундаментальных положений квантовой механики — соотношению неопределенностей Гейзенберга.

Волновые свойства микрочастиц в настоящее время находят широкое практическое применение, в частности при изучении структуры вещества.

2.1. Гипотеза де Бройля

Волновые свойства частиц. Корпускулярно-волновой дуализм материи. Установление корпускулярно-волнового дуализма в оптических явлениях имело очень большое значение для дальнейшего развития физики. Впервые была выявлена двойственная корпускулярно-волновая природа физического объекта — элек-

тромагнитного излучения. Естественно было ожидать, что подобная двойственность может не ограничиваться только оптическими явлениями.

В 1924 г. французский физик Луи де Бройль выдвинул смелую гипотезу, согласно которой корпускулярно-волновой дуализм имеет универсальный характер. По *гипотезе де Бройля*, каждая материальная частица обладает волновыми свойствами, причем соотношения, связывающие волновые и корпускулярные характеристики частицы, остаются такими же, как и в случае электромагнитного излучения. Напомним, что энергия E и импульс $p_ф$ фотона связаны с круговой частотой ω и длиной волны λ соотношениями (1.31), (1.43): $E = \hbar\omega$, $p_ф = k\hbar = 2\pi\hbar/\lambda$. Согласно гипотезе де Бройля, свободно движущейся частице, обладающей энергией E и импульсом p, соответствует волновой процесс, частота которого

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \tag{2.1}$$

а длина волны

$$\lambda_Б = \frac{2\pi\hbar}{p}. \tag{2.2}$$

Как известно, плоская волна частотой ω, распространяющаяся вдоль оси x, может быть представлена в комплексной форме

$$\xi(x,\ t) = A\exp\left[-i\left(\omega t - kx\right)\right],$$

где A — амплитуда волны, а $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$ — волновое число.

Согласно гипотезе де Бройля, свободной частице с энергией E и импульсом p, движущейся вдоль оси x, соответствует плоская волна

$$\Psi(x,\ t) = A\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(Et - px\right)\right], \tag{2.3}$$

распространяющаяся в том же направлении и описывающая волновые свойства частицы. Эту волну называют *волной де Бройля*. Соотношения, связывающие волновые и корпускулярные свойства частицы,

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \tag{2.4}$$

где $\vec{p}$ — импульс частицы, а $\vec{k}$ — волновой вектор, получили название уравнений де Бройля.

Свойства волн де Бройля. Рассмотрим свойства, которыми обладают волны де Бройля. Прежде всего следует отметить, что волны материи — волны де Бройля — в процессе распространения могут отражаться, преломляться, интерферировать и дифрагировать по обычным волновым законам. Найдем фазовую скорость волны де Бройля $v_{\text{фаз}}$, т. е. скорость, с которой распространяются точки волны с постоянной фазой. Пусть частица движется вдоль оси x, тогда условие постоянства фазы волны (2.3) имеет вид $Et - px = \text{const}$. Дифференцируя это соотношение, находим

$$v_{\text{фаз}} = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p}.$$

Поскольку $E = mc^2$, а $p = mv$, где m — релятивистская масса частицы, а v — ее скорость, то для фазовой скорости волны де Бройля получаем следующее выражение:

$$v_{\text{фаз}} = \frac{c^2}{v}. \tag{2.5}$$

Так как $v < c$, то фазовая скорость волны де Бройля $v_{\text{фаз}}$ оказывается больше скорости света в вакууме c. Это не противоречит теории относительности, которая запрещает движение со скоростью, большей скорости света. Ограничения, накладываемые теорией относительности, справедливы лишь для процессов, связанных с переносом массы или энергии. Фазовая скорость волны не характеризует ни один из этих процессов, поэтому на ее величину не накладывается никаких ограничений.

Найдем теперь групповую скорость $v_{\text{гр}}$ волны де Бройля. По определению,

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk}.$$

Преобразуя это выражение, получаем

$$v_{\text{гр}} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}.$$

Связь между энергией E и импульсом p частицы, согласно теории относительности, определяется соотношением $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$, где m_0 — масса покоя частицы. Дифференцируя это выражение, находим

$$2EdE = 2pc^2dp,$$

или

$$\frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E}.$$

Таким образом,

$$v_{\text{гр}} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{mc^2} = \frac{p}{m} = v,$$

т. е. групповая скорость волны де Бройля $v_{\text{гр}}$ равна скорости движения частицы v.

Расчет длины волны де Бройля $\lambda_{\text{Б}}$ для нерелятивистских и релятивистских частиц. Получим выражение для длины волны де Бройля $\lambda_{\text{Б}}$ частицы, обладающей кинетической энергией $E_{\text{к}}$.

В случае нерелятивистской частицы, скорость которой $v \ll c$,

$$E_{\text{к}} = \frac{m_0v^2}{2} = \frac{p^2}{2m_0}.$$

Тогда, согласно соотношению (2.2),

$$\lambda_{Б} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 E_к}}. \qquad (2.6)$$

В случае релятивистской частицы, когда скорость частицы v сравнима со скоростью света в вакууме c, связь между импульсом и кинетической энергией частицы определяется соотношением

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{E_к\left(E_к + 2m_0c^2\right)} = \sqrt{2m_0E_к}\sqrt{1+\frac{E_к}{2m_0c^2}}.$$

Подставляя это выражение в (2.2), получаем, что в случае релятивистской частицы

$$\lambda_{Б}' = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0E_к}\sqrt{1+\dfrac{E_к}{2m_0c^2}}} = \frac{\lambda_{Б}}{\sqrt{1+\dfrac{E_к}{2m_0c^2}}}. \qquad (2.7)$$

Длина волны де Бройля $\lambda_{Б}$ микро- и макрообъектов. Чтобы более отчетливо представить себе порядок дебройлевских длин волн микрочастиц, найдем длину волны де Бройля электрона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов U. Для определенности будем считать электрон нерелятивистским. В этом случае, согласно выражению (2.6),

$$\lambda_{Б} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0E_к}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0eU}}. \qquad (2.8)$$

Подставляя в (2.8) численные значения констант, получаем

$$\lambda_{Б} = \sqrt{\frac{150{,}4}{U}}\cdot 10^{-10}\ \text{м}.$$

Таким образом, при значении ускоряющей разности потенциалов от десятков вольт до нескольких киловольт дебройлевская длина волны электрона имеет порядок 10^{-10} м. Напомним, что размеры атомов, а также расстояние между атомами и молекулами в твердых телах имеют тот же порядок — 10^{-10} м.

Вычислим теперь длину волны де Бройля у макроскопического, но достаточно малого объекта — пылинки, масса которой $m = 10^{-6}$ г, а скорость $v = 1$ мм/с. Используя соотношение (2.2), получаем

$$\lambda_{Б} = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{6{,}6 \cdot 10^{-34}}{10^{-9} \cdot 10^{-3}} = 6{,}6 \cdot 10^{-22} \text{ м}.$$

Найденная длина волны значительно меньше не только размеров самой пылинки, но и наименьшего известного в физике размера — радиуса атомного ядра, порядок которого 10^{-15} м.

Поскольку никакого принципиального различия между микро- и макрообъектами не существует, то возникает вопрос: в каких случаях волновые свойства играют решающую роль в поведении частицы, а в каких случаях они оказываются несущественными и их можно не учитывать? Чтобы ответить на этот вопрос, воспользуемся аналогией с оптикой. Как известно, волновая природа излучения максимально проявляется в тех случаях, когда длина волны излучения λ сравнима с характерными размерами системы L, т. е. $\lambda \sim L$. Если же $\lambda \ll L$, то волновые свойства излучения становятся несущественными и можно пользоваться геометрической, или лучевой, оптикой.

В силу аналогии, существующей между механическими и оптическими явлениями, классическая ньютоновская механика соответствует геометрической оптике, а квантовая, или, как ее еще называют, волновая механика, — волновой оптике. Таким образом, волновые свойства частиц будут наиболее ярко проявляться в тех случаях, когда дебройлевская длина волны частицы сравнима с характерными размерами области движения частицы L, т. е. $\lambda_{Б} \sim L$. Напомним, что в первом из разобранных выше примеров дебройлевская длина волны электрона $\lambda_{Б}$, размеры атома и рас-

стояние между атомами в кристалле имеют один и тот же порядок. Следовательно, при взаимодействии электронов с атомами, а также при их движении в твердых телах волновые свойства электронов будут проявляться максимальным образом. В тех же случаях, когда $\lambda_Б \ll L$, как, например, для рассмотренной выше пылинки, волновые свойства частицы становятся несущественными, и для описания движения таких объектов необходимо пользоваться законами классической механики. Этот вопрос более подробно разобран в задаче 2.5.

Преломление электронных волн в металле. Как известно, на электрон, находящийся в металле, действует электрическое поле, создаваемое положительно заряженными ионами, которые расположены в узлах кристаллической решетки. Это поле, вообще говоря, периодически меняется внутри металла. Усредненное по объему металла значение потенциала этого поля φ_0 называется внутренним потенциалом металла.

Для того чтобы вырвать электрон из металла, нужно затратить энергию, равную работе выхода $A_в$, которая связана с φ_0 соотношением $A_в = e\varphi_0$. Если же электрон попадает в металл извне, то его энергия возрастает на величину, равную работе выхода. При этом изменяются фазовая скорость и дебройлевская длина волны электронных волн, т. е. на поверхности металла электронные волны испытывают преломление. Пусть электрон падает на металл из вакуума, тогда *показатель преломления* n_e *электронной волны* равен отношению фазовой скорости дебройлевской волны электрона в вакууме $v^{в}_{фаз}$ к фазовой скорости волны в металле $v^{м}_{фаз}$: $n_e = v^{в}_{фаз} / v^{м}_{фаз}$.

Используя соотношение (2.5), получаем

$$n_e = \frac{c^2/v^{в}}{c^2/v^{м}} = \frac{v^{м}}{v^{в}},$$

где $v^{в}$ — скорость электрона в вакууме; $v^{м}$ — скорость электрона в металле. Пусть первоначально электрон обладал кинетической энергией $E_к$, тогда кинетическая энергия электрона в метал-

ле будет равна $E_к + A_в$. Используя классическую связь между скоростью и кинетической энергией частицы $v = \sqrt{\frac{2E_к}{m_0}}$, получаем

$$n_e = \sqrt{\frac{E_к + A_в}{E_к}} = \sqrt{1 + \frac{A_в}{E_к}}.$$

Выражая кинетическую энергию электрона через ускоряющую разность потенциалов U, а работу выхода электрона из металла через внутренний потенциал φ_0, приходим к следующему выражению для показателя преломления электронных волн:

$$n_e = \sqrt{1 + \frac{e\varphi_0}{eU}} = \sqrt{1 + \frac{\varphi_0}{U}}. \qquad (2.9)$$

Согласно (2.9), показатель преломления n_e может заметно отличаться от единицы лишь в случае электронов низких энергий (медленных электронов), для которых разность потенциалов U не слишком велика по сравнению с φ_0. В случае электронов высоких энергий (быстрых электронов) $U \gg \varphi_0$ и n_e лишь незначительно отличается от единицы.

□ **Задача 2.1.** При каком значении кинетической энергии $E_к$ частицы погрешность определения длины волны де Бройля по нерелятивистской формуле не превышает значения $\varepsilon = 1\ \%$? Решите задачу: а) для электрона; б) для протона.

Решение. Относительная погрешность ε определения длины волны де Бройля по нерелятивистской формуле с учетом (2.6) и (2.7) имеет вид

$$\varepsilon = \frac{\lambda_Б - \lambda'_Б}{\lambda_Б} = 1 - \left(1 + \frac{E_к}{2m_0c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}.$$

▽ Выражая отсюда $E_к$ как функцию ε, получаем

$$E_к = 2m_0c^2\left[(1-\varepsilon)^{-2}-1\right].$$

Так как по условию задачи $\varepsilon = 0{,}01 \ll 1$, то, используя разложение в ряд Тэйлора, находим, что $(1-\varepsilon)^{-2} \approx 1+2\varepsilon$. С учетом этого получаем

$$E_к(\varepsilon) = 2m_0c^2 \cdot 2\varepsilon = 4\varepsilon m_0c^2 = 4\varepsilon E_0,$$

где $E_0 = m_0c^2$ — энергия покоя частицы.

Поскольку энергия покоя электрона $E_0 = 0{,}511$ МэВ, то находим, что для электрона $E_к = 20{,}4$ кэВ. Это означает, что при кинетической энергии электронов вплоть до $E_к = 20{,}4$ кэВ погрешность определения $\lambda_Б$ по нерелятивистской формуле не будет превышать 1 %.

В физическом эксперименте ускорение заряженных частиц осуществляется, как правило, в электрическом поле. Проходя ускоряющую разность потенциалов U, электрон приобретает кинетическую энергию $E_к = eU$. Для того чтобы кинетическая энергия электрона была равна найденному нами значению $E_к = 20{,}4$ кэВ, он должен пройти ускоряющую разность потенциалов $U = 20{,}4$ кВ. При меньшем значении U относительная погрешность определения дебройлевской длины волны $\lambda_Б$ по нерелятивистской формуле (2.6) будет заведомо меньше 1 %.

Поскольку энергия покоя протона $E_0 = 938{,}2$ МэВ, то кинетическая энергия, при которой погрешность определения дебройлевской длины волны протона не превышает 1 %, $E_к = 37{,}5$ МэВ.

Задача 2.2. На какую кинетическую энергию должен быть рассчитан ускоритель заряженных частиц с массой покоя m_0, чтобы с их помощью можно было исследовать структуры с линейными размерами l? Решите задачу для электронов и протонов в случае $l = 10^{-15}$ м, что соответствует характерному размеру атомных ядер.

Решение. Для того чтобы с помощью частиц можно было исследовать структуры с линейными размерами l, необходимо, чтобы дебройлевская длина волны этих частиц $\lambda_Б$ была меньше или порядка l, т. е. $\lambda_Б \le l$. Поскольку данное в условии задачи значение l очень

▽ малó, то ясно, что иметь длину волны де Бройля, сравнимую с l, может только быстрая, релятивистская частица. Пользуясь выражением для длины волны де Бройля релятивистской частицы (2.7), получаем

$$\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0E_к}\sqrt{1+\dfrac{E_к}{2m_0c^2}}} \le l.$$

Данное неравенство можно привести к следующему виду:

$$E_к^2 + 2m_0c^2E_к - m_0{}^2c^2\frac{\Lambda_К^2}{l^2} \ge 0,$$

где $\Lambda_К = \dfrac{2\pi\hbar}{m_0c}$ — комптоновская длина волны частицы. Решая это неравенство, находим, что

$$E_к \ge m_0c^2\left(\sqrt{1+\frac{\Lambda_К^2}{l^2}} - 1\right).$$

Поскольку комптоновская длина волны электрона $\Lambda_К = 2{,}43\cdot10^{-12}$ м, то $\dfrac{\Lambda_К}{l} \gg 1$. С учетом этого условия для энергии электронов получаем

$$E_к \ge m_0c^2\frac{\Lambda_К}{l}.$$

Подставляя численные значения, находим, что $E_к \ge 1{,}2$ ГэВ.

Электроны, ускоренные до таких энергий, использовались в экспериментах по изучению размеров и структуры ядер, а также структуры частиц, образующих ядра, — протонов и нейтронов (см. 2.4).

Комптоновская длина волны протонов $\Lambda_К = 1{,}32\cdot10^{-15}$ м. С учетом этого получаем, что ускоритель протонов должен быть рассчитан на энергию $E_к \ge 0{,}6$ ГэВ. ■

2.2. Экспериментальные подтверждения гипотезы де Бройля

Критерием истинности любой физической теории, любой гипотезы всегда является эксперимент. Необходимость экспериментальной проверки гипотезы де Бройля была тем более актуальна,

что, во-первых, эта гипотеза касалась глубинных, фундаментальных свойств материи, а во-вторых, наличие у частиц волновых свойств не соответствовало традиционным представлениям классической физики.

Первые экспериментальные исследования, подтвердившие волновую природу частиц, были выполнены американскими физиками К. Дэвиссоном и Л. Джермером в 1927 г., а также независимо английским физиком Дж. П. Томсоном и советским физиком П.С. Тартаковским в 1928 г. В этих работах использовалась дифракция электронов на кристаллической решетке. Прежде чем перейти к подробному описанию этих экспериментов, отметим следующее. Как уже обсуждалось выше, дебройлевская длина волны электрона при не очень большом значении ускоряющей разности потенциалов (~100 В) имеет порядок 10^{-10} м. Расстояние между атомными плоскостями в кристалле имеет такой же порядок. Поэтому, так же как и в случае рентгеновского излучения, кристалл может играть роль дифракционной решетки для электронных волн.

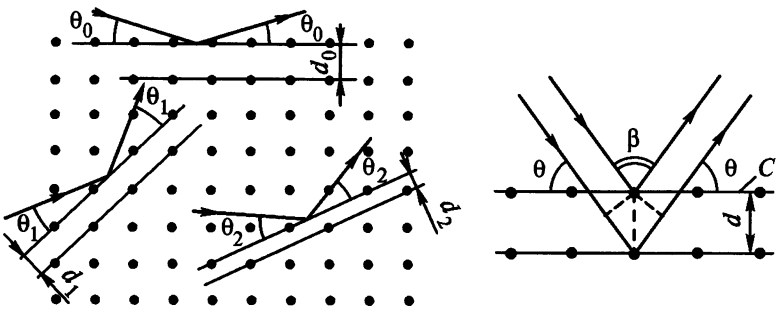
Рассмотрим *дифракцию электронов на совершенном кристалле*, т. е. кристалле, обладающем идеальной, без каких-либо нарушений кристаллической решеткой. Электроны с дебройлевской длиной волны $\lambda_Б$ могут дифрагировать на различных атомных плоскостях (рис. 2.1, *а*), выбор которых осуществляется взаимной ориентацией падающего пучка электронов и рассеивающего кристалла. Пусть электроны падают на кристалл под углом скольжения θ по отношению к рассеивающему семейству плоскостей. Для простоты рассмотрим симметричный случай (рис. 2.1, *б*), когда поверхность кристалла C параллельна рассеивающим плоскостям, хотя на практике это условие далеко не всегда выполняется. Тогда угол θ будет углом скольжения, под которым электроны падают на поверхность кристалла, а $\beta = \pi - 2\theta$ — углом между падающим и дифрагирующим пучками электронов.

Теоретический анализ дифракции электронов на кристаллах во многом аналогичен анализу дифракции рентгеновского излучения. При значении угла θ, удовлетворяющем условию Брэгга — Вульфа

$$2d \sin\theta = n\lambda_Б, \qquad (2.10)$$

возникает интенсивный дифракционный максимум отраженной волны. Здесь d — расстояние между отражающими плоскостями

(постоянная решетки кристалла); θ — брэгговский угол; n — целое число, принимающее значения 1, 2, 3, ..., называемое порядком отражения.



а *б*

Рис. 2.1. Дифракция электронов на совершенном кристалле: *а* — отражение от различных атомных плоскостей; *б* — отражение от одного семейства плоскостей

Физический смысл условия Брэгга — Вульфа (2.10) достаточно прозрачен: дифракционный максимум появляется в тех случаях, когда разность хода волн, отраженных от соседних атомных плоскостей, равна целому числу длин волн де Бройля. Именно в этом случае отраженные волны усиливают друг друга, т. е. имеет место конструктивная интерференция.

Отметим, что условие (2.10) получено без учета преломления электронных волн в кристалле. С учетом преломления условие Брэгга — Вульфа принимает вид

$$2d\sqrt{n_e^2 - \cos^2\theta} = n\lambda_Б, \qquad (2.11)$$

где n_e — показатель преломления электронных волн в кристалле (см. задачу 2.3).

Опыт Дэвиссона и Джермера. К. Дэвиссон и Л. Джермер исследовали дифракцию электронов на монокристалле никеля (рис. 2.2.), кристаллическая структура которого была известна из опытов по дифракции рентгеновского излучения. Электроны от электронной пушки S, прошедшие ускоряющую разность потен-

циалов U, падали нормально на сошлифованную поверхность кристалла никеля C. С помощью детектора D исследовалось число электронов, отраженных от кристалла под углом β при различных значениях U. Напомним, что разным значениям U, согласно (2.8), соответствуют разные дебройлевские длины волн электронов.

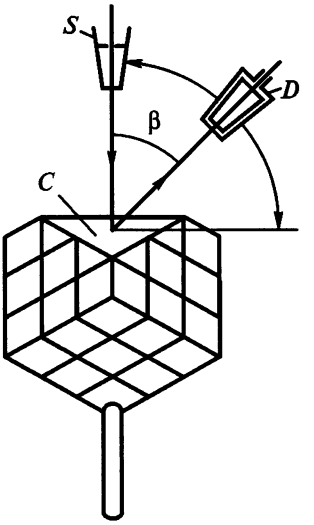


Рис. 2.2. Схема опыта Дэвиссона и Джермера

Кристаллическая решетка в опыте Дэвиссона и Джермера играла роль объемной отражательной дифракционной решетки, и с точки зрения гипотезы де Бройля увеличение амплитуды отраженной волны при выполнении условия Брэгга — Вульфа (2.10) означало существенный рост вероятности отражения электронов, что и приводило к наблюдаемому увеличению числа отраженных от кристалла электронов.

Результаты экспериментальных исследований Дэвиссона и Джермера представлены на рис. 2.3. Здесь приведены полярные диаграммы интенсивности отраженных электронов при нескольких значениях ускоряющей разности потенциалов U. При U = = 44 В дифракционный максимум под углом $\beta = 50^{\circ}$ только начинает формироваться, при $U = 54$ В он достигает максимальной интенсивности, а при дальнейшем возрастании U опять ослабляется вплоть до полного исчезновения.

В опытах Дэвиссона и Джермера максимальное отражение электронов наблюдалось при ускоряющей разности потенциалов $U = 54$ В, что соответствует дебройлевской длине волны

$$\lambda_{Б} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e eU}} = 0{,}167 \text{ нм}.$$

Длина волны, определяемая из условия Брэгга — Вульфа (2.10) для постоянной решетки никеля $d = 2{,}15 \cdot 10^{-10}$ м, равнялась $\lambda_{Б}$ = = 0,165 нм. Это совпадение экспериментальных и расчетных зна-

чений $\lambda_Б$ служит прекрасным подтверждением гипотезы де Бройля о наличии у частиц волновых свойств.

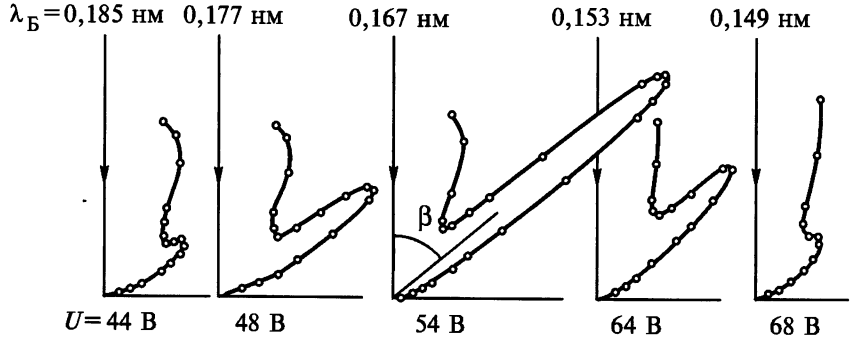


Рис. 2.3. Динамика дифракционного отражения электронов при изменении ускоряющей разности потенциалов U

Дэвиссоном и Джермером была также измерена интенсивность дифрагирующих электронов при фиксированном угле отражения β (постоянном угле скольжения θ) в зависимости от ускоряющей разности потенциалов U. Результаты этого опыта приведены на рис. 2.4. Экспериментально наблюдаемые максимумы отражения отстоят друг от друга на равном по шкале $\sqrt{U}$ расстоянии, что подтверждается и теорией. Действительно, поскольку

$$\lambda_Б = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e E_к}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e eU}},$$

то из условия Брэгга — Вульфа (2.10) получаем

$$2d\sin\theta_Б = n\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e eU_n}}, \quad n = 1, 2, ...,$$

где U_n — ускоряющая разность потенциалов, отвечающая n-му порядку отражения, а m_e — масса электрона. Таким образом, связь между U_n и n имеет вид

$$\sqrt{U_n} = Cn, \quad \text{где } C = \frac{\pi\hbar}{d\sin\theta\sqrt{2em_e}} = \text{const},$$

что и свидетельствует об эквидистантности максимумов отражения в зависимости от значения $\sqrt{U}$.

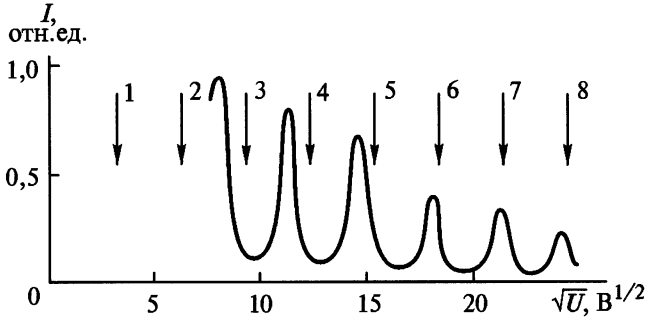


Рис. 2.4. Зависимость интенсивности I пучка электронов, дифрагирующего на монокристалле никеля, от ускоряющего напряжения U при постоянном значении угла θ

Различие теории и эксперимента в этом опыте заключалось в том, что положения наблюдаемых дифракционных максимумов не совпадали с положениями максимумов, определяемых из условия Брэгга — Вульфа (2.10) (вертикальные стрелки на рис. 2.4). Особенно заметным это различие было для небольших значений n, т. е. для небольшой ускоряющей разности потенциалов U_n. Причина такого расхождения теории и эксперимента состоит в том, что условие Брэгга — Вульфа (2.10) не учитывает преломление электронных волн в металле. Использование условия (2.11) полностью устраняет это расхождение.

Дифракция электронов на поликристаллах. В экспериментах Томсона и Тартаковского исследовалась дифракция электронов на поликристаллических образцах. Коллимированный пучок моноэнергетических электронов падал нормально на тонкую металлическую поликристаллическую фольгу (рис. 2.5). На фотопластине, расположенной за фольгой, прошедшие электроны образовывали дифракционную картину в виде тонких концентрических

колец. Поясним, почему при дифракции на поликристаллическом образце на фотопластине получаются дифракционные кольца.

Как известно, поликристалл состоит из большого числа очень маленьких монокристаллических зерен — кристаллитов, которые хаотически ориентированы по отношению друг к другу. На рис. 2.6, *а* параллельными линиями показана ориентация некоторой выделенной системы атомных плоскостей в кристаллитах. Эта ориентация произвольным образом меняется при переходе от одного кристаллита к другому.

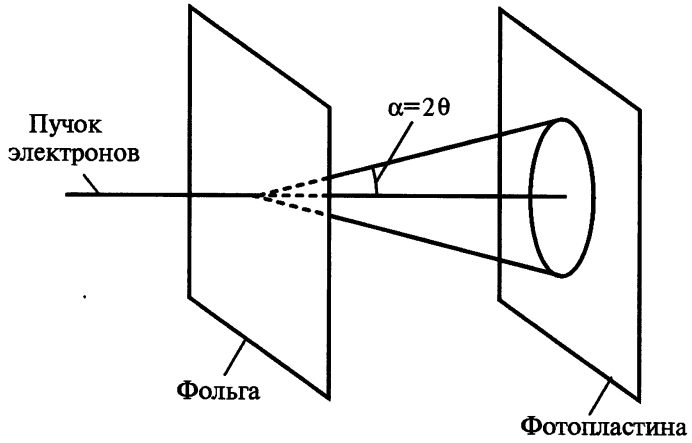
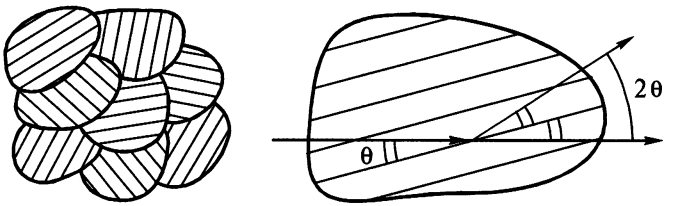


Рис. 2.5. Дифракция электронов в поликристаллической фольге

При падении пучка электронов на поликристалл в нем всегда найдутся кристаллиты, ориентированные так, что какая-либо система атомных плоскостей будет находиться в отражающем положении, т. е. для нее будет выполняться условие Брэгга — Вульфа (2.10). Рассмотрим случай, когда постоянная решетки d и порядок отражения n фиксированы, т. е. когда значение брэгговского угла θ однозначно определено. Пусть пучок электронов падает под углом θ на систему атомных плоскостей кристаллита, представленную на рис. 2.6, *б* параллельными линиями. Легко видеть, что дифрагирующий пучок электронов отклоняется на угол 2θ по отношению к проходящему пучку и, попадая на фотопластинку, оставляет на ней точку.



а *б*

Рис. 2.6. Дифракция в поликристалле:

а — структура поликристаллического образца; *б* — дифракционное отражение от отдельного кристаллита

Ввиду осевой симметрии задачи в дифракции будут также принимать участие кристаллиты, у которых рассматриваемые отражающие плоскости повернуты относительно оси, задаваемой направлением падения электронов, при условии, что падение пучка осуществляется под тем же углом θ. Следовательно, направления движения частиц, дифрагирующих на поликристалле при фиксированном значении θ, образуют конус с углом раствора $\alpha = 2\theta$. Сечение этого конуса плоскостью фотопластинки представляет собой окружность. Отражение от разных плоскостей кристалла (разные значения d), а также наличие различных порядков отражения n приводят к появлению на фотопластинке системы концентрических окружностей (рис. 2.7). В опыте Томсона использовались быстрые электроны с энергией 17,5 ... 56,5 кэВ, поскольку медленные электроны интенсивно поглощаются фольгой, что значительно ослабляет проходящий пучок. В опыте Тартаковского использовались сравнительно медленные электроны с энергией 1,7 кэВ.

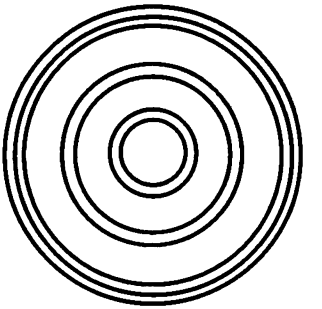


Рис. 2.7. Результаты дифракционных опытов с электронами на поликристалле серебра

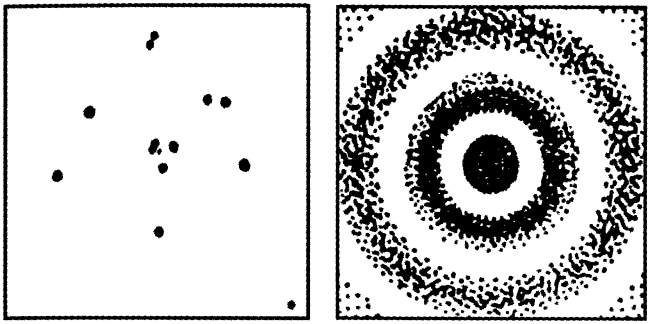
При анализе дифракционной картины можно было допустить, что дифракцию испытывают не электроны, а вторичное рентгеновское излучение, испускаемое атомами кристалла под

действием электронного пучка. Чтобы однозначно установить природу дифрагирующих частиц (электроны или рентгеновское излучение), в области между фольгой и фотопластинкой было создано магнитное поле. Если дифракцию испытывают электроны, то они будут отклоняться магнитным полем, что приведет к искажению дифракционной картины. Если же дифрагирует рентгеновское излучение, то система колец должна остаться без изменений. Эксперимент с магнитным полем показал, что дифракционное отражение испытывают именно электроны.

Дифракция одиночных электронов. Рассмотренные выше эксперименты проводились с достаточно интенсивными пучками частиц, в данном случае электронов. Поэтому выявленные в них волновые свойства могли быть приписаны как всей системе взаимодействующих между собой электронов, так и отдельному электрону. Для того чтобы выяснить, обладает ли индивидуальная частица волновыми свойствами, группа советских физиков во главе с В.А. Фабрикантом выполнила в 1949 г. дифракционные исследования с очень слабым пучком электронов. В этих опытах промежуток времени между двумя последовательными прохождениями электронов через кристалл в 30 000 раз превышал время, затрачиваемое одним электроном на прохождение всего прибора. Таким образом, электроны дифрагировали в кристалле поодиночке, поэтому возникновение дифракционной картины как результата взаимодействия электронов друг с другом полностью исключалось. Качественный вид распределения дифрагировавших электронов по фотопластинке приведен на рис. 2.8. При небольшой длительности эксперимента точки на фотопластинке, отвечающие попаданию электронов, распределены совершенно случайным образом (рис. 2.8, *а*). Однако при достаточной длительности эксперимента распределение точек приобретает характерный для дифракции на поликристалле вид концентрических колец (рис. 2.8, *б*). Таким образом было доказано, что волновые свойства присущи отдельному электрону.

Опыты по дифракции без кристаллов. Первые опыты, подтвердившие гипотезу де Бройля, были выполнены на кристаллах, которые являются наиболее удобной дифракционной решеткой, созданной природой для наблюдения дифракции электронных волн. В дальнейшем с электронами был осуществлен ряд дифракционных опытов, аналогичных тем классическим опытам, которые хорошо известны в оптике. Наблюдалась дифракция электронов на крае полубесконечной плоскости, на двух щелях и т. д. Были выполнены опыты по дифракции электронов в неоднородном элек-

трическом поле, которое играло роль аналога бипризмы Френеля. Все эти эксперименты подтвердили наличие у электронов волновых свойств.



а *б*

Рис. 2.8. Распределение дифрагирующих электронов по фотопластинке:

а — при небольшой длительности эксперимента; *б* — в случае длительного эксперимента

Эффект Рамзауэра. В 1921 г. немецкий физик К. Рамзауэр, исследуя упругое рассеяние электронов на атомах аргона, обнаружил явление, которое не находило объяснения в рамках классической физики. Лишь через несколько лет стало ясно, что это явление представляет собой еще одно подтверждение волновых свойств электрона и является электронным аналогом хорошо известного в оптике пятна Пуассона.

Рамзауэр исследовал поперечное сечение упругого рассеяния электронов σ на атомах аргона при энергии электронов E от долей электрон-вольта до нескольких десятков электрон-вольт. Эффективное сечение упругого рассеяния электронов определяется выражением

$$\sigma = \frac{N}{nv},$$

где N — число актов упругого рассеяния электронов на атомах аргона в единицу времени; n — плотность электронов в пучке; v — скорость электронов. Сечение упругого рассеяния σ имеет размерность площади. Оно представляет собой площадь мишени

вокруг атома, попадая в которую электрон испытывает упругое рассеяние (см. 7.3).

Сечение упругого рассеяния зависит от энергии электронов E, причем, согласно классическим представлениям, при уменьшении энергии (скорости) электронов сечение упругого рассеяния должно увеличиваться.

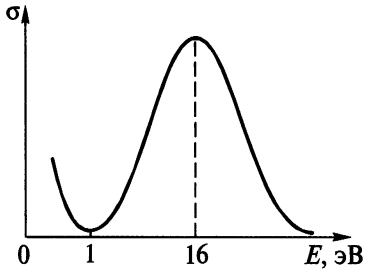


Рис. 2.9. Качественная зависимость сечения упругого рассеяния электронов на атомах аргона от энергии электронов

Качественный вид результатов измерения Рамзауэра приведен на рис. 2.9. При энергии электронов, превышающей 16 эВ, сечение упругого рассеяния σ возрастает с уменьшением E, что согласуется с классической теорией. Однако при дальнейшем уменьшении E картина качественно меняется. При $E < 16$ эВ сечение рассеяния убывает с уменьшением E и при $E \approx 1$ эВ σ практически обращается в нуль. При дальнейшем уменьшении энергии электронов сечение рассеяния вновь возрастает.

Обращение σ в нуль означает, что атомы аргона становятся как бы прозрачными для электронов, т. е. электрон проходит через атом аргона, не рассеиваясь на нем. Этот экспериментальный результат, совершенно не совместимый с представлениями классической физики, находит свое объяснение при учете волновой природы электрона.

Из волновой оптики известно, что при дифракции на непрозрачном диске в центре геометрической тени может существовать яркое пятно, называемое пятном Пуассона. Это пятно образуется за счет дифракции света, т. е. отклонения от закона прямолинейного распространения света, обусловленного его волновой природой. В опыте Рамзауэра роль такого диска играет атом аргона. Если энергия электрона такова, что его дебройлевская длина волны сравнима с диаметром атома, то в результате дифракции электрона на атоме может возникнуть пятно Пуассона для электронной волны. В этом случае электроны проходят через атом аргона, не испытывая какого-либо отклонения от направления своего первоначального движения. В дальнейшем подобное явление было обнаружено и для атомов

других инертных газов — криптона и ксенона. То обстоятельство, что эффект Рамзауэра наблюдается только в инертных газах, объясняется тем, что атомы инертных газов имеют полностью заполненную внешнюю электронную оболочку, они сферически симметричны и обладают достаточно резкой внешней границей.

Здесь мы ограничились качественным анализом эффекта Рамзауэра. Решение квантово-механической задачи о рассеянии электрона на атоме, позволяющее получить определенные количественные соотношения, приведено в 4.4.

Опыты по дифракции нейтронов и пучков частиц. До сих пор, обсуждая волновую природу микрочастиц, мы основное внимание уделяли электрону. Это вполне естественно, поскольку первые эксперименты, подтвердившие наличие у частиц волновых свойств, были выполнены именно с электронами. Но, согласно гипотезе де Бройля, волновыми свойствами должны обладать и другие микрочастицы — атомы, ионы, молекулы, а также открытые позже электрона такие элементарные частицы, как, например, протоны, нейтроны и т. д. Все эти частицы по отношению к электрону являются тяжелыми частицами, так как их масса значительно, в несколько тысяч раз, превосходит массу электрона. Поскольку длина волны де Бройля $\lambda_Б = 2\pi\hbar / mv$ обратно пропорциональна массе частицы m, то при одинаковых скоростях длина волны де Бройля тяжелых частиц оказывается существенно меньше дебройлевской длины волны электрона. Для того чтобы наблюдать дифракцию тяжелых частиц на кристаллах, необходимо, чтобы их дебройлевская длина волны была сравнима с межплоскостным расстоянием в кристалле ($\sim 10^{-10}$ м), а это оказывается возможным только в случае медленных частиц.

Дальнейшее усовершенствование техники эксперимента позволило наблюдать дифракцию на кристаллах тяжелых частиц, например атомов гелия и молекул водорода. Особенность этих опытов заключалась в том, что дифрагировавшие атомы и молекулы вследствие малой скорости не могли проникнуть в глубь кристалла и испытывали дифракцию на двумерной решетке, образованной атомами кристалла на его поверхности.

Большое значение имело проведение дифракционных опытов с нейтронами. У нейтронов нет электрического заряда, поэтому даже при малых скоростях они могут свободно проникать в кристалл и дифрагировать на трехмерной, пространственной кристалличе-

ской решетке. Источниками нейтронов являются ядерные реакции, поэтому интенсивный пучок нейтронов, необходимый для проведения дифракционных исследований, может быть получен от ядерных реакторов или на ускорителях заряженных частиц.

Анализ показывает, что испытывать дифракцию в кристалле могут только *тепловые нейтроны*, т. е. нейтроны, энергия которых сравнима с энергией атомов или молекул $E = \frac{3}{2}kT$ при комнатной температуре $T \sim 300$ K. У тепловых нейтронов дебройлевская длина волны

$$\lambda_{\text{Б}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_n E}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{3m_n kT}}, \qquad (2.12)$$

где m_n — масса нейтрона. Из (2.12) следует, что $\lambda_{\text{Б}}$ имеет порядок 10^{-10} м, т. е. возможна дифракция нейтронов на кристаллической решетке.

Первые исследования, в которых наблюдалась *дифракция нейтронов на кристаллах*, были выполнены в 1936 г. Х. Халбаном, П. Прайсверком и Д. Митчеллом. В этих экспериментах использовались радиево-бериллиевые источники нейтронов (см. 7.3), однако ниже мы приведем традиционную, сложившуюся за последние десятилетия, схему эксперимента по дифракции нейтронов, в которой источником нейтронов является ядерный реактор (рис. 2.10).

Нейтроны, выходящие из ядерного реактора R, проходят через замедлитель S и теряют в нем часть своей энергии. Далее через коллимирующую систему K, формирующую узконаправленный пучок, они попадают на кристалл C, в котором и происходит дифракция. Дифрагировавший пучок нейтронов регистрируется детектором нейтронов D. Характерный вид наблюдаемой в эксперименте зависимости интенсивности дифрагировавших нейтронов от брэгговского угла θ и дебройлевской длины волны $\lambda_{\text{Б}}$ приведен на рис. 2.11.

В качестве замедлителя нейтронов используются большие поликристаллические образцы графита, бериллия, висмута и других веществ, ядра которых слабо поглощают нейтроны. В замедлителе нейтроны испытывают многократное дифракционное отражение и отдают избыток своей энергии ядрам кристалла.

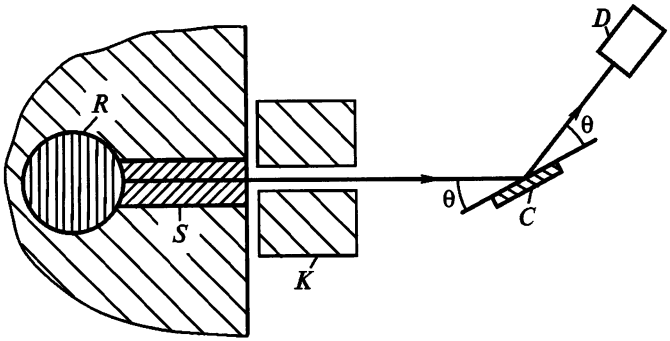


Рис. 2.10. Схема экспериментальной установки для наблюдения дифракции нейтронов

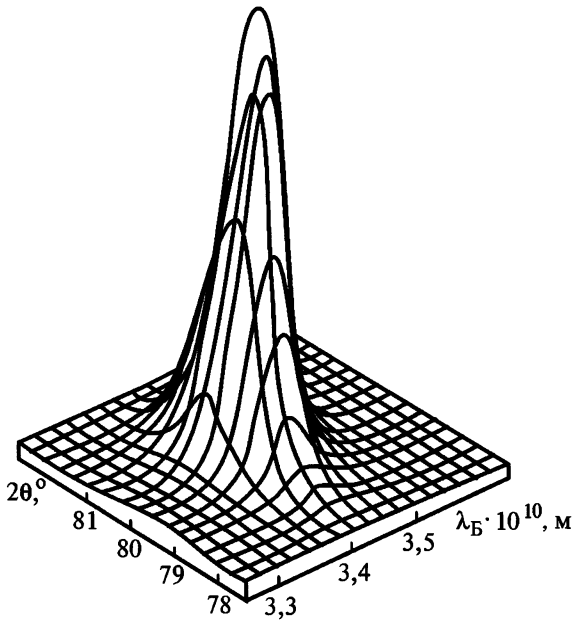


Рис. 2.11. Дифракционный максимум интенсивности нейтронов, отраженных от монокристалла $CsHSeO_4$

Кроме того, в поликристаллическом замедлителе происходит *фильтрация* (выделение) низкоэнергетической части спектра пучка нейтронов, также основанная на дифракции нейтронов. Рассмотрим это явление подробнее.

Из условия Брэгга —Вульфа $2d\sin\theta = n\lambda_Б$ следует, что максимальная дебройлевская длина волны нейтронов, которые могут испытывать дифракционное отражение, равна

$$\lambda_{Б\max} = \max\left\{\frac{2d\sin\theta}{n}\right\} = 2d.$$

Эту длину волны $\lambda_{Б\max}$ называют граничной длиной волны и обозначают $\lambda_г$. Наличие граничной длины волны означает, что нейтроны высоких энергий (быстрые нейтроны) с длиной волны $\lambda_Б < \lambda_г$ будут испытывать дифракцию в кристалле, отклоняться за счет этого от своего первоначального направления и выбывать из проходящего пучка (рис. 2.12).

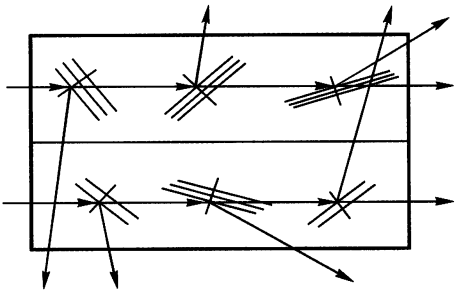


Рис. 2.12. Схема фильтрации нейтронного пучка поликристаллическим фильтром

Нейтроны низких энергий (*медленные нейтроны*) с длиной волны $\lambda_Б > \lambda_г$ не испытывают дифракцию и проходят через поликристалл практически без изменения интенсивности пучка. Наблюдавшаяся в эксперименте зависимость интенсивности пучка нейтронов, прошедших через поликристаллический бериллиевый фильтр, от дебройлевской длины волны нейтронов $\lambda_Б$ представлена на рис. 2.13. Резкое уменьшение интенсивности I прошедшего пучка происходит при значении длины волны нейтронов $\lambda_Б \approx 0,4$ нм, что согласуется со значением граничной длины волны для бериллиевого фильтра $\lambda_г = 0,395$ нм.

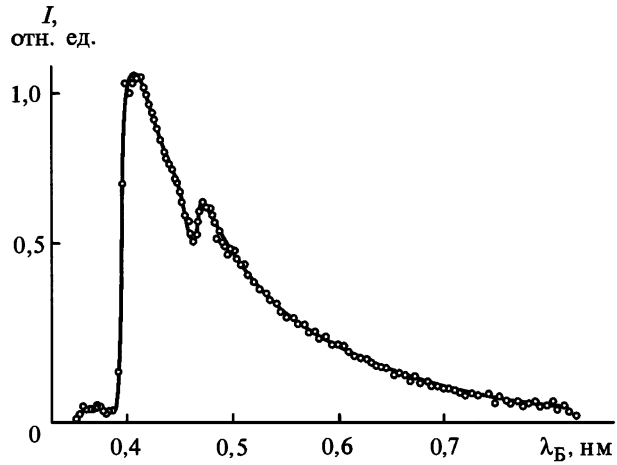


Рис. 2.13. Спектр нейтронов, прошедших через поликристаллический бериллиевый фильтр

Проходящие через поликристаллический фильтр нейтроны низких энергий получили название *холодных нейтронов*. Результаты расчета, выполненного в задаче 2.4, поясняют такое название.

Для нейтронов, так же как и для других частиц, возможна постановка классических дифракционных опытов, хорошо известных в оптике. На рис. 2.14 приведены результаты экспериментального исследования дифракции нейтронов на крае непрозрачного экрана. В этом опыте использовались нейтроны с дебройлевской длиной волны $\lambda_Б = 2$ нм. На графике одна единица по оси x соответствует смещению приемной щели детектора шириной 30 мкм на расстояние 100 мкм.

Дифракционные опыты с тяжелыми частицами — атомами, молекулами, нейтронами — показали, что гипотеза де Бройля имеет универсальный характер. Все частицы, независимо от их природы и внутреннего строения, обладают волновыми свойствами.

Изучение волновых свойств частиц активно продолжается и в настоящее время. Так, в 2003 г. были экспериментально обнаружены волновые свойства молекул фторфуллерена $C_{60}F_{48}$, масса каждой из которых составляет 1648 атомных единиц массы. Удалось также наблюдать интерференционную картину для биологических объектов — молекул тетрафинилпорфирина $C_{44}H_{30}N_4$. Эти моле-

кулы входят в состав многих сложных биомолекул, в частности гемоглобина и хлорофилла. При скорости молекул $v \approx 100$ м/с их длина волны де Бройля составляет $\lambda_Б \approx 10^{-12}$ м =1 пм.

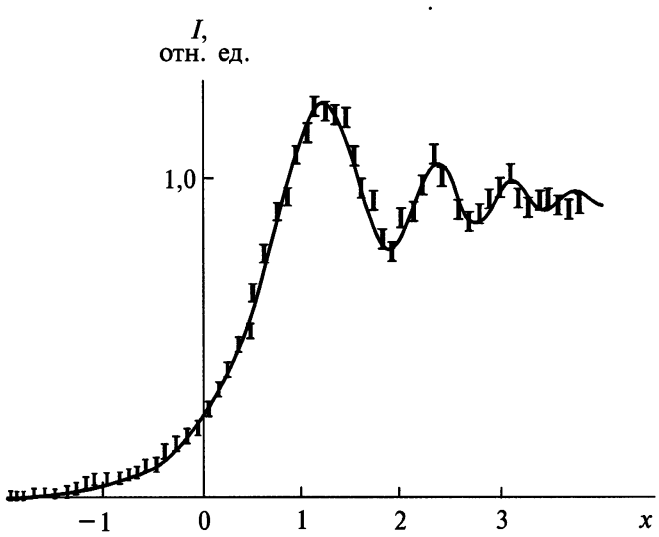


Рис. 2.14. Интенсивность I пучка нейтронов, дифрагирующих на крае поглощающего экрана

□ **Задача 2.3.** Получите условие Брэгга — Вульфа с учетом преломления электронной волны в металле.

Решение. Как было показано в 2.1 , при падении электронов на поверхность металла происходит преломление электронных волн де Бройля. Получим условие Брэгга — Вульфа с учетом этого преломления.

Пусть электроны падают на атомные плоскости кристалла под углом скольжения θ, угол скольжения для преломленной волны обозначим θ_1 (рис. 2.15). Будем рассматривать симметричный случай, т. е. считать, что атомные плоскости параллельны поверхности кристалла. Найдем разность хода Δ электронных волн, отраженных от соседних атомных плоскостей. С учетом преломления получаем

$$\Delta = (AB + BC)n_e - AD = 2AB \cdot n_e - AC\cos\theta = \frac{2dn_e}{\sin\theta_1} - \frac{2d}{\operatorname{tg}\theta_1}\cos\theta.$$

▽

Закон преломления (закон Снеллиуса) для электронных волн имеет вид

$$\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}-\theta\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{2}-\theta_1\right)}=\frac{\cos\theta}{\cos\theta_1}=n_e.$$

С учетом этого выражения разность хода Δ лучей *1* и *2* можно представить следующим образом:

$$\Delta=\frac{2dn_e}{\sin\theta_1}-\frac{2dn_e\cos^2\theta_1}{\sin\theta_1}=2dn_e\sin\theta_1=2d\sqrt{n_e^2-\cos^2\theta}.$$

Тогда условие усиления волн, отраженных от соседних атомных плоскостей, т. е. условие Брэгга — Вульфа, с учетом преломления электронной волны де Бройля примет вид (2.11)

$$2d\sqrt{n_e^2-\cos^2\theta}=n\lambda_Б,\ n=1,\ 2,\ 3,\ ...$$

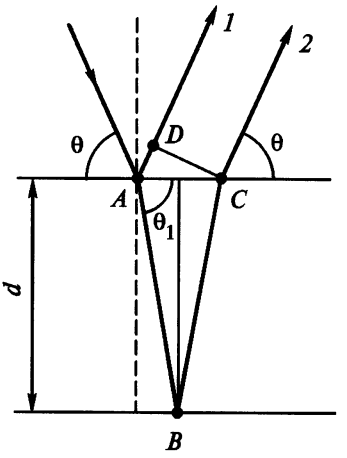


Рис. 2.15. Дифракция электронов с учетом преломления электронной волны в металле

Отметим, что полученное условие Брэгга — Вульфа справедливо не только для электронов, но и для других частиц, обладающих волновыми свойствами — фотонов, нейтронов и т. д. Его использование оправдано в тех случаях, когда показатель преломления n_e сколько-нибудь заметно отличается от единицы. Если же $n_e=1$, то найденное условие переходит в условие Брэгга — Вульфа (2.10), полученное без учета преломления.

Задача 2.4. Определите температуру T, соответствующую самым коротким волнам де Бройля нейтронов, пропускаемых поликристаллом графита, постоянная решетки которого $d=0{,}335$ нм.

Решение. Так как постоянная решетки графита d известна, то для граничной длины волны пропускаемых графитом нейтронов по-

▽ лучаем $\lambda_г = 2d = 0{,}67$ нм . Для того чтобы найти температуру T, соответствующую самым коротким волнам де Бройля пропускаемых нейтронов, представим температуру T как функцию $\lambda_Б$ (см. выражение (2.12)):

$$T = \frac{(2\pi\hbar)^2}{3mk\lambda_Б{}^2}.$$

Подставляя сюда $\lambda_Б = \lambda_г = 0{,}67 \cdot 10^{-9}$ м, находим, что

$$T = \frac{\left(6{,}62 \cdot 10^{-34}\right)^2}{3 \cdot 1{,}675 \cdot 10^{-27} \cdot 1{,}38 \cdot 10^{-23} \cdot \left(0{,}67 \cdot 10^{-9}\right)^2} = 14 \text{ K}.$$

Таким образом, мы видим, что нейтронам, прошедшим через поликристаллический фильтр, действительно соответствуют очень низкие температуры, так что их по праву называют холодными нейтронами. ■

2.3. Соотношения неопределенностей

Свойства микрочастиц. Открытие волновых свойств у микрочастиц показывает, что в физике микромира мы имеем дело с принципиально новым объектом исследований. В одних экспериментах микрочастицы проявляют волновые свойства, в других ведут себя подобно корпускулам, однако ни волнами, ни частицами в полном смысле слова они не являются, т. е. проявляется несостоятельность классического подхода при описании поведения микрочастиц.

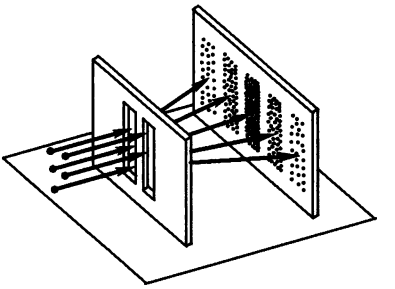
Отличие микрочастицы от волны состоит в том, что волну, используя, например, полупрозрачное зеркало, можно разделить на две части и отдельно исследовать каждую из них. Микрочастица же, например электрон или нейтрон, во всех опытах проявляется как единое целое. Никому еще не удавалось наблюдать полэлектрона, четверть нейтрона и т. д.

Отличие микрочастицы от макроскопической частицы, подчиняющейся законам классической механики, заключается, в частности, в том, что для описания движения микрочастицы понятие траектории оказывается, вообще говоря, неприменимым. Проил-

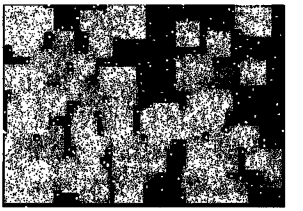
люстрируем это утверждение результатами опыта по дифракции электронов на двух щелях, который является электронным аналогом хорошо известного в оптике опыта Юнга. Схема эксперимента представлена на рис. 2.16, *а*, вид картины, наблюдаемой на экране по мере увеличения числа электронов, приведен на рис. 2.16, *б*, *в*, *г*.

В том месте экрана, куда попадает электрон, прошедший через систему двух щелей, образуется светлое пятно. При небольшом числе электронов (при небольшой длительности эксперимента) эти пятна распределены по экрану довольно хаотично (рис. 2.16, *б*). Однако по мере увеличения продолжительности опыта интерференционная картина на экране, обусловленная волновой природой электронов, формируется все более и более достоверно. На рис. 2.16, *г* отчетливо видна характерная для интерференции система чередующихся светлых и темных полос.

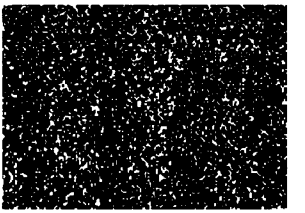
Если бы каждый электрон проходил через вполне определенную щель, т. е. если бы можно было указать траекторию электрона, то на экране наблюдалась бы интенсивность, соответствующая некогерентному суммированию вкладов от каждой из двух щелей. В этом случае не было бы никаких оснований для возникновения интерференционной картины, следовательно, интерференция должна была бы отсутствовать.



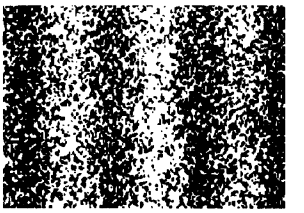
а



б



в



г

Рис. 2.16. Экспериментальное исследование дифракции пучка электронов на двух щелях:

а — схема эксперимента; *б* — *г* — картины, наблюдаемые на экране, при различном числе электронов: *б* — 100 электронов; *в* — 3000 электронов; *г* — 70000 электронов

Существование на экране интерференционных полос (см. рис. 2.16, *г*) означает, что при прохождении каждого электрона через систему двух щелей участвуют обе щели. Принципиально невозможно, не разрушив интерференционную картину, указать, через какую из них прошел электрон. Это приводит к выводу о том, что невозможно указать траекторию, по которой электрон двигался.

Возникновение интерференционной картины при прохождении частицы через систему двух щелей является самой известной иллюстрацией характерных особенностей частиц, обладающих волновыми свойствами. При описании этого эксперимента нельзя полагаться на интуицию, выработанную ежедневным опытом жизни в макроскопическом мире. Описать и объяснить результаты такого опыта на языке классической физики невозможно.

Действительно, у читателя, придерживающегося привычной, макроскопической точки зрения, может появиться следующий ход рассуждений. Интерференционная картина на экране обусловлена влиянием двух щелей на движение одной частицы. В этом случае наблюдать интерференционную картину можно только при условии, что каждая частица проходит через две щели. Если бы она проходила только через одну щель, то интерференция отсутствовала бы. Но представить движение частицы одновременно через две щели с точки зрения классической физики невозможно.

Этот читатель может попытаться опровергнуть возможность прохождения частицы через две щели следующим мысленным экспериментом. Пусть наблюдатель подстережет частицу сразу за щелями с помощью двух "фонариков", испускающих очень узкие световые пучки, поперечный размер которых не превышает размера щели. Тогда прошедшая через щель частица попадет в свой световой пучок, в котором она обязательно столкнется с фотоном. Рассеянный фотон можно будет наблюдать как некоторую вспышку, порожденную частицей. Таким образом, увидев вспышку в световом пучке от одного или другого фонарика, наблюдатель сможет определить, через какую щель прошла частица.

Значит ли это, что если наблюдатель узнал, через какую щель проходит частица, то интерференционная картина должна исчезнуть? Восстановится ли такая интерференционная картина, если фонарики потушить? А что будет, если фонарики горят, но наблюдатель не захотел смотреть на световые вспышки? Ведь частица "не знает", на что смотрит наблюдатель.

Ответы на эти вопросы дает эксперимент, который получил название эксперимента "Который Путь" (по-английски "Wich Way experiment"). В 1998 г. один из таких экспериментов был проведен с пучком атомов, которые последовательно пересекали систему двух стоячих световых волн. Стоячие волны играли роль интерференционных решеток, после прохождения которых атомный пучок расщеплялся на четыре когерентных пучка. Эти пучки интерферировали между собой. Главное, что с помощью дополнительных устройств, представляющих собой резонаторы с лазерным излучением, можно было получить и записать информацию о пути атома после прохождения им световой решетки. Опыт показал, что при включении лазерных резонаторов интерференционная картина исчезала, а при выключении вновь восстанавливалась. Частица как бы "узнавала", следит за ней наблюдатель или нет.

Следовательно, природа устроена так, что если в опыте принципиально возможно получить информацию о пути движения частицы, то интерференцию частиц в таком опыте наблюдать нельзя. Если же информация "Который Путь" отсутствует, то при прохождении частиц через щели наблюдается интерференционный эффект. При этом, конечно, не важно, смотрит ли наблюдатель на прибор, дающий информацию "Который Путь", или нет. В этом смысле наличие наблюдателя есть наличие самого измерительного прибора.

Исчезновение интерференции частиц при появлении дополнительной информации об их движении в теории квантовых измерений получило название *декогеренции*. Важно, что декогеренция может наблюдаться и в том случае, когда измерение не организуется экспериментатором намеренно, а является результатом дополнительного взаимодействия частицы с ее окружением.

Наличие у микрочастицы волновых свойств означает отказ от одного из важнейших понятий классической механики — понятия траектории частицы. В соответствии с классическими представлениями, частица, двигаясь по траектории, в каждый момент времени находится в определенной точке пространства и, следовательно, не может в этот же момент времени находиться в других точках. Согласно квантовым представлениям, микрочастица в силу своих волновых свойств имеет вероятность быть обнаруженной в один и тот же момент времени в разных точках пространства. Таким образом, для описания движения микрочастиц понятие траектории оказывается, вообще говоря, неприменимым.

Какие же свойства классических частиц сохраняются в области микромира? Это — масса, электрический заряд и энергия, которая при взаимодействии частицы с другими телами расходуется так, как если бы частица была сосредоточена в одной точке.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга. Двойственная корпускулярно-волновая природа микрочастиц накладывает ограничения на точность определения значений физических величин, характеризующих состояние частицы. Причем эти ограничения никак не связаны с точностью измерений, достижимой в конкретном эксперименте, а имеют принципиальное значение. Рассмотрим в качестве примера дифракцию электрона на щели.

Пусть электроны падают нормально на непрозрачный экран, в котором имеется щель AB шириной Δx (рис. 2.17).

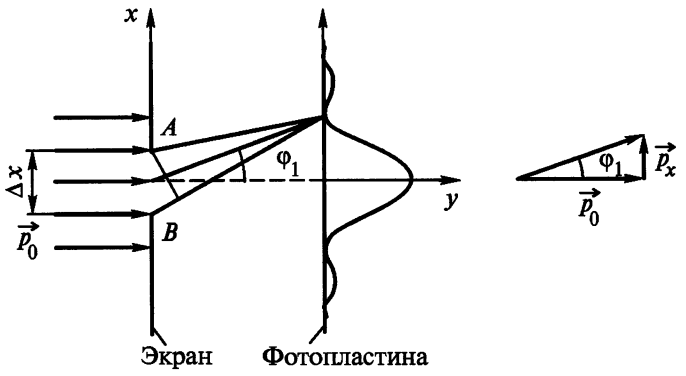


Рис. 2.17. Картина дифракции электрона на щели

Дифракционная картина фиксируется фотопластинкой, расположенной за экраном. Направим ось x в плоскости экрана перпендикулярно щели, а ось y — вдоль направления движения падающего пучка электронов. Пусть падающие электроны обладают определенным импульсом $\vec{p}_0$, тогда, согласно квантово-механическим представлениям, этим электронам соответствует плоская волна с волновым вектором $\vec{k}$, определяемым из уравнений де Бройля (2.4): $\vec{k} = \vec{p}_0 / \hbar$ и $\lambda_Б = 2\pi\hbar / p_0$.

Поскольку волна распределена по всему пространству, то каждый электрон до прохождения через щель имеет точно определен-

ный импульс $\vec{p}_0(p_x = 0,\ p_y = p_0,\ p_z = 0)$ и неопределенную координату x.

При прохождении электрона через щель ситуация существенным образом меняется. Неопределенность координаты x становится равной ширине щели Δx, но при этом появляется неопределенность проекции импульса Δp_x, обусловленная дифракцией электронов на щели. Дело в том, что электроны, прошедшие через щель в экране, описываются уже не плоской, а расходящейся волной, интенсивность которой в соответствии с законами дифракции зависит от угла дифракции φ (см. рис. 2.17).

Наибольшее изменение при прохождении через щель претерпевает проекция p_x импульса электрона на ось x. Оценим порядок разброса значений p_x, обусловленный дифракцией электронов.

Электроны, прошедшие через щель, в подавляющем большинстве случаев будут попадать в центральный дифракционный максимум. Границы этого максимума определяются углом дифракции φ_1, задающим направление на первый минимум интенсивности в дифракционной картине. Согласно теории дифракции, этот угол находят из условия $\Delta x \sin\varphi_1 = \lambda_Б$, где $\lambda_Б$ — дебройлевская длина волны электрона. В силу малости угла φ_1 $\sin\varphi_1 \approx \mathrm{tg}\varphi_1$, следовательно,

$$\frac{\lambda_Б}{\Delta x} = \sin\varphi_1 \approx \mathrm{tg}\varphi_1 \ . \qquad (2.13)$$

В то же время угол φ_1 можно определить через компоненты p_x и p_y импульса электрона:

$$\mathrm{tg}\varphi_1 = \frac{p_x}{p_y} = \frac{p_x}{p_0}.$$

Считая, что неопределенность проекции импульса Δp_x вдоль оси x сравнима с p_x, получаем

$$\mathrm{tg}\varphi_1 \approx \frac{\Delta p_x}{p_0} \ . \qquad (2.14)$$

Сравнивая (2.13) и (2.14), находим, что $\Delta x \Delta p_x \approx \lambda_Б p_0$. Принимая во внимание, что $\lambda_Б = 2\pi\hbar / p_0$, окончательно получаем

$$\Delta x \Delta p_x \approx 2\pi\hbar. \qquad (2.15)$$

Поскольку при выводе (2.15) использовались некоторые упрощающие предположения, это соотношение, естественно, является приближенным. Строгий вывод, приведенный в 3.7, дает следующий результат:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \qquad (2.16)$$

Это соотношение было получено в 1927 г. немецким физиком В. Гейзенбергом и называется соотношением неопределенностей Гейзенберга. Из него следует, что чем точнее мы определяем координату частицы, т. е. чем меньше Δx, тем более неопределенной становится проекция импульса частицы Δp_x на эту координатную ось и наоборот.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга является математическим выражением принципа неопределенностей. Согласно этому принципу, в природе не существует состояния частицы с точно определенными значениями координаты и проекции импульса на эту координатную ось.

Подчеркнем еще раз, что соотношение (2.16) является следствием корпускулярно-волнового дуализма материи, т. е. того, что частица обладает одновременно свойствами и волны, и корпускулы. Оно никак не связано с погрешностью измерения конкретных измерительных приборов, используемых в том или ином эксперименте. Это соотношение задает теоретический предел точности измерения характеристик микрочастицы, который далеко не всегда может быть достижим на практике.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга связывает неопределенность координаты частицы с неопределенностью проекции импульса именно на данную координатную ось. Поскольку ось x в предыдущем рассмотрении физически ничем не была выделена, то соотношение (2.16) оказывается справедливым и для других координатных осей: $\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}$, $\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$.

В то же время не существует никаких принципиальных ограничений на точность определения координаты и проекции импульса на другую координатную ось, например: Δx и Δp_y или Δy и Δp_z, или Δz и Δp_x.

В квантовой механике, учитывающей волновые свойства частиц, соотношение неопределенностей Гейзенберга имеет фундаментальное значение. С его помощью можно получать важные физические результаты, а также проводить численные оценки, не прибегая к точному, иногда достаточно трудоемкому, решению квантово-механической задачи. Так, соотношение неопределенностей (2.16) позволяет понять, почему электрон в атоме не падает на ядро, почему электрон не может входить в состав атомного ядра, а также сделать ряд других физически значимых выводов. Это соотношение дает возможность оценить порядок размера атома, минимальной энергии электрона в атоме и получить другие важные оценочные результаты.

Покажем, каким образом соотношение неопределенностей позволяет сделать вывод об устойчивости атома. Рассмотрим атом водорода и будем считать, что электрон движется вокруг ядра (протона) по круговой орбите радиуса r со скоростью v. Поскольку движение электрона по орбите происходит под действием кулоновской силы, то, согласно второму закону Ньютона,

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2}. \qquad (2.17)$$

Воспользуемся теперь соотношением неопределенностей Гейзенберга. Будем считать, что неопределенность координаты электрона Δx равна радиусу орбиты r, а неопределенность импульса Δp не превышает самого значения импульса p, т. е. $\Delta p \approx p = mv$. В этом случае соотношение (2.16) принимает вид

$$r m_e v \geq \frac{\hbar}{2}. \qquad (2.18)$$

Объединяя (2.17) и (2.18), получаем

$$r \geq \frac{\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0{,}13\cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

Следовательно, радиус орбиты электрона, т. е. радиус атома не может быть меньше найденного значения. Отсюда следует, что электрон не может упасть на ядро, т. е. атом является устойчивым образованием.

Соотношение неопределенностей позволяет также очертить *границы применимости классической механики*. Чтобы продемонстрировать это, перепишем соотношение (2.16) так, чтобы в него явно входила масса частицы m. Подставляя в (2.16) $\Delta p_x = m\Delta v_x$, получаем

$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x}. \qquad (2.19)$$

Поскольку постоянная Планка очень мала ($\hbar = 1{,}055 \cdot 10^{-34}$ Дж · с), неопределенность скорости Δv_x может иметь заметное значение лишь для частиц с очень малой массой, находящихся в области очень малых размеров Δx.

Возьмем в качестве примера малую, но макроскопическую частицу — пылинку, масса которой $m = 10^{-6}$ кг. Разумной погрешностью определения координат этой пылинки будем считать $\Delta x = 10^{-6}$ м. В этом случае неопределенность скорости пылинки $\Delta v_x \sim 10^{-22}$ м/с, что на много порядков меньше погрешностей измерений, достигаемых на лучших экспериментальных установках. Таким образом, при описании движения пылинки, как и вообще макроскопических тел, необходимо пользоваться не квантовой, а классической механикой.

Посмотрим теперь, что дает соотношение неопределенностей Гейзенберга в случае микрочастицы, например электрона в атоме: масса электрона $m = 0{,}91 \cdot 10^{-30}$ кг, неопределенность его координаты примем равной размеру атома $\Delta x \approx 10^{-10}$ м. В этом случае $\Delta v_x \sim 10^6$ м/с.

Сравним полученное значение со скоростью электрона в атоме. Электрон в атоме имеет энергию порядка 10 эВ, что соответствует скорости электрона $v \sim 10^6$ м/с . Следовательно, неопределенность скорости электрона Δv_x сравнима со скоростью электрона v.

Это означает, что для описания поведения электрона в атоме необходимо пользоваться законами квантовой механики.

Как будет показано в 3.7, кроме координат и проекций импульсов существуют другие пары физических величин, которые не могут быть измерены одновременно точно и для которых выполняются соотношения неопределенностей, аналогичные соотношению (2.16). Особо следует выделить соотношение, которое называется соотношением неопределенностей для энергии и времени:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar. \qquad (2.20)$$

Здесь ΔE — неопределенность энергии системы, т. е. разность двух измерений энергии системы, проведенных в два различных момента времени, отличающихся на Δt. Более детальное рассмотрение процесса измерения энергии показывает, что неопределенность энергии системы обусловлена влиянием на систему измерительного прибора, с помощью которого проводится измерение энергии.

Из соотношения (2.20) следует, что в квантовой механике, учитывающей наличие у частиц волновых свойств, закон сохранения энергии системы может быть проверен посредством двух измерений лишь с точностью порядка $\hbar/\Delta t$, где Δt — интервал времени между измерениями.

Соотношение (2.20) можно рассмотреть и с иной точки зрения, применив его к системе, имеющей "ограниченную продолжительность жизни" τ, по истечении которой система распадается с испусканием фотонов или каких-либо других частиц, переходя в другое состояние. В этом случае соотношение (2.20) можно записать в виде

$$\Delta E \tau \geq \hbar. \qquad (2.21)$$

Отсюда следует, что энергия способной к распаду системы может быть определена лишь с точностью порядка $\hbar/\tau$, где τ — время жизни нестабильной системы. В таком виде соотношение (2.21) позволяет оценить конечную ширину энергетического уровня системы.

Выводы, следующие из соотношения неопределенностей (2.21), можно наблюдать в эксперименте, например в атомной спектрос-

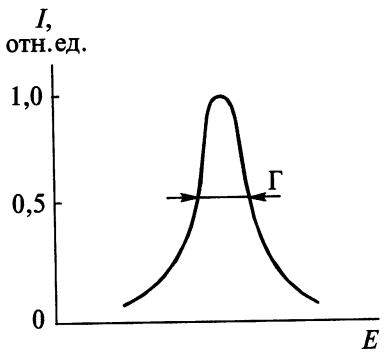


Рис. 2.18. Качественный вид формы линии в спектре излучения атомов

копии. Хорошо известно, что линии в спектре излучения атомов не являются бесконечно узкими — это соответствовало бы значению неопределенности $\Delta E = 0$, т. е. точно определенной энергии кванта излучения. Спектральные линии, наблюдаемые в эксперименте, имеют конечную, так называемую *естественную ширину линии* Г, которая представляет собой разброс значений энергии фотонов относительно некоторого среднего значения, характеризующего центр линии (рис. 2.18).

Из (2.21) следует, что эта ширина связана с временем жизни атома в возбужденном состоянии τ соотношением

$$\Gamma\tau \approx \hbar. \qquad (2.22)$$

Измеряя естественную ширину спектральных линий Г, можно с помощью (2.22) найти время жизни атома в том или ином возбужденном состоянии. Так, естественная ширина линии, которая измерена в спектре атомов, излучающих в видимом диапазоне, имеет значение порядка 10^{-7} эВ. Подставляя это значение в (2.22), находим, что время жизни атома в возбужденном состоянии $\tau \approx 10^{-8}$ с. Более подробно вопрос об уширении спектральной линии атомов рассмотрен в 5.2.

Следствия из соотношения неопределенностей. Обсудим следствия, вытекающие из соотношения неопределенностей (2.16). Об одном из них мы уже говорили — в квантовой механике теряет смысл понятие траектории частицы. Согласно классическим представлениям, частица в каждый момент времени имеет точно определенную координату и скорость (или импульс), т. е. движется по траектории. Из соотношений (2.16) и (2.19) следует, что в квантовой механике может быть точно определена лишь одна из

этих величин: либо точно известна координата частицы, т. е. $\Delta x = 0$, но тогда совершенно не определена ее скорость, т. е. $\Delta v_x \to \infty$, либо точно известна скорость частицы $(\Delta v_x = 0)$, но тогда совершенно не определена ее координата $(\Delta x \to \infty)$. В общем же случае в силу двойственной корпускулярно-волновой природы частица обладает неопределенностями координаты и импульса, которые связаны соотношением (2.16).

Соотношение неопределенностей позволяет понять парадоксальное на первый взгляд поведение частиц в камере Вильсона. Напомним, что при прохождении через камеру Вильсона быстрые частицы оставляют в ней следы в виде четко выраженных траекторий — треков. Никакой размытости трека, связанной с волновыми свойствами частицы, не наблюдается. В чем же дело? Ответ заключается в следующем. Трек частицы в камере Вильсона представляет собой цепочку маленьких капелек тумана размером $\Delta x \approx 10^{-6}$ м. В этом случае неопределенность импульса частицы, согласно (2.16), составляет

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{2\Delta x} \sim 10^{-28} \text{ кг} \cdot \text{м/с},$$

что значительно меньше значения самого импульса p. Это означает, что для описания поведения такой частицы должна применяться классическая механика и без сколько-нибудь значительной погрешности можно говорить о траектории частицы. Этот вывод подтверждается также и тем, что для частиц с высокой энергией, т. е. для частиц с большим импульсом p, дебройлевская длина волны $\lambda_Б$ оказывается очень малой. Такие частицы вполне можно считать классическими.

Другим следствием, вытекающим из соотношения неопределенностей, является вывод о невозможности состояния полного покоя микрочастицы как состояния с точно определенной координатой частицы и импульсом, точно равным нулю. Действительно, если область изменения координаты частицы ограничена, например $\Delta x = a$, то, согласно (2.16), разброс значений импульса частицы $\Delta p_x \geq \hbar/(2a)$ и, следовательно, ее энергия отлична от нуля. Мини-

мальный разброс значений импульса $\Delta p_{x\min} = \hbar/(2a)$. Полагая $p_{x\min} \approx \Delta p_{x\min}$, находим минимальную (не равную нулю) энергию микрочастицы

$$E_{\min} = \frac{p_{x\min}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8ma^2}.$$

Таким образом, в квантовой механике микрочастица не может находиться в состоянии полного покоя.

Еще один важный вывод, вытекающий из соотношения неопределенностей, заключается в том, что при учете волновых свойств частицы теряет смысл деление полной энергии частицы на кинетическую и потенциальную. Кинетическая энергия $E_к$ зависит от импульса частицы, а потенциальная энергия U — от ее координаты. Но поскольку, согласно (2.16), координата и импульс не могут одновременно иметь определенные значения, то полная энергия E не может быть представлена в виде суммы одновременно точно определенных кинетической и потенциальной энергий. Таким образом, равенство $E = E_к + U$ для мгновенных значений $E_к$ и U в квантовой механике невозможно. В дальнейшем будет показано, что это равенство оказывается справедливым лишь для средних значений энергии $\langle E \rangle = \langle E_к \rangle + \langle U \rangle$.

□ **Задача 2.5.** Используя соотношение неопределенностей Гейзенберга, получите оценочное соотношение, определяющее границы применимости классической механики для описания движения частицы в некоторой области пространства с характерным линейным размером L.

Решение. Очевидно, что понятие траектории для описания движения частицы можно использовать только в том случае, если неопределенность ее координаты мала по сравнению с характерным размером области движения, т. е. $\Delta x << L$. Воспользуемся соотношением неопределенностей (2.16), полагая в нем $\Delta p_x \approx p$. Для неопределенности координаты частицы получаем

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} \approx \frac{\hbar}{2p} = \frac{\lambda_Б}{4\pi},$$

▽

▽ где $\lambda_Б$ — длина волны де Бройля рассматриваемой частицы.

Следовательно, условие, при выполнении которого для описания движения частицы можно, пренебрегая квантовыми эффектами, использовать законы классической механики, имеет вид $\lambda_Б << L$.

Отметим, что в это условие входит размер области движения частицы L, который обычно задается условием задачи. Анализ показывает, что полученное соотношение нарушается для частиц малой массы, т. е. микрочастиц, движущихся в областях пространства, размеры которых сравнимы с размерами атома. ■

□ **Задача 2.6.** Используя соотношение неопределенностей энергии и времени (2.20), найдите естественную ширину $\Delta\lambda$ спектральной линии излучения атома. Среднее время жизни атома в возбужденном состоянии $\tau = 10^{-8}$ с, длина волны излучения $\lambda = 500$ нм.

Решение. Энергия испускаемого атомом излучения E связана с длиной волны λ соотношением

$$E = \hbar\omega = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}.$$

Отсюда получаем связь между неопределенностью энерги ΔE и шириной спектральной линии $\Delta\lambda$:

$$\Delta E = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda^2}\Delta\lambda.$$

Так как $\Delta E = \Gamma$, то с учетом (2.22) получаем $\Delta\lambda = \lambda^2/(2\pi c\tau)$. Подставляя численные значения, находим, что $\Delta\lambda = 1{,}3\cdot10^{-14}$ м. При этом относительная ширина излучаемой спектральной линии составляет

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = 2{,}6\cdot10^{-8}.$$

Именно это малое значение $\Delta\lambda$ определяет предельную степень монохроматичности спектральных линий излучения атомов. Реальная ширина спектральных линий, наблюдаемых в эксперименте, оказывается больше найденной естественной ширины вследствие, например, доплеровского уширения линии, обусловленного тепловым движением излучающих атомов (см. 5.2). ■

2.4. Применение микрочастиц для исследования структуры вещества

Использование микрочастиц позволило получить новый, очень эффективный метод структурных исследований. Впервые наиболее ярко это было продемонстрировано в 1911 г. английским физиком Э. Резерфордом и его сотрудниками в опытах по рассеянию α-частиц. Изучение рассеяния α-частиц в тонкой металлической фольге позволило Резерфорду сделать вывод о распределении электрического заряда в атоме и прийти к ядерной (планетарной) модели атома.

Однако, хотя в исследованиях Резерфорда использовались α-частицы, условия опыта были таковы, что волновые свойства частиц оказывались несущественными и рассеяние α-частиц на ядрах можно было рассматривать в рамках классической физики. В этом параграфе основное внимание уделяется рассмотрению тех методов исследования структуры вещества с помощью микрочастиц, в которых волновые свойства частиц играют определяющую роль.

Подобно тому как первые опыты по дифракции рентгеновского излучения на кристаллах, выявившие периодичность в расположении атомов в кристалле, привели к созданию нового метода исследования структуры твердых тел — рентгенографии, так и первые опыты по дифракции электронов и нейтронов на кристаллах положили начало новым методам изучения структуры вещества. Метод исследования структуры вещества, основанный на дифракции электронов, получил название *электронографии*, а метод, основанный на дифракции нейтронов, — *нейтронографии*.

В настоящее время электронография широко применяется для изучения структуры кристаллов, аморфных тел, жидкостей, а также молекул газов и паров. В связи с тем, что электроны сильно поглощаются веществом, этот метод позволяет исследовать структуру только довольно тонких кристаллов и кристаллических пленок. А использование в опыте медленных электронов, которые проникают в кристалл на очень малую глубину, дает возможность получать информацию об очень тонком приповерхностном слое кристаллов. Дифракция медленных электронов в настоящее время является одним из наиболее информативных методов исследования поверхности твердых тел, она позволяет изучать перестройку кристаллической структуры на поверхности, явления адсорбции и самые начальные стадии кристаллизации твердых тел. С помощью электронографии также изучают атомную структуру ближнего порядка в аморфных

телах, стеклах и жидкостях и, кроме того, структуру молекул газов и характер их тепловых колебаний в широком температурном интервале.

Очень широко применяются в структурных исследованиях нейтронографические методы. Нейтрон не имеет электрического заряда и поэтому в отличие от электрона обладает высокой проникающей способностью, что позволяет исследовать свойства вещества во всем объеме. Поскольку дебройлевская длина волны $\lambda_Б$ тепловых нейтронов имеет тот же порядок, что и расстояния между атомами в конденсированных средах, дифракция нейтронов дает возможность изучать взаимное расположение атомов, т. е. структуру вещества. В силу того что масса нейтрона соизмерима с массой атома, а кинетическая энергия тепловых нейтронов сравнима с энергией межатомных взаимодействий в веществе, это дает возможность по результатам неупругого рассеяния нейтронов изучать динамические свойства атомов и молекул.

Наличие у нейтрона магнитного момента позволяет по результатам дифракционных опытов изучать магнитную структуру твердых тел, т. е. величину магнитных моментов атомов, их взаимное расположение и ориентацию относительно кристаллографических осей. Соответствующий метод структурных исследований получил название *магнитной нейтронографии*. В настоящее время это единственный прямой метод определения магнитной структуры твердых тел. С его помощью изучена магнитная структура более тысячи магнитоупорядоченных кристаллов.

На рис. 2.19 приведены результаты нейтронографических исследований магнитной структуры кристалла MnO. При комнатной температуре это соединение является парамагнетиком, а при температуре ниже точки Нееля T_N = 80 K (аналог точки Кюри для ферромагнетиков) переходит в антиферромагнитное состояние, характеризующееся антипараллельным упорядочением магнитных моментов атомов марганца. Сравнение зависимостей интенсивности дифрагировавшего пучка нейтронов от угла рассеяния, полученных при двух значениях температуры кристалла (выше и ниже точки Нееля) (рис. 2.19, *а*), показывает, что упорядочение магнитных моментов атомов в кристалле приводит к появлению дополнительных дифракционных максимумов. Наличие этих максимумов позволило установить, что размер элементарной магнитной ячейки кристалла по всем направлениям оказывается вдвое больше структурного.

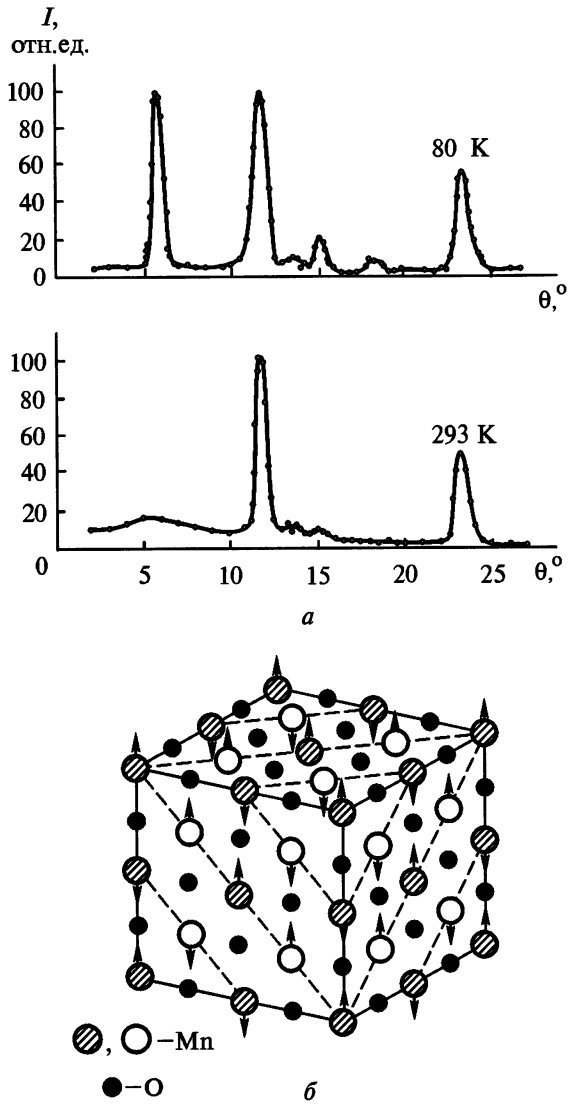


Рис. 2.19. Результаты исследований магнитной структуры кристалла MnO с помощью дифракции нейтронов:

а — угловая зависимость интенсивности дифрагирующего пучка нейтронов при температурах 80 K и 293 K; *б* — модель антиферромагнитного упорядочения ионов Mn (стрелками указаны направления магнитных моментов)

Вид упорядочения магнитных моментов атомов марганца в элементарной ячейке кристалла MnO, определенный по результатам нейтронографических исследований, приведен на рис. 2.19, *б*: маленькие черные кружки соответствуют атомам кислорода, большие светлые и заштрихованные кружки — атомам марганца. Стрелками указано направление магнитных моментов атомов марганца.

Еще одной важной областью исследований, в которых используются волновые свойства микрочастиц, является *электронная микроскопия*. Напомним, что предел разрешения микроскопа определяется выражением

$$l_{\min} = 0{,}61\frac{\lambda}{n\sin\alpha},$$

где λ — длина волны излучения; n — показатель преломления среды, в которой находится объект; 2α — апертурный угол. Величина $l_{\min}$ характеризует минимальное расстояние между двумя точками, которые в изображении, формируемом с помощью микроскопа, воспринимаются раздельно. В случае волн оптического диапазона $l_{\min}$ составляет сотни нанометров.

Использование вместо световых лучей пучков электронов позволяет существенно, в тысячи раз, повысить разрешающую способность микроскопа благодаря чрезвычайно малому значению дебройлевской длины волны электронов. Действительно, для электронов, прошедших ускоряющую разность потенциалов $U = 10$ кВ, длина волны де Бройля, согласно (2.8), составляет $\lambda_Б =$ 0,0122 нм, что на порядок меньше характерных размеров атомов. Однако достигнуть столь высокого разрешения на практике не удается поскольку магнитные и электрические линзы, фокусирующие пучки электронов в микроскопе, обладают заметными аберрациями. Тем не менее разрешение современных электронных микроскопов составляет $l_{\min} =$ $= 0{,}15...0{,}30$ нм, что дает возможность наблюдать атомарную и молекулярную структуры исследуемых объектов.

На рис. 2.20 представлен общий вид электронного микроскопа просвечивающего типа. Ускоряющее напряжение в электронных микроскопах высокого разрешения составляет 100...400 кВ, что позволяет исследовать слой вещества толщиной от одного до нескольких десятков нанометров. В электронно-оптической системе микроскопа создается глубокий вакуум (до $\sim 10^{-5}$ Па).

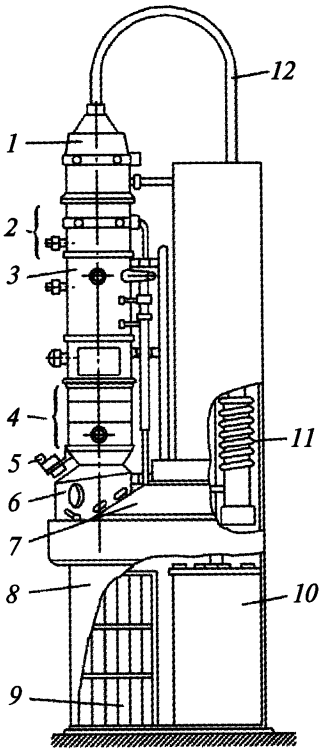


Рис. 2.20. Электронный микроскоп просвечивающего типа:

1 — электронная пушка с ускорителем; *2* — конденсорные линзы; *3* — объективная линза; *4* — проекционная линза; *5* — световой микроскоп, дополнительно увеличивающий изображение, наблюдаемое на экране; *6* — тубус со смотровыми окнами, через которые можно наблюдать изображение; *7* — пульт управления; *8* — стенд; *9* — источник питания линз; *10* — высоковольтное питающее устройство; *11* — вакуумная система; *12* — высоковольтный кабель

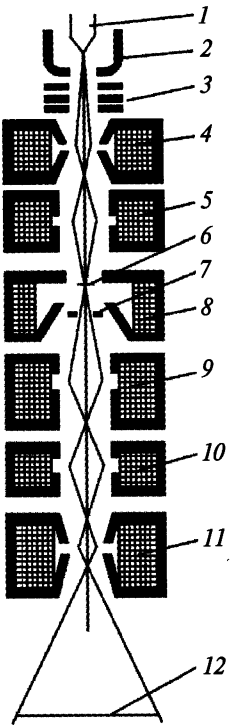
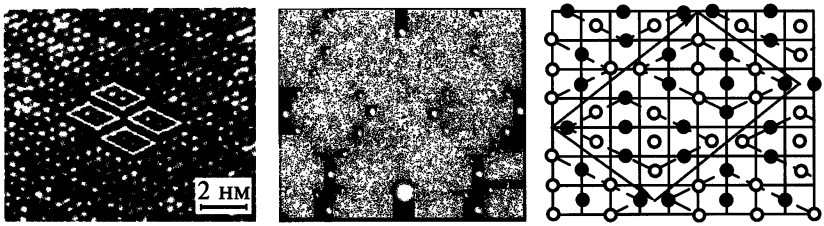


Рис. 2.21. Электронно-оптическая схема электронного микроскопа просвечивающего типа:

1 — катод; *2* — фокусирующий цилиндр; *3* — ускоритель электронов; *4* — первый (короткофокусный) конденсор, создающий уменьшенное изображение источника электронов; *5* — второй (длиннофокусный) конденсор, который переносит уменьшенное изображение источника электронов на объект; *6* — объект исследования; *7* — апертурная диафрагма объектива; *8* — объектив; *9*, *10*, *11* — система проекционных линз; *12* — катодолюминесцентный экран

Схема электронно-оптической системы микроскопа приведена на рис. 2.21. Пучок ускоренных электронов фокусируется первым и вторым конденсорами, которые создают на исследуемом объекте электронное пятно малого размера (от 1 до 20 мкм). Прошедшие через объект электроны с помощью системы проекционных линз формируют изображение объекта на катодолюминесцентном экране. Под экраном находится магазин с фотопластинками, на которые фотографируется получаемое изображение.

Типичные результаты исследований, выполненных методами электронной микроскопии, представлены на рис. 2.22. Эти результаты наглядно демонстрируют возможности электронной микроскопии в структурных исследованиях. Очень высокое разрешение, достигаемое в электронных микроскопах, делает электронную микроскопию эффективным методом изучения структуры вещества вплоть до атомарного уровня.



а *б* *в*

Рис 2.22. Результаты исследования структуры сплава золота и марганца с помощью электронного микроскопа:

а — вид структурного упорядочения атомов в сплаве; *б* — картина дифракции электронов на исследуемом образце; *в* — модель структуры сплава, полученная на основании проведенных исследований

До сих пор речь шла главным образом о применении микрочастиц в исследовании структуры твердых тел. В таких опытах используются частицы с длиной волны де Бройля, сравнимой с межатомным расстоянием в кристаллах. Для того чтобы выполнялось это условие, частица должна обладать не очень большой энергией. Так, в рассмотренных выше экспериментах энергия электронов находится в диапазоне от десятков электрон-вольт до нескольких сотен килоэлектрон-вольт.

В то же время с помощью ускорителей заряженных частиц оказывается возможным получать пучки электронов и протонов очень высоких энергий. В современных ускорителях энергия заряжен-

ных частиц может достигать порядка 10^3 ГэВ. Дебройлевская длина волны таких частиц очень мала (см. задачу 2.2), что позволяет использовать их для получения информации о размерах и структуре атомных ядер, а также образующих ядра нуклонов — протонов и нейтронов.

В 1955—1958 гг. американский физик Р. Хофштадтер выполнил серию экспериментов по рассеянию быстрых электронов на ядрах и нуклонах. Идея его опытов была достаточно проста. Из оптики хорошо известно, что при рассеянии волны на объекте, имеющем форму сферы радиуса R, дифракционные явления возникают при длине волны $\lambda \le R$ (рис. 2.23, *а*).

Интенсивность дифрагирующей волны I как функция угла дифракции φ имеет качественный вид, представленный на рис. 2.23, *б*.

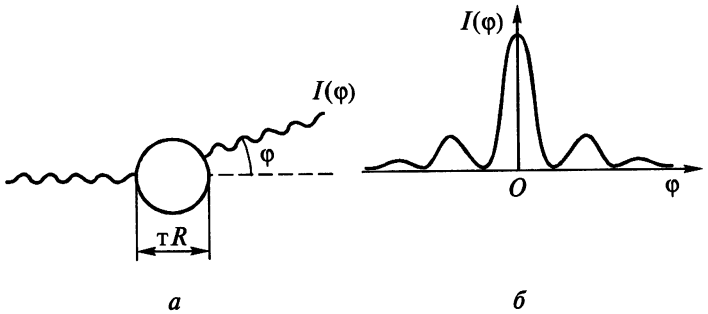


Рис. 2.23. Дифракция волны на сферическом объекте:
а — общая схема дифракции; *б* — зависимость интенсивности дифрагировавшей волны $I(\varphi)$ от угла дифракции φ

Углы, при которых $I(\varphi)$ достигает минимума, определяются, согласно волновой оптике, соотношением

$$\sin\varphi_m \approx m\frac{0{,}61}{R}\lambda\,,\quad m = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots \qquad (2.23)$$

Если считать, что ядро имеет форму сферы с достаточно резкой границей, и использовать быстрые электроны с длиной волны де Бройля $\lambda_Б \approx R$, то в рассеянии таких электронов на ядрах должны проявляться дифракционные эффекты, в частности минимумы интенсивности при углах, отвечающих условию (2.23).

На рис. 2.24 приведены результаты опыта Хофштадтера по наблюдению дифракции электронов с энергией $E = 750$ МэВ на ядрах ^{40}Ca. В этом опыте дебройлевская длина волны электронов составляла $\lambda_Б = 1{,}7$ фм. (Здесь используется более привычная для ядерной физики единица длины 1фм = 10^{-15} м.) Наблюдаемые в эксперименте минимумы интенсивности $I(\varphi)$ отвечают углам дифракции $\varphi_1 = 18^\circ$, $\varphi_2 = 31^\circ$, $\varphi_3 = 48^\circ$. Подставляя эти значения в соотношение (2.23), получаем следующие оценки для радиуса ядра ^{40}Ca:

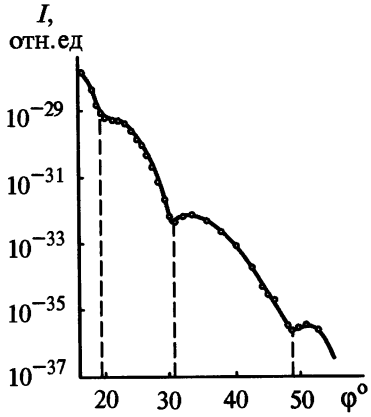


Рис. 2.24. Зависимость интенсивности пучка электронов, дифрагирующих на ядрах ^{40}Ca, от угла дифракции φ

$$m = 1,\ \varphi_1 = 18^\circ,\quad R = 3{,}3\ \text{фм};$$
$$m = 2,\ \varphi_2 = 31^\circ,\quad R = 3{,}9\ \text{фм};$$
$$m = 3,\ \varphi_3 = 48^\circ,\quad R = 3{,}6\ \text{фм}.$$

Сравним найденные с помощью дифракции электронов значения радиуса ядра ^{40}Ca с результатами расчета по приближенной формуле $R = 1{,}1A^{1/3}$ фм, где A — массовое число (суммарное число протонов и нейтронов в ядре). Подстановка в эту формулу значения $A = 40$ дает $R = 3{,}7$ фм, что хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Повышение энергии используемых в опыте электронов до 20 ГэВ позволило по рассеянию электронов исследовать структуру образующих ядра нуклонов. Однако, в силу того что нуклон в отличие от ядра не имеет резкой границы, отчетливых дифракционных максимумов и минимумов при рассеянии электронов на нуклонах не наблюдается. Опыты по рассеянию электронов дали

возможность изучить распределение заряда в протоне и нейтроне, а также определить их размеры.

В частности, было установлено, что плотность электрического заряда $\rho(r)$ внутри протона меняется с расстоянием r по закону

$$\rho(r) = \rho_0 \exp\left(-\frac{r}{a}\right), \qquad (2.24)$$

где $\rho_0 = 3e/\text{фм}^3$, $a = 0{,}23$ фм; e — заряд электрона.

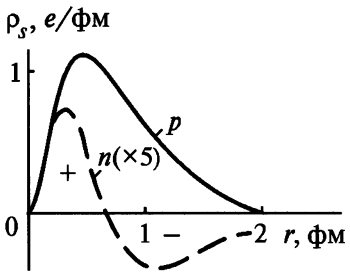


Рис. 2.25. Распределение электрического заряда в протоне (сплошная линия) и нейтроне (пунктирная линия), полученное из опытов по дифракции электронов

Распределение плотности электрического заряда протона p и нейтрона n, установленное в эксперименте по рассеянию быстрых электронов, приведено на рис. 2.25, где изображена зависимость от расстояния r величины $\rho_s = 4\pi r^2 \rho(r)$, которая представляет собой заряд, находящийся в сферическом (шаровом) слое единичной толщины. Результаты исследований показывают, что центральная часть нейтрона заряжена положительно, а периферийная область ($r > 0{,}7$ фм) содержит отрицательный заряд и в итоге суммарный электрический заряд нейтрона, как и следовало ожидать, равен нулю. Такой характер распределения заряда в протоне и нейтроне объясняется кварковым составом этих частиц (см. 7.4).

Соотношение (2.24) позволяет определить среднее значение квадрата радиуса протона:

$$\left\langle r^2 \right\rangle = \frac{\int_0^\infty 4\pi\, r^2 \rho(r)\, r^2 dr}{\int_0^\infty 4\pi\, r^2 \rho(r)\, dr} = 0{,}62 \text{ фм}^2.$$

Отсюда следует, что среднеквадратичный радиус протона $r_{\text{кв}} = \sqrt{\langle r^2 \rangle} \approx 0{,}8$ фм. Размер нейтрона имеет примерно такое же значение.

За свои исследования Р. Хофштадтер был удостоен Нобелевской премии по физике в 1961 г. Его эксперименты продемонстрировали наличие нуклонов внутри ядра и позволили установить их размеры и распределение в них электрического заряда. Они получили название опыта Резерфорда второго поколения. Действительно, в опытах самого Резерфорда по рассеянию α-частиц было обнаружено атомное ядро, а опыты Хофштадтера экспериментально доказали, что атомные ядра состоят из протонов и нейтронов. Об опыте Резерфорда третьего поколения — экспериментах, позволивших обнаружить кварковую структуру нуклонов, — рассказано в 7.4.

3. ОСНОВНЫЕ ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Квантовая механика описывает движение частиц, обладающих волновыми свойствами. Как и любая новая физическая теория, квантовая механика базируется на некоторых постулатах. Правильность этих постулатов может быть подтверждена сравнением предсказаний квантовой механики с результатами экспериментов, в которых нельзя пренебречь волновыми свойствами частиц.

Один из постулатов квантовой механики утверждает, что состояние частицы полностью описывается волновой функцией, имеющей вероятностный смысл и определяющей вероятность нахождения частицы в различных областях пространства. Волновая функция находится из уравнения Шредингера, которое является основным уравнением нерелятивистской квантовой механики.

Квантовая механика принципиально отличается от классической механики в подходе к вопросу о результатах измерений физических величин. Прежде всего, в квантовой механике физические величины могут иметь дискретные спектры значений. Кроме того, результаты измерений физических величин в квантовых системах имеют вероятностный характер. Это означает, что в общем случае при измерениях в квантовой системе с определенной вероятностью может реализоваться одно из нескольких значений наблюдаемой физической величины. Постулаты квантовой механики, базирующиеся на представлении физических величин операторами, с помощью разработанного в этой теории математического аппарата позволяют предсказать результаты измерений наблюдаемых физических величин в квантовых системах с известной волновой функцией.

Многочисленные эксперименты в области микромира подтверждают все выводы квантовой механики.

3.1. Волновая функция

Особенности описания движения частиц в квантовой механике. Согласно гипотезе де Бройля, движущаяся частица обладает волновыми свойствами, и этими свойствами нельзя пренебречь, если длина волны де Бройля $\lambda_Б$ частицы сравнима с характерным размером L области движения частицы или больше его. Как показывают оценки, условие $\lambda_Б \geq L$ выполняется для частиц малых масс, движущихся в областях, размеры которых сравнимы с размерами атомов. Такие частицы в дальнейшем будем называть микрочастицами.

Для описания движения микрочастицы, обладающей волновыми свойствами, не может быть использован способ, разработанный в классической механике, когда состояние частицы определяется ее пространственными координатами и скоростью (импульсом), заданными в данный момент времени. При этом движение частицы связано с изменением во времени ее механического состояния, а непрерывная смена состояний соответствует движению частицы по определенной траектории.

Наличие у микрочастицы волновых свойств, как это следует из соотношений неопределенностей Гейзенберга (2.16), делает невозможным одновременное точное определение координат и импульса микрочастицы. Следовательно, механическое состояние микрочастицы не может быть задано классическим способом, а представление о траектории движения микрочастицы принципиально не может быть использовано для описания ее движения.

Такой отказ от традиционного классического способа описания движения частицы может даже вызвать внутренний протест. Как это частица может двигаться в пространстве, не имея при этом траектории движения? Вероятно, мы просто не можем измерить ряд параметров, которые позволили бы описать траекторию, движения частицы. Еще раз подчеркнем, что это не так. История развития физики показала, что, только отказавшись от классического способа описания движения частицы и от представления о траектории движения, можно правильно и полно описать движение микрочастицы, обладающей волновыми свойствами, и предсказать результаты экспериментов с такими частицами.

Физическая теория, в которой описывается движение частиц, обладающих волновыми свойствами, первоначально получила

название волновой механики. Однако это название вскоре было заменено другим — квантовая механика — так как оказалось, что волновая механика предсказывает дискретный характер, т. е. квантование различных физических величин у движущихся микрочастиц. Именно название "квантовая механика" закрепилось за этой теорией.

Квантовая механика является более общей физической теорией, чем классическая механика. Однако при выполнении условия $\lambda_Б << L$, когда волновыми свойствами частицы можно пренебречь, выводы квантовой механики должны совпадать с результатами классической механики. Этого требует принцип соответствия, утверждающий, что любая более общая физическая теория не должна исключать предыдущую, а должна включать ее как предельный частный случай. Поэтому при описании движения ракеты в космическом пространстве, подводной лодки в глубинах океана и даже при описании движения электрона в электронно-лучевой трубке в физике всегда с успехом будет использоваться классический способ описания механического движения тел. Только при существенном уменьшении пространственных масштабов движений микрочастиц, с которыми имеет дело атомная и ядерная физика, а также физика элементарных частиц, квантовая механика становится единственно возможной теорией описания явлений микромира. Отметим, однако, что, хотя квантовые эффекты проявляются на уровне атомных систем, эти эффекты определяют особенности работы многих современных установок и приборов и лежат в основе передовых нанотехнологий.

Переходя к описанию движения частиц в квантовой механике, сформулируем ряд ее постулатов, лежащих в основе теории.

Первый постулат квантовой механики гласит: состояние частицы в квантовой механике описывается *волновой функцией* $\Psi(x, y, z, t)$, являющейся функцией пространственных координат и времени.

Физико-математический аппарат, разработанный в квантовой механике, позволяет, проводя некоторые операции над волновой функцией Ψ, получать полную информацию о движении микрочастицы.

Вероятностный смысл волновой функции. Невозможность задать состояние микрочастицы указанием в любой момент времени ее координат и скорости и отказ от траекторного способа

описания движения приводят к вероятностному способу описания движения микрочастицы. Это означает, что в квантовой механике, описывая состояние частицы, следует указать способ определения вероятности обнаружения частицы в различных точках пространства в данный момент времени.

В 1926 г. М. Борн так сформулировал вероятностный смысл волновой функции в квантовой механике: квадрат модуля волновой функции $\Psi(x, y, z, t)$ определяет плотность вероятности w того, что в момент времени $t \geq 0$ частица может быть обнаружена в точке пространства $M = M(x, y, z)$ с координатами x, y и z.

Следовательно,

$$w = \frac{dP}{dV} = |\Psi|^2. \tag{3.1}$$

Отметим, что волновая функция в общем случае является комплекснозначной функцией, т. е. содержит действительную и мнимую части. Поэтому физический смысл имеет не сама волновая функция, а ее квадрат модуля $|\Psi|^2$ — действительная величина, которую во многих случаях удобно находить, умножая волновую функцию Ψ на комплексно сопряженную с ней функцию Ψ^*, так как из теории комплексных чисел следует, что $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$.

Преобразуем формулу (3.1) к виду

$$dP = |\Psi|^2 dV = \Psi^*\Psi dV, \tag{3.2}$$

где dP — вероятность того, что для заданного квантового состояния частицы в некоторый момент времени мы обнаружим частицу в элементарном объеме dV, окружающем точку M (рис. 3.1).

При описании движения частиц будем использовать N-мерное ($N = 1, 2, 3$) евклидово пространство $\Re^N$. Обыч-

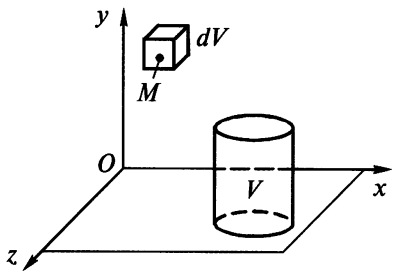


Рис. 3.1. Выделенные объемы в конфигурационном пространстве

но в этом пространстве, которое в физике называют конфигурационным пространством, вводят декартову прямоугольную систему координат. В такой системе координат для одномерного ($N=1$) движения частицы вдоль оси x элемент "объема" $dV=dx$, для двумерного ($N=2$) движения на плоскости $dV=dxdy$, а для трехмерного ($N=3$) движения $dV=dxdydz$. В задачах, описывающих систему с пространственными симметриями, можно использовать также цилиндрическую (r,φ,z) или сферическую (r,θ,φ) систему координат, определяя волновую функцию как функцию этих координат и времени.

Из формулы (3.2) следует, что в заданном квантовом состоянии частицы, описываемом волновой функцией $\Psi(x,y,z,t)$, можно рассчитать также вероятность P того, что частица будет обнаружена в любой области пространства конечного объема V. Действительно, так как

$$P=\int dP=\int\limits_{V} w dV,$$

то из (3.1) и (3.2) следует, что

$$P=\int\limits_{V}\left|\Psi^2\right| dV \text{ или } P=\int\limits_{V}\Psi^*\Psi dV. \qquad (3.3)$$

В квантовой механике формулы (3.1)—(3.3) определяют вероятностный смысл волновой функции. Именно поэтому волновую функцию называют также амплитудой вероятности.

Свойства волновой функции. Если в качестве области пространства в (3.3) взять все пространство $\Re^N$, для которого $V\to\infty$, то обнаружение частицы во всем пространстве является достоверным событием, вероятность которого равна единице. Следовательно, из вероятностного смысла волновой функции вытекает, что

$$\int\limits_{V\to\infty}\left|\Psi\right|^2 dV=1, \text{ или } \int\limits_{\Re^N}\Psi^*\Psi dV=1. \qquad (3.4)$$

Условие (3.4) называют *условием нормировки волновой функции*, а волновую функцию, удовлетворяющую этому условию, — нормированной волновой функцией.

Следует заметить, что в некоторых задачах квантовой механики условие нормировки в виде (3.4) может не выполняться. В таких задачах частица движется из бесконечности и уходит в бесконечность. Поэтому квадрат модуля волновой функции в таких задачах не стремится к нулю на бесконечности, и интеграл в условии (3.4) становится расходящимся. Примером такой волновой функции служит плоская волна де Бройля (2.3), которая является волновой функцией, описывающей квантовое состояние свободно движущейся частицы. При использовании ненормированных волновых функций важно не абсолютное значение квадрата модуля волновой функции, а отношение ее квадратов модулей в двух точках пространства. Это отношение определяет отношение вероятностей обнаружения частицы вблизи этих точек пространства. Следует отметить, что в задачах с ненормированными волновыми функциями некоторый аналог условия нормировки может быть получен с использованием плотности потока вероятности. Определение этой физической величины и описание ее связи с волновой функцией будут даны в 3.3.

Вероятностный смысл волновой функции накладывает определенные ограничения, или условия, на волновые функции в задачах квантовой механики. Эти стандартные условия часто называют *условиями регулярности волновой функции*.

1. Условие конечности волновой функции. Волновая функция не может принимать бесконечных значений, таких, что интегралы в (3.3) и (3.4) станут расходящимися интегралами. Следовательно, это условие требует, чтобы волновая функция была квадратично интегрируемой функцией. В частности, в задачах с нормированной волновой функцией квадрат модуля волновой функции должен стремиться к нулю на бесконечности.

2. Условие однозначности волновой функции. Волновая функция должна быть однозначной функцией координат и времени, так как плотность вероятности обнаружения частицы должна определяться в каждой задаче однозначно. В задачах с использованием цилиндрической или сферической системы координат условие однозначности приводит к периодичности волновых функций по угловым переменным.

3. Условие непрерывности волновой функции. В любой момент времени волновая функция должна быть непрерывной функцией пространственных координат. Кроме того, непрерывными должны быть также частные производные волновой функции $\frac{\partial\Psi}{\partial x}$, $\frac{\partial\Psi}{\partial y}$ и $\frac{\partial\Psi}{\partial z}$. Эти частные производные волновой функции лишь в редких случаях задач с идеализированными силовыми полями могут терпеть разрыв в тех точках пространства, где потенциальная функция, описывающая силовое поле, в котором движется частица, испытывает разрыв второго рода.

Принцип суперпозиции квантовых состояний. Сформулируем одно из важных свойств квантовых состояний, которое формально является следствием линейности уравнения Шредингера для волновой функции (см. 3.2). Из линейности этого уравнения следует, что если частица может находиться в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией Ψ_1, а также в другом квантовом состоянии, описываемом волновой функцией Ψ_2, то эта частица может также находиться в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2, \tag{3.5}$$

где C_1 и C_2 — в общем случае комплексные числа.

Очевидно, что можно говорить и о суперпозиции (сложении) любого числа квантовых состояний, т. е. о существовании квантового состояния частицы, которое описывается волновой функцией

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + \ldots + C_N\Psi_N = \sum_{n=1}^{N} C_n\Psi_n. \tag{3.6}$$

В таком состоянии квадрат модуля коэффициента C_n определяет вероятность того, что при измерении мы обнаружим частицу в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией Ψ_n. Поэтому для нормированных волновых функций $\sum_{n=1}^{N}|C_n|^2 = 1$.

Квантово-механический принцип суперпозиции состояний не имеет аналога в классической механике. Действительно, в классической теории свободная частица в данный момент времени движется в пространстве в определенном направлении. А куда движется квантовая частица, состояние которой описывается волновой функцией, являющейся суперпозицией двух плоских волн де Бройля,

$$\Psi(x,t)=\left(C_1e^{\frac{i}{\hbar}px}+C_2e^{-\frac{i}{\hbar}px}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\ ?$$

Такая частица одновременно движется и вправо вдоль оси x и влево. С точки зрения классической механики такой ответ абсурден. С позиций квантовой механики это означает, что при проведении серии опытов по определению направления движения частицы, находящейся в таком квантовом состоянии, с вероятностью $P_1 \sim |C_1|^2$ будет получен ответ, что частица движется вправо вдоль оси x, а с вероятностью $P_2 \sim |C_2|^2$ — что частица движется влево.

Точно также в состоянии, являющемся суперпозицией двух плоских волн де Бройля, распространяющихся в направлениях вдоль осей x и y, когда

$$\Psi(x,y,t)=\left(C_1e^{\frac{i}{\hbar}px}+C_2e^{\frac{i}{\hbar}py}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}Et},$$

нет однозначного ответа на вопрос: “Куда движется частица?”. Ответ, что частица движется и в направлении оси x и в направлении оси y не означает, что она движется вдоль биссектрисы угла между осями x и y. Этот ответ означает, что частица с некоторой вероятностью движется вдоль оси x, а с некоторой вероятностью — вдоль оси y. Такой результат будет получен в серии измерений направления движения частицы.

Столь необычный ответ квантовой механики, казалось бы, на простой вопрос не является чисто теоретическим абстрактным результатом. В связи с этим отметим, например, что в современных информационных технологиях, разрабатывающих квантовые компьютеры, возможно использование не только логического элемента с двумя состояниями “0” и “1”, но и элементов, которые

могут находиться в состояниях суперпозиции нуля и единицы с некоторыми вероятностями. Такие элементы существенно изменяют принцип работы компьютера и позволяют создавать алгоритмы, значительно повышающие быстродействие и эффективность переработки информации.

Возможность существования состояний, в которых данная физическая величина не имеет определенного значения и которые являются результатом суперпозиции состояний с определенными значениями этой величины, есть характерная черта квантовой механики, принципиально отличающая ее от классической механики. Описать состояние квантовой суперпозиции одной частицы на языке классической механики невозможно. Поэтому не следует рассматривать системы, в которых формально объединены как классические, так и квантовые объекты. Такие системы некорректны для исследования, так как в них обнаруживаются неразрешимые противоречия. Одно из таких противоречий демонстрирует предложенный Э. Шредингером парадокс, который получил название "*парадокса кошки*".

Пусть в замкнутой системе (рис. 3.2), которая ограничена некоторым непроницаемым "ящиком", находится кошка. На кошку направлен ствол заряженного пулей ружья. Перед нами система, содержащая классические объекты. Запустим теперь в этот ящик движущуюся микрочастицу, обладающую волновыми свойствами. При попадании этой квантовой частицы в курок ружья, ружье стреляет, и кошка погибает.

Пусть наша частица может находиться в первом квантовом состоянии, описываемом волновой функцией Ψ_1, и пусть в этом состоянии вероятность обнаружить частицу в области вблизи курка равна нулю. Это означает, что если микрочастица находится в первом квантовом состоянии, то кошка в ящике жива.

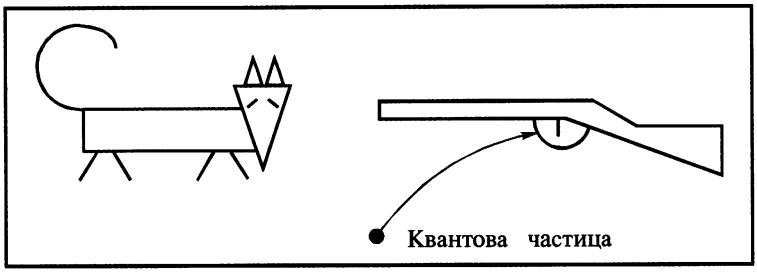


Рис. 3.2. К "парадоксу кошки" Э. Шредингера

Есть другое состояние частицы, описываемое волновой функцией Ψ_2. В этом квантовом состоянии вероятность нахождения частицы в области вблизи курка ружья велика и практически равна единице. Не удивительно, что если частица находится во втором состоянии, то кошка мертва.

Согласно принципу суперпозиции состояний, микрочастица может находиться и в состоянии, которое является суперпозицией первого и второго состояний и описывается волновой функцией

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_2. \qquad (3.7)$$

Тот факт, что частица в таком состоянии с равной вероятностью может быть обнаружена либо в первом состоянии, либо во втором возражений не вызывает. Однако, естественно, возникает коварный вопрос. Жива или мертва кошка в состоянии микрочастицы, описываемом волновой функцией (3.7)? Ведь кошка не может находиться в состоянии, которое является суперпозицией жизни и смерти, т. е. не может быть ни живой, ни мертвой. Так жива или мертва кошка? Ведь если мы откроем ящик, то однозначно увидим, что кошка или жива, или мертва. И если она мертва, то когда это произошло? Ведь до открытия ящика однозначного ответа, что кошка мертва, не могло быть. Неужели мы убили кошку тем, что открыли ящик? На все поставленные вопросы нет ответов только потому, что была рассмотрена некорректная система, которая формально объединяла классические и квантовые объекты.

□ **Задача 3.1.** Волновая функция, описывающая состояние микрочастицы, движущейся в сферически симметричном силовом поле с расстоянием r от центра, имеет вид

$$\Psi(r,\ t) = A\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right).$$

Здесь r — расстояние от силового центра; a — известная постоянная; E — полная энергия частицы, не зависящая от времени t.

Определите: а) значение постоянного множителя A; б) наиболее вероятное расстояние частицы от силового центра. ▽

Решение. а. Значение постоянной A найдем из условия нормировки волновой функции (3.4), выбирая в качестве элементарного объема объем шарового слоя радиусов от r до $r+dr$. Объем такого слоя $dV = 4\pi r^2 dr$. Условие нормировки приводит к соотношению

$$\int_0^\infty \left|\Psi(r,\, t)^2\right| 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) r^2 dr = 1.$$

Вычисляя интеграл

$$I = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) r^2 dr = \frac{a^3}{4},$$

из условия нормировки находим

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}.$$

б. Наиболее вероятное расстояние частицы от силового центра найдем, записав вероятность нахождения частицы на расстоянии r от центра, точнее, в выделенном шаровом слое. Эта вероятность равна

$$dP = \left|\Psi\right|^2 4\pi r^2 dr = f(r)\, dr,$$

где

$$f(r) = \frac{4r^2}{a^3} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right).$$

Приравняв производную $\dfrac{df}{dr}$ нулю, найдем экстремальную точку $r = a$, где функция f достигает максимума. Именно на расстоянии $r = a$ от силового центра в заданном квантовом состоянии наиболее вероятно обнаружить частицу. Это расстояние со временем не изменяется. ■

Задача 3.2. В момент времени $t = 0$ волновая функция, описывающая квантовое состояние частицы, движущейся вдоль оси x, имеет вид

$$\Psi(x,\, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ibx\right),$$

где A, a и b — известные действительные константы.

Определите зависимости от координаты x: а) действительной части волновой функции; б) квадрата модуля волновой функции.

Решение. а. Найдем действительную часть волновой функции:

$$\mathrm{Re}\,\Psi = \mathrm{Re}\left[A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)\exp(ibx)\right] = A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)\mathrm{Re}\{\exp(ibx)\}.$$

По формуле Эйлера, согласно теории комплексных чисел, получаем

$$\mathrm{Re}\,\Psi = A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)\cos bx.$$

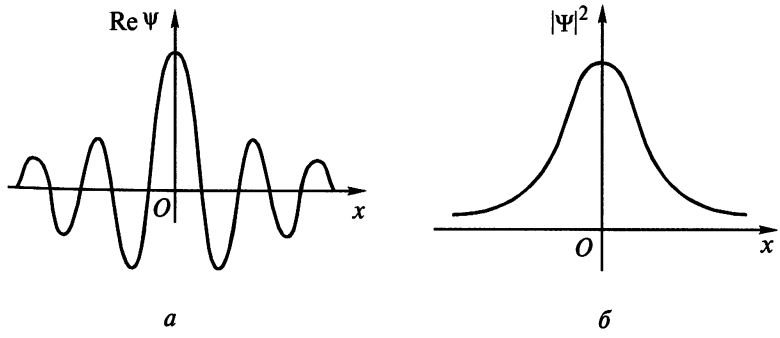
б. Определим квадрат модуля волновой функции:

$$|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi = A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2} - ibx\right)A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ibx\right).$$

Отсюда

$$|\Psi|^2 = A^2\exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right).$$

Качественный вид найденных зависимостей представлен на рис. 3.3.



а *б*

Рис. 3.3. Координатные зависимости действительной части волновой функции (*а*) и квадрата ее модуля (*б*)

3.2. Уравнение Шредингера

Как, зная структуру силового поля, в котором движется частица, определить волновую функцию, описывающую квантово-механическое состояние этой частицы? Как, зная волновую функцию в начальный момент времени, описать эволюцию волновой функции во времени? Ответы на эти вопросы дает основное уравнение нерелятивистской квантовой механики, сформулированное Э. Шредингером в 1926 г.

Общее *временно́е уравнение Шредингера* позволяет определить в любой момент времени волновую функцию Ψ для частицы массой m_0, движущейся в силовом поле $\vec{F} = -\mathrm{grad}U$, описываемом скалярной потенциальной функцией $U(x,y,z,t)$. Это уравенние имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\Psi + U\Psi. \qquad (3.8)$$

Здесь $i = \sqrt{-1}$ — мнимая единица, а $\hbar$ — рационализированная постоянная Планка. Стандартным символом Δ в (3.8) обозначен дифференциальный оператор Лапласа, который в декартовой прямоугольной системе координат определяется следующим образом:

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \qquad (3.9)$$

В общем случае в задачах квантовой механики дифференциальное уравнение в частных производных (3.8) должно решаться с учетом определенных начальных и граничных условий на волновую функцию. Начальное условие задает значение волновой функции в начальный момент времени $t = 0$. Граничные условия являются следствием регулярности волновой функции, обеспечивая, в частности, ее непрерывность. Эти условия формулируются на границах областей, где потенциальная функция U терпит разрывы первого или второго рода. К граничным условиям относятся также условия на волновую функцию в бесконечно удаленных точках пространства, которые обеспечивают выполнение условия нормировки (3.4).

Уравнение Шредингера, как и законы классической механики Ньютона, законы термодинамики, уравнения электродинамики Максвелла и другие основные физические уравнения, не может быть выведено. Его следует рассматривать как некоторое научное положение, справедливость которого подтверждается данными экспериментов. Такое согласие теории с опытом установлено для большого числа явлений в атомной и ядерной физике. Квантовые эффекты, предсказанные с помощью уравнения Шредингера, лежат в основе работы многих технических устройств и приборов, а также широко используются в современных технологиях.

Уравнение Шредингера тесно связано с гипотезой де Бройля и вытекающим из нее корпускулярно-волновым дуализмом материи. Действительно, легко убедиться, что для свободной частицы, с кинетической энергий $E = \dfrac{p^2}{2m_0}$, движущейся в отсутствие силовых полей ($U = 0$, $\vec{F} = 0$) в направлении оси x, решением соответствующего уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \tag{3.10}$$

является волновая функция

$$\Psi(x,t) = A \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right], \tag{3.11}$$

соответствующая плоской волне де Бройля. Этот факт позволяет утверждать, что и в общем случае уравнение Шредингера, описывающее движение микрочастицы, имеет волновые решения. Линейность этого уравнения обусловливает принцип суперпозиции квантовых состояний, физическое содержание которого обсуждалось в 3.1.

Уже указывалось, что квантовая механика содержит в себе классическую механику как некоторый предельный случай. Значит, соответствующий предельный переход можно осуществить и в основном уравнении квантовой механики. Уравнение Шредингера после такого предельного преобразования должно перейти в основное уравнение классической механики.

Связь между квантовой и классической механикой аналогична связи между волновой и геометрической оптикой. В обоих случаях переход от одной теории к другой соответствует переходу от относительно больших длин волн (частицы или излучения) к малым длинам волн, если их сравнивать с характерным размером L области неоднородности силового поля или оптических свойств среды. Проиллюстрируем это следующим образом:

Волновая оптика	Квантовая механика
$\lambda \geq L$	$\lambda_Б \geq L$
Геометрическая оптика	Классическая механика
$\lambda << L$	$\lambda_Б << L$

В таком сравнении теорий траектория движения классической частицы является аналогом светового луча в геометрической оптике.

Формально малость длины волны де Бройля для частицы можно обеспечить, считая квант действия $\hbar$ некоторым параметром задачи и осуществляя предельный переход $\hbar \to 0$ по этому параметру. Действительно, по формуле де Бройля (2.2) при $\hbar \to 0$ длина волны де Бройля также стремится к нулю. Поэтому переход от квантовой теории к классической в уравнении Шредингера (3.8) можно осуществить, выполняя в нем предельный переход $\hbar \to 0$. В курсах теоретической физики анализируются результаты такого предельного перехода и доказывается, что при $\hbar \to 0$ общее временно́е уравнение Шредингера (3.8) переходит в уравнение Гамильтона — Якоби классической механики.

Следует отметить, что с помощью волновых функций, найденных из решений уравнения Шредингера, можно описывать квантовые состояния только нерелятивистских частиц, которые движутся со скоростями, намного меньшими скорости света в вакууме. Переход к релятивистским скоростям частиц в квантовой механике был впервые осуществлен для электрона П. Дираком в 1928 г. При этом были использованы принципиально новые физические идеи для описания квантовых состояний релятивистских частиц, что привело к созданию релятивистской квантовой механики. В основе этой теории лежит уравнение Дирака, которое обобщает уравнение Шредингера и в настоящее время широко используется в квантовой электродинамике и теории элементарных частиц.

3.3. Вектор плотности потока вероятности

Уравнение Шредингера учитывает свойства симметрии пространства и времени. Поэтому из основного уравнения квантовой механики могут быть получены такие общие законы, как закон сохранения массы, закон сохранения заряда и другие законы сохранения. Чтобы показать это, выделим в пространстве некоторый объем V, ограниченный замкнутой поверхностью S. В квантовом состоянии с заданной волновой функцией Ψ вероятность P нахождения частицы в рассматриваемом объеме определяется как

$$P = \int_V |\Psi|^2 \, dV.$$

Если эта вероятность изменяется со временем, то следует предположить наличие потока вероятности П через поверхность S, который и приводит к изменению вероятности P:

$$\frac{dP}{dt} = \Pi. \tag{3.12}$$

Считая поток вероятности П распределенным по всей поверхности S, введем вектор плотности потока вероятности $\vec{j}$, который определим интегральным соотношением

$$\Pi = -\oint_S \vec{j} \, \vec{dS}. \tag{3.13}$$

Здесь $\vec{dS} = dS\vec{n}$, где $\vec{n}$ — единичный вектор внешней нормали. Знак минус в правой части (3.13) соответствует естественному предположению о росте вероятности P при поступлении в объем V извне потока вероятности и убывании P при изменении направления вектора $\vec{j}$ на поверхности S.

Из (3.12) и (3.13) получаем для скорости изменения вероятности интегральное соотношение

$$\frac{dP}{dt} = -\oint_S \vec{j}\,\vec{dS}. \tag{3.14}$$

С помощью теоремы Остроградского

$$\oint_S \vec{j}\,\vec{dS} = \int_V \operatorname{div}\vec{j}\,dV$$

соотношение (3.14) можно преобразовать к виду

$$\int_V \left(\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} \right) dV = 0. \tag{3.15}$$

Отсюда в силу произвольности объема V следует уравнение непрерывности для поля вероятности в дифференциальной форме

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} = 0. \tag{3.16}$$

Первое слагаемое в (3.16) можно представить в виде

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\Psi\right) = \Psi\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t}. \tag{3.17}$$

Так как волновая функция Ψ является решением уравнения Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\Psi + U\Psi, \tag{3.18}$$

то комплексно сопряженная функция Ψ^* удовлетворяет уравнению

$$-i\hbar\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\Psi^* + U\Psi^*. \tag{3.19}$$

После умножения (3.18) на Ψ^*, а (3.19) на Ψ вычтем из первого соотношения второе. Тогда

$$i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)=\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\Psi\Delta\Psi^*-\Psi^*\Delta\Psi\right). \qquad (3.20)$$

Подставив (3.20) в правую часть формулы (3.17), получим

$$\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t}=-\frac{i\hbar}{2m_0}\left(\Psi\Delta\Psi^*-\Psi^*\Delta\Psi\right). \qquad (3.21)$$

Теперь, используя известные формулы векторного анализа, запишем два следующих равенства:

$$\operatorname{div}\left(\Psi\operatorname{grad}\Psi^*\right)=\operatorname{grad}\Psi^*\operatorname{grad}\Psi+\Psi\Delta\Psi^*$$

и

$$\operatorname{div}\left(\Psi^*\operatorname{grad}\Psi\right)=\operatorname{grad}\Psi\operatorname{grad}\Psi^*+\Psi^*\Delta\Psi.$$

Отсюда получаем соотношение

$$\operatorname{div}\left(\Psi\operatorname{grad}\Psi^*-\Psi^*\operatorname{grad}\Psi\right)=\Psi\Delta\Psi^*-\Psi^*\Delta\Psi,$$

с помощью которого преобразуем (3.21) к виду

$$\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t}+\operatorname{div}\left[\frac{i\hbar}{2m_0}\left(\Psi\operatorname{grad}\Psi^*-\Psi^*\operatorname{grad}\Psi\right)\right]=0. \qquad (3.22)$$

Сравнив (3.22) с (3.16), запишем выражение для *плотности потока вероятности*:

$$\vec{j}=\frac{i\hbar}{2m_0}\left(\Psi\operatorname{grad}\Psi^*-\Psi^*\operatorname{grad}\Psi\right). \qquad (3.23)$$

Учитывая, что $\operatorname{grad}\Psi \equiv \nabla\Psi$, представим (3.23) в более компактной форме:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m_0}\left(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi\right). \qquad (3.24)$$

Отметим, что в задачах квантовой механики с ненулевым значением плотности потока вероятности можно считать, что рассматриваемая частица движется в потоке таких же частиц, которые независимо друг от друга взаимодействуют с силовым полем. В такой интерпретации задачи следует принять, что модуль вектора $\vec{j}$ характеризует число частиц, пересекающих единичную поверхность, перпендикулярную направлению вектора $\vec{j}$, за единицу времени.

В этом случае соотношения (3.14) и (3.16) можно рассматривать как законы сохранения числа частиц, записанные в интегральной и дифференциальной формах.

Если уравнение (3.16) умножить на массу частицы m_0, то величины $\rho_m = m_0|\Psi|^2$ и $\vec{j}_m = m_0\vec{j}$ приобретают смысл плотности и потока массы вещества, движущегося в пространстве, а само уравнение (3.16) переходит в известное в механике сплошных сред уравнение непрерывности

$$\frac{\partial\rho_m}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j}_m = 0. \qquad (3.25)$$

Аналогично, если движущиеся частицы несут заряд q, то величины $\rho_q = q|\Psi|^2$ и $\vec{j}_q = q\vec{j}$ можно трактовать как объемную плотность заряда и плотность электрического тока. Тогда после умножения на q уравнение (3.16) преобразуется в известный в электродинамике закон сохранения заряда в дифференциальной форме:

$$\frac{\partial\rho_q}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j}_q = 0. \qquad (3.26)$$

Задача 3.3. Рассчитайте плотность потока вероятности в задаче о свободно движущейся частице, квантовое состояние которой описывается плоской волной де Бройля

$$\Psi(x, t) = A\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right].$$

Решение. Записав комплексно сопряженную волновую функцию

$$\Psi^*(x, t) = A\exp\left[+\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right],$$

найдем отличные от нуля компоненты градиентов:

$$(\mathrm{grad}\,\Psi)_x = \frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar}\Psi,$$

$$\left(\mathrm{grad}\,\Psi^*\right)_x = \frac{\partial\Psi^*}{\partial x} = \frac{-ip}{\hbar}\Psi^*.$$

Теперь по формуле (3.23) определим составляющую вектора плотности потока вероятности вдоль оси x:

$$j_x = \frac{p}{m_0}\Psi\Psi^* = \frac{p}{m_0}A^2 = \frac{\mathrm{k}\hbar}{m_0}A^2.$$

Здесь $\mathrm{k} = \dfrac{p}{\hbar} = \dfrac{2\pi}{\lambda_Б}$ — волновое число.

Таким образом, для движущейся свободной частицы плотность потока вероятности пропорциональна квадрату амплитуды волны де Бройля. Отсюда следует, что волновую функцию свободной частицы можно нормировать, полагая $j_x = 1$. В этом случае амплитуда волны де Бройля

$$A = \sqrt{\frac{m_0}{p}} = \sqrt{\frac{1}{v}},$$

где p — импульс; v — скорость движущейся частицы.

3.4. Представление физических величин операторами

Как, зная волновую функцию, предсказать результат измерения какой-либо физической величины у частицы, находящейся в рассматриваемом квантовом состоянии? Для получения информации о физических величинах, связанных с движущейся частицей, в квантовой механике разработан специальный математический аппарат, в котором используют операторы физических величин и результаты их действия на волновые функции.

В работах М. Борна, П. Дирака и других ученых был сформулирован *второй постулат квантовой механики*, утверждающий, что каждой физической величине соответствует определенный оператор этой физической величины. При этом соотношения между операторами в квантовой механике имеют ту же структуру, что и соотношения между соответствующими им физическими величинами в классической механике.

Для расшифровки этого постулата дадим некоторые пояснения. Оператор — это математическое правило, следуя которому мы можем преобразовать одну функцию в другую. Задать оператор — значит определить рецепт этого преобразования. Такое преобразование может быть простым умножением исходной функции на число или известную функцию, дифференцированием функции, перестановкой аргументов функции и др.

В квантовой механике в качестве символа соответствующего оператора используется классическое обозначение физической величины со "шляпкой" над буквой в виде значка "$\wedge$". Например, $\hat{x}$ — это оператор координаты x, $\hat{p}_x$ — оператор проекции импульса на ось x, $\hat{U}$ — оператор потенциальной энергии и т. д. Оператор предполагается действующим на написанную за ним функцию. В качестве таких функций в квантовой механике выступают волновые функции. При этом равенство двух функций $\hat{A}\Psi = \hat{B}\Psi$ в операторной форме будет записываться как равенство операторов: $\hat{A} = \hat{B}$.

Определим операторы основных физических величин в квантовой механике.

1. *Оператор координаты*. Действие этого оператора на волновую функцию сводится к умножению ее на соответствующую координату, т. е.

$$\hat{x}\Psi = x\Psi, \quad \hat{y}\Psi = y\Psi, \quad \hat{z}\Psi = z\Psi. \tag{3.27}$$

В символической операторной форме записи этих операций имеют вид

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z. \tag{3.28}$$

Объединяя эти формулы, можно ввести векторный оператор $\hat{\vec{r}}$, соответствующий радиус-вектору $\vec{r}$ в классической механике. Такой оператор формально рассматривается как некоторый вектор, имеющий в качестве компонент в декартовой прямоугольной системе координат операторы $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$. Поэтому

$$\hat{\vec{r}} = \vec{e}_x \hat{x} + \vec{e}_y \hat{y} + \vec{e}_z \hat{z}. \tag{3.29}$$

Здесь $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ — единичные орты координатных осей.

2. *Оператор импульса.* С помощью операций дифференцирования по координатам определим операторы проекций импульса, записав эти определения в символической операторной форме:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \tag{3.30}$$

Все эти три формулы можно объединить в одну, введя векторный оператор импульса $\hat{\vec{p}} = \vec{e}_x \hat{p}_x + \vec{e}_y \hat{p}_y + \vec{e}_z \hat{p}_z$, который с учетом (3.30) запишем как

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla. \tag{3.31}$$

Здесь

$$\nabla = \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z}.$$

Используя соотношение классической механики

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = p_x p_x + p_y p_y + p_z p_z,$$

определим оператор квадрата импульса

$$\hat{p}^2 = (\hat{p}_x)^2 + (\hat{p}_y)^2 + (\hat{p}_z)^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right). \qquad (3.32)$$

Используя символ оператора Лапласа, представим (3.32) в более компактном виде:

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta. \qquad (3.33)$$

3. *Оператор момента импульса.* Согласно формуле классической механики, определяющей момент импульса частицы как вектор $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, запишем выражения для его проекций на координатные оси:

$$L_x = yp_z - zp_y, \; L_y = zp_x - xp_z, \; L_z = xp_y - yp_x.$$

Эти соотношения превратим в операторные, определяющие операторы проекций момента импульса:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \qquad (3.34)$$

Оператор квадрата момента импульса можно построить по правилу

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x\hat{L}_x + \hat{L}_y\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_z. \qquad (3.35)$$

Отметим, что задачи квантовой механики, описывающие системы со сферической симметрией, удобнее решать не в декартовой

прямоугольной, а в сферической системе координат (r, θ, φ). Переходя от декартовых координат к сферическим по обычным правилам замены переменных $x = r\sin\theta\cos\varphi$, $y = r\sin\theta\sin\varphi$, $z = r\cos\theta$, формулы (3.34) и (3.35) преобразуем к следующему виду:

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \qquad (3.36)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad , \quad \hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}.$$

Здесь

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad —$$

угловая часть оператора Лапласа в сферической системе координат.

4. *Операторы энергий.* Классическая формула связи кинетической энергии частицы с квадратом ее импульса $E_к = p^2/(2m_0)$ позволяет записать аналогичное соотношение между соответствующими операторами. Поэтому

$$\hat{E}_к = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta. \qquad (3.37)$$

Если частица движется в стационарном силовом поле и ее потенциальная энергия $U = U(x, y, z)$ определена в любой точке пространства, то оператор потенциальной энергии $\hat{U}$ определяется как оператор умножения на функцию U, т. е.

$$\hat{U}\cdot\Psi = U\cdot\Psi \quad \text{или} \quad \hat{U} = U. \qquad (3.38)$$

Так как полная энергия частицы в классической механике есть сумма кинетической и потенциальной энергий, то в квантовой механике оператор полной энергии $\hat{H}$ определяется как сумма операторов кинетической и потенциальной энергий. Поэтому

$$\hat{H} = \hat{E}_{\text{к}} + \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + U.$$

Подставляя выражение для оператора квадрата импульса из формулы (3.33), запишем оператор полной энергии как

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + U(x, y, z). \tag{3.39}$$

В классической механике полную энергию частицы, выраженную через ее координаты и импульс, называют функцией Гамильтона. Поэтому в квантовой механике оператор полной энергии $\hat{H}$ называют оператором функции Гамильтона или просто *гамильтонианом*.

Гамильтониан $\hat{H}$ является основным оператором квантовой механики, поскольку, выбирая конкретный вид гамильтониана с учетом силового поля, действующего на частицу, мы формулируем на математическом языке все особенности квантовой системы. Поэтому и основное уравнение нерелятивистской квантовой механики — уравнение Шредингера (3.8) — может быть записано в операторной форме, содержащей гамильтониан $\hat{H}$:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \tag{3.40}$$

Заметим, что формула (3.39) определяет гамильтониан квантовой системы и в том случае, когда силовое поле является нестационарным, т. е. $U = U(x, y, z, t)$, а $\vec{F} = -\text{grad}\, U$.

Однако эту формулу нельзя применить, если на частицу действует сила, зависящая от скорости частицы. К такому типу сил относится, в частности, сила Лоренца, действующая на движущуюся в электромагнитном поле заряженную частицу. Если такое поле

характеризуется скалярным φ и векторным $\vec{A}$ потенциалами, то гамильтониан в уравнении Шредингера (3.40) следует записать в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0}\left(\hat{\vec{p}} - q\hat{\vec{A}}\right)^2 + q\hat{\varphi} + \hat{U}.$$

Здесь q — заряд частицы, а векторный оператор $\hat{\vec{A}} = \vec{A}(x, y, z, t)$ и скалярный оператор $\hat{\varphi} = \varphi(x, y, z, t)$ являются операторами умножения на эти функции.

Физическое содержание операторного метода в квантовой механике накладывает определенные ограничения на возможный вид квантово-механических операторов. Пусть $\hat{\Phi}$ — оператор физической величины f. Тогда для любых функций Ψ_1 и Ψ_2 и произвольных постоянных C_1 и C_2 должно выполняться равенство

$$\hat{\Phi}\left(C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2\right) = C_1\hat{\Phi}\Psi_1 + C_2\hat{\Phi}\Psi_2. \qquad (3.41)$$

Операторы, обладающие таким свойством, называются линейными операторами. Свойство линейности операторов физических величин тесно связано с принципом суперпозиции квантовых состояний. Использование в теории линейных операторов не нарушает этого принципа.

Оператором физической величины может быть только *линейный самосопряженный* (*эрмитов*) *оператор*. Такому оператору, как показано в 3.5, соответствует действительная (не комплексная) физическая величина. Самосопряженным называют оператор, который совпадает со своим сопряженным оператором. В этом случае для произвольных функций Ψ_1 и Ψ_2 тождественно выполняется следующее интегральное равенство

$$\int_{\Re^N} \Psi_1^*\left(\hat{\Phi}\Psi_2\right) dV = \int_{\Re^N} \Psi_2\left(\hat{\Phi}\Psi_1\right)^* dV. \qquad (3.42)$$

Таким образом, каждой физической величине в квантовой механике ставится в соответствие определенный линейный самосопряженный оператор. Непосредственной проверкой можно убедиться, что все определенные выше квантово-механические операторы обладают такими свойствами.

□ **Задача 3.4.** Проверьте условие самосопряженности оператора проекции импульса $\hat{p}_x$.

Решение. Рассмотрим две нормированные волновые функции $\Psi_1(x,t)$ и $\Psi_2(x,t)$, удовлетворяющие стандартным условиям регулярности и, в частности, условиям на бесконечности: $\Psi_{1,2}(-\infty, t) = \Psi_{1,2}(+\infty, t) = 0$. С помощью интегрирования по частям находим, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*(\hat{p}_x\Psi_2)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial x}\right)dx =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\Psi_1^*\Psi_2\Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2\left(i\hbar\frac{\partial\Psi_1^*}{\partial x}\right)dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial x}\right)^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2(\hat{p}_x\Psi_1)^*\,dx.$$

Таким образом, мы доказали, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*(\hat{p}_x\Psi_2)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2(\hat{p}_x\Psi_1)^*\,dx.$$

В соответствии с (3.42) это и доказывает для одномерного случая $(N=1)$ самосопряженность оператора $\hat{p}_x$. Для $N=2$ и $N=3$ доказательство выполняется аналогично. ■

□ **Задача 3.5.** Определите z-проекцию оператора момента импульса L_z ▽ в сферической системе координат.

Решение. Используя формулы связи декартовой прямоугольной и сферической систем координат

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta,$$

запишем вытекающие из них соотношения

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2, \quad x^2 + y^2 = r^2\sin^2\theta, \quad y = x\,\mathrm{tg}\varphi.$$

Дифференцируя эти формулы, находим

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\varphi, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin\theta\sin\varphi,$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{y\cos^2\varphi}{x^2} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}, \quad \frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{\cos^2\varphi}{x} = \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta},$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{\cos\varphi\cos\theta}{r}, \quad \frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{\sin\varphi\cos\theta}{r}.$$

Так как

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta},$$

то

$$\hat{L}_z = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) = i\hbar\left[\left(y\frac{\partial r}{\partial x} - x\frac{\partial r}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial r} + \right.$$

$$\left. + \left(y\frac{\partial\varphi}{\partial x} - x\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi} + \left(y\frac{\partial\theta}{\partial x} - x\frac{\partial\theta}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial\theta}\right].$$

▽ Подставляя найденные значения производных, находим, что

$$\left(y\frac{\partial r}{\partial x}-x\frac{\partial r}{\partial y}\right)=\left(y\frac{\partial \theta}{\partial x}-x\frac{\partial \theta}{\partial y}\right)=0,$$

$$\left(y\frac{\partial \varphi}{\partial x}-x\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)=-1.$$

Следовательно,

$$\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

■

3.5. Собственные функции и собственные значения операторов

Основные свойства собственных функций. Значения, которые может принимать данная физическая величина f, называют в квантовой механике ее собственными значениями. Нахождение таких значений тесно связано с математической задачей определения собственных функций и соответствующих им собственных значений оператора $\hat{\Phi}$.

Если при действии оператора на некоторую функцию получается та же самая функция, умноженная на число, т. е. если

$$\hat{\Phi}\Psi=f\Psi, \tag{3.43}$$

то такую функцию называют собственной функцией оператора $\hat{\Phi}$, а число f — его собственным значением.

Квантово-механические операторы имеют не одну, а множество собственных функций и соответствующих им собственных значений. При этом совокупность собственных значений называют спектром оператора. Спектр оператора $\hat{\Phi}$ считается дискретным, если он состоит из счетного множества значений f_n для $n=1,\ 2,\ \ldots,$ соответствующих набору собственных функций Ψ_n, которые представляют собой регулярные решения уравнения вида

$$\hat{\Phi}\Psi_n = f_n\Psi_n, \quad n=1,\ 2,\ \ldots \tag{3.44}$$

Спектр собственных значений оператора может быть либо непрерывным, когда в (3.43) f может принимать все возможные значения, либо состоящим из отдельных полос (интервалов), таких, что значения f лежат в ряде интервалов.

В некоторых случаях одному собственному значению f_n оператора $\hat{\Phi}$ принадлежит не одна, а несколько собственных функций $\Psi_{n1}, \Psi_{n2}, ..., \Psi_{nk}$. Такие случаи называются вырожденными, а число k таких функций называется кратностью вырождения.

Из (3.43) следует, что собственные функции, вообще говоря, определены с точностью до некоторой постоянной, значение которой обычно выбирают из условия нормировки собственных функций.

Докажем, что собственные числа операторов физических величин в квантовой механике всегда являются действительными числами и это свойство обусловлено самосопряженностью операторов. Действительно, пусть $\hat{\Phi}$ — самосопряженный оператор, а Ψ — его собственная функция, соответствующая собственному значению f. По определению, функция Ψ является решением уравнения

$$\hat{\Phi}\Psi = f\Psi. \tag{3.45}$$

Выполнив операцию комплексного сопряжения, получим

$$\left(\hat{\Phi}\Psi\right)^* = f^*\Psi^*. \tag{3.46}$$

Если в соотношении (3.42), которое для самосопряженного оператора выполняется тождественно, положить $\Psi_1 = \Psi_2 = \Psi$, то в результате получим интегральное соотношение

$$\int_{\Re^N} \Psi^*\left(\hat{\Phi}\Psi\right)dV = \int_{\Re^N} \Psi\left(\hat{\Phi}\Psi\right)^* dV, \tag{3.47}$$

которое с учетом (3.45) и (3.46) можно преобразовать к виду

$$f \int_{\Re^N} \Psi^* \Psi dV = f^* \int_{\Re^N} \Psi \Psi^* dV. \qquad (3.48)$$

Отсюда следует, что $f = f^*$, т. е собственные значения самосопряженных операторов всегда являются действительными числами.

Докажем важное свойство ортогональности собственных функций квантово-механических операторов. Пусть Ψ_n и Ψ_m — две собственные функции самосопряженного оператора $\hat{\Phi}$, соответствующие различным собственным значениям f_n и f_m, тогда они являются решениями следующих уравнений:

$$\hat{\Phi}\Psi_n = f_n \Psi_n \quad \text{и} \quad \hat{\Phi}\Psi_m = f_m \Psi_m. \qquad (3.49)$$

Условие (3.42) самосопряженности оператора $\hat{\Phi}$, записанное для функций Ψ_n и Ψ_m, принимает вид

$$\int_{\Re^N} \Psi_n^* \left(\hat{\Phi}\Psi_m\right) dV = \int_{\Re^N} \Psi_m \left(\hat{\Phi}\Psi_n\right)^* dV. \qquad (3.50)$$

Отсюда с учетом (3.49) получаем

$$f_m \int_{\Re^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = f_n^* \int_{\Re^N} \Psi_m \Psi_n^* dV. \qquad (3.51)$$

Так как для самосопряженного оператора $f_n = f_n^*$, то (3.51) можно преобразовать к виду

$$\left(f_m - f_n\right) \int_{\Re^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = 0. \qquad (3.52)$$

Если $n \neq m$, то $f_n \neq f_m$, и из (3.52) получаем условие ортогональности собственных функций, соответствующих различным собственным значениям:

$$\int_{\Re^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = 0, \quad n \neq m. \tag{3.53}$$

Если волновые функции Ψ_n и Ψ_m считать нормированными на единицу, то условие ортогональности (3.53) собственных функций может быть записано как условие ортонормированности

$$\int_{\Re^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = \delta_{nm}, \tag{3.54}$$

где символ Кронекера $\delta_{nm} = 0$ при $n \neq m$ и $\delta_{nm} = 1$ при $n = m$.

Математическая теория линейных самосопряженных операторов доказывает, что система собственных функций квантовомеханических операторов является полной системой функций. Это означает, что всякая волновая функция Ψ, определенная в той же области переменных, что и собственные функции оператора, может быть разложена по собственным функциям, т. е. представлена в виде ряда

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n. \tag{3.55}$$

Коэффициенты этого разложения (в общем случае комплексные) можно определить, воспользовавшись ортогональностью собственных функций. Для этого умножим ряд (3.55) на Ψ_m^* и проинтегрируем по всему пространству. Тогда, изменив порядок суммирования и интегрирования, получим

$$\int_{\Re^N} \Psi_m^* \Psi dV = \sum_n C_n \int_{\Re^N} \Psi_m^* \Psi_n = \sum_n C_n \delta_{mn} = C_m. \tag{3.56}$$

Отсюда, меняя обозначение m на n, получаем формулу для определения коэффициентов C_n в разложении (3.55):

$$C_n = \int\limits_{\mathfrak{R}^N} \Psi_n^* \Psi dV. \tag{3.57}$$

Если оператор $\hat{\Phi}$ имеет непрерывный спектр собственных значений f, лежащих в интервале F, то в разложении любой волновой функции по собственным функциям суммирование переходит в интегрирование. Поэтому

$$\Psi = \int\limits_F C_f \Psi_f df, \tag{3.58}$$

и непрерывное множество коэффициентов C_f определяется по формуле

$$C_f = \int\limits_{\mathfrak{R}^N} \Psi_f^* \Psi dV. \tag{3.59}$$

Спектры собственных значений квантово-механических операторов. Физическое содержание проблемы нахождения собственных значений квантово-механических операторов, которое будет рассмотрено в 3.6, обусловливает принципиально важную роль в квантовой механике этой на первый взгляд чисто математической задачи.

Рассмотрим несколько таких задач о нахождении спектров собственных значений операторов.

1. Спектр собственных значений оператора координаты $\hat{x}$ непрерывен. В самом деле, так как действие этого оператора на волновую функцию сводится к умножению ее на координату x, то уравнение задачи на собственные значения оператора $\hat{x}$, имеющее вид

$$\hat{x}\Psi = x\Psi, \tag{3.60}$$

соответствует операторному равенству $\hat{x} = x$, которое, по определению, выполняется для любого значения $x \in (-\infty, +\infty)$. Аналогичные выводы получаем для операторов $\hat{y}$ и $\hat{z}$.

2. Спектр оператора проекции импульса $\hat{p}_x$ также является непрерывным спектром. Действительно, задача на собственные значения такого оператора сводится к решению дифференциального уравнения первого порядка

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} = p_x\Psi, \tag{3.61}$$

из которого следует определить возможные значения p_x.

Решение уравнения (3.61)

$$\Psi = C\exp\left(i\frac{p_x x}{\hbar}\right) \tag{3.62}$$

при всех действительных значениях p_x определяет функцию Ψ, удовлетворяющую всем стандартным условиям регулярности. Поэтому собственные значения оператора $\hat{p}_x$ образуют непрерывный спектр от $-\infty$ до $+\infty$. Такой же вывод относится к собственным значениям операторов $\hat{p}_y$ и $\hat{p}_z$.

3. Примером дискретного спектра является спектр собственных значений оператора проекции момента импульса $\hat{L}_z$. Для определения этого спектра направим полярную ось сферической системы координат вдоль оси z. Тогда с учетом (3.36) уравнение для определения собственных функций и собственных значений оператора $\hat{L}_z$ представим как дифференциальное уравнение первого порядка

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} = L_z\Psi. \tag{3.63}$$

Общее решение этого уравнения может быть записано в виде

$$\Psi = C\exp\left(i\frac{L_z\varphi}{\hbar}\right). \qquad (3.64)$$

Собственные функции оператора $\hat{L}_z$ должны быть однозначными функциями, а так как угловая координата φ является циклической переменной задачи, то условие однозначности собственной функции сводится к условию ее периодичности: $\Psi(\varphi+2\pi)=\Psi(\varphi)$. Выполняя это условие для функции (3.64), получаем равенство

$$\exp\left[i\frac{L_z(\varphi+2\pi)}{\hbar}\right]=\exp\left(i\frac{L_z\varphi}{\hbar}\right)$$

или

$$\exp\left(i\frac{L_z 2\pi}{\hbar}\right)=1.$$

Из последнего соотношения следует, что

$$\frac{L_z 2\pi}{\hbar}=2\pi m, \quad m=0,\pm1,\pm2,\ldots$$

Таким образом, найден дискретный спектр собственных значений оператора $\hat{L}_z$:

$$L_z = m\hbar, \quad m=0,\pm1,\pm2,..., \qquad (3.65)$$

соответствующий набору собственных функций этого оператора

$$\Psi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi). \qquad (3.66)$$

Значение константы $C=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ выбрано в (3.66) из условия нормировки

$$\int_0^{2\pi} \Psi_m^* \Psi_m \, d\varphi = 1.$$

4. Собственные функции и собственные значения оператора квадрата момента импульса $\hat{L}^2$ следует искать из уравнения

$$\hat{L}^2 \Psi = L^2 \Psi,$$

которое с учетом формулы (3.36) запишем в сферической системе координат:

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \Psi}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial\varphi^2} \right] = L^2 \Psi. \qquad (3.67)$$

Решить это уравнение можно с привлечением специальных функций. Это решение приводится в курсах теоретической и математической физики. Ниже мы ограничимся лишь кратким перечнем свойств этого решения.

Прежде всего отметим, что спектр собственных значений оператора $\hat{L}^2$ оказывается дискретным, т. е. уравнение (3.67) имеет решения из класса регулярных функций только для значений

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \ldots \qquad (3.68)$$

Каждому собственному значению из (3.68) соответствует $2l+1$ различных собственных функций, которые выделяются заданием целочисленного параметра $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$. Другими словами, каждое собственное значение оператора $\hat{L}^2$ имеет кратность вырождения, равную $2l+1$.

Собственные функции оператора $\hat{L}^2$, найденные из решения уравнения (3.67), имеют вид

$$\Psi_{l,m} = Y_{l,m}(\theta, \varphi). \qquad (3.69)$$

Функции $Y_{l,m}$ относятся к классу специальных функций и называются сферическими, или шаровыми, функциями. Если их нормировать условием

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{l,m}\, Y_{l,m} \sin\theta\, d\theta d\varphi = 1,$$

то можно выписать несколько первых нормированных сферических функций в явном виде:

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}};\ Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\ Y_{1,\pm1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp(\pm i\varphi);$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta - 1\right),\ Y_{2,\pm1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\exp(\pm i\varphi), \qquad (3.70)$$

$$Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\exp(\pm i2\varphi);\ Y_{3,0} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\cos\theta\left(5\cos^2\theta - 3\right).$$

5. Задачи о нахождении спектра собственных значений оператора полной энергии $\hat{H}$ связаны с заданием конкретного вида потенциального силового поля, в котором движется частица. Некоторые из них будут решены в гл. 4 при описании стационарных квантовых состояний. В этих задачах решение уравнения Шредингера будет сведено к нахождению собственных функций и собственных значений гамильтониана $\hat{H}$.

3.6. Измерения физических величин в квантовых системах

Пусть известна волновая функция, описывающая состояние частицы в квантовой системе. Каков будет результат измерения физической величины f в этой системе? Как рассчитать и предсказать результаты эксперимента по определению значений этой физической величины? Ответ на эти вопросы о результатах измерений физических величин дает *третий постулат квантовой*

механики, утверждающий, что в результате измерения физической величины f в любой квантовой системе могут быть получены только такие значения, которые являются собственными значениями оператора $\hat{\Phi}$, соответствующего этой величине.

Этот важный постулат квантовой механики устанавливает связь между теорией и возможностью ее экспериментальной проверки. Математический аппарат теории, в котором физические величины представлены операторами, позволяет предсказать результаты измерений физических величин в различных квантовых системах. Эти выводы теории могут быть проверены экспериментально.

Так, например, используя найденные в 3.5 спектры собственных значений операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$, можно утверждать, что при измерении модуля орбитального момента импульса атомов всегда будут получаться значения $L = \sqrt{L^2}$ из набора

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \quad l = 0, 1, 2, \ldots,$$

а для проекции момента импульса на выделенное магнитным полем направление z в экспериментах будут получены значения

$$L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$$

Точное решение задачи квантовой механики об атоме водорода, которое будет рассмотрено в гл. 5, приведет нас к такому же выводу, причем целочисленные параметры l и m в теории атома называются квантовыми числами, характеризующими состояние электрона в атоме.

Теперь следует ответить на вопрос о том, какое конкретное собственное значение f_n оператора $\hat{\Phi}$ будет результатом измерения физической величины f в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией Ψ? Ответ на этот вопрос подтверждает, что вероятностная интерпретация лежит в основе всех положений квантовой механики.

Если состояние частицы в квантовой системе описывается волновой функцией Ψ_n, которая является одной из собственных функций оператора $\hat{\Phi}$, то в этом квантовом состоянии физическая

величина f имеет определенное значение, равное f_n. Это означает, что если представить совокупность большого числа одинаковых независимых квантовых систем (рис. 3.4), в которых тождественные частицы все находятся в одинаковых квантовых состояниях (такую совокупность квантовых систем называют квантовым ансамблем), то, измеряя физическую величину f в различных системах этого ансамбля, мы всегда будем получать в результате измерения одно и то же значение, равное f_n.

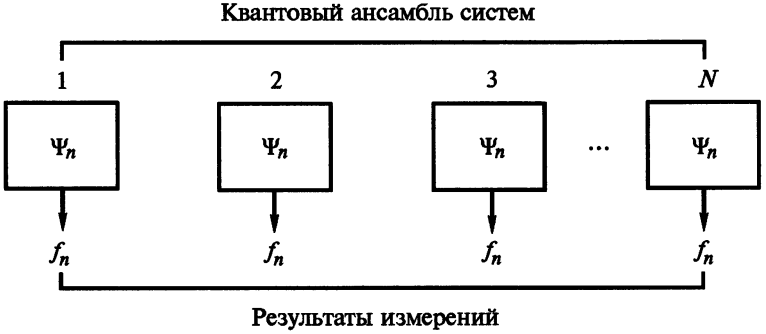


Рис. 3.4. Измерение физической величины, имеющей определенное значение

Однако возможна и другая ситуация, когда волновая функция не будет являться собственной функцией оператора $\hat{\Phi}$. В таком квантовом состоянии физическая величина f не имеет определенного значения. Это означает, что, согласно третьему постулату квантовой механики, и в этом случае результатом измерений физической величины f в системах квантового ансамбля будут только значения из спектра собственных значений оператора $\hat{\Phi}$. Однако измерения в различных системах квантового ансамбля (рис. 3.5) будут давать разные значения $f_1, f_2, \ldots, f_n$ и т. д. При этом каждое значение f_n в квантовом ансамбле будет обнаруживаться с определенной вероятностью P_n.

В процессе измерения квантовая система взаимодействует с измерительным прибором. В результате такого взаимодействия квантовая система, находящаяся в состоянии, описываемом волно-

вой функцией Ψ, переходит с вероятностью P_n в состояние с волновой функцией Ψ_n. Такой переход называют редукцией, или коллапсом, волновой функции.

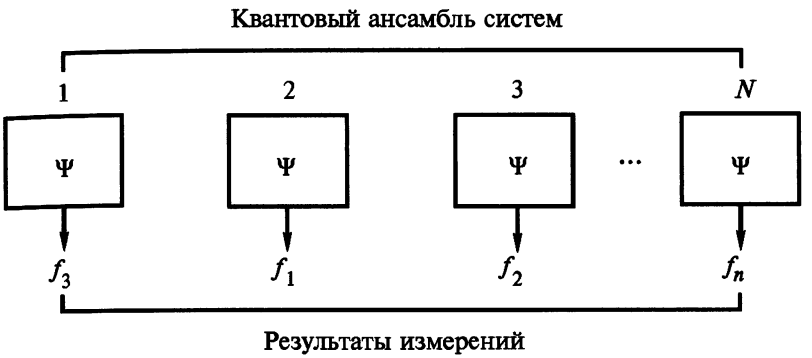


Рис. 3.5. Измерение физической величины, не имеющей определенного значения

В квантовых системах, в которых физическая величина f не имеет определенного значения, имеет смысл находить среднее значение, т. е. математическое ожидание результатов измерений в серии из большого числа измерений

$$\langle f \rangle = \sum_n P_n f_n. \tag{3.71}$$

Для того чтобы рассчитать вероятности P_n в (3.71), следует разложить волновую функцию Ψ в ряд по полной системе собственных функций Ψ_n оператора $\hat{\Phi}$:

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n. \tag{3.72}$$

Напомним, что такое разложение всегда возможно и коэффициенты этого разложения вычисляются по формуле

$$C_n = \int_{\mathfrak{R}^N} \Psi_n^* \Psi dV. \tag{3.73}$$

Разложение (3.72) показывает, что произвольное квантовое состояние можно представить в виде совокупности квантовых состояний с определенными значениями физической величины f. Поэтому искомая вероятность P_n равна квадрату модуля $|C_n|^2$ соответствующего коэффициента в разложении (3.72). Следовательно, среднее значение

$$\langle f \rangle = \sum_n P_n f_n = \sum_n |C_n|^2 f_n. \qquad (3.74)$$

С учетом (3.73) преобразуем (3.74) к удобному для расчетов виду. При этом

$$\langle f \rangle = \sum_n C_n C_n^* f_n = \sum_n C_n f_n \int_{\Re^N} \Psi_n \Psi^* dV = \sum_n C_n \int_{\Re^N} \Psi^* f_n \Psi_n dV.$$

По свойству собственных функций и собственных значений оператора $\hat{\Phi}$

$$f_n \Psi_n = \hat{\Phi} \Psi_n.$$

Следовательно,

$$\langle f \rangle = \sum_n C_n \int_{\Re^N} \Psi^* \left(\hat{\Phi} \Psi_n \right) dV = \int_{\Re^N} \Psi^* \left(\sum_n C_n \hat{\Phi} \Psi_n \right) dV.$$

С учетом свойства линейности оператора $\hat{\Phi}$ получаем

$$\sum_n C_n \hat{\Phi} \Psi_n = \hat{\Phi} \left(\sum_n C_n \Psi_n \right) = \hat{\Phi} \Psi.$$

Поэтому для расчета среднего значения физической величины f в квантовом состоянии системы, описываемом волновой функцией Ψ, окончательно получаем формулу

$$\langle f \rangle = \int_{\Re^N} \Psi^* \left(\hat{\Phi} \Psi \right) dV. \qquad (3.75)$$

Учитывая важность формулы (3.75), ее часто рассматривают как *четвертый постулат квантовой механики.*

Отметим, что если $\Psi = \Psi_n$, то из (3.75), естественно, следует

$$\langle f \rangle = \int_{\Re^N} \Psi_n^* \left(\hat{\Phi} \Psi_n \right) dV = \int_{\Re^N} \Psi_n^* f_n \Psi_n dV = f_n \int_{\Re^N} \Psi_n^* \Psi_n dV = f_n.$$

Таким образом, квантовая механика позволяет дать численную оценку потенциальных возможностей того или иного поведения квантового объекта. И хотя вероятность того или иного результата измерения в квантовой механике относится к отдельному объекту, для экспериментального определения численного значения этой вероятности необходимо многократное повторение измерений в квантовом ансамбле одинаковых систем.

Такой подход к описанию физических явлений принципиально отличается от традиционного подхода классической теории. Поэтому на стадии становления квантовой механики столь необычные и революционные идеи даже в среде физиков не сразу нашли полное понимание.

"Некоторые физики, в том числе и я сам, не могут поверить, что мы раз и навсегда должны отказаться от идеи прямого изображения физической реальности в пространстве и времени или что мы должны согласиться с мнением, будто явления в природе подобны игре случая. <...> Я еще верю в возможность создания модели, т. е. теории, способной излагать сами сущности, а не только вероятности их проявления", — писал А. Эйнштейн в начале XX в.

Однако впечатляющие успехи квантовой механики при описании явлений в микромире показали, что другой теории, альтернативной квантовой механике, в физике нет.

"Внедрение случайности в жизнь Вселенной не порождает хаоса. В жизни Вселенной осуществляется безмерно великое число проб и испытаний. В этом многообразии событий обнаруживается закон величайшей Красоты и Гармонии. Иллюстрацией этому утверждению может служить квантовая механика, законы которой основаны на концепции, отвергающей предопределенность событий. Именно на этой основе были вскрыты изумительные закономерности атомного мира, позволившие понять строение атомов и молекул, закономерности их взаимодействия", —писал известный физик Д.И.Блохинцев в конце XX в.

Задача 3.6. Определите скорость изменения со временем среднего значения физической величины f, считая, что оператор $\hat{\Phi}$ явно не зависит от времени.

Решение. Так как

$$\langle f \rangle = \int_{\Re^N} \Psi^* \left(\hat{\Phi} \Psi \right) dV,$$

то

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \int_{\Re^N} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \left(\hat{\Phi} \Psi \right) dV + \int_{\Re^N} \Psi^* \left(\hat{\Phi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dV.$$

Учитывая, что эволюция волновой функции Ψ описывается уравнением Шредингера, находим

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \hat{H} \Psi^*.$$

Поэтому

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\int_{\Re^N} \left(\hat{H} \Psi^* \right) \left(\hat{\Phi} \Psi \right) dV - \int_{\Re^N} \Psi^* \left(\hat{\Phi} \hat{H} \Psi \right) dV \right].$$

Поскольку операторы $\hat{H}$ и $\hat{\Phi}$ — эрмитовы, то первый интеграл в правой части этого равенства можно преобразовать к виду

$$\int_{\Re^N} \left(\hat{H} \Psi^* \right) \left(\hat{\Phi} \Psi \right) dV = \int_{\Re^N} \left(\hat{\Phi} \Psi \right) \left(\hat{H} \Psi \right)^* dV = \int_{\Re^N} \Psi^* \left(\hat{H} \hat{\Phi} \Psi \right) dV.$$

Следовательно,

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int_{\Re^N} \Psi^* \left[\left(\hat{H} \hat{\Phi} - \hat{\Phi} \hat{H} \right) \Psi \right] dV.$$

Полученное соотношение показывает, что производная среднего значения физической величины по времени может быть представлена как среднее значение для некоторого оператора. Этот оператор и

▽ называют производной оператора $\hat{\Phi}$ по времени. Таким образом, для оператора $\hat{\Phi}$, явно не зависящего от времени,

$$\frac{d\hat{\Phi}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{\Phi} - \hat{\Phi}\hat{H}\right).$$

Отсюда следует, что если оператор $\hat{\Phi}$ некоторой физической величины f явно не зависит от времени и коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}$, т. е. $\hat{H}\hat{\Phi} = \hat{\Phi}\hat{H}$, то среднее значение $\langle f \rangle$ этой физической величины не изменятся со временем. Как и в классической механике, в квантовой механике такие величины называются интегралами движения, соответствующими различным законам сохранения.

Заметим, что оператор

$$\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{\Phi} - \hat{\Phi}\hat{H}\right) \equiv \frac{1}{i\hbar}\left(\hat{\Phi}\hat{H} - \hat{H}\hat{\Phi}\right)$$

■ называется квантовой скобкой Пуассона операторов $\hat{\Phi}$ и $\hat{H}$.

3.7. Одновременное измерение разных физических величин

Важным вопросом в квантовой механике является вопрос о возможности одновременного точного измерения в некоторой квантовой системе двух разных физических величин. В качестве таких наблюдаемых величин могут выступать, например, координата и проекция импульса частицы, кинетическая и потенциальная энергии частицы, два различных компонента момента импульса и др. Можно ли организовать физический эксперимент так, чтобы в нем эти две величины были измерены одновременно и точно? Какие физические величины в квантовой системе могут быть измерены одновременно и точно, а какие — нет?

Некоторая физическая величина считается измеренной точно в данной квантовой системе, если каждое ее измерение в квантовом ансамбле одинаковых систем приводит к одному и тому же результату измерения. При этом предполагается, что эксперимент проведен идеально и приборные погрешности исключены.

В 3.6 было показано, что физическая величина a может быть точно измерена только в такой системе, квантовое состояние которой описывается волновой функцией, являющейся одной из собственных функций соответствующего этой физической величине оператора $\hat{A}$. При этом вовсе не обязательно, чтобы в этом квантовом состоянии была возможность так же точно измерить другую физическую величину b. Эти физические величины a и b будут одновременно точно измерены только в том случае, если соответствующие им операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют общую систему собственных функций.

Покажем, что если два оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют общую систему собственных функций, то между ними существуют некоторые коммутационные соотношения и результаты последовательного действия операторов на волновую функцию не зависят от порядка их применения. Действительно, пусть функции Ψ_n $(n=1, 2, ...)$ являются собственными функциями как оператора $\hat{A}$, так и оператора $\hat{B}$. Тогда выполняются следующие соотношения:

$$\hat{A}\left(\hat{B}\Psi_n\right)=\hat{A}\left(b_n\Psi_n\right)=b_n\left(\hat{A}\Psi_n\right)=b_n a_n\Psi_n,$$

$$\hat{B}\left(\hat{A}\Psi_n\right)=\hat{B}\left(a_n\Psi_n\right)=a_n\left(\hat{B}\Psi_n\right)=a_n b_n\Psi_n.$$

Здесь a_n и b_n — собственные значения операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, соответствующие их общей собственной функции Ψ_n.

Отсюда следует, что

$$\hat{A}\left(\hat{B}\Psi_n\right)=\hat{B}\left(\hat{A}\Psi_n\right).$$

Но так как любая волновая функция Ψ может быть представлена в виде линейной комбинации собственных функций: $\Psi=\sum_n C_n\Psi_n$, то в силу линейности квантово-механических операторов для любой волновой функции должно выполняться коммутационное соотношение

$$\hat{A}\left(\hat{B}\Psi\right)=\hat{B}\left(\hat{A}\Psi\right), \tag{3.76}$$

которое в операторной форме может быть записано в виде

$$\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A} \text{ или } \hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=0. \tag{3.77}$$

Разность операторов $\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ называют коммутатором операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ и обозначают обычно символом

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]\equiv\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}. \tag{3.78}$$

Два оператора, коммутатор которых равен нулю, называют *коммутирующими операторами*.

Таким образом, мы приходим к важному выводу квантовой механики: если две разные физические величины a и b могут быть одновременно точно измерены, то соответствующие им операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ должны быть коммутирующими операторами, т. е. для них должно выполняться соотношение (3.77). Справедливо и обратное утверждение.

Таким образом, коммутативность операторов указывает на возможность одновременного точного измерения соответствующих им физических величин. И наоборот, некоммутативность операторов указывает на невозможность такого одновременного точного измерения двух соответствующих им физических величин.

По этому правилу проверим, можно ли одновременно точно измерить координату x частицы и проекцию p_x ее импульса? Для этого найдем коммутатор операторов $\hat{x}$ и $\hat{p}_x$:

$$\hat{x}\left(\hat{p}_x\Psi\right)-\hat{p}_x\left(\hat{x}\Psi\right)=x\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)+i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(x\Psi\right)=i\hbar\Psi.$$

Отсюда получаем

$$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=i\hbar\neq 0\,. \tag{3.79}$$

Таким образом, нельзя одновременно точно измерить координату x частицы и проекцию p_x ее импульса. Как и следовало ожи-

дать, этот вывод совпадает с выводом, полученным ранее (см. 2.3) при анализе соотношений неопределенностей Гейзенберга.

При одновременном измерении у квантовой частицы ее координаты x и проекции p_x импульса результаты измерений в квантовом ансамбле будут разбросаны относительно средних значений, и эти флуктуации можно охарактеризовать средними квадратами отклонений, или дисперсиями:

$$D_1 = \left\langle \left(\Delta x^2\right)\right\rangle = \left\langle \left(x - \langle x\rangle\right)^2\right\rangle = \left\langle x^2\right\rangle - \left(\langle x\rangle\right)^2,$$

$$D_2 = \left\langle \left(\Delta p^2\right)\right\rangle = \left\langle \left(p_x - \langle p_x\rangle\right)^2\right\rangle = \left\langle p_x^2\right\rangle - \left(\langle p_x\rangle\right)^2.$$

Покажем, что найденное значение для коммутатора $[\hat{x},\ \hat{p}_x] = i\hbar$ позволяет оценить связь между этими дисперсиями. С целью упрощения выкладок ограничимся рассмотрением одномерного движения частицы, выбрав систему отсчета, для которой $\langle x\rangle = 0$ и $\langle p_x\rangle = 0$. В этом случае

$$D_1 = \left\langle (\Delta x)^2\right\rangle = \left\langle x^2\right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* x^2 \Psi dx,$$

$$D_2 = \left\langle (\Delta p_x)^2\right\rangle = \left\langle p_x^2\right\rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{d^2\Psi}{dx^2} dx.$$

Будем считать также, что волновая функция Ψ нормирована и поэтому $\Psi(\pm\infty) = 0$, причем на бесконечности квадрат модуля волновой функции достаточно быстро (быстрее, чем x^{-1}) стремится к нулю. При этих предположениях рассмотрим несобственный интеграл, зависящий от некоторого действительного параметра α и имеющий положительные значения для всех значений этого параметра

$$J(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \left(\alpha\hat{x} - \frac{i}{\hbar}\hat{p}_x\right)\Psi \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \alpha x\Psi + \frac{d\Psi}{dx} \right|^2 dx.$$

Запишем это соотношение в виде

$$J(\alpha)=\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\alpha x\Psi+\frac{d\Psi}{dx}\right)\left(\alpha x\Psi^{*}+\frac{d\Psi^{*}}{dx}\right)dx=A\alpha^{2}-B\alpha+C. \quad (3.80)$$

Здесь

$$A=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^{*}x^{2}\Psi dx=D_1>0,$$

$$B=-\int_{-\infty}^{+\infty}x\left(\Psi\frac{d\Psi^{*}}{dx}+\Psi^{*}\frac{d\Psi}{dx}\right)dx=-\int_{-\infty}^{+\infty}x\frac{d}{dx}\left(\Psi^{*}\Psi\right)dx=$$

$$=-x\Psi^{*}\Psi\Big|_{-\infty}^{+\infty}+\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^{*}\Psi dx=1,$$

$$C=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\Psi^{*}}{dx}\frac{d\Psi}{dx}dx=-\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^{*}\frac{d^{2}\Psi}{dx^{2}}dx=\frac{1}{\hbar^{2}}D_2>0.$$

Условие положительности интеграла $J(\alpha)$, значение которого записано в виде квадратного трехчлена (3.80), на основании теоремы о корнях квадратного уравнения можно записать в виде

$$4AC\geq B^{2}. \quad (3.81)$$

Подставляя в (3.81) вместо A, B, C их значения, получаем, что всегда выполняется неравенство $4D_1D_2\geq\hbar^{2}$, которое можно записать как

$$\sqrt{\left\langle(\Delta x)^{2}\right\rangle}\ \sqrt{\left\langle(\Delta p_x)^{2}\right\rangle}\geq\frac{\hbar}{2}. \quad (3.82)$$

Если величины $\Delta x = \sqrt{\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle}$ и $\Delta p_x = \sqrt{\left\langle (\Delta p_x)^2 \right\rangle}$ назвать неопределенностями координаты и проекции импульса, то (3.82) примет вид

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{3.83}$$

Аналогично могут быть получены еще два неравенства для других координат:

$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{3.84}$$

Сравнение полученных соотношений с формулами (2.16) показывает, что соотношения неопределенностей Гейзенберга являются следствием общих положений квантовой механики.

В общем случае можно доказать, что если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ двух физических величин не коммутируют, причем $[\hat{A}, \hat{B}] = c$, то для соответствующих физических величин a и b справедливо соотношение неопределенности $\Delta a \Delta b \geq \frac{|c|}{2}$, исключающее возможность одновременного стремления к нулю неопределенностей Δa и Δb.

Легко убедиться, что операторы кинетической и потенциальной энергий не коммутируют. Поэтому, хотя оператор полной энергии есть сумма таких операторов, нельзя утверждать, что в квантовой системе полная энергия системы есть сумма кинетической и потенциальной энергий. Это означает, что принципиально нельзя одновременно точно измерить кинетическую и потенциальную энергии движущейся частицы. В связи с этим нельзя измерить полную энергию частицы, измеряя одновременно ее кинетическую и потенциальную энергии.

Еще раз подчеркнем, что в квантовой механике математическим объектам и операциям над ними всегда соответствуют физические объекты и управляющие их движением законы. Известный физик-теоретик А.В. Фок в своей книге "Начала квантовой механики" отмечал, что можно составить целый словарь для перевода квантовой механики с математического языка на физический язык. В качестве примера приведем одну из страничек такого словаря.

Математика	Физика
Волновая функция Ψ	Состояние квантовой частицы
Квадрат модуля $\lvert\Psi\rvert^2 = \Psi^*\Psi$	Плотность вероятности обнаружения частицы
Условие нормировки $\int\limits_{\Re^N} \Psi^*\Psi dV = 1$	Достоверность наличия частицы
Линейный эрмитов оператор $\hat{\Phi}$	Физическая величина f
Собственная функция Ψ_n оператора $\hat{\Phi}$, соответствующая собственному значению f_n	Состояние квантовой частицы, в котором значение физической величины f равно f_n
Квадрат модуля коэффициента в разложении волновой функции Ψ в ряд по собственным функциям Ψ_n оператора $\hat{\Phi}$	Вероятность при измерении f получить значение f_n
Интеграл $\int\limits_{\Re^N} \Psi^*\hat{\Phi}\Psi dV$	Среднее значение (математическое ожидание) физической величины f в заданном квантовом состоянии
Коммутативность операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$	Принципиальная возможность одновременно наблюдать и точно измерять физические величины a и b

Можно порекомендовать каждому, изучающему квантовую механику, самостоятельно продолжить заполнение страниц такого словаря.

Задача 3.7. Определите оператор ускорения для частицы массой m_0, движущейся в потенциальном силовом поле $\vec{F} = -\text{grad}U$.

Решение. Так как векторный оператор скорости $\hat{\vec{v}}$ можно выразить через оператор импульса

$$\hat{\vec{v}} = \frac{\hat{\vec{p}}}{m_0} = -\frac{i\hbar}{m_0}\nabla,$$

то, дифференцируя этот оператор по времени в соответствии с правилом, найденным при решении задачи 3.5, определим векторный оператор ускорения как

$$\hat{\vec{a}} = \frac{d\hat{\vec{v}}}{dt} = \frac{1}{m_0}\frac{d\,\hat{\vec{p}}}{dt} = \frac{i}{m_0\hbar}\left[\hat{H}\,\hat{\vec{p}} - \hat{\vec{p}}\hat{H}\right] = \frac{1}{m_0}\left[\hat{H}\nabla - \nabla\hat{H}\right].$$

Поскольку гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + \hat{U},$$

а операторы $\Delta \equiv \nabla^2$ и ∇ являются коммутирующими операторами, то

$$\hat{\vec{a}} = \frac{1}{m_0}\left[\hat{U}\nabla - \nabla\hat{U}\right].$$

Для выяснения смысла получившегося коммутатора подействуем им на произвольную функцию Ψ. Тогда получим

$$\hat{U}(\nabla\Psi) - \nabla\left(\hat{U}\Psi\right) = U(\nabla\Psi) - \nabla(U\Psi) = -(\nabla U)\Psi.$$

Но в потенциальном поле векторный оператор силы $\hat{\vec{F}} = \left\{\hat{F}_x, \hat{F}_y, \hat{F}_z\right\}$ есть оператор умножения на $-\nabla U$, т. е.

$$\hat{\vec{F}}\Psi = -(\nabla U)\Psi.$$

Поэтому окончательно находим

$$\hat{\vec{a}} = \frac{\hat{\vec{F}}}{m_0}, \quad \text{или} \quad m_0\hat{\vec{a}} = \hat{\vec{F}}.$$

Это операторное уравнение имеет вид уравнения Ньютона классической механики. Оно подтверждает вывод о том, что соотношения

между операторами в квантовой механике имеют ту же структуру, что и соотношения между соответствующими физическими величинами в классической механике.

Задача 3.8. Установите коммутационные соотношения между операторами проекций момента импульса $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ и $\hat{L}_z$.

Решение. Рассмотрим коммутатор операторов $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$:

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x.$$

С учетом явного вида (3.34) операторов $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$ определим в декартовой системе координат результат действия коммутатора этих операторов на волновую функцию:

$$\hat{L}_x\left(\hat{L}_y\Psi\right) - \hat{L}_y\left(\hat{L}_x\Psi\right) = -\hbar^2\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial\Psi}{\partial x} - x\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right) -\right.$$

$$\left. -\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial\Psi}{\partial z} - z\frac{\partial\Psi}{\partial y}\right)\right] =$$

$$= -\hbar^2\left[y\frac{\partial\Psi}{\partial x} + yz\frac{\partial^2\Psi}{\partial z\partial x} - yx\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} - z^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial x} + zx\frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial z} - zy\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial z} +\right.$$

$$\left. + z^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial y} + xy\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} - x\frac{\partial\Psi}{\partial y} - xz\frac{\partial^2\Psi}{\partial z\partial y}\right] = -\hbar^2\left(y\frac{\partial\Psi}{\partial x} - x\frac{\partial\Psi}{\partial y}\right) = i\hbar\hat{L}_z\Psi.$$

Таким образом, доказано, что

$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z \neq 0.$$

Точно так же можно получить коммутационные соотношения для других пар операторов проекций момента импульса:

$$\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y = i\hbar\hat{L}_x$$

и

$$\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z = i\hbar\hat{L}_y.$$

Эти соотношения свидетельствуют о том, что все три проекции момента импульса не могут одновременно иметь определенные значения, за исключением случая, когда все три проекции одновременно равны нулю.

Можно показать (доказательство рекомендуется провести самостоятельно), что оператор квадрата момента импульса $\hat{L}^2$ коммутирует с операторами $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ и $\hat{L}_z$. Следовательно, квадрат момента импульса (или модуль момента импульса) может быть одновременно точно измерен лишь с одной из его проекций.

Полученный результат означает, что в квантовой механике изображение момента импульса в виде вектора носит достаточно условный характер. Поэтому и сложение моментов импульса (например, орбитального и спинового) нельзя проводить как сложение векторов.

3.8. Матричная формулировка квантовой механики

Представление физических величин эрмитовыми операторами, действующими на волновую функцию, не является единственно возможным математическим аппаратом квантовой механики. В 1925 г., еще до открытия Э. Шредингером основного уравнения для волновой функции, В. Гейзенберг предложил в квантовой механике каждой физической величине ставить в соответствие некоторую матрицу с бесконечным числом строк и столбцов.

Такая "матричная механика" была развита в работах В. Гейзенберга, М. Борна, П. Иордана и других физиков на первом этапе независимо от волновой теории, а позже — параллельно ей. В дальнейшем Э. Шредингер показал, что представления физических величин операторами и матрицами эквивалентны, хотя математический аппарат этих двух методов решения задач квантовой механики оказывается различным.

Связь между операторами и матрицами физических величин установим, считая для упрощения выкладок, что спектры рассматриваемых квантово-механических операторов являются дискретными, хотя все обсуждаемые ниже соотношения были обобщены Дираком и на случай операторов с непрерывными спектрами.

Пусть Ψ_n, $n=1, 2, \ldots$, — известный набор собственных функций некоторого квантово-механического оператора $\hat{A}$. Из свойств собственных функций эрмитовых операторов следует, что любую регулярную функцию φ можно разложить в ряд по собственным функциям оператора:

$$\varphi = \sum_n C_n \Psi_n, \tag{3.85}$$

причем коэффициенты этого разложения определяются по формулам

$$C_n = \int_{\Re^N} \Psi_n^* \varphi dV. \tag{3.86}$$

Если теперь в качестве функции φ взять функцию $\hat{\Phi}\Psi_m$, являющуюся результатом действия на функцию Ψ_m оператора $\hat{\Phi}$ физической величины f, то из (3.85) и (3.86) получим равенство

$$\hat{\Phi}\Psi_m = \sum_n \Phi_{nm} \Psi_n, \tag{3.87}$$

где

$$\Phi_{nm} = \int_{\Re^N} \Psi_n^* \left(\hat{\Phi}\Psi_m\right) dV. \tag{3.88}$$

Величины Φ_{nm} можно рассматривать как элементы некоторой бесконечной матрицы

$$\Phi = \begin{pmatrix} \Phi_{11} & \Phi_{12} & \Phi_{13} & \ldots & \Phi_{1m} & \ldots \\ \Phi_{21} & \Phi_{22} & \Phi_{23} & \ldots & \Phi_{2m} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \Phi_{n1} & \Phi_{n2} & \Phi_{n3} & \ldots & \Phi_{nm} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}.$$

Эту матрицу называют матрицей оператора $\hat{\Phi}$ (или физической величины f) в системе собственных функций оператора $\hat{A}$, или, как говорят, в A-представлении. В квантовой механике при этом используются координатное, импульсное, энергетическое и другие представления.

Каждую величину Φ_{nm} называют матричным элементом, соответствующим переходу из состояния m в состояние n. Матричный элемент имеет два индекса: первый n — номер строки матрицы и второй m — номер ее столбца.

Для матричных элементов Φ_{nm} применяется также обозначение, предложенное Дираком,

$$< n\left|\hat{\Phi}\right|m > \text{ или } < n|f|m >. \qquad (3.89)$$

Такой символ можно рассматривать как символ, сконструированный из обозначения наблюдаемой физической величины f (или соответствующего ей оператора $\hat{\Phi}$) и символов $|m>$ и $< n|$. Формально каждую собственную функцию Ψ_m (начальное состояние) представляет некоторый базисный вектор $|\Psi_m>$ или сокращенно $|m>$ бесконечномерного пространства, который называют кет-вектором. Собственную функцию Ψ_n (конечное состояние) представляет вектор $<\Psi_n|$ или $< n|$, который называют бра-вектором. Такие названия происходят от английских *brac-* и *ket-*, образующих слово *bracket* (скобка).

Заметим, что обозначение $< n|m >$ следует рассматривать как сокращенную запись выражения $< n\left|\hat{I}\right|m >$, где $\hat{I}$ — единичный (тождественный) оператор, для которого $\hat{I}\Psi_m = \Psi_m$. Поэтому

$$< n|m > = <\Psi_n|\Psi_m > = \int\limits_{\Re^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & \text{если} \quad n = m, \\ 0, & \text{если} \quad n \neq m. \end{cases}$$

Итак, оператор $\hat{\Phi}$ физической величины f в A-представлении определяется матрицей Φ, элементы Φ_{nm} которой определяются соотношением (3.88). При этом эрмитову оператору всегда соответствует эрмитова матрица, для матричных элементов которой справедливо соотношение $\Phi_{nm} = \Phi^*_{mn}$.

Определим некоторые алгебраические операции над матрицами Гейзенберга.

1. Сложение матриц. Если $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$, то для матричных элементов матрицы $C = A + B$ выполняется равенство

$$C_{nm} = A_{nm} + B_{nm}.$$

2. Умножение матриц. Если $\hat{C} = \hat{A} \cdot \hat{B}$, то элементы матрицы $C = A \cdot B$ определяются по правилу перемножения матриц

$$C_{nm} = \sum_k A_{nk} B_{km}.$$

При этом произведение матриц, как и произведение операторов, не коммутативно, т. е. в общем случае $A \cdot B \neq B \cdot A$.

Так как правила сложения и умножения матриц определены, то можно определить и простейшие функции матриц. Так, например, под функцией $\exp(\Phi)$ будем понимать следующий ряд из матриц:

$$\exp(\Phi) = 1 + \Phi + \frac{1}{2}\Phi^2 + \ldots + \frac{1}{n!}\Phi^n + \ldots$$

Отметим одно важное свойство матриц Гейзенберга физических величин в квантовой механике. Если определить матричные элементы Φ_{nm} оператора $\hat{\Phi}$ в собственном Φ-представлении, когда $\hat{\Phi}\Psi_m = f_m \Psi_m$, то из (3.88) получим

$$\Phi_{nm} = <n|\hat{\Phi}|m> = \int_{\Re^N} \Psi^*_n \hat{\Phi} \Psi_m dV = f_m \int_{\Re^N} \Psi^*_n \Psi_m dV = f_m \delta_{nm}.$$

Это означает, что матрица оператора $\hat{\Phi}$ в собственном представлении является диагональной, т. е. матрицей, у которой отличны от нуля лишь элементы с $n = m$, причем эти диагональные элементы являются собственными значениями оператора $\hat{\Phi}$.

Таким образом, важная задача квантовой механики — определение собственных значений квантово-механического оператора $\hat{\Phi}$ — в матричной формулировке сводится к нахождению такого преобразования матрицы, которое приводит ее к диагональному виду.

Представление квантовой механики в матричной форме позволяет формулировать уравнения квантовой механики так, что в них не фигурирует волновая функция, а сами уравнения по форме совпадают с уравнениями классической механики, но с тем принципиальным отличием, что в этих уравнениях классические физические величины заменены соответствующими матрицами.

В некоторых случаях при решении задач квантовой механики матричная форма уравнений оказывается даже удобнее операторной. Но в нашем курсе при решении задач квантовой механики будет рассматриваться только операторная форма с использованием волновой функции и волнового уравнения Шредингера. Примеры решения некоторых задач квантовой механики с матричной формой уравнений можно найти в учебниках по теоретической физике.

4. СТАЦИОНАРНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Особенности движения микрочастиц в тех или иных силовых полях можно выявить, рассматривая стационарные состояния — состояния, в которых полная энергия частицы остается постоянной. В этом случае плотность вероятности пребывания частицы в какой-либо точке пространства не зависит от времени. Волновая функция, описывающая стационарное состояние частицы, является решением уравнения Шредингера для стационарных состояний.

При движении частицы в ограниченной области пространства, например в случае, когда частица находится в потенциальной яме и не может уйти на бесконечность, ее энергетический спектр оказывается дискретным, т. е. энергия частицы квантуется. В случае, когда частица может уйти на бесконечность, она обладает непрерывным энергетическим спектром. Квантование энергии наиболее ярко проявляется для атомных систем, т. е. систем, размеры и массы которых чрезвычайно малы.

Решение стационарных задач квантовой механики позволяет получить ряд интересных физических результатов, не имеющих классических аналогов. В частности, это относится к туннельному эффекту — явлению, заключающемуся в прохождении квантовой частицы через потенциальный барьер, высота которого превышает полную энергию частицы. В настоящее время устройства, в которых используется туннельный эффект, широко применяются в научных исследованиях и технических приложениях: туннельный диод, лампа с холодным катодом, сканирующий туннельный микроскоп и т. д.

4.1. Уравнение Шредингера для стационарных состояний

Основным уравнением нерелятивистской квантовой механики является временно́е уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi, \tag{4.1}$$

где $\hat{H}=\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta+U(x, y, z, t)$ — оператор полной энергии частицы (гамильтониан). Это уравнение позволяет найти волновую функцию $\Psi(x, y, z, t)$ как функцию координат и времени, определить плотность вероятности нахождения частицы в любой точке пространства в любой момент времени и тем самым полностью описать квантовое состояние частицы, движущейся в силовом поле.

В квантовой механике существует класс задач о движении в силовых полях, для которых силовая функция $U(x, y, z, t)$ не зависит явно от времени, т. е. $U(x, y, z, t)\equiv U(x, y, z)$. Такие силовые поля называются *стационарными силовыми полями*. В этом случае силовая функция $U(x, y, z)$ имеет смысл потенциальной энергии частицы. В стационарных полях квантовая система может находиться в состояниях с определенным значением энергии E. Эти состояния называются стационарными состояниями, а задачи о движении частиц, находящихся в таких состояниях, — *стационарными задачами квантовой механики*. Именно стационарные состояния квантовых систем и будут рассмотрены в этой главе.

Найдем общий вид волновой функции, соответствующей стационарному состоянию. Поскольку оператор $\hat{H}$ в уравнении (4.1) не зависит явно от времени, то волновую функцию $\Psi(x, y, z, t)$ следует искать в виде произведения двух функций

$$\Psi(x, y, z, t)=\psi(x, y, z)\varphi(t), \tag{4.2}$$

одна из которых — $\psi(x, y, z)$ — зависит только от координат, а другая — $\varphi(t)$ — только от времени. Подставив волновую функцию (4.2) в уравнение (4.1) и разделив затем обе части уравнения на $\psi(x, y, z)\varphi(t)$, получим

$$\frac{i\hbar}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt}=\frac{1}{\psi}\hat{H}\psi. \tag{4.3}$$

В уравнении (4.3) левая часть зависит только от времени, а правая — только от координат. Выполнение этого равенства возможно лишь в том случае, если левая и правая части уравнения равны постоянной величине, обозначим ее буквой E. Таким образом, из (4.3) получаем два уравнения (одно — для функции $\psi(x, y, z)$, а другое — для функции $\varphi(t)$):

$$\hat{H}\psi = E\psi, \tag{4.4а}$$

$$i\hbar\frac{d\varphi}{dt} = E\varphi. \tag{4.4б}$$

Уравнение (4.4а) определяет собственные значения и собственные функции оператора полной энергии (гамильтониана) $\hat{H}$. Следовательно, константа E представляет собой не что иное, как полную энергию квантово-механической системы. Перепишем уравнение (4.4а) с учетом вида оператора $\hat{H}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi + U\psi = E\psi, \tag{4.5}$$

где $\Delta = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$ — оператор Лапласа. Уравнение (4.5) называется *уравнением Шредингера для стационарных состояний*. Его решения — функции $\psi(x, y, z)$ и соответствующие значения энергии E — определяются конкретным видом потенциальной энергии частицы $U(x, y, z)$. Часто уравнение Шредингера для стационарных состояний записывают в следующей форме:

$$\Delta\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \tag{4.6}$$

Перейдем теперь к анализу временно́й функции $\varphi(t)$. Решение уравнения (4.4б) имеет вид

$$\varphi(t) = \varphi_0 e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \qquad (4.7)$$

где φ_0 — некоторая константа. Без потери общности можно положить $\varphi_0 = 1$, так как в выражение (4.2), определяющее общий вид волновой функции, входит также функция $\psi(x, y, z)$, задаваемая с точностью до произвольного множителя.

Таким образом, волновая функция частицы, находящейся в стационарном квантовом состоянии, имеет вид

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(x, y, z) e^{-i\omega t}. \qquad (4.8)$$

Из (4.8) следует, что волновая функция стационарного состояния гармонически изменяется со временем t. Частота этого изменения $\omega = E/\hbar$. Данный результат показывает, что соотношение де Бройля $E = \hbar\omega$, первоначально применявшееся в случае свободного движения частицы, справедливо также и в случае движения частицы в произвольном стационарном силовом поле.

Важно отметить, что для стационарных состояний плотность вероятности местонахождения частицы не зависит от времени. Действительно,

$$w = \left|\Psi(x, y, z, t)\right|^2 = \left|\psi(x, y, z)\right|^2 \left|e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\right|^2 =$$

$$= \left|\psi(x, y, z)\right|^2 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{i\frac{E}{\hbar}t} = \left|\psi(x, y, z)\right|^2. \qquad (4.9)$$

Можно показать, что в стационарных состояниях от времени также не зависят вектор плотности потока вероятности и средние значения физических величин.

С учетом соотношения (4.9) условие нормировки волновой функции

$$\int\limits_{\mathfrak{R}^N} \left|\Psi(x, y, z, t)\right|^2 dV = 1$$

для таких состояний принимает вид

$$\int\limits_{\mathfrak{R}^N} \left|\psi(x, y, z)\right|^2 dV = 1. \qquad (4.10)$$

Координатную часть волновой функции $\psi(x, y, z)$ в стационарных задачах часто называют просто волновой функцией, учитывая, что зависимость от времени определяется соотношением (4.8).

□ **Задача 4.1.** Покажите, что в стационарном состоянии среднее значение физической величины, оператор которой не зависит явно от времени, остается постоянным.

Решение. Рассмотрим физическую величину a, оператор которой $\hat{A}$ не зависит явно от времени. Среднее значение $\langle a \rangle$, согласно (3.75), определяется из выражения

$$\langle a \rangle = \int\limits_{\mathfrak{R}^N} \Psi^*(x, y, z, t)\hat{A}\Psi(x, y, z, t)dV.$$

С учетом вида волновой функции (4.8) получаем

$$\langle a \rangle = \int\limits_{\mathfrak{R}^N} \psi(x, y, z)\ e^{i\frac{E}{\hbar}t}\hat{A}\psi(x, y, z)\ e^{-i\frac{E}{\hbar}t}dV.$$

Так как оператор $\hat{A}$ явно от времени не зависит, то временной множитель $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ можно вынести из-под знака оператора

$$\langle a \rangle = \int\limits_{\mathfrak{R}^N} \psi(x, y, z)\ e^{i\frac{E}{\hbar}t}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\hat{A}\psi(x, y, z)dV.$$

Поскольку $e^{i\frac{E}{\hbar}t}e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = 1$, то в итоге получаем ▽

$$\langle a \rangle = \int\limits_{\Re^N} \psi(x, y, z) \hat{A} \psi(x, y, z) dV.$$

Таким образом, среднее значение величины a остается неизменным во времени. ■

Задача 4.2. Докажите, что если частица находится в стационарном состоянии и имеет дискретный энергетический спектр, то среднее значение проекции ее импульса $\langle p_x \rangle$ равно нулю. Решение проведите для одномерного случая ($N = 1$) .

Решение. Докажем сначала, что операторы координаты $\hat{x}$, проекции импульса $\hat{p}_x$ и гамильтониан $\hat{H}$ связаны следующим коммутационным соотношением:

$$\left[\hat{H}, \hat{x}\right] = -\frac{i\hbar}{m_0} \hat{p}_x.$$

Подействуем коммутатором $\left[\hat{H}, \hat{x}\right]$ на некоторую функцию ψ

$$\left[\hat{H}, \hat{x}\right]\psi = \hat{H}(\hat{x}\psi) - \hat{x}\left(\hat{H}\psi\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) + Ux\psi -$$

$$-x\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U\psi\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) + x\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} .$$

Принимая во внимание, что $\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) = 2\frac{\partial\psi}{\partial x} + x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$, получаем

$$\left[\hat{H}, \hat{x}\right] = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(2\frac{\partial\psi}{\partial x} + x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) + \frac{\hbar^2}{2m_0}x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{i\hbar}{m_0}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x} = -\frac{i\hbar}{m_0}\hat{p}_x\psi,$$

т. е. $\left[\hat{H}, \hat{x}\right] = -\frac{i\hbar}{m_0}\hat{p}_x$. Отсюда следует, что

$$\hat{p}_x = \frac{im_0}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{x}\right].$$

Найдем теперь среднее значение проекции импульса $\langle p_x \rangle$ в состоянии, описываемом волновой функцией ψ. Оно определяется как

$$\langle p_x \rangle = \int_{\mathfrak{R}^1} \psi^* \hat{p}_x \psi \, dx.$$

Подставляя сюда найденное выражение для оператора $\hat{p}_x$, получаем

$$\langle p_x \rangle = \frac{im_0}{\hbar} \int_{\mathfrak{R}^1} \left(\psi^* \hat{H}\hat{x}\psi - \psi^* \hat{x}\hat{H}\psi\right) dx = \frac{im_0}{\hbar} \int_{\mathfrak{R}^1} \left(\psi^* \hat{H}x\psi - \psi^* x\hat{H}\psi\right) dx.$$

Учитывая эрмитовость оператора $\hat{H}$ (см.(3.42)) и дискретность спектра энергии, находим, что

$$\langle p_x \rangle = \frac{im_0}{\hbar} \int_{\mathfrak{R}^1} \left[x\psi\left(\hat{H}\psi\right)^* - x\psi^* \hat{H}\psi \right] dx.$$

Поскольку состояние частицы является стационарным, то

$$\hat{H}\psi = E\psi, \text{ а } \left(\hat{H}\psi\right)^* = \left(E\psi\right)^* = E\psi^*.$$

Таким образом,

$$\langle p_x \rangle = \frac{im_0}{\hbar} \int_{\mathfrak{R}^1} \left(xE\psi\psi^* - xE\psi\psi^* \right) dx = 0.$$

4.2. Частица в потенциальной яме с непроницаемыми стенками

Рассмотрение стационарных задач квантовой механики начнем с наиболее простой для анализа задачи о движении частицы в потенциальной яме с непроницаемыми, т. е. с бесконечно высокими

стенками. Такие ямы называют еще потенциальными ящиками, наиболее часто это название применяется по отношению к трехмерной потенциальной яме. В этом случае частица движется в ограниченной области пространства, т. е. мы имеем дело с так называемым финитным движением. Рассматриваемые в этом параграфе особенности движения частицы, такие, например, как квантование энергии, вырождение энергетических уровней и т. д. в дальнейшем будут проанализированы для случая потенциальных ям другого вида.

Одномерная потенциальная яма. Рассмотрим частицу, находящуюся в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. В этом случае потенциальная энергия частицы $U(x)$ имеет вид

$$U(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ 0, & 0<x<a\\ \infty, & x>a\end{cases},$$

т. е. внутри ямы ($0<x<a$) потенциальная энергия $U(x)$ постоянна и равна нулю, а вне ямы обращается в бесконечность (рис. 4.1).

Запишем уравнение Шредингера для одномерного движения частицы вдоль оси x

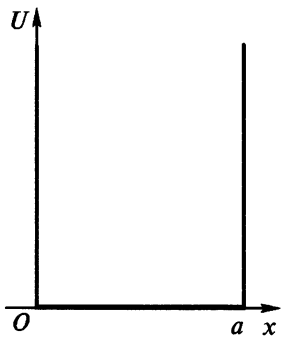


Рис. 4.1. Одномерная потенциальная яма с непроницаемыми стенками

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E-U(x)\right]\psi=0. \qquad (4.11)$$

Поскольку вне ямы потенциальная энергия обращается в бесконечность, то для того, чтобы выполнялось уравнение (4.11) , необходимо, чтобы вне ямы волновая функция $\psi(x)$ обращалась в нуль, т. е. $\psi(x)\equiv 0$. Это означает, что в случае ямы с бесконечно высокими стенками частица не может выйти за пределы ямы, поскольку такие стенки являются непроницаемыми для частицы. В силу непре-

рывности волновая функция $\psi(x)$ должна обращаться в нуль и на границах ямы: при $x=0$ и при $x=a$.

Таким образом, задача о движении частицы в потенциальной яме сводится к решению уравнения

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m_0}{\hbar^2}E\psi=0,\ 0<x<a, \tag{4.12}$$

с граничными условиями $\psi(0)=0,\ \psi(a)=0.$

Введем обозначение

$$k=\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}E}. \tag{4.13}$$

При этом уравнение (4.12) примет вид хорошо известного из теории колебаний уравнения

$$\psi''+k^2\psi=0,$$

решение которого есть

$$\psi(x)=A\sin k\,x+B\cos k\,x. \tag{4.14}$$

Используя граничное условие $\psi(0)=0$, получаем $B=0$, т. е. $\psi(x)=A\sin k\,x$. Второе граничное условие $\psi(a)=0$ приводит к соотношению $A\sin ka=0$, которое для $A\neq 0$ выполняется при

$$ka=\pm\pi n,\ \ n=1,\,2,\,3,\,\ldots\ . \tag{4.15}$$

Отметим, что значение $n=0$, формально также входящее в решение (4.14) , не удовлетворяет условию задачи, так как при этом $\psi\equiv 0$, а это означает, что частица в яме отсутствует. Поэтому значение $n=0$ следует отбросить.

Подставляя (4.13) в (4.15), приходим к выражению для полной энергии частицы, движущейся в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками,

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.16}$$

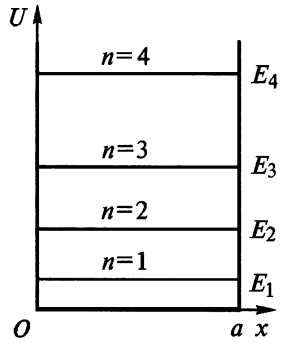


Рис. 4.2. Энергетические уровни частицы в потенциальной яме

Важной особенностью полученного *энергетического спектра* (4.16) является его *дискретность*. Частица, находящаяся в потенциальной яме, может иметь только дискретные, квантованные значения энергии (рис. 4.2), определяемые из выражения (4.16). Отметим, что квантование возникает вследствие граничных условий, накладываемых на волновую функцию, т. е. вследствие равенства нулю волновой функции на границе потенциальной ямы.

Число n в (4.16), определяющее энергию частицы в потенциальной яме, называется *квантовым числом*, а соответствующее ему значение E_n — уровнем энергии. Состояние частицы, в котором она обладает наименьшей энергией (в этом случае $n = 1$), называется *основным состоянием*. Все остальные состояния являются *возбужденными*: значение $n = 2$ отвечает первому возбужденному состоянию, значение $n = 3$ — второму возбужденному состоянию и т. д.

Следует отметить, что минимальное значение энергии частицы, находящейся в основном состоянии, отлично от нуля. Этот результат согласуется с соотношением неопределенностей и является общим для всех задач квантовой механики. В классической механике минимальную энергию, равную нулю, имеет покоящаяся в яме частица. Такого состояния покоя у квантовой частицы не существует.

Обсудим подробнее вопрос о дискретности энергетического спектра. Разность значений энергий ΔE_n n-го и $(n+1)$-го энергетических уровней равна

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}(2n+1).$$

Оценим величину ΔE_n для конкретных случаев.

Случай 1. Рассмотрим молекулу газа массой $m_0 \approx 10^{-27}$ кг в сосуде размером $a \approx 0{,}1$ м. При этом для $n > 1$

$$\Delta E_n \approx 6{,}8 \cdot 10^{-20} n \text{ эВ}.$$

Энергетическое расстояние между соседними уровнями оказывается столь малым по сравнению с энергией теплового хаотического движения молекулы kT (при комнатной температуре $kT \approx \approx 2{,}6 \cdot 10^{-2}$ эВ), что практически можно говорить о сплошном энергетическом спектре движущейся молекулы.

Случай 2. Рассмотрим свободный электрон ($m_0 = 0{,}9 \cdot 10^{-30}$ кг) в металле ($a \approx 0{,}01$ м). В этом случае

$$\Delta E_n \approx 7{,}5 \cdot 10^{-15} n \text{ эВ},$$

т. е. энергетическое расстояние между уровнями намного меньше характерного значения энергии электронов в металле, составляющего по порядку величины 1 эВ. Однако, как будет показано в гл. 6, наличие дискретных уровней даже в случае потенциальной ямы макроскопических размеров для электронов имеет принципиально важное значение.

Случай 3. Рассмотрим свободный электрон в атоме ($a \approx 10^{-10}$ м). При этом разность значений энергий соседних уровней составляет

$$\Delta E_n \approx 0{,}75n \text{ эВ}.$$

Это заметная величина по сравнению, например, с энергией связи электрона в атоме ($E_{\text{св}} \sim 10$ эВ). Поэтому дискретность энергетического спектра в этом случае оказывается весьма существенной.

Завершая рассмотрение энергетического спектра частицы в потенциальной яме (4.16), отметим еще одно его свойство. Запишем отношение ΔE_n к E_n:

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}.$$

При увеличении квантового числа n это отношение уменьшается $\left(\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n}\right)$, таким образом, дискретность энергетического спектра с возрастанием n играет все меньшую роль. Этот результат представляет собой проявление важного физического принципа — *принципа соответствия*, согласно которому при больших значениях квантового числа n, т. е. при $n \to \infty$, квантовая механика переходит в классическую механику.

Волновые функции частицы в одномерной потенциальной яме. Перейдем теперь к анализу волновых функций частицы, находящейся в одномерной потенциальной яме. Из (4.14) с учетом (4.15) получаем

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{\pi n x}{a}.$$

Множитель A находим из условия нормировки волновой функции (4.10)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx = A^2 \frac{a}{2} = 1.$$

Таким образом, $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$. Тогда волновые функции частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками имеют вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a}, \quad 0 < x < a, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (4.17)$$

Отметим, что эти функции, согласно общей теории (см. (3.54)), являются ортонормированными, т. е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn} \qquad (4.18)$$

где δ_{mn} — символ Кронекера.

Рассмотрим графики волновых функций $\psi_n(x)$ (рис. 4.3) для первых четырех значений квантового числа n. Волновые функции, отвечающие разным значениям n, существенно отличаются друг от друга. Если поместить начало координат в середину ямы, то волновые функции частицы внутри ямы для нечетных значений n будут четными функциями координаты, и наоборот, волновые функции для четных n — нечетными функциями координаты. При увеличении квантового числа n на единицу число точек пересечения волновой функции с осью x также увеличивается на единицу.

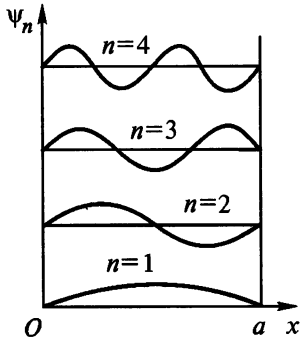


Рис. 4.3. Волновые функции частицы в потенциальной яме с непроницаемыми стенками

Отличительным свойством найденных волновых функций является излом, т. е. скачок производной на границах ямы. Этот скачок возникает вследствие того, что на границах ямы потенциальная энергия частицы $U(x)$ обращается в бесконечность. В случае ямы конечной глубины скачок производной волновой функции на границе ямы отсутствует, т. е. волновая функция является гладкой (см. 4.4).

На рис. 4.4 представлены графики квадрата модуля волновой функции $|\psi_n(x)|^2$, определяющего плотность вероятности нахождения частицы в потенциальной яме. Плотность вероятности оказывается существенно различной для разных состояний частицы, т. е. для разных значений квантового числа n. Так, например, в основном состоянии, т. е. при $n=1$, частица с наибольшей вероятностью находится в центре ямы, а в первом возбужденном состоянии, т. е. при $n=2$, вероятность обнаружить частицу в центре ямы равна нулю, хотя пребывание частицы в левой и правой поло-

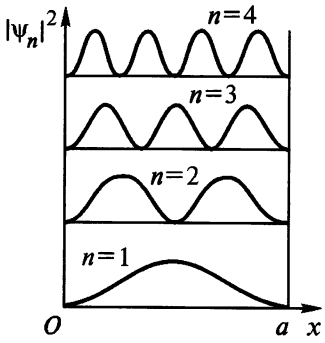


Рис. 4.4. Плотность вероятности нахождения частицы для различных квантовых состояний

винах ямы равновероятно. Такое поведение кардинально отличается от поведения в яме классической частицы, для которой плотность вероятности нахождения частицы одинакова в любой точке ямы.

Вероятность того, что частица в яме находится в области $x_1 \le x \le x_2$, определяется согласно выражению

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 \, dx = \int_{x_1}^{x_2} \psi_n^*(x)\psi_n(x)\, dx. \qquad (4.19)$$

Отметим, что с математической точки зрения задача о движении частицы в одномерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками аналогична задаче о колебании струны с закрепленными концами. И в том, и в другом случае из граничных условий следует, что на ширине ямы (на длине струны) должно укладываться целое число полуволн, т. е. $a = n\dfrac{\lambda}{2}$. В нашем случае λ — это дебройлевская длина волны частицы в яме $\lambda_Б$.

Двумерная потенциальная яма. Рассмотрим частицу, находящуюся в двумерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. В этом случае потенциальную энергию частицы $U(x, y)$ можно представить следующим образом:

$$U(x,y) = \begin{cases} 0, & (x,\ y) \in \Omega, \\ \infty, & (x,\ y) \notin \Omega, \end{cases}$$

где $\Omega = \{(x,y): 0 < x < a_1,\ 0 < y < a_2\}$ — прямоугольная область на плоскости (x, y) (рис. 4.5). Вне потенциальной ямы, как и в одномерном случае, волновая функция частицы $\psi(x, y) \equiv 0$.

Поскольку движение частицы в яме вдоль осей x и y происходит независимо, волновую функцию $\psi(x, y)$ запишем в виде произведения:

$$\psi(x, y) = \psi_1(x)\psi_2(y), \quad (4.20)$$

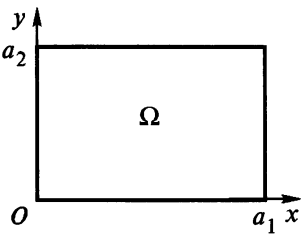


Рис. 4.5. Двумерная прямоугольная потенциальная яма

где $\psi_1(x)$ — функция, зависящая только от координаты x, а $\psi_2(y)$ — функция, зависящая только от координаты y. Подставляя выражение (4.20) в уравнение Шредингера (4.6), получаем

$$\Delta\psi(x, y) + \frac{2m_0}{\hbar^2} E\psi(x, y) = 0,$$

или

$$\psi_2(y)\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \psi_1(x)\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m_0}{\hbar^2} E\psi_1(x)\psi_2(y).$$

Разделив левую и правую части этого выражения на $\psi_1(x)\psi_2(y)$, приходим к соотношению

$$\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{1}{\psi_2(y)}\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m_0}{\hbar^2} E. \quad (4.21)$$

Первое слагаемое в левой части (4.21) зависит только от x, а второе — только от y. Поскольку их сумма равна постоянной величине, то это означает, что каждое из слагаемых также представляет собой постоянную величину, т. е.

$$\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = -\frac{2m_0}{\hbar^2} E_1,$$

$$\frac{1}{\psi_2(y)}\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m_0}{\hbar^2}E_2,$$

где E_1 и E_2 — константы, имеющие размерность энергии, причем $E_1 + E_2 = E$. Таким образом, уравнение Шредингера для двумерной задачи разделяется на два одномерных уравнения

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}E_1\psi_1(x) = 0,$$

$$\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}E_2\psi_2(y) = 0, \qquad (4.22)$$

решения которых были нами получены ранее (см. (4.17)). Функции $\psi_1(x)$ и $\psi_2(y)$ имеют вид

$$\psi_{1,n_1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a_1}}\sin\frac{\pi n_1 x}{a_1},$$

$$\psi_{2,n_2}(y) = \sqrt{\frac{2}{a_2}}\sin\frac{\pi n_2 y}{a_2},$$

где квантовые числа n_1 и n_2 принимают значения $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \ldots$ В результате нормированная волновая функция частицы, находящейся в двумерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, есть

$$\psi_{n_1, n_2}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{a_1 a_2}}\sin\frac{\pi n_1 x}{a_1}\sin\frac{\pi n_2 y}{a_2}, \qquad (4.23)$$
$$0 < x < a_1,\ 0 < y < a_2,\ n_1, n_2 = 1, 2, 3, \ldots$$

Энергия частицы в двумерной яме описывается выражением

$$E_{n_1,\,n_2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{n_1}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2}\right)^2\right],\ n_1, n_2 = 1, 2, 3, \ldots \qquad (4.24)$$

Энергетический спектр частицы (4.24), как и следовало ожидать, является дискретным и зависит от двух квантовых чисел n_1 и n_2.

Рассмотрим движение частицы в квадратной потенциальной яме, для которой $a_1 = a_2 = a$. В этом случае

$$E_{n_1,\,n_2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0 a^2}\left(n_1^2 + n_2^2\right),\ n_1, n_2 = 1, 2, 3, \ldots \qquad (4.25)$$

Отсюда следует, что одному и тому же энергетическому уровню E_{n_1,n_2}, определяемому квантовыми числами n_1 и n_2, при $n_1 \neq n_2$ соответствуют два различных состояния частицы, описываемых волновыми функциями ψ_{n_1,n_2} и ψ_{n_2,n_1}. Энергетический уровень, которому соответствует не одно, а несколько состояний частицы, называется *вырожденным энергетическим уровнем*, а число соответствующих ему состояний называется *кратностью вырождения* или степенью вырождения уровня. В случае двумерной квадратной потенциальной ямы кратность вырождения энергетического уровня, для которого $n_1 \neq n_2$, равна двум. Энергетический уровень, которому соответствует одно состояние частицы, называется невырожденным. В двумерной квадратной потенциальной яме невырожденными являются энергетические уровни, для которых $n_1 = n_2$.

Трехмерная потенциальная яма. Рассмотрим частицу, находящуюся в трехмерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (в потенциальном ящике). Обозначим через $G = \{(x, y, z)\colon 0 < x < a_1,\ 0 < y < a_2,\ 0 < z < a_3\}$ внутреннюю область прямоугольного параллелепипеда (рис. 4.6). В этой задаче потенциальная энергия частицы $U(x, y, z)$ имеет вид

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & (x, y, z) \in G, \\ \infty, & (x, y, z) \notin G. \end{cases}$$

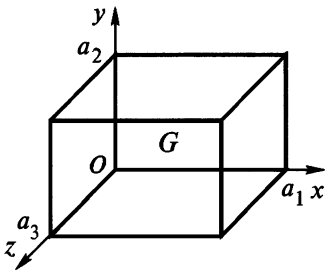


Рис. 4.6. Трехмерная потенциальная яма (потенциальный ящик)

Вне потенциальной ямы волновая функция частицы $\psi(x, y, z) \equiv 0$. Внутри ямы, так же как и в двумерном случае, представим волновую функцию в виде произведения

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z),$$

где функция $\psi_1(x)$ зависит только от координаты x; $\psi_2(y)$ — только от координаты y; $\psi_3(z)$ — только от координаты z.

Используя тот же самый метод решения, что и для двумерной ямы, из уравнения Шредингера в трехмерном случае получаем три одномерных уравнения:

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E_1\psi_1(x) = 0,$$

$$\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E_2\psi_2(y) = 0,$$

$$\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E_3\psi_3(z) = 0,$$

где $E_1 + E_2 + E_3 = E$. Решение этих уравнений, обращающееся в нуль на границе области G, т. е. на непроницаемых стенках потенциального ящика, определяет вид нормированной волновой функции частицы

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a_1 a_2 a_3}} \sin\frac{\pi n_1 x}{a_1} \sin\frac{\pi n_2 y}{a_2} \sin\frac{\pi n_3 z}{a_3} \qquad (4.26)$$

и ее энергетический спектр

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{n_1}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{a_3}\right)^2\right]. \qquad (4.27)$$

Здесь квантовые числа $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \ldots$ Отметим, что и квантовое состояние частицы, и ее энергия в случае трехмерной потенциальной ямы задаются тремя квантовыми числами.

Рассмотрим движение частицы в кубической потенциальной яме, т. е. будем считать, что $a_1 = a_2 = a_3 = a$. В этом случае энергетический спектр частицы

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \ldots \qquad (4.28)$$

Энергетические уровни в кубической яме, для которых $n_1 = n_2 = n_3$, являются невырожденными, все остальные уровни вырождены. Вопрос о кратности вырождения энергетических уровней в кубической яме рассмотрен в задаче 4.4.

□ **Задача 4.3.** Частица массой m_0 находится в двумерной квадратной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками во втором возбужденном состоянии. Найдите вероятность обнаружения частицы в области $0 < x \le \frac{a}{3}$, $0 < y \le \frac{a}{3}$, где a — сторона ямы, а также разность значений энергий второго и первого возбужденных состояний.

Решение. Волновая функция частицы, находящейся в двумерной квадратной потенциальной яме, согласно (4.23), имеет вид

$$\psi_{n_1, n_2}(x, y) = \frac{2}{a}\sin\frac{\pi n_1 x}{a}\sin\frac{\pi n_2 y}{a},$$

а ее энергетический спектр описывается выражением

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}\left(n_1^2 + n_2^2\right),$$

▽

где квантовые числа $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \ldots$ Первому возбужденному состоянию частицы отвечают квантовые числа $n_1 = 1, \quad n_2 = 2$ (или, наоборот, $n_1 = 2, \quad n_2 = 1$). Следовательно, соответствующий ему энергетический уровень оказывается двукратно вырожденным. Второму возбужденному состоянию отвечают квантовые числа $n_1 = n_2 = 2$, соответствующий ему энергетический уровень невырожден.

Вероятность обнаружить частицу в области $0 < x \le \frac{a}{3}$, $0 < y \le \frac{a}{3}$ определяется выражением

$$P = \int_0^{a/3} \int_0^{a/3} \left|\psi_{2,2}(x, y)\right|^2 dxdy =$$

$$= \frac{4}{a^2} \int_0^{a/3} \int_0^{a/3} \sin^2 \frac{2\pi x}{a} \sin^2 \frac{2\pi y}{a} dxdy = \left(\frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{8\pi}\right)^2 \approx 0,07.$$

Разность значений энергий второго и первого возбужденных состояний частицы равна

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}(8-5) = \frac{3}{2}\frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0 a^2}.$$

Задача 4.4. Частица массой m_0 находится в трехмерной кубической потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Сторона куба равна a. Найдите: а) энергию 6-го уровня; б) разность энергий 6-го и 5-го уровней; в) кратность вырождения 6-го уровня.

Решение. Энергия частицы, находящейся в трехмерной кубической потенциальной яме, согласно (4.28), может принимать значения

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right),$$

где квантовые числа $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \ldots$ Основному состоянию частицы, т. е. состоянию с наименьшей энергией, отвечают квантовые числа $n_1 = n_2 = n_3 = 1$. Энергетические уровни возбужденных

состояний частицы определяются приведенным выражением для E_{n_1, n_2, n_3} при последовательном увеличении суммы квадратов квантовых чисел $\sum_{i=1}^{3} n_i^2$ (см. таблицу).

Номер уровня	Квантовые числа (n_1, n_2, n_3)	$\sum_{i=1}^{3} n_i^2$
1	(1, 1, 1)	3
2	(1, 1, 2), (1, 2, 1), (2, 1, 1)	6
3	(1, 2, 2), (2, 1, 2), (2, 2, 1)	9
4	(1, 1, 3), (1, 3, 1), (3, 1, 1)	11
5	(2, 2, 2)	12
6	(1, 2, 3), (1, 3, 2), (2, 1, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2), (3, 2, 1)	14

Как следует из таблицы, 6-му энергетическому уровню соответствует сумма квадратов квантовых чисел, равная четырнадцати, следовательно,

$$E_6 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}14 = 7\frac{\pi^2\hbar^2}{m_0a^2}.$$

Для разности значений энергий 6-го и 5-го уровней получаем

$$\Delta E = E_6 - E_5 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}(14-12) = \frac{\pi^2\hbar^2}{m_0a^2}.$$

Обсудим теперь вопрос о кратности вырождения энергетических уровней частицы, находящейся в трехмерной кубической яме. Если квантовые числа n_1, n_2, и n_3 равны между собой, то соответствующий энергетический уровень оказывается невырожденным.

Таковы, например, энергетические уровни, отвечающие набору квантовых чисел (1, 1, 1), (2, 2, 2) и т. д. Если два из трех квантовых чисел равны между собой, но не равны третьему квантовому числу, то энергетический уровень имеет кратность вырождения, равную трем. В частности, трехкратно вырожденными являются 2, 3 и 4-й энергетические уровни. И наконец, если квантовые числа не равны между собой, т. е. если $n_1 \neq n_2 \neq n_3$, то кратность вырождения определяется числом возможных перестановок из трех чисел, т. е. равна шести. Именно эта ситуация реализуется для 6-го энергетического уровня. Таким образом, кратность вырождения 6-го уровня $K_6 = 6$.

Задача 4.5. Нуклон в ядре за счет действия ядерных сил находится в сферической потенциальной яме радиуса $a = 10^{-14}$ м с непроницаемыми стенками. Полагая, что основное состояние частицы в поле ядерных сил является сферически симметричным, оцените нижний энергетический уровень нуклона в ядре. Массу покоя нуклона считать равной $m_0 = 1{,}67 \cdot 10^{-27}$ кг.

Решение. Ядра атомов состоят из протонов и нейтронов. Эти частицы в ядерном взаимодействии ведут себя одинаковым образом, поэтому и протоны, и нейтроны в ядре называют общим названием — нуклоны.

Мощные короткодействующие ядерные силы удерживают нуклоны в ядре. По условию задачи поле ядерных сил $U(r)$ в первом приближении можно моделировать сферической потенциальной ямой с непроницаемыми стенками:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < a, \\ \infty, & r > a. \end{cases}$$

Здесь r — расстояние нуклона от центра ядра, а a — радиус потенциальной ямы, равный по порядку величины размеру ядра.

Стенки рассматриваемой потенциальной ямы ($r = a$) непроницаемы для частицы вследствие бесконечности их энергетической высоты. Поэтому вне ямы, т. е. при $r > a$, волновая функция нуклона равна нулю. Это означает, что нуклон находится только внутри ямы, где $0 \leq r < a$.

Чтобы найти энергию нуклона в сферической потенциальной яме, нужно решить уравнение Шредингера для стационарных состояний (4.6). С учетом того, что внутри ямы потенциальная энергия нуклона $U = 0$, уравнение Шредингера запишем в виде

$$\Delta\psi + \frac{2m_0E}{\hbar^2}\psi = 0, \quad 0 \le r < a.$$

Так как в этой задаче силовое поле имеет сферическую симметрию, следует перейти в сферическую систему координат и рассматривать волновую функцию ψ как функцию радиальной координаты r и угловых переменных ϑ и φ, т. е. $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi)$. Но поскольку, согласно условию задачи, основное состояние частицы в яме является сферически симметричным, т. е. не зависит от углов ϑ и φ, мы будем считать, что волновая функция частицы зависит только от радиальной координаты r. В этом случае оператор Лапласа имеет вид

$$\Delta\psi(r) = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi(r)}{dr}\right) = \frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\psi(r)}{dr}.$$

Таким образом, уравнение Шредингера для частицы в сферической потенциальной яме можно представить в виде

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\psi}{dr} + \frac{2m_0E}{\hbar^2}\psi = 0.$$

Искомое решение этого уравнения должно удовлетворять двум условиям: $|\psi(0)| < \infty$ и $\psi(a) = 0$. Первое из этих условий является следствием ограниченности волновой функции в любой точке пространства, а второе — следствием непрерывности волновой функции с учетом непроницаемости стенок потенциальной ямы.

Будем искать волновую функцию $\psi(r)$ в виде $\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$. Подставляя ее в уравнение Шредингера, получаем уравнение для функции $u(r)$

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2m_0E}{\hbar^2}u = 0, \quad 0 \le r < a,$$

с граничными условиями $u(0) = 0$ и $u(a) = 0$.

▽ Эта задача формально полностью эквивалентна задаче о движении частицы в одномерной потенциальной яме шириной a с бесконечно высокими стенками (см. 4.2). Поэтому с учетом соотношений (4.16), (4.17) ее решения можно записать в виде

$$u_n(r) = A\sin\frac{n\pi r}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Возвращаясь к функции $\psi(r)$, запишем ненормированные (A = const) волновые функции

$$\psi_n(r) = A\frac{\sin\dfrac{n\pi r}{a}}{r}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

являющиеся решением исходной задачи и описывающие все возможные сферически симметричные квантовые состояния частицы в данной потенциальной яме. Этим квантовым состояниям соответствуют значения полной энергии частицы

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

При $n = 1$ это выражение определяет минимально возможную полную энергию нуклона в рассматриваемой модели ядра. Подставляя численные значения $m_0 = 1{,}67\cdot10^{-27}$ кг и $a = 10^{-14}$ м, находим $E_{\min} = 3{,}3\cdot10^{-13}$ Дж = $2{,}1\cdot10^6$ эВ = 2,1 МэВ. Это значение энергии существенно превышает значение энергии электрона в атоме, что указывает на возможность выделения в ядерных процессах энергии, в миллионы раз превышающей энергию химических реакций. Осуществление реакций деления тяжелых ядер и синтеза легких ядер с выделением ядерной энергии подтверждает этот вывод, полученный как следствие законов квантовой механики. ■

4.3. Движение частицы в областях потенциального порога и потенциального барьера

В 4.2 было рассмотрено движение частицы в ограниченной области пространства — финитное движение. Перейдем теперь к

анализу случаев, в которых частица, находящаяся в силовых полях, способна уходить на бесконечность, т. е. приступим к рассмотрению инфинитного движения частицы.

Движение частицы в области потенциального порога. Рассмотрим движение частицы в силовом поле, в котором ее потенциальная энергия $U(x)$ имеет вид

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0, & x > 0. \end{cases}$$

Такое силовое поле называют *потенциальным порогом* (потенциальной стенкой). Оно может быть использовано для моделирования различных силовых полей с резкой границей. На границе порога, т. е. при $x = 0$, потенциальная энергия частицы скачком меняется на конечную величину U_0 (рис. 4.7).

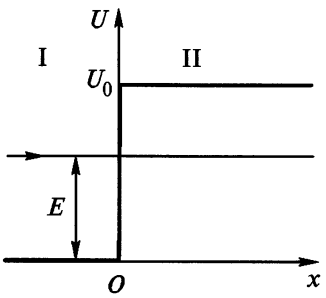


Рис. 4.7. Прямоугольный потенциальный порог

Обозначим область слева от порога $(x < 0)$ цифрой I и все решения для этой области будем отмечать индексом 1. Область справа от порога $(x > 0)$ обозначим цифрой II и будем отмечать соответствующие ей решения индексом 2.

Уравнение Шредингера для частицы в таком силовом поле имеет вид:

в области I

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E\psi_1 = 0,$$

в области II

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U_0)\psi_2 = 0.$$

Рассмотрим сначала случай, когда энергия частицы E меньше высоты потенциального порога U_0, т. е. $E < U_0$. В этом случае мы имеем дело с *высоким потенциальным порогом*. Вводя обозначения

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}E} \quad \text{и} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_0 - E)}, \tag{4.29}$$

получаем уравнения Шредингера для областей I и II:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \tag{4.30а}$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - k_2^2\psi_2 = 0. \tag{4.30б}$$

Решения уравнений (4.30а), (4.30б) запишем в виде

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \tag{4.31а}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}. \tag{4.31б}$$

Отметим, что полученные волновые функции ψ_1 и ψ_2, описывающие состояние частицы в областях I и II, в случае высокого потенциального порога имеют существенно различный вид. Первое слагаемое в выражении для волновой функции ψ_1 описывает плоскую волну де Бройля, распространяющуюся вдоль оси x из $-\infty$ к области порога, т. е. слева направо. Аналогично, второе слагаемое описывает плоскую дебройлевскую волну, распространяющуюся вдоль оси x в отрицательном направлении.

В том, что выражение e^{ikx} действительно описывает плоскую волну, легко убедиться, вспомнив про временной множитель $e^{-i\omega t}$ для волновой функции частицы, находящейся в стационарном состоянии (4.8). Умножая e^{ikx} на $e^{-i\omega t}$, получаем $e^{i(kx-\omega t)}$, т. е. пло-

скую волну де Бройля, распространяющуюся вдоль оси x в положительном направлении. Аналогично e^{-ikx} соответствует плоской волне де Бройля, распространяющейся вдоль оси x в отрицательном направлении.

Таким образом, волновая функция $\psi_1(x)$ (4.31а) представляет собой сумму падающей на порог и отраженной от него плоских волн де Бройля, тогда как волновая функция $\psi_2(x)$ (4.31б), характеризующая движение частицы в области II, представляет собой сумму двух экспонент с действительными показателями степени.

Воспользуемся теперь условиями, налагаемыми на волновую функцию. Поскольку волновая функция должна быть ограниченной, а первое слагаемое в выражении для волновой функции $\psi_2(x)$ при x, стремящемся к бесконечности, неограниченно возрастает, то необходимо потребовать, чтобы коэффициент A_2 перед этим слагаемым был равен нулю. Далее, в силу того, что порог U_0 имеет конечную высоту, волновая функция на границе раздела областей I и II должна быть не только непрерывной, но и гладкой, т. е. иметь непрерывную производную. Приравнивание волновых функций и их производных на границе раздела двух областей, в которых волновая функция имеет разный вид, получило название сшивки волновых функций и их производных. В данном случае условия сшивки имеют вид

$$\psi_1(0) = \psi_2(0),$$
$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0),$$

или

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= B_2, \\ ik_1 A_1 - ik_1 B_1 &= -k_2 B_2. \end{aligned} \qquad (4.32)$$

Уравнения (4.32) позволяют выразить коэффициенты B_1 и B_2 через коэффициент A_1, т. е. через амплитуду падающей на порог волны де Бройля. Поскольку в подобных задачах все имеющие физический смысл величины, такие, например, как коэффициент отражения частицы от порога, коэффициент прохождения и т. д., выражаются через отношение коэффициентов B_1 и B_2 (или анало-

гичных им) к A_1, то без потери общности можно положить $A_1 = 1$. При этом для B_1 и B_2 из (4.32) получаем

$$B_1 = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}, \quad B_2 = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2}. \tag{4.33}$$

Таким образом, волновые функции частицы в случае высокого порога равны:

$$\psi_1(x) = e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} e^{-ik_1 x}, \quad x < 0, \tag{4.34а}$$

$$\psi_2(x) = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} e^{-k_2 x}, \quad x > 0. \tag{4.34б}$$

Отметим, что система уравнений (4.32) имеет решение при любых значениях коэффициентов k_1 и k_2, т. е. при любых значениях энергии E (напомним, что $E < U_0$). Это означает, что частица обладает непрерывным энергетическим спектром.

Найдем коэффициент отражения R, определяющий вероятность того, что частица отразится от высокого порога. Согласно физическому смыслу, коэффициент отражения

$$R = \frac{\left|\vec{j}_{\text{отр}}\right|}{\left|\vec{j}_{\text{пад}}\right|}, \tag{4.35}$$

где $\vec{j}_{\text{отр}}$ и $\vec{j}_{\text{пад}}$ — векторы плотности потока вероятности соответственно для отраженной (второе слагаемое в (4.34а)) и падающей (первое слагаемое в (4.34а)) волн. Напомним, что вектор плотности потока вероятности (см. (3.19)) определяется через волновую функцию ψ следующим образом:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m_0}\left[\psi \operatorname{grad}\psi^* - \psi^* \operatorname{grad}\psi\right]. \tag{4.36}$$

С учетом соотношений (4.34а) и (4.36) получаем

$$\left|\vec{j}_{\text{пад}}\right| = \frac{\hbar k_1}{m_0},$$

$$\left|\vec{j}_{\text{отр}}\right| = \frac{\hbar k_1}{m_0}\left|\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\right|^2.$$

Подставляя эти выражения в (4.35), находим, что

$$R = \left|\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\right|^2 = 1.$$

Коэффициент прохождения D частицы через порог (коэффициент прозрачности порога), определяющий вероятность того, что частица пройдет в область II имеет вид

$$D = \frac{\left|\vec{j}_{\text{пр}}\right|}{\left|\vec{j}_{\text{пад}}\right|},$$

где $\vec{j}_{\text{пр}}$ — вектор плотности потока вероятности для прошедшей волны $\psi_2(x)$ (4.34б). Подставляя $\psi_2(x)$ в (4.36), получаем, что $\vec{j}_{\text{пр}} = 0$, а следовательно, и $D = 0$.

Таким образом, в случае высокого порога (см. рис. 4.7) $R = 1$, $D = 0$ и выполняется условие $R + D = 1$.

Рассмотрим поведение частицы в области II высокого потенциального порога. Волновая функция частицы $\psi_2(x)$ (см. выражение (4.34б)) отлична от нуля и уменьшается с возрастанием x по экспоненциальному закону, а это означает, что существует отличная от нуля вероятность пребывания частицы под порогом, т. е. в области, в которой полная энергия частицы E меньше ее потенциальной энергии U_0. С точки зрения классической механики эта область для частицы является запрещенной, так как условие $E < U_0$ означает, что кинетическая энергия частицы должна быть отрицательной. Однако с точки зрения квантовой механики никакого противоречия здесь нет. Кинетическая энергия является функцией импульса частицы p, а потенциальная энергия — функ-

цией ее координаты x, но, согласно соотношению неопределенностей, одновременное точное определение координаты и импульса невозможно. Поэтому в квантовой механике представление полной энергии частицы в виде суммы одновременно точно определенных кинетической и потенциальной энергий, как уже отмечалось в 2.3, не имеет смысла.

Полученный результат означает, что микрочастицы могут проникать в области, которые для макроскопических частиц недоступны. Плотность вероятности нахождения частицы в области II определяется выражением

$$w_2(x) = \frac{dP}{dx} = |\psi_2(x)|^2 = \left|\frac{2k_1}{k_1 + ik_2}\right|^2 \exp(-2k_2 x) = \\ = \frac{4{k_1}^2}{{k_1}^2 + {k_2}^2} \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0 - E)}\,x\right] \tag{4.37}$$

и зависит от массы частицы m_0, разности энергий $U_0 - E$ и расстояния от границы порога x.

Найдем значение экспоненциального множителя в (4.37) для электрона, полагая $U_0 - E = 1$ эВ. При $x = 10^{-10}$ м, т. е. при расстоянии от порога, сравнимом с размерами атома,

$$\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0 - E)}\,x\right] \approx 0{,}29.$$

Мы видим, что вероятность найти электрон на таком расстоянии в области II высокого потенциального порога достаточно велика. При $x = 10^{-9}$ м

$$\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0 - E)}\,x\right] \approx 4{,}54 \cdot 10^{-8}.$$

Это означает, что вероятность пребывания электрона на таком расстоянии от порога ничтожно мала. Полученные оценки показывают, что в данном случае электрон с заметной вероятностью мо-

жет проникать в область II лишь на расстояния, сравнимые с размером атома.

Таким образом, хотя коэффициент отражения частицы от высокого барьера $R = 1$, т. е. отражение является полным, оно не обязательно происходит на самом пороге, т. е. на границе раздела областей I и II. С определенной вероятностью частица может проникнуть в область II и затем выйти из нее.

Интересно отметить, что рассмотренное явление имеет аналог в классической физике — явление полного внутреннего отражения в волновой оптике. В этом случае также происходит полное отражение при падении света на границу раздела оптически более плотной и менее плотной сред. При этом свет может проникать в оптически менее плотную среду, однако его амплитуда убывает с глубиной по экспоненциальному закону.

Перейдем теперь к анализу случая, когда энергия налетающей на порог частицы E превышает высоту потенциального порога U_0, т. е. $E > U_0$. Такой порог носит название *низкого потенциального порога*. В этом случае уравнение Шредингера для областей I и II имеет вид

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \tag{4.38а}$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0, \tag{4.38б}$$

где k_1 и k_2 определяются из соотношений

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}E} \quad \text{и} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U_0)}. \tag{4.39}$$

Решая уравнения (4.38а), (4.38б), получаем

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad x < 0, \tag{4.40а}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad x > 0. \tag{4.40б}$$

Будем считать, что частица приближается к порогу со стороны отрицательных значений x, т. е. движется слева направо. При этом

первое слагаемое в (4.40а) описывает падающую на порог волну де Бройля, а второе слагаемое — волну, отраженную от порога. Аналогично первое слагаемое в (4.40б) соответствует прошедшей через порог волне де Бройля. Поскольку отраженная волна в области II отсутствует, то коэффициент B_2 следует считать равным нулю, т. е. $B_2 = 0$.

Условие непрерывности волновых функций и их производных на границе (при $x = 0$) приводит к следующей системе уравнений для коэффициентов A_1, B_1 и A_2:

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2, \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 &= k_2 A_2. \end{aligned} \tag{4.41}$$

Полагая, как и в предыдущем случае, $A_1 = 1$, для B_1 и A_2 получаем

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}.$$

Таким образом, волновые функции частицы в случае ее движения в области низкого порога имеют вид

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x}, \\ \psi_2(x) &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x}, \end{aligned} \tag{4.42}$$

где k_1 и k_2 заданы соотношениями (4.39).

Для того чтобы найти коэффициенты отражения R и прохождения D частицы через порог, определим векторы плотности потока вероятности для падающей, отраженной и прошедшей (преломленной) волн де Бройля. Подставляя найденные волновые функции (4.42) в (4.36), получаем

$$\left|\vec{j}_{\text{пад}}\right| = \frac{\hbar k_1}{m_0},$$

$$\left|\vec{j}_{\text{отр}}\right| = \frac{\hbar k_1}{m_0} \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2,$$

$$\left|\vec{j}_{\text{пр}}\right| = \frac{\hbar k_2}{m_0}\left|\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right|^2. \qquad (4.43)$$

С учетом (4.35) и (4.43) коэффициент отражения частицы от низкого потенциального порога

$$R = \left|\frac{\vec{j}_{\text{отр}}}{\vec{j}_{\text{пад}}}\right| = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}}\right)^2. \qquad (4.44)$$

Отсюда следует, что при $E > U_0$ существует отличная от нуля вероятность отражения частицы от низкого потенциального порога, т. е. возможно так называемое *надбарьерное отражение*. Этот эффект является чисто квантовым и объясняется наличием у частицы волновых свойств. Макроскопическая частица, подчиняющаяся законам классической механики, при прохождении через низкий потенциальный порог не испытывает отражения, в области порога лишь уменьшается ее кинетическая энергия.

Интересно отметить, что если потенциальный порог "обратить", т. е. считать, что $U(x) = U_0$ в области I и $U(x) = 0$ в области II, то коэффициент отражения частицы с заданной полной энергией $E > U_0$ не изменится. Этот вывод следует из того, что в задаче с "обращенным" порогом во всех формулах k_1 и k_2 поменяются местами, но при этом, согласно (4.44), коэффициент отражения R не изменится. Этот результат можно сформулировать и другими словами: вероятность отражения частицы от низкого потенциального порога не зависит от направления движения частицы.

Коэффициент прохождения D частицы через порог, согласно (4.43), принимает вид

$$D = \frac{\left|\vec{j}_{\text{пр}}\right|}{\left|\vec{j}_{\text{пад}}\right|} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 4\frac{\sqrt{1 - U_0/E}}{\left(1 + \sqrt{1 - U_0/E}\right)^2}. \qquad (4.45)$$

Таким образом, и в случае низкого порога $R + D = 1$, что естественно было ожидать с точки зрения сложения вероятностей: па-

дающая на порог частица либо отразится от него, либо пройдет в область II.

Следует отметить, что волна де Бройля, описывающая движение частицы в области порога, на границе раздела областей I и II испытывает преломление, связанное с изменением скорости частицы v и ее длины волны $\lambda_Б$. Относительный показатель преломления n (см. 2.1) определяется как

$$n = \frac{\lambda_Б^{(1)}}{\lambda_Б^{(2)}} = \frac{v_2}{v_1}, \qquad (4.46)$$

где $\lambda_Б^{(1)}$ и $\lambda_Б^{(2)}$ — длины волн де Бройля, а v_1 и v_2 — скорости движения частицы соответственно в областях I и II. Выражая v_1 и v_2 через кинетическую энергию частицы, получаем

$$n = \sqrt{\frac{E - U_0}{E}} = \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}.$$

Проведенный анализ еще раз указывает на глубокую аналогию, существующую между квантовой механикой и волновой оптикой.

Прохождение частицы через потенциальный барьер. Область пространства, в которой потенциальная энергия частицы U больше, чем в окружающих областях, называется *потенциальным барьером*. Анализ движения частицы в области потенциального барьера начнем с рассмотрения простейшего случая одномерного прямоугольного потенциального барьера (рис. 4.8), для которого потенциальная энергия частицы

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x<0, \\ U_0, & 0<x<a, \\ 0, & x>a. \end{cases}$$

Обозначим цифрой I область слева от барьера, цифрой II — область $0 < x < a$ и цифрой III — область справа от барьера. Будем

считать, что частица приближается к барьеру со стороны отрицательных значений x, т. е. движется слева направо. Рассмотрим случай, когда энергия частицы E меньше высоты потенциального барьера U_0, т. е. $E < U_0$ (случай $E > U_0$ рассмотрен в задаче 4.7).

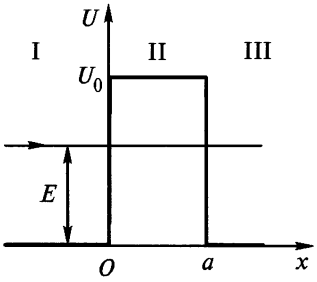


Рис. 4.8. Прямоугольный потенциальный барьер

Уравнение Шредингера для областей I, II и III имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_2(x) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_3(x) &= 0, \end{aligned} \qquad (4.47)$$

где $k_1 = \sqrt{\dfrac{2m_0E}{\hbar^2}}$, $k_2 = \sqrt{\dfrac{2m_0(U_0 - E)}{\hbar^2}}$.

Волновые функции, являющиеся решением уравнений (4.47), запишем следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x}, \\ \psi_2(x) &= A_2e^{k_2x} + B_2e^{-k_2x}, \\ \psi_3(x) &= A_3e^{ik_1x} + B_3e^{-ik_1x}. \end{aligned} \qquad (4.48)$$

Как обычно, будем считать амплитуду падающей на барьер волны де Бройля $A_1 = 1$. Коэффициент B_3 положим равным нулю, принимая во внимание, что при движении частицы слева направо в области III может распространяться только проходящая волна.

Условие непрерывности волновых функций и их производных на границах барьера, т. е. при $x = 0$ и $x = a$, приводят к системе четырех уравнений с четырьмя неизвестными — коэффициентами B_1, A_2, B_2, A_3:

$$\begin{aligned} &1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ &ik_1 - ik_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2, \\ &A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} = A_3 e^{ik_1 a}, \\ &k_2 A_2 e^{k_2 a} - k_2 B_2 e^{-k_2 a} = ik_1 A_3 e^{ik_1 a}. \end{aligned} \tag{4.49}$$

Эта система имеет решение при любых значениях параметров k_1 и k_2, т. е. при любых значениях энергии частицы E. Следовательно, энергетический спектр частицы является непрерывным.

Основное внимание в данном случае сосредоточим на анализе прохождения частицы через барьер. Решая систему уравнений (4.49), для амплитуды A_3 прошедшей через барьер волны получаем

$$A_3 = \frac{4ik_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1 + ik_2)^2 e^{k_2 a} - (k_1 - ik_2)^2 e^{-k_2 a}}.$$

Рассчитаем плотности потоков вероятности для падающей на барьер и прошедшей через него волн. С учетом (4.36) и (4.48) найдем, что

$$\left|\vec{j}_{\text{пад}}\right| = \frac{\hbar k_1}{m_0},$$

$$\left|\vec{j}_{\text{пр}}\right| = \frac{\hbar k_1}{m_0}|A_3|^2.$$

Коэффициент прохождения частицы через барьер

$$D = \frac{\left|\vec{j}_{\text{пр}}\right|}{\left|\vec{j}_{\text{пад}}\right|} = |A_3|^2 = \left[1 + \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2}\right)^2 \operatorname{sh}^2 k_2 a\right]^{-1}. \tag{4.50}$$

В случае, когда ширина барьера a удовлетворяет условию $k_2 a >> 1$ (приведенные выше численные оценки показывают, что для электрона это условие выполняется уже при ширине a в несколько атомных слоев), $e^{-k_2 a} << 1$ и гиперболический синус можно заменить экспонентой $\mathrm{sh} k_2 a \approx \frac{1}{2} e^{k_2 a}$. При этом коэффициент прохождения D частицы через барьер примет вид

$$D = \frac{16 k_1^2 k_2^2}{\left(k_1^2 + k_2^2\right)^2} e^{-2k_2 a}.$$

Подставляя сюда выражения для k_1 и k_2 (см. (4.47)), получаем

$$D = D_0 \exp\left[-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0 - E)}\right].$$

Здесь коэффициент $D_0 = 16\frac{E}{U_0}\left(1 - \frac{E}{U_0}\right)$ является медленно изменяющейся функцией отношения $\frac{E}{U_0}$, численное значение которой сравнимо с единицей. Основной вклад в зависимость D от параметров задачи дает экспонента. Поэтому в большинстве случаев при оценке коэффициента прохождения через потенциальный барьер полагают $D_0 \approx 1$. При этом выражение для D, которое используется при расчетах прозрачности барьера, принимает вид

$$D = \exp\left[-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0 - E)}\right]. \qquad (4.51)$$

Отсюда следует, что коэффициент прохождения D испытывает сильную (экспоненциальную) зависимость от ширины барьера a, массы частицы m_0 и разности энергий $U_0 - E$.

Обобщим полученный результат на случай потенциального барьера произвольной формы. Для этого представим потенциаль-

ный барьер в виде последовательности большого числа узких прямоугольных потенциальных барьеров, расположенных один за другим (рис. 4.9, *а*). Будем считать, что барьер имеет достаточно плавную форму, т. е. полагать, что его высота на расстоянии, сравнимом с длиной волны де Бройля, изменяется незначительно. Будем также пренебрегать надбарьерным отражением частицы.

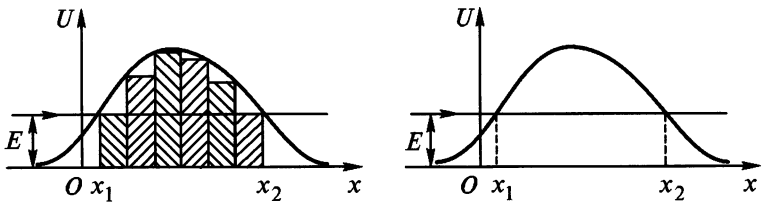
Волна де Бройля, прошедшая через i-й прямоугольный барьер, представляет собой волну, падающую на $(i + 1)$-й барьер и т. д. Вероятность прохождения частицы через цепочку последовательно расположенных потенциальных барьеров равна произведению вероятностей прохождения через каждый из барьеров. Таким образом, коэффициент прохождения D равен произведению коэффициентов прохождения для каждого барьера:

$$D = \prod_i D_i \approx \prod_i \exp\left\{-\frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2m_0\left[U(x_i) - E\right]}\right\} = \\ = \exp\left\{-\sum_i \frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2m_0\left[U(x_i) - E\right]}\right\}, \tag{4.52}$$

где Δx_i — ширина i-го барьера; $U(x_i)$ — высота i-го барьера. Переходя в (4.52) в пределе $\Delta x_i \to 0$ от суммирования к интегрированию, получаем

$$D = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m_0[U(x) - E]}\,dx\right\}, \tag{4.53}$$

где x_1 и x_2 — значения координат, при которых $U(x) = E$ (рис. 4.9, *б*).



а *б*

Рис. 4.9. Прохождение частицы через потенциальный барьер:
а — приближение цепочкой прямоугольных барьеров; *б* — потенциальный барьер произвольной формы

Туннельный эффект. Прохождение частицы через потенциальный барьер, высота которого превышает энергию частицы, получило название туннельного эффекта (частица, проходя под барьером, как бы движется в туннеле). Отметим, что туннельный эффект представляет собой чисто квантовое явление. Классическая частица, подходя к барьеру, высота которого больше ее полной энергии, отражается от него. Пройти через такой барьер, т. е. через область, в которой ее кинетическая энергия стала бы отрицательной, она не может. Квантовая частица может пройти через этот потенциальный барьер, причем вероятность ее прохождения испытывает сильную (экспоненциальную) зависимость от массы частицы, а также от вида потенциального барьера $U(x)$. Подчеркнем, что при прохождении через барьер полная энергия частицы E не изменяется.

Туннельный эффект объясняет ряд важных физических явлений, таких, например, как *холодная эмиссия электронов из металла, альфа-распад радиоактивных ядер*, контактная разность потенциалов. Кроме того, туннельный эффект находит очень широкое применение в технических приложениях. В частности, на его основе был создан сканирующий туннельный микроскоп, который произвел подлинную революцию в физике и технике поверхности и имеет широкие перспективы в связи с развитием нанотехнологий.

Холодная эмиссия электронов из металла. Как известно, для того, чтобы вырвать электрон из металла, ему нужно сообщить дополнительную энергию, равную работе выхода. Это означает, что электрон в металле находится в потенциальной яме. Если вблизи поверхности металла имеется электрическое поле напряженностью $\vec{\mathcal{E}}$, способствующее выходу электронов из металла, то потенциальная энергия электрона вблизи поверхности металла может быть представлена в виде

$$U(x) = U_0 - e\mathcal{E}x, \tag{4.54}$$

где U_0 — глубина потенциальной ямы. Таким образом, на границе металл-вакуум возникает потенциальный барьер треугольной формы (рис. 4.10). Туннелирование электронов через этот барьер и объясняет явление холодной или, как ее еще называют, автоэлектронной, эмиссии — выход электронов из металла даже при низких температурах. Детальный анализ и расчет тока холодной эмиссии

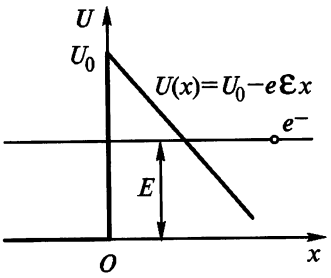


Рис. 4.10. Потенциальный барьер для электронов на границе металл — вакуум при наличии электрического поля

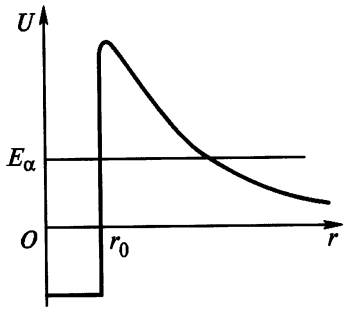


Рис. 4.11. Потенциальный барьер α-частицы в поле ядра

электронов, а также описание ее практического применения содержится в 6.6.

Радиоактивный альфа-распад. Еще одним важным примером прохождения частиц через потенциальный барьер является α-распад радиоактивных ядер. Он заключается в самопроизвольном испускании радиоактивным ядром α-частицы, т. е. ядра гелия, состоящего из двух протонов и двух нейтронов. Ядро, испускающее α-частицу, называется материнским ядром, после испускания оно превращается в дочернее ядро. Потенциальная энергия α-частицы в поле дочернего ядра представлена на рис. 4.11.

На больших расстояниях r между α-частицей и ядром действуют силы кулоновского отталкивания и потенциальная энергия частицы

$$U(r)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze\cdot 2e}{r},$$

где Ze — заряд дочернего ядра; $2e$ — заряд α-частицы. Кулоновские силы между α-частицей и дочерним ядром действуют вплоть до расстояний, сравнимых с размерами ядра r_0 и составляющих по порядку величины $10^{-14}\ldots10^{-15}$ м. При $r\le r_0$ между α-частицей и ядром действуют более мощные силы — силы ядерного притяжения, которые значительно уменьшают потенциальную энергию частицы. Таким образом, внутри ядра α-частица находится в потенциальной яме, выйти из которой она может только за счет туннельного эффекта. Результаты расчета вероятности туннелирования не очень сильно зависят от формы ямы, так что яму можно считать прямоугольной и полагать, что ее ширина определяется радиусом ядра r_0.

Результаты исследований показывают, что высота потенциального барьера при α-распаде составляет 20...30 МэВ, тогда как энергия испущенных α-частиц лежит в пределах 5...6 МэВ, т. е. оказывается существенно меньше высоты барьера. Это означает, что α-частицы могут испускаться ядрами только за счет туннельного эффекта.

Как будет показано в 7.2, закон радиоактивного распада, определяющий изменение со временем числа нераспавшихся ядер $N(t)$, имеет вид

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}, \tag{4.55}$$

где N_0 — число нераспавшихся ядер в начальный момент времени $t = 0$; λ — постоянная распада, характеризующая скорость распада ядер.

Найдем связь между постоянной распада λ и коэффициентом прохождения D α-частицы через потенциальный барьер. Пусть радиус ядра равен r_0, а скорость α-частицы в ядре равна v. Тогда число ударов α-частицы о стенки потенциального барьера в единицу времени равно $\frac{v}{2r_0}$. Так как вероятность туннелирования при одном ударе о стенку равна D, а общее число ядер равно $N(t)$, то число ядер dN, в которых произойдет испускание α-частиц за время от момента t до момента $t + dt$, составит

$$dN = -N(t)\frac{v}{2r_0}Ddt.$$

Знак минус в этом соотношении взят потому, что dN имеет смысл приращения числа нераспавшихся ядер, а их число на самом деле убывает.

С другой стороны, дифференцируя (4.55) по времени, получаем $dN = -\lambda N(t)dt$. Сравнивая эти два соотношения, находим, что

$$\lambda = \frac{v}{2r_0}D,$$

т. е. постоянная распада прямо пропорциональна коэффициенту прохождения D α-частицы через потенциальный барьер.

Сканирующий туннельный микроскоп. Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) был создан в 1982 г. сотрудниками исследовательского отдела фирмы IBM Г. Биннингом и Х. Рёрером. Благодаря ему были открыты уникальные возможности научных и прикладных исследовании в области нанотехники. Он явился первым техническим устройством, с помощью которого была осуществлена наглядная визуализация атомов и молекул. За создание СТМ Биннинг и Рёрер в 1986 г. были удостоены Нобелевской премии по физике.

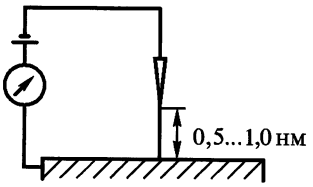


Рис. 4.12. Принципиальная схема СТМ

Принцип работы СТМ заключается в следующем: к поверхности проводящего образца на характерное межатомное расстояние z, составляющее доли нанометра, подводится очень тонкое металлическое острие (игла). При приложении между образцом и иглой разности потенциалов $U \sim 0{,}1 \ldots 1{,}0$ В в цепи (рис. 4.12) появляется электрический ток, обусловленный туннелированием электронов через зазор между ними.

Сила туннельного тока составляет $I_т \sim 1 \ldots 10$ нА, т. е. имеет значение, которое вполне можно измерить экспериментально.

Поскольку вероятность туннелирования через потенциальный барьер экспоненциально зависит от ширины барьера (см. (4.51)), то сила туннельного тока при увеличении зазора z между иглой и поверхностью образца убывает по экспоненте и уменьшается примерно на порядок при увеличении z на каждые 0,1 нм. Экспоненциальная зависимость туннельного тока от расстояния обеспечивает чрезвычайно высокую разрешающую способность СТМ. Вдоль оси z, перпендикулярной поверхности образца, разрешающая способность СТМ составляет $\Delta z \sim 10^{-3}$ нм, а вдоль осей x и y, параллельных поверхности образца, Δx, $\Delta y \sim 10^{-1}$ нм. Перемещая иглу СТМ вдоль поверхности образца, т. е. осуществляя сканирование поверхности, можно получать информацию о рельефе поверхности с атомным пространственным разрешением.

Существуют два варианта режима работы СТМ: режим постоянной высоты и режим постоянного тока. При работе в режиме

постоянной высоты острие иглы перемещается в горизонтальной плоскости над исследуемой поверхностью (рис. 4.13, *а*). Туннельный ток при этом изменяется, и по этим изменениям легко может быть определен рельеф поверхности образца.

При работе в режиме постоянного тока (рис. 4.13, *б*) используется система обратной связи, которая поддерживает постоянным ток туннелирования за счет перемещения острия иглы в вертикальном направлении. В этом случае информация о рельефе поверхности получается на основании данных о перемещении иглы.

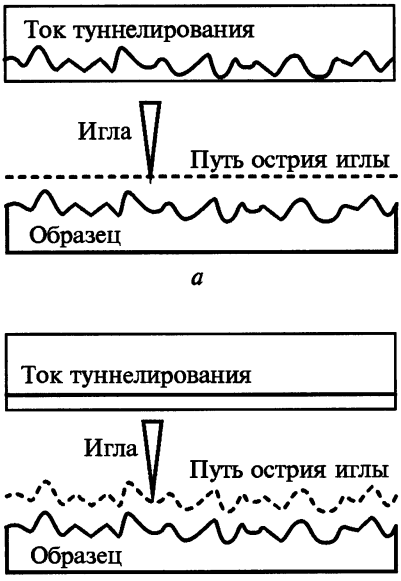


Рис. 4.13. Режимы работы СТМ:
а — режим постоянной высоты; *б* — режим постоянного тока

Общая схема СТМ приведена на рис. 4.14. С помощью системы грубого подвода и позиционирования иглу СТМ подводят к исследуемой поверхности на расстояние примерно 0,1 мкм. Дальнейшее перемещение иглы и исследование поверхности проводится с помощью специального сканирующего устройства. Это устройство изготовлено из пьезоэлектрика, т. е. вещества, способного изменять свои линейные размеры при приложении к нему электрического поля, и позволяет перемещать иглу СТМ над поверхностью образца с очень высокой точностью.

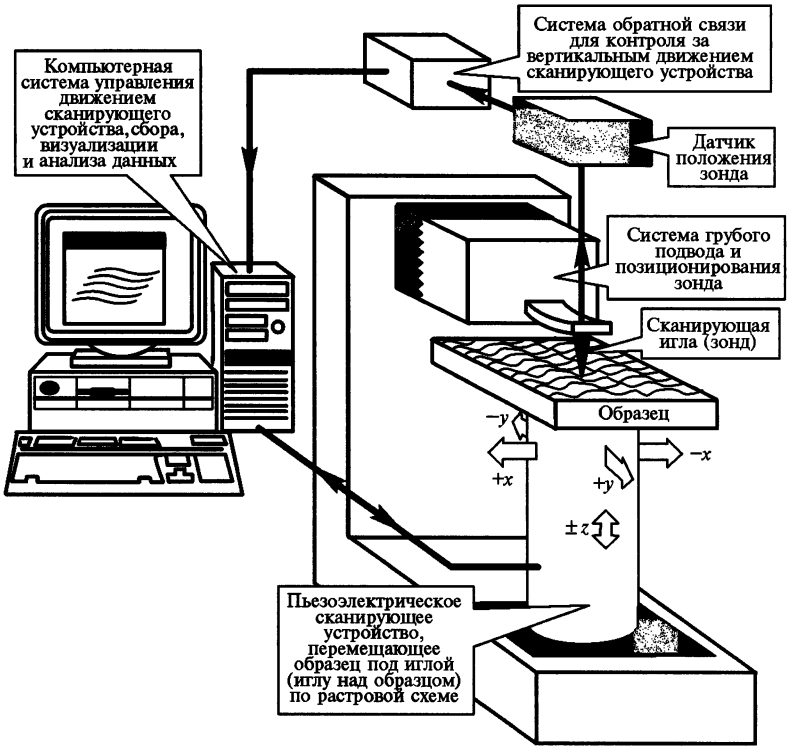


Рис. 4.14. Общая схема СТМ

Одним из наиболее важных узлов СТМ является игла (зонд), в качестве которой используется тонкая проволока из вольфрама, ванадия или другого проводящего материала. Для улучшения характеристик кончика иглы его подвергают электрохимическому травлению. Эксперименты показывают, что травление кончика иглы радиусом $\leq 0{,}2$ мкм практически обеспечивает разрешающую способность СТМ на атомном уровне.

Управление движением сканирующего устройства и контроль за работой системы обратной связи осуществляется компьютером. С его помощью проводится запись результатов измерения, их обработка и визуализация исследуемой поверхности. Типичные результаты исследований, выполненные с помощью СТМ, приведены на рис. 4.15, на котором представлены изображения молекул C_{60}, адсорбированных на поверхности кристалла меди.

Важно отметить, что СТМ в отличие от других электронных микроскопов не содержит линз, и, следовательно, получаемое в нем изображение не искажается из-за аберраций. Кроме того, энергия электронов, формирующих изображение в СТМ, не превышает нескольких электрон-вольт, т. е. оказывается меньше характерной энергии химической связи, что обеспечивает возможность неразрушающего контроля исследуемого образца. Напомним, что в электронной микроскопии высокого разрешения (см. 2.4) энергия электронов достигает сотен килоэлектрон-вольт, что приводит к образованию радиационных дефектов.

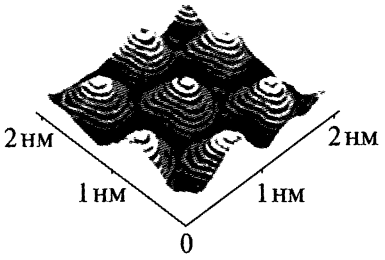


Рис. 4.15. Изображения молекул C_{60}, полученные с помощью СТМ

В настоящее время перспективны следующие области применения СТМ:

1. Исследование физических и химических свойств поверхности с разрешающей способностью на атомном уровне.

2. Нанометрия — исследование параметров шероховатости поверхности, процессов зародышеобразования при росте пленок, процессов химического или ионного травления, осаждения и т. д.

3. Нанотехнология — исследование и изготовление приборных структур нанометрового размера.

4. Исследование макромолекул, вирусов и других биологических структур.

Подводя итог описанию СТМ, следует отметить, что его возможности выходят далеко за рамки чисто микроскопических задач. С его помощью, например, можно заставить атомы перемещаться вдоль поверхности и собирать из них искусственные структуры нанометровых размеров. Так, в частности, с помощью острия сканирующего туннельного микроскопа из 35 атомов инертного газа ксенона, "рассыпанных" на поверхности никеля, была собрана аббревиатура фирмы IBM (рис. 4.16). Такие возможности СТМ делают его перспективным инструментом

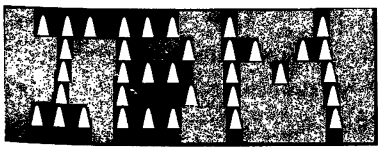


Рис. 4.16. Первые буквы, "набранные" атомами

при разработке и создании нанотехники будущего поколения, например квантового компьютера. СТМ явился прототипом целого семейства более совершенных сканирующих микроскопов. На базе СТМ был создан сканирующий атомно-силовой микроскоп, с помощью которого можно исследовать непроводящие вещества, микроскоп на магнитных силах, дающий возможность изучать магнитные свойства поверхности, и т. д.

Все сказанное выше о СТМ позволяет сделать вывод о том, что принцип действия СТМ настолько прост, а потенциальные возможности так велики, что следует ожидать его самого широкого применения в различных областях науки и техники уже в самом ближайшем будущем.

□ **Задача 4.6.** Частица массой m_0 падает слева на прямоугольный потенциальный порог высотой U_0, причем энергия частицы $E < U_0$. Найдите эффективную глубину $x_{эф}$ проникновения частицы в область высокого порога. Вычислите $x_{эф}$ для электрона, если $U_0 - E = 1$ эВ.

Решение. Поскольку, согласно условию задачи, энергия частицы E меньше высоты порога U_0, то мы имеем дело с высоким потенциальным порогом (см. рис. 4.7). В этом случае, как уже отмечалось выше, хотя коэффициент отражения частицы от порога равен единице, тем не менее существует вероятность обнаружить частицу в области под порогом, т. е. при $x > 0$. Согласно (4.37), плотность вероятности нахождения частицы в области под порогом имеет вид

$$w(x) = |\psi_2(x)|^2 = \frac{4k_1^2}{\left(k_1^2 + k_2^2\right)} \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0 - E)}\,x\right],$$

где k_1 и k_2 определяются из соотношений (4.29). Определим эффективную глубину $x_{эф}$ проникновения частицы в область потенциального порога как расстояние от границы порога, на котором плотность вероятности w обнаружения частицы уменьшается в e = 2,718 раз. Отсюда следует, что

$$\frac{w(x_{эф})}{w(0)} = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0 - E)}\,x_{эф}\right] = e^{-1}.$$

▽

Из этого выражения находим, что

$$x_{эф} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m_0(U_0 - E)}}.$$

В случае электрона, налетающего на потенциальный порог, для которого $U_0 - E = 1$ эВ, получаем

$$x_{эф} = \frac{1{,}05 \cdot 10^{-34}}{2\sqrt{2 \cdot 9{,}1 \cdot 10^{-31} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}}} \approx 10^{-10}\text{м} = 0{,}1 \text{ нм}.$$

Задача 4.7. Частица массой m_0 падает на прямоугольный потенциальный барьер высотой U_0 и шириной a. Энергия частицы $E > U_0$. Найдите: а) коэффициент прозрачности D барьера; б) значения энергии частицы, при которых она будет беспрепятственно проходить через такой барьер.

Решение. Обозначим цифрой I область $x < 0$, цифрой II область $0 < x < a$ и цифрой III область $x > a$. Решения уравнения Шредингера в этих трех областях имеют вид

$$\psi_1(x) = e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad x < 0,$$
$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad 0 < x < a,$$
$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x}, \quad x > a,$$

где $k_1 = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}$; $k_2 = \sqrt{\frac{2m_0(E - U_0)}{\hbar^2}}$.

Условия непрерывности волновых функций и их производных на границах барьера (при $x = 0$ и $x = a$) приводят к следующей системе уравнений:

$$1 + B_1 = A_2 + B_2,$$
$$ik_1 - ik_1 B_1 = ik_2 A_2 - ik_2 B_2,$$
$$A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a},$$
$$ik_2 A_2 e^{ik_2 a} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 a} = ik_1 A_3 e^{ik_1 a}.$$

Решая эту систему уравнений, находим амплитуду прошедшей волны

$$A_3 = \frac{4k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{-ik_2 a}}.$$

Коэффициент прохождения D частицы над потенциальным барьером выражается через плотности потока вероятности для падающей и прошедшей волн

$$\left|\vec{j}_{\text{пад}}\right| = \frac{\hbar k_1}{m_0}, \quad \left|\vec{j}_{\text{пр}}\right| = \frac{\hbar k_1}{m_0}\left|A_3\right|^2.$$

В итоге получаем

$$D = \frac{\left|\vec{j}_{\text{пр}}\right|}{\left|\vec{j}_{\text{пад}}\right|} = \left|A_3\right|^2 = \left|\frac{4k_1k_2e^{-ik_1a}}{\left(k_1+k_2\right)^2 e^{ik_2a} - \left(k_1-k_2\right)^2 e^{-ik_2a}}\right|^2.$$

Подставляя сюда выражения для k_1 и k_2, находим, что

$$D = \left[1+\frac{U_0{}^2 \sin^2 k_2a}{4E\left(E-U_0\right)}\right]^{-1}.$$

Коэффициент прохождения D обращается в единицу при $\sin k_2a = 0$, т. е. при

$$\sqrt{\frac{2m_0\left(E-U_0\right)}{\hbar^2}}\,a = \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

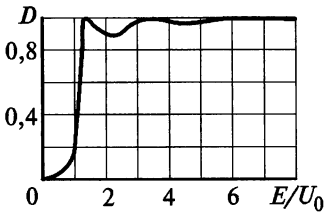
Таким образом, значения энергии частицы, при которых $D = 1$ и, следовательно, $R = 0$, равны

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}n^2 + U_0, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Следует подчеркнуть, что хотя значение $n = 0$ формально и удовлетворяет условию $\sin k_2a = 0$, но при $n = 0$ коэффициент прохождения D не будет равен единице. Дело в том, что при $n = 0$ энергия частицы $E = U_0$, т. е. $(E - U_0) = 0$, и параметр k_2 также равен нулю. Это означает, что числитель и знаменатель дроби в выражении для D равны нулю. Избавляясь от неопределенности, находим, что коэффициент прохождения при $E = U_0$

$$D = \left(1+\frac{m_0a^2U_0}{2\hbar^2}\right)^{-1}.$$

Рис. 4.17. Вероятность надбарьерного прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер при $\frac{m_0 a^2 U_0}{\hbar} = 8$



Зависимость коэффициента прохождения D частицы через барьер от энергии налетающей частицы E приведена на рис. 4.17.

4.4. Потенциальная яма конечной глубины

В 4.2 мы рассмотрели движение частицы в потенциальных ямах с бесконечно высокими стенками. Переход к анализу движения частицы в яме конечной глубины будем проводить поэтапно. Для этого сначала рассмотрим частицу в потенциальной яме с одной непроницаемой (бесконечно высокой) стенкой (рис. 4.18). Такая задача представляет практический интерес, поскольку потенциальная энергия двух частиц, между которыми действуют силы притяжения, например двух атомов, образующих молекулу, по виду близка к рассматриваемой модели.

Одномерная потенциальная яма с одной бесконечно высокой стенкой. Рассмотрим частицу, движущуюся в одномерной потенциальной яме, в которой ее потенциальная энергия имеет вид

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < a, \\ U_0, & x > 0. \end{cases}$$

При $x < 0$ потенциальная энергия частицы бесконечна и волновая функция $\psi(x)$, как мы уже знаем, обращается в нуль. Поэтому уделим основное внимание при решении данной задачи исследованию движения частицы в области $x > 0$.

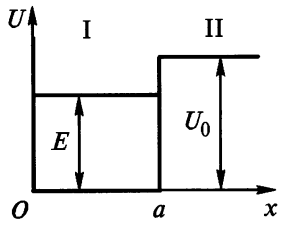


Рис. 4.18. Потенциальная яма с одной непроницаемой стенкой

Обозначим цифрой I область $0 < x < a$, а цифрой II — область $x > a$. Рассмотрим сначала случай, при котором полная энергия частицы $E < U_0$. Состояния частицы, в которых ее энергия $E < U_0$, называются связанными состояниями. Классическая частица с такими значениями полной энергии должна двигаться только внутри ямы, поскольку область вне ямы является для нее недоступной.

Уравнение Шредингера (4.6) в области I имеет вид

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E\psi_1 = 0, \tag{4.56}$$

а в области II —

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi_2 = 0. \tag{4.57}$$

Вводя обозначения

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}E} \quad \text{и} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_0 - E)}, \tag{4.58}$$

приводим уравнения (4.56) и (4.57) к виду

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \tag{4.59а}$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - k_2^2\psi_2 = 0. \tag{4.59б}$$

Решая уравнения (4.59а), (4.59б), находим, что

$$\psi_1(x) = A\sin(k_1 x + \alpha), \tag{4.60а}$$

$$\psi_2(x) = Be^{k_2 x} + Ce^{-k_2 x}. \tag{4.60б}$$

Здесь A, B, C и α — константы, значения которых следует определить.

Воспользуемся условиями, налагаемыми на волновую функцию. Поскольку волновая функция должна быть всюду конечной, а первое слагаемое в (4.60б) при $x \to \infty$ неограниченно возрастает, то необходимо потребовать, чтобы коэффициент B был равен нулю, т. е. чтобы $\psi_2(x) = Ce^{-k_2 x}$.

Перейдем теперь к анализу граничных условий. Непрерывность волновой функции $\psi_1(x)$ на левой непроницаемой для частицы границе ямы приводит, как мы уже видели в 4.2, к соотношению $\psi_1(0) = 0$, откуда следует, что $\alpha = 0$. Условия непрерывности волновых функций и их производных при $x = a$ дают следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} A\sin k_1 a &= Ce^{-k_2 a}, \\ k_1 A\cos k_1 a &= -k_2 Ce^{-k_2 a}. \end{aligned} \tag{4.61}$$

Разделив первое уравнение на второе, приходим к соотношению

$$\operatorname{tg} k_1 a = -\frac{k_1}{k_2}, \tag{4.62}$$

которое и определяет энергетический спектр частицы в яме.

Ввиду того что уравнение (4.62) является трансцендентным, получить значения энергии частицы E в явном виде не удается. Покажем с помощью графического метода, что энергетический спектр частицы, определяемый соотношением (4.62), является дискретным, т. е. энергия частицы в яме квантуется.

Преобразуем уравнение (4.62) с учетом (4.58) к виду

$$\sin k_1 a = \pm\frac{1}{\sqrt{1+\operatorname{ctg}^2 k_1 a}} = \pm\frac{k_1}{\sqrt{{k_1}^2 + {k_2}^2}}.$$

С учетом того, что, согласно (4.58), ${k_1}^2 + {k_2}^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}U_0$, получаем

$$\sin k_1 a = \pm\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_0 a^2 U_0}}\; k_1 a. \tag{4.63}$$

Построим графики левой и правой частей уравнения (4.63) как функции параметра k_1a. Точки пересечения синусоиды с прямой (рис. 4.19) определяют корни уравнения (4.63), отвечающие искомым значениям энергии частицы E. Поскольку, согласно (4.62), $\operatorname{tg} k_1a < 0$, будем выбирать только те значения параметра k_1a, которые удовлетворяют условию

$$\frac{\pi}{2} + \pi m < k_1a < \pi + \pi m,$$

где $m = 0, 1, 2, 3,\ldots$ На рис. 4.19 соответствующие области значений k_1a на оси абсцисс выделены жирной линией.

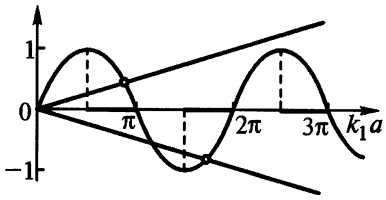


Рис. 4.19. К нахождению корней уравнения (4.63)

Приведенные графики показывают, что энергетический спектр частицы является дискретным. Чем больше глубина U_0 и ширина a потенциальной ямы, тем ниже наклон прямой линии графика правой части уравнения (4.63) и тем больше точек пересечения имеет прямая с синусоидой. Следовательно, тем больше энергетических уровней помещается в потенциальной яме.

Найдем условие, при котором в яме существует хотя бы один энергетический уровень. В этом случае коэффициент, определяющий наклон прямой линии графика правой части уравнения (4.63), должен удовлетворять неравенству

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_0U_0a^2}} < \frac{1}{\pi/2}.$$

Отсюда получаем

$$U_0a^2 > \frac{\pi^2\hbar^2}{8m_0}. \qquad (4.64)$$

Обсудим это соотношение подробнее. Именно при выполнении этого условия уравнение Шредингера для частицы в яме имеет решение, т. е. в яме есть хотя бы один энергетический уровень.

Говорят, что в этом случае частица находится в яме в связанном состоянии. Отметим, что в левую часть неравенства (4.64) входят только параметры потенциальной ямы — ее ширина a и глубина U_0, а правая часть неравенства для рассматриваемого типа частиц (значения m_0) представляет собой константу.

Пусть потенциальная яма недостаточно глубока или недостаточно широка, что приводит к нарушению условия (4.64). В этом случае уравнение Шредингера для частицы в яме не имеет решения, или, как говорят, в яме нет ни одного энергетического уровня. В физике такие случаи отсутствия связанных состояний достаточно хорошо известны. Так, например, между двумя нейтронами или между двумя протонами действуют ядерные силы притяжения, однако связанного состояния двух нейтронов или двух протонов в природе не существует — потенциальная яма, соответствующая взаимодействию этих частиц, имеет недостаточную ширину и глубину.

Сила взаимодействия между протоном и нейтроном лишь незначительно превышает силу взаимодействия между двумя протонами или двумя нейтронами, однако этого превышения оказывается достаточно, чтобы появилось связанное состояние нейтрона и протона — *дейтрон*. В потенциальной яме, характеризующей взаимодействие протона с нейтроном, существует лишь один энергетический уровень. Это означает, что дейтрон всегда находится в основном состоянии и не имеет возбужденных состояний.

Вернемся к анализу волновых функций данной задачи. При $x<0$, как уже отмечалось, $\psi(x)\equiv 0$. В области I, т. е. в потенциальной яме, волновая функция имеет вид

$$\psi_1(x)=A\sin k_1 x,$$

это означает, что уравнение Шредингера, как и в случае ямы с двумя бесконечно высокими стенками, имеет осциллирующее решение. Наибольший интерес представляет вид волновой функции в области II

$$\psi_2(x)=Ce^{-k_2 x}.$$

Волновая функция $\psi_2(x)$ вне потенциальной ямы отлична от нуля и убывает с расстоянием x по экспоненциальному закону, а

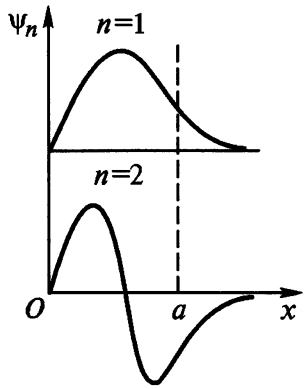


Рис. 4.20. Волновые функции частицы в яме с одной непроницаемой стенкой

это означает, что в связанном состоянии существует отличная от нуля вероятность пребывания частицы вне потенциальной ямы (см. задачу 4.7). Соотношения между константами A и C могут быть найдены из условия нормировки волновой функции. Качественный вид волновых функций для данной задачи приведен на рис. 4.20.

Рассмотрим теперь случай $E > U_0$. Уравнение Шредингера в областях I и II соответственно имеет вид

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0 \qquad (4.65а)$$

и

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0, \qquad (4.65б)$$

где $k_1 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}E}$; $k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U_0)}$.

Запишем решение уравнения (4.65а) с учетом условия на границе ямы $\psi_1(0) = 0$

$$\psi_1(x) = A' \sin k_1 x = \frac{A'}{2i}\left(e^{ik_1x} - e^{-ik_1x}\right). \qquad (4.66)$$

Решение уравнения (4.65б) представим в виде

$$\psi_2(x) = B'e^{ik_2x} - C'e^{-ik_2x}. \qquad (4.67)$$

Сшивая волновые функции и их производные в точке $x = a$, приходим к следующей системе уравнений:

$$\frac{A'}{2i}\left(e^{ik_1a}-e^{-ik_1a}\right)=B'e^{ik_2a}-C'e^{-ik_2a},$$
$$\frac{A'}{2i}ik_1\left(e^{ik_1a}+e^{-ik_1a}\right)=ik_2\left(B'e^{ik_2a}+C'e^{-ik_2a}\right).$$

Решая эту систему относительно амплитуд B' и C', получаем их выражения через амплитуду A':

$$B'=\frac{A'}{4i}e^{-ik_2a}\left[e^{ik_1a}\left(\frac{k_1}{k_2}+1\right)+e^{-ik_1a}\left(\frac{k_1}{k_2}-1\right)\right],$$
$$C'=\frac{A'}{4i}e^{ik_2a}\left[e^{ik_1a}\left(\frac{k_1}{k_2}-1\right)+e^{-ik_1a}\left(\frac{k_1}{k_2}+1\right)\right]. \qquad (4.68)$$

Отметим, что соотношения (4.68) определяют амплитуды B' и C' при любых значениях k_1 и k_2, т. е. при любом значении энергии частицы $E>U_0$. Следовательно, при $E>U_0$ частица имеет непрерывный спектр энергии.

Обсудим вид волновых функций (4.66) и (4.67). Каждая из них представляет собой сумму двух волн де Бройля: волны e^{-ikx}, распространяющейся справа налево, и волны e^{ikx}, распространяющейся слева направо. Пришедшая из $+\infty$ волна (второе слагаемое в (4.67)) на границе ямы $x=a$ частично отражается, внося вклад в первое слагаемое в (4.67), и преломляется (второе слагаемое в (4.66)). Далее волна полностью отражается от стенки при $x=0$ (первое слагаемое в (4.66)), опять преломляется на границе ямы $x=a$, внося вклад в первое слагаемое в (4.67), и уходит на бесконечность.

Прямоугольная потенциальная яма конечной глубины. Рассмотрим частицу, находящуюся в области симметричной прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины (рис. 4.21). Такая модель качественно описывает движение заряженной частицы, например электрона, вблизи атома и применяется в атомной физике и физике твердого тела.

Потенциальную энергию частицы в такой яме представим в виде

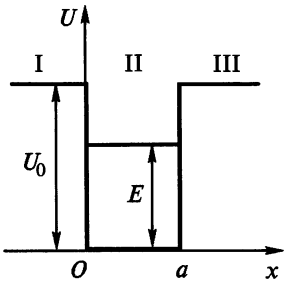


Рис. 4.21. Потенциальная яма конечной глубины

$$U(x)=\begin{cases}U_0, & x<0,\\ 0, & 0<x<a,\\ U_0, & x>a.\end{cases}$$

Рассмотрим сначала случай $E<U_0$, т. е. будем считать, что частица находится в связанном состоянии. Уравнение Шредингера в областях I и III (вне потенциальной ямы) запишем следующим образом:

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2}-\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_0-E)\ \psi_{1,3}=0.$$

Вводя обозначение $k_1=\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_0-E)}$, получаем

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2}-k_1{}^2\psi_{1,3}=0.$$

Решения этого уравнения имеют вид

$$\psi_1(x)=A_1e^{k_1x}+B_1e^{-k_1x},\quad x<0,$$
$$\psi_3(x)=A_3e^{k_1x}+B_3e^{-k_1x},\quad x>a.$$

Для того чтобы волновая функция была ограничена, нужно потребовать, чтобы $B_1=0$ и $A_3=0$.

В области II, т. е. внутри потенциальной ямы, уравнение Шредингера

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+\frac{2m_0}{\hbar^2}E\psi_2=0$$

имеет осциллирующее решение $\psi_2(x)=C\sin(k_2x+\alpha)$, где $k_2=\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}E}$, а C и α — некоторые постоянные.

Таким образом, волновые функции частицы для данной задачи записываются как

$$\begin{aligned}
&\psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x}, \quad x < 0, \\
&\psi_2(x) = C \sin(k_2 x + \alpha), \quad 0 < x < a, \\
&\psi_3(x) = B_3 e^{-k_1 x}, \quad x > a.
\end{aligned} \tag{4.69}$$

В силу непрерывности волновых функций и их производных в точках $x = 0$ и $x = a$ получаем

$$\operatorname{tg}\alpha = \frac{k_2}{k_1},$$

$$\operatorname{tg}(k_2 a + \alpha) = -\frac{k_2}{k_1}.$$

Эти соотношения можно привести к виду

$$\sin\alpha = \frac{\hbar k_2}{\sqrt{2m_0 U_0}},$$

$$\sin(k_2 a + \alpha) = -\frac{\hbar k_2}{\sqrt{2m_0 U_0}}.$$

Исключая из них α, получаем выражение

$$k_2 a = \pi n - 2\arcsin\frac{\hbar k_2}{\sqrt{2m_0 U_0}}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{4.70}$$

которое и определяет вид энергетического спектра частицы в потенциальной яме. Отметим, что отрицательные значения n и $n = 0$ не удовлетворяют условию задачи, поскольку левая часть (4.70) неотрицательна. В силу того что аргумент функции arcsin не может превосходить единицу, значения k_2 ограничены величиной $k_{2\max} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_0 U_0}$.

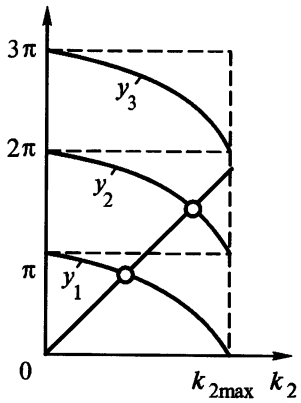


Рис. 4.22. К нахождению корней уравнения (4.70)

Покажем с помощью графического метода, что энергия частицы в яме квантуется, т. е. энергетический спектр, определяемый уравнением (4.70), имеет дискретный характер. Для этого построим графики левой и правой частей уравнения (4.70) в зависимости от k_2 (рис. 4.22). График левой части представляет собой прямую линию $y = k_2 a$, наклон которой возрастает с шириной ямы a. Графики правой части уравнения (4.70) для значений $n = 1, 2, 3$ представлены на рисунке кривыми y_1, y_2 и y_3. Точки пересечения прямой $y = k_2 a$ с кривыми y_i определяют корни уравнения (4.70). Таким образом, спектр значений k_2, а следовательно, и спектр связанных с ним значений энергии частицы E будет дискретным. Чем больше ширина ямы a, т. е. чем круче идет прямая $y = k_2 a$, тем с большим числом кривых y_i она пересекается, следовательно, тем больше энергетических уровней существует в яме. При $k_{2\max} a < \pi n$ в яме может быть n энергетических уровней, т. е. частица может находиться в яме в n связанных состояниях.

С уменьшением глубины ямы U_0 величина $k_{2\max}$, а следовательно, и число уровней в яме уменьшаются. В случае $k_{2\max} < \dfrac{\pi}{a}$, т. е. при

$$U_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m_0 a^2},$$

в яме остается лишь один энергетический уровень. Подчеркнем, что в симметричной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины всегда имеется по крайней мере один энергетический уровень, т. е. существует одно связанное состояние частицы.

Легко убедиться, что энергетический спектр (см. выражение (4.70)) при бесконечном возрастании глубины ямы, т. е. при

$U_0 \to \infty$, переходит в полученный ранее спектр для одномерной ямы с бесконечно высокими стенками (см. (4.16)).

Качественный вид волновых функций (4.69) для данной задачи приведен на рис. 4.23. Внутри потенциальной ямы волновые функции имеют вид синусоид, а вне ямы убывают по экспоненциальному закону. Отметим, что для состояний с большей энергией (и, следовательно, меньшей разностью $U_0 - E$) волновая функция имеет бóльшие значения на краях ямы и медленнее спадает по мере удаления от ямы.

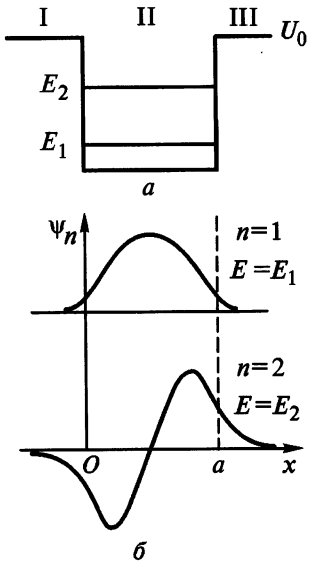


Рис. 4.23. Частица в яме конечной глубины:
а — энергетические уровни частицы; *б* — волновые функции для $n = 1$ и для $n = 2$

Перейдем теперь к анализу случая, когда энергия частицы $E > U_0$. Будем для определенности считать, что частица пролетает над потенциальной ямой конечной глубины, двигаясь слева направо. Уравнение Шредингера (4.6) в областях I, II и III имеет следующие решения:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 e^{i\tilde{k}_1 x} + B_1 e^{-i\tilde{k}_1 x}, \quad x < 0, \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad 0 < x < a, \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{i\tilde{k}_1 x} + B_3 e^{-i\tilde{k}_1 x}, \quad x > a, \end{aligned} \tag{4.71}$$

где

$$\tilde{k}_1 = \sqrt{\frac{2m_0(E - U_0)}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}. \tag{4.72}$$

Согласно (4.71), каждая из волновых функций представляет собой сумму двух волн де Бройля: волны, идущей в положительном направлении оси x, и волны, идущей в обратном направлении. Так

как частица движется слева направо, то второе слагаемое в выражении для ψ_3 должно отсутствовать, поскольку оно соответствует движению частицы к яме из $+\infty$, т.е. справа налево. Следовательно, нужно положить $B_3 = 0$.

Первое слагаемое в выражении для ψ_1 характеризует волну, падающую на яму из $-\infty$, второе слагаемое — волну, отраженную от ямы. Первое слагаемое в выражении для ψ_2 описывает волну, преломленную на границе $x = 0$, а второе слагаемое — волну, отраженную от границы $x = a$. Волновая функция ψ_3 содержит только одно слагаемое, соответствующее проходящей волне. Будем, как и прежде, считать, что амплитуда падающей волны $A_1 = 1$.

Условия непрерывности волновых функций и их производных в точках $x = 0$ и $x = a$ приводят к следующей системе уравнений:

$$
\begin{aligned}
&1 + B_1 = A_2 + B_2,\\
&i\tilde{k}_1 - i\tilde{k}_1 B_1 = ik_2 A_2 - ik_2 B_2,\\
&A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{i\tilde{k}_1 a},\\
&ik_2 A_2 e^{ik_2 a} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 a} = i\tilde{k}_1 A_3 e^{i\tilde{k}_1 a},
\end{aligned}
$$

решение которой позволяет найти амплитуды B_1, A_2, B_2 и A_3. Данная система уравнений имеет решение при любых значениях параметров $\tilde{k}_1$ и k_2, т. е. при любых значениях полной энергии частицы E. Это означает, что при $E > U_0$ частица обладает непрерывным энергетическим спектром.

Решая эту систему, для амплитуды прошедшей волны A_3 получаем следующее выражение:

$$
A_3 = \frac{4\tilde{k}_1 k_2 e^{-i\tilde{k}_1 a}}{\left(\tilde{k}_1 + k_2\right)^2 e^{ik_2 a} - \left(\tilde{k}_1 - k_2\right)^2 e^{-ik_2 a}}.
$$

Векторы плотности потока вероятности для падающей на яму и прошедшей через нее волны, согласно (4.36), имеют вид

$$\left|\vec{j}_{\text{пад}}\right| = \frac{\hbar\tilde{k}_1}{m_0}, \quad \left|\vec{j}_{\text{пр}}\right| = \frac{\hbar\tilde{k}_1}{m_0}\left|A_3\right|^2.$$

Таким образом, коэффициент прохождения D, характеризующий вероятность прохождения частицы над ямой, равен

$$D = \frac{\left|\vec{j}_{\text{пр}}\right|}{\left|\vec{j}_{\text{пад}}\right|} = \left|A_3\right|^2 = \left|\frac{4\tilde{k}_1 k_2 e^{-i\tilde{k}_1 a}}{\left(\tilde{k}_1 + k_2\right)^2 e^{ik_2 a} - \left(\tilde{k}_1 - k_2\right)^2 e^{-ik_2 a}}\right|^2. \quad (4.73)$$

Подставляя в (4.73) значения $\tilde{k}_1$ и k_2 из (4.72), получаем

$$D = \left[1 + \frac{U_0{}^2 \sin^2 k_2 a}{4E\left(E - U_0\right)}\right]^{-1}. \quad (4.74)$$

Из (4.74) следует, что коэффициент прохождения D зависит от соотношения между энергией частицы E и глубиной потенциальной ямы U_0 и в общем случае оказывается меньше единицы. Это означает, что даже при $E > U_0$ существует отличная от нуля вероятность того, что частица отразится от потенциальной ямы. Данное явление, полностью отсутствующее в классической физике, объясняется наличием у частицы волновых свойств.

При $\sin k_2 a = 0$ коэффициент прохождения D обращается в единицу, т. е. частица не испытывает отражения на границах ямы. Это условие выполняется при $k_2 a = \pi n$, т. е. при значениях энергии частицы

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} n^2, \quad (4.75)$$

где n — целые числа, при которых $E > U_0$.

Энергию частицы, движущейся над потенциальной ямой, удобно отсчитывать не от дна ямы, а от ее верхнего уровня U_0,

поскольку именно энергия $E' = E - U_0$ определяет кинетическую энергию частицы вдали от ямы. Переходя в (4.75) от E к E', получаем

$$E' = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} n^2 - U_0, \qquad (4.76)$$

где n — целые числа, при которых $E' > 0$.

Проведенный анализ дает квантово-механическое объяснение эффекту Рамзауэра (см. гл. 2). Напомним, что в опыте Рамзауэра наблюдалась прозрачность атомов инертных газов для пучка электронов при определенном значении энергии электронов. Конечно же, более адекватным опыту Рамзауэра было бы рассмотрение движения электрона в области трехмерной потенциальной ямы, моделирующей силовое взаимодействие электрона с атомом. Однако решение даже одномерной задачи позволяет не только качественно объяснить результаты опыта, но и получить определенные количественные соотношения (см. выражения (4.74) — (4.76)).

Условие $k_2 a = \pi n$ можно представить в виде

$$2a = \lambda_Б n,$$

где $\lambda_Б$ — дебройлевская длина волны частицы внутри ямы. Это условие определяет гашение за счет интерференции волн, отраженных от двух границ ямы. Аналогичное явление наблюдается в волновой оптике и заключается в том, что тонкая пленка определенной толщины может не отражать световую волну. Нанесение такой пленки на поверхность прозрачного тела, например линзы, позволяет полностью исключить отражение световых волн при прохождении через него (эффект "просветления оптики").

Задача 4.8. Частица массой m_0 находится в одномерной потенциальной яме с одной бесконечно высокой стенкой (см. рис. 4.18). Глубина ямы равна U_0, ширина — a. Считая, что в яме есть лишь один энергетический уровень $E = U_0/2$, найдите:

а) значение $U_0 a^2$ для такой ямы; б) наиболее вероятное значение координаты частицы $x_в$; в) вероятность нахождения частицы в области $x > a$.

Решение. Условие, определяющее возможные значения энергии частицы при $E < U_0$, имеет вид

$$\sin k_1 a = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_0 a^2 U_0}}\, k_1 a,$$

где $k_1 = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}$. Подставляя сюда значение $E = \frac{U_0}{2}$, получаем

$$\sin \frac{a\sqrt{m_0 U_0}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2}}{2}.$$

Поскольку в яме всего один энергетический уровень, значение аргумента синуса должно лежать в пределах от $\frac{\pi}{2}$ до π. Следовательно, решение уравнения имеет вид

$$\frac{a\sqrt{m_0 U_0}}{\hbar} = \frac{3\pi}{4}.$$

Отсюда находим, что ширина и глубина ямы должны удовлетворять условию

$$U_0 a^2 = \frac{9}{16}\frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0}.$$

Рассчитаем наиболее вероятное значение координаты частицы $x_{\text{вер}}$. Плотность вероятности нахождения частицы в яме w определяется квадратом модуля волновой функции $|\psi(x)|^2$. Поскольку внутри ямы (см. уравнение (4.60а)) $|\psi(x)|^2 = A^2 \sin^2 k_1 x$, то, решая задачу на экстремум w, получаем

$$\sin 2k_1 x = 0.$$

Отсюда следует, что $2k_1 x = \pi m$, где $m = 1, 2, 3, \ldots$ В силу того что $k_1 a < \pi$, в полученном решении следует оставить только значение $m = 1$. Таким образом,

$$x_в = \frac{\pi}{2k_1} = \frac{\pi}{2}\frac{\hbar}{\sqrt{m_0 U_0}}.$$

Учитывая связь между a^2 и U_0, приходим к окончательному выражению

$$x_в = \frac{\pi\hbar}{2\sqrt{m_0 \frac{9}{16}\frac{\pi^2\hbar^2}{m_0 a^2}}} = \frac{2}{3}a.$$

Рассчитаем теперь вероятность нахождения частицы в области $x > a$. Обозначим через P_1 и P_2 вероятности нахождения частицы соответственно внутри и вне ямы. С учетом вида волновых функций (4.60а), (4.60б)

$$P_1 = \int_0^a A^2 \sin^2 k_1 x\, dx, \quad P_2 = \int_a^\infty C^2 e^{-2k_2 x} k_1 x\, dx,$$

где

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_0 - E)} = \sqrt{\frac{m_0}{\hbar^2}U_0} = k_1 = \frac{3\pi}{4a}.$$

Соотношение между амплитудами A и C определим из условия непрерывности волновых функций при $x = a$:

$$A \sin k_1 a = C e^{-k_2 a}.$$

С учетом того, что $k_1 = k_2 = \frac{3\pi}{4a}$ и, следовательно, $\sin k_1 a = \frac{\sqrt{2}}{2}$, получаем

$$\frac{A}{C} = \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}}}{\frac{\sqrt{2}}{2}} = \sqrt{2} e^{-\frac{3\pi}{4}}.$$

Отношение вероятностей P_1 и P_2 равно

$$\frac{P_1}{P_2}=\frac{A^2}{C^2}\frac{\int_0^a \sin^2\frac{3\pi}{4a}x\,dx}{\int_a^\infty e^{-\frac{3\pi}{2a}x}dx}=2e^{-\frac{3\pi}{2}}\frac{a(3\pi+2)}{6\pi\frac{2a}{3\pi}e^{-\frac{3\pi}{2}}}=\frac{3\pi+2}{2}.$$

Принимая во внимание, что $P_1+P_2=1$, получаем

$$P_2=\frac{2}{3\pi+4}=0{,}149.$$

Этот результат означает, что с достаточно высокой вероятностью (~15 %) частица находится вне потенциальной ямы.

Задача 4.9. Частица массой m_0, двигаясь слева направо, падает на прямоугольную потенциальную яму глубиной U_0 (см. рис. 4.21). Считая, что полная энергия частицы $E>U_0$ известна, найдите ширину ямы a, при которой коэффициент отражения частицы от ямы максимален.

Решение. Отражение частицы от потенциальной ямы представляет собой чисто квантовый эффект. Классическая частица не может отразиться от потенциальной ямы, в области ямы лишь возрастают ее кинетическая энергия и скорость. Квантовая частица испытывает отражение от ямы в силу того, что она обладает волновыми свойствами и, подобно волне, может отражаться от любых препятствий.

Поскольку коэффициент отражения R и коэффициент прохождения D связаны соотношением $R=1-D$, то максимум отражения будет наблюдаться в том случае, когда коэффициент прохождения D минимален. Согласно (4.74), коэффициент прохождения D имеет вид

$$D=\left[1+\frac{U_0^{\,2}\sin^2 k_2 a}{4E(E-U_0)}\right]^{-1},$$

где $k_2=\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}E}$. Минимум D для различных значений ширины ямы a реализуется при условии $|\sin k_2 a|=1$, т. е. при

$$k_2 a = (2m+1)\frac{\pi}{2}, \quad m = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Отсюда находим ширину ямы a, при которой отражение частицы будет максимальным:

$$a = \frac{(2m+1)\pi\hbar}{\sqrt{8m_0 E}}.$$

Отметим, что это условие можно переписать в виде

$$a = \frac{2m+1}{4}\lambda_{\text{Б}},$$

где $\lambda_{\text{Б}} = \dfrac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 E}}$ — дебройлевская длина волны частицы в яме.

4.5. Квантовый гармонический осциллятор

Как известно, гармоническим осциллятором называется система, способная совершать гармонические колебания. В физике модель гармонического осциллятора играет важную роль, особенно при исследовании малых колебаний систем вблизи положения устойчивого равновесия. Примером таких колебаний в квантовой механике являются колебания атомов в твердых телах, молекулах и т. д.

Рассмотрим одномерный гармонический осциллятор, совершающий колебания вдоль оси x под действием возвращающей квазиупругой силы $F_x = -kx$. Выражение для потенциальной энергии такого осциллятора имеет вид

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m_0 \omega_0{}^2 x^2}{2}, \qquad (4.77)$$

где $\omega_0 = \sqrt{\dfrac{k}{m_0}}$ — собственная частота классического гармонического осциллятора. Таким образом, квантово-механическая задача о гармоническом осцилляторе сводится к задаче о движении частицы в *параболической потенциальной яме* (рис. 4.24).

Рассмотрим сначала поведение классического гармонического осциллятора. Пусть частица, обладающая полной энергией E, совершает колебания в силовом поле (4.77). Точки a_0 и $-a_0$, в которых полная энергия частицы равна потенциальной энергии $E = U(x)$, являются для частицы точками поворота. Частица совершает колебательные движения между стенками потенциальной ямы внутри отрезка $[-a_0, a_0]$, выйти за пределы которого она не может. Амплитуду колебаний a_0 находим из выражения

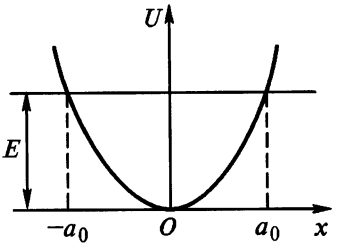


Рис. 4.24. Потенциальная энергия гармонического осциллятора

$$a_0 = \sqrt{\frac{2E}{m_0 \omega_0{}^2}}.$$

В квантовой механике для решения задачи о гармоническом осцилляторе нужно решить уравнение Шредингера (4.6), в котором потенциальная энергия U имеет вид (4.77):

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \frac{m_0\omega_0 x^2}{2}\right)\psi = 0\,, \quad -\infty < x < +\infty. \tag{4.78}$$

Вводя величины

$$\eta = \frac{2E}{\hbar\omega_0} \quad \text{и} \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0\omega_0}} \tag{4.79}$$

и переходя к новой безразмерной переменной $\xi = \dfrac{x}{x_0}$, приводим уравнение (4.78) к виду

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \left(\eta - \xi^2\right)\psi = 0. \tag{4.80}$$

Анализ показывает, что волновые функции, являющиеся решением уравнения (4.80) , будут непрерывными и конечными не при всех значениях параметра η, а лишь при

$$\eta = 2n+1, \quad n = 0, 1, 2, 3, ...$$

Выражая, согласно (4.79), энергию осциллятора E через η, получаем

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right), \; n = 0, 1, 2, 3, \; ... \qquad (4.81)$$

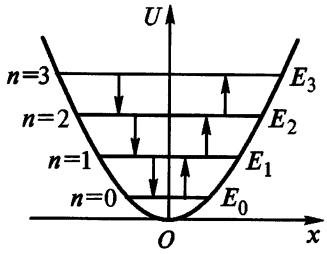


Рис. 4.25. Уровни энергии гармонического осциллятора

Это соотношение и определяет закон квантования энергии гармонического осциллятора. Отметим, что уровни энергии гармонического осциллятора в отличие, например, от случая прямоугольной потенциальной ямы, являются *эквидистантными*, т. е. расположены на одинаковом энергетическом расстоянии $\Delta E = \hbar\omega_0$ друг от друга (рис. 4.25).

Еще одной важной особенностью энергетического спектра (4.81) является наличие так называемых *нулевых колебаний* — колебаний с энергией $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$, соответствующих значению квантового числа $n = 0$. Отличие от нуля минимальной энергии осциллятора характерно, как мы уже видели, для всех квантовых систем и является следствием соотношения неопределенностей. В реальных квантовых системах, например в кристаллах, эти колебания сохраняются, как показывает опыт, даже при температурах, близких к абсолютному нулю, когда, казалось бы, все тепловое движение должно прекратиться.

Нулевые колебания играют в физике весьма важную роль, в частности, они обусловливают отсутствие кристаллизации жидкого гелия при нормальном давлении даже при абсолютном нуле

температур. Велика роль нулевых колебаний и в объяснении природы сил молекулярных взаимодействий, физических особенностей поверхностного натяжения, адсорбции и других молекулярных явлений. В эксперименте наличие нулевых колебаний наблюдается, в частности, в опытах по рассеянию света кристаллами при низких температурах.

Покажем, что значение нулевой энергии $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ есть как раз то минимальное значение энергии осциллятора, которое согласуется с требованиями соотношения неопределенностей. Поместим начало координат в точку, являющуюся положением равновесия гармонического осциллятора, совершающего колебания по закону $x = x_0 \cos\omega_0 t$. Тогда неопределенность координаты Δx принимает вид

$$\Delta x = \sqrt{\overline{x^2}} = \sqrt{a_0{}^2 \overline{\cos^2 \omega_0 t}} = \sqrt{\frac{1}{2} a_0{}^2},$$

где черта означает усреднение по времени.

Амплитуда колебаний a_0 связана с энергией E соотношением $E = \frac{1}{2} m_0 a_0{}^2 \omega_0{}^2$, следовательно,

$$\Delta x = \sqrt{\frac{E}{m_0 \omega_0{}^2}}.$$

Аналогично для неопределенности импульса имеем

$$\Delta p = \sqrt{\overline{p^2}} = \sqrt{m_0{}^2 a_0{}^2 \omega_0{}^2 \overline{\sin^2 \omega_0 t}} = \sqrt{\frac{1}{2} m_0{}^2 a_0{}^2 \omega_0{}^2} = \sqrt{m_0 E}.$$

Подставляя Δx и Δp в соотношение неопределенностей $\Delta x \Delta p \geq \geq \frac{\hbar}{2}$, получаем следующее условие: $E \geq \hbar\omega_0/2$, т. е. действительно, минимальное значение энергии гармонического осциллятора есть $E_0 = \hbar\omega_0/2$.

Эквидистантность энергетических уровней гармонического осциллятора (см. выражение (4.81)) на первый взгляд означает, что осциллятор может поглощать и испускать излучение частотой ω, кратной ω_0, т. е. $\omega = \Delta n \omega_0$, где Δn — разность квантовых чисел начального и конечного уровней осциллятора. Однако на самом деле это не так. Точный расчет, выходящий за рамки данного курса, показывает, что особенности испускания и поглощения электромагнитного излучения гармоническим осциллятором таковы, что возможны переходы только между соседними уровнями, т. е.

$$\Delta n = \pm 1. \tag{4.82}$$

Условия, которые определяют изменение квантовых чисел при разрешенных переходах системы из одного состояния в другое, называются *правилами отбора*. Таким образом, согласно правилам отбора, квантовое число n при испускании и поглощении электромагнитного излучения квантовым гармоническим осциллятором может изменяться только на единицу.

Перейдем теперь к анализу волновых функций гармонического осциллятора. Как следует из теории дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами, волновые функции, являющиеся решениями уравнения (4.80), имеют вид

$$\psi_n(\xi) = C_n \, e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{4.83}$$

где C_n — коэффициент, получаемый из условия нормировки волновой функции. Функция $H_n(\xi)$ представляет собой полином Чебышева — Эрмита n-го порядка:

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \tag{4.84}$$

Отметим, что для этих полиномов справедливо рекуррентное соотношение

$$H_{n+1}(\xi) + 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi) = 0,$$

позволяющее найти $H_n(\xi)$ для всех n, исходя из того, что $H_0(\xi)\equiv 1$ и $H_1(\xi)=2\xi$. Например,

$$H_2(\xi)=2\xi H_1(\xi)-2H_0(\xi)=4\xi^2-2,$$

$$H_3(\xi)=2\xi H_2(\xi)-4H_1(\xi)=8\xi^3-12\xi$$

и т. д.

Волновые функции (4.83) ортонормированы, т. е. удовлетворяют условию

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\ \psi_m(x)dx=\delta_{mn},$$

где δ_{mn} — символ Кронекера.

Приведем вид нормированных волновых функций для первых трех энергетических уровней гармонического осциллятора

$$\begin{aligned}
\psi_0(x)&=\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\exp\left(-\frac{x^2}{2{x_0}^2}\right),\\
\psi_1(x)&=\frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}}\frac{2x}{x_0}\exp\left(-\frac{x^2}{2{x_0}^2}\right),\\
\psi_2(x)&=\frac{1}{\sqrt{8x_0\sqrt{\pi}}}\left(\frac{4x^2}{{x_0}^2}-2\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2{x_0}^2}\right).
\end{aligned}\qquad (4.85)$$

Графики волновых функций для значений квантового числа n от 0 до 5 представлены на рис. 4.26. Отрезок $[-a_0,\ a_0]$ определяет область, в которой совершал бы колебания классический осциллятор. Ширина этой области оказывается различной для разных значений квантового числа n, поскольку энергия осциллятора, а следовательно, и амплитуда его колебаний также зависят от n.

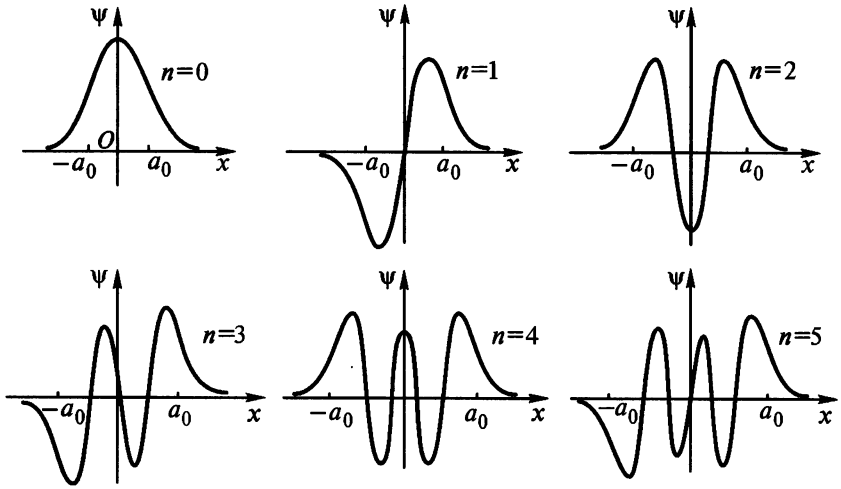


Рис. 4.26. Волновые функции гармонического осциллятора

Из (4.83) — (4.85) следует, что волновые функции гармонического осциллятора обладают определенной четностью. Они являются четными функциями координаты x при четных значениях n и при $n=0$, и нечетными функциями при нечетных n. Значение квантового числа n определяет также число точек пересечения волновой функции с осью x. В основном состоянии, т. е. при $n=0$, точки пересечения внутри параболической ямы отсутствуют, при $n=1$ имеется одна точка пересечения, при $n=2$ — две и т. д. Таким образом, при увеличении квантового числа n на единицу волновая функция гармонического осциллятора меняет четность и приобретает добавочную точку пересечения с осью x.

Отметим, что вне классической области $[-a_0, a_0]$ волновые функции ψ_n отличны от нуля, что свидетельствует о том, что квантовый гармонический осциллятор с определенной вероятностью может находиться вне пределов параболической потенциальной ямы (см. задачу 4.10).

При малых значениях квантового числа n плотность вероятности нахождения частицы, определяемая квадратом модуля волновой функции $|\psi_n(x)|^2$, кардинальным образом отличается от плотности вероятности обнаружения классического осциллятора

$$\frac{dP}{dx}=\frac{1}{\pi\sqrt{a_0^2-x^2}}. \qquad (4.86)$$

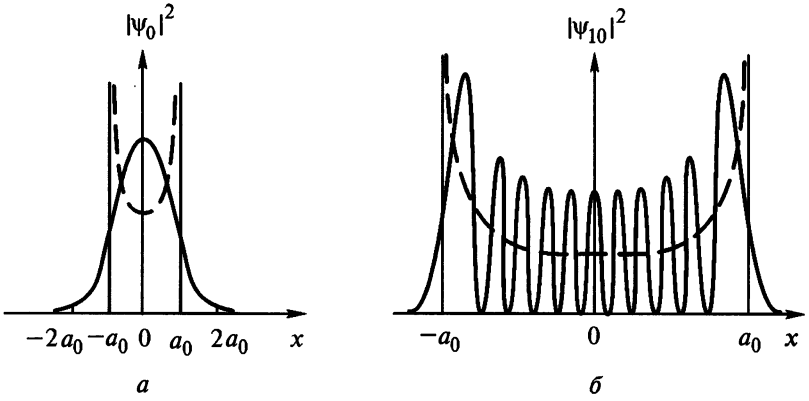
Плотность вероятности в случае классического осциллятора (4.86) можно получить следующим образом. Пусть за время dt частица проходит путь от точки с координатой x до точки с координатой $x+dx$, т. е. ее координата меняется в интервале значений шириной dx. Поскольку для гармонических колебаний $x=a_0\sin\frac{2\pi}{T}t$, а $dx=a_0\frac{2\pi}{T}\cos\frac{2\pi}{T}t\,dt$, то вероятность dP того, что частица при движении в одну сторону находится в интервале шириной dx, равна $dP=\frac{dt}{T/2}=\frac{dx}{a_0\pi\cos\frac{2\pi}{T}t}=\frac{dx}{\pi\sqrt{a_0^2-x^2}}$, откуда и следует (4.86).

При $n=0$ плотность вероятности обнаружения квантового осциллятора $|\psi_0(x)|^2$ имеет форму гауссовской кривой с максимумом в точке $x=0$ (рис. 4.27, *а*, сплошная линия), а плотность вероятности обнаружения классического осциллятора (4.86), наоборот, минимальна в точке $x=0$ и стремится к бесконечности в точках поворота, в которых скорость частицы становится равной нулю (рис. 4.27, *а*, пунктирная линия).

При достаточно большом значении квантового числа n, например при $n=10$, функция $|\psi_n(x)|^2$ приближается к классической кривой распределения. Она достигает максимума вблизи точек поворота и резко спадает вне классической области движения (рис. 4.27, *б*). При $n\to\infty$ плотность вероятности $|\psi_n(x)|^2$, как того и требует принцип соответствия, переходит в классическую функцию распределения плотности вероятности.

Отметим, что модель гармонического осциллятора и связанная с ним задача о движении частицы в параболической потенциальной яме является идеализацией, справедливой лишь при малых отклонениях колеблющейся частицы от положения равновесия. Во всех реальных ситуациях потенциальная энергия $U(x)$ частицы, совершающей колебания около положения равновесия, имеет более

сложный по сравнению с (4.77) вид. Поэтому при возрастании амплитуды колебаний движение частицы будет все больше отличаться от гармонических колебаний. Такое движение называют ангармоническим движением, а соответствующий осциллятор — *ангармоническим осциллятором*. Однако в случае малых колебаний влияние ангармонизма ничтожно мало́, что позволяет использовать модель гармонического осциллятора для описания колебательного движения квантово-механических систем.



а *б*

Рис. 4.27. Плотности вероятности обнаружения частицы для квантового (сплошная линия) и классического (пунктирная линия) осциллятора: *а* — при $n = 0$; *б* — при $n = 10$

Выполненный в этой главе анализ движения частиц в прямоугольной и параболической потенциальных ямах показывает, что, несмотря на различие форм ямы, в поведении частицы в яме имеется много общего:

1. Энергетический спектр частицы, находящейся в яме в связанном состоянии, является дискретным, т. е. энергия частицы квантуется.

2. Частица, находящаяся в основном состоянии, т. е. на самом низшем энергетическом уровне, обладает не равной нулю энергией.

3. Плотность вероятности обнаружения частицы $|\psi|^2$ имеет максимумы в области между классическими точками поворота и экспоненциально убывает вне классической области. Это означает, что с определенной вероятностью частица может находиться вне ямы (за исключением ям с непроницаемыми стенками).

4. При увеличении квантового числа n на единицу волновая функция, описывающая поведение частицы в яме, приобретает дополнительную точку пересечения с осью x.

Подчеркнем, что отмеченные свойства не зависят от формы потенциальной ямы, т. е. от вида потенциальной энергии $U(x)$.

Следует отметить еще одно важное обстоятельство: энергетический спектр частицы является дискретным (энергия квантуется) только в тех случаях, когда частица находится в потенциальной яме в связанном состоянии. Если же частица движется в области потенциального порога, потенциального барьера или над потенциальной ямой (при $E > U_0$), то квантование энергии отсутствует и ее энергетический спектр является непрерывным. Этот результат согласуется с общей теоремой квантовой механики, в соответствии с которой энергия всегда квантуется у систем, которые не могут уходить на бесконечность, и не квантуется у систем, способных уходить в бесконечность, т. е. у которых плотность потока вероятности не равна нулю в бесконечно удаленной точке.

□ **Задача 4.10.** Гармонический осциллятор находится в основном состоянии. Найдите вероятность обнаружения частицы вне пределов классической области, т. е. вне области $-a_0 \le x \le a_0$, где a_0 — амплитуда классических колебаний.

Решение. Поскольку осциллятор находится в основном состоянии, то, согласно (4.81) и (4.85), его энергия равна $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$, а волновая функция, описывающая его состояние, имеет вид $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$. Здесь $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0\omega_0}}$, а $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$ — частота классического гармонического осциллятора.

При максимальном отклонении классического осциллятора от положения равновесия его полная энергия должна быть равна потенциальной энергии, т. е. $ka_0^2/2 = \hbar\omega_0/2$. Отсюда следует, что амплитуда классических колебаний

$$a_0 = \sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_0 m_0}} = x_0.$$

▽

Найдем вероятность обнаружения частицы в классической области

$$P_{\text{кл}} = \int_{-a_0}^{a_0} |\psi_0(x)|^2 \, dx = \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}} \int_{-a_0}^{a_0} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-1}^{1} e^{-y^2} dy = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{1} e^{-y^2} dy.$$

Интеграл

$$I(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-y^2} dy$$

называется интегралом вероятностей. Он широко используется в теории вероятностей, статистике, теоретической и математической физике, его значения для различных пределов интегрирования t приведены в справочниках специальных функций. В данном случае, при $t = 1$, $I(1) = 0{,}8427$, следовательно, $P_{\text{кл}} = 0{,}8427 \approx 0{,}84$. Соответственно вероятность P того, что частица будет обнаружена вне классической области, равна $P = 1 - P_{\text{кл}} \approx 0{,}16$. Таким образом, вероятность пребывания гармонического осциллятора, находящегося в основном состоянии, вне пределов классической области составляет 16 %.

Задача 4.11. Квантовый гармонический осциллятор с частотой колебаний ω_0 находится в первом возбужденном состоянии. Найдите средние значения потенциальной $\langle U \rangle$ и кинетической $\langle E_{\text{к}} \rangle$ энергий осциллятора.

Решение. В силу того что осциллятор находится в первом возбужденном состоянии ($n = 1$), его энергия, согласно (4.81), равна $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$, а соответствующая ему волновая функция имеет вид (4.85):

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} \frac{2x}{x_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right),$$

где $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0\omega_0}}$.

Операторы потенциальной $\hat{U}$ и кинетической $\hat{E}_{\text{к}}$ энергий в рассматриваемой задаче имеют вид

$$\hat{U} = \frac{m_0\omega_0{}^2 x^2}{2} \quad \text{и} \quad \hat{E}_к = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dx^2}.$$

Средние значения потенциальной $\langle U \rangle$ и кинетической $\langle E_к \rangle$ энергий осциллятора, находящегося в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi_1(x)$, согласно (3.62), могут быть представлены следующим образом:

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1{}^*(x)\hat{U}\psi_1(x)dx, \langle E_к \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1{}^*(x)\hat{E}_к\psi_1(x)dx.$$

Найдем среднее значение потенциальной энергии гармонического осциллятора

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1{}^*(x)\frac{m_0\omega_0{}^2 x^2}{2}\psi_1(x)\,dx = \frac{m_0\omega_0{}^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \left|\psi_1(x)\right|^2 dx.$$

С учетом явного вида волновой функции $\psi_1(x)$ получаем

$$\langle U \rangle = \frac{m_0\omega_0{}^2 x_0{}^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{x}{x_0}\right)^4 e^{-\frac{x^2}{x_0{}^2}} d\left(\frac{x}{x_0}\right) = \frac{m_0\omega_0{}^2 x_0{}^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 e^{-y^2} dy =$$

$$= \frac{2m_0\omega_0{}^2 x_0{}^2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{+\infty} y^4 e^{-y^2} dy = \frac{2m_0\omega_0{}^2 x_0{}^2}{\sqrt{\pi}} I_1,$$

где интеграл $I_1 = \int_{0}^{+\infty} y^4 e^{-y^2} dy = \frac{3}{8}\sqrt{\pi}$. Таким образом, среднее значение потенциальной энергии гармонического осциллятора, находящегося в первом возбужденном состоянии, равно

$$\langle U \rangle = \frac{2m_0\omega_0{}^2}{\sqrt{\pi}} \frac{\hbar}{m_0\omega_0} \frac{3}{8}\sqrt{\pi} = \frac{3}{4}\hbar\omega_0.$$

Теперь найдем среднее значение кинетической энергии

$$\langle E_к \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\hat{E}_к\psi_1(x)dx = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}dx.$$

Вторая производная волновой функции $\psi_1(x)$ по координате x равна

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} \frac{2}{x_0} \left(-\frac{3x}{x_0^2} + \frac{x^3}{x_0^4} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}.$$

Подставляя $\psi_1^*(x)$ и $\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}$ в выражение для $\langle E_к \rangle$, получаем

$$\langle E_к \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{2x_0\sqrt{\pi}} \frac{4}{x_0^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{3x^2}{x_0^2} + \frac{x^4}{x_0^4} \right) e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} dx = \frac{2\hbar\omega_0}{\sqrt{\pi}} (3I_2 - I_1),$$

где интеграл $I_2 = \int_0^{+\infty} y^2 e^{-y^2} dy = \frac{1}{4}\sqrt{\pi}$. Подставляя сюда значения I_1 и I_2, находим, что

$$\langle E_к \rangle = \frac{2\hbar\omega_0}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{4}\sqrt{\pi} - \frac{3}{8}\sqrt{\pi} \right) = \frac{3}{4}\hbar\omega_0.$$

Таким образом, средние значения потенциальной энергии $\langle U \rangle$ и кинетической энергии $\langle E_к \rangle$ гармонического осциллятора, находящегося в первом возбужденном состоянии, равны между собой и составляют половину полной энергии осциллятора $E = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$. Можно показать, что это утверждение будет справедливым и для любого другого состояния квантового гармонического осциллятора. Полученный результат подтверждает вывод, сделанный в 2.3, о том, что в квантовой механике равенство полной энергии частицы сумме ее потенциальной и кинетической энергий выполняется только для средних значений энергии.

Задача 4.12. Частица массой m_0 движется в трехмерном потенциальном поле

$$U(x, y, z) = \frac{k}{2}\left(x^2 + y^2 + z^2\right),$$

где k — постоянная величина (трехмерный изотропный гармонический осциллятор). Найдите собственные значения энергии частицы и кратность вырождения n-го энергетического уровня.

Решение. Поскольку движение частицы вдоль осей x, y и z происходит независимо, будем искать волновую функцию в виде произведения

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z),$$

где ψ_1 зависит только от координаты x; ψ_2 — только от координаты y; ψ_3 — только от координаты z. Подставляя $\psi(x, y, z)$ в уравнение Шредингера (4.6), получаем

$$\psi_2(y)\psi_3(z)\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \psi_1(x)\psi_3(z)\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \psi_1(x)\psi_2(y)\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} +$$

$$+\frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E - U(x, y, z)\right]\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) = 0.$$

Разделив это уравнение на $\psi(x, y, z)$ и подставив данный в условии задачи вид зависимости $U(x, y, z)$, приходим к соотношению

$$\left[\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2}\frac{kx^2}{2}\right] + \left[\frac{1}{\psi_2(y)}\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2}\frac{ky^2}{2}\right] +$$

$$+\left[\frac{1}{\psi_3(z)}\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2}\frac{kz^2}{2}\right] = -\frac{2m_0}{\hbar^2}E.$$

Первое выражение в квадратных скобках в левой части этого равенства является функцией только координаты x, второе — только координаты y, третье — только координаты z. Поскольку их сумма — величина постоянная, то каждое из этих слагаемых также будет постоянной величиной:

$$\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2}\frac{kx^2}{2} = -\frac{2m_0}{\hbar^2}E_1,$$

$$\frac{1}{\psi_2(y)}\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2}\frac{ky^2}{2} = -\frac{2m_0}{\hbar^2}E_2,$$

$$\frac{1}{\psi_3(z)}\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2}\frac{kz^2}{2} = -\frac{2m_0}{\hbar^2}E_3,$$

▽ где константы E_1, E_2, E_3 имеют размерность энергии и удовлетворяют условию $E_1 + E_2 + E_3 = E$. Таким образом, получаем три уравнения для одномерного гармонического осциллятора, решения которых нам уже известны (см. (4.81), (4.83)).

Волновая функция трехмерного гармонического осциллятора представляет собой произведение трех волновых функций для одномерного гармонического осциллятора (4.83) и зависит от трех квантовых чисел n_1, n_2 и n_3:

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(x, y, z) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z),$$
$$n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Для энергии трехмерного изотропного гармонического осциллятора получаем следующее выражение:

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{3}{2}\right),$$

где $n = n_1 + n_2 + n_3$, $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$

Найдем кратность вырождения n-го энергетического уровня трехмерного гармонического осциллятора. Для заданного значения n кратность вырождения уровня равна числу возможных перестановок трех чисел n_1, n_2 и n_3, сумма которых равна n. Найдем сначала число перестановок при фиксированном значении n_1. Оно, как легко видеть, равно числу возможных значений n_2 (или, что то же самое, n_3). Число n_2 при заданном n_1 может меняться в пределах от 0 до $(n - n_1)$, т. е. принимает $n - n_1 + 1$ значение. Следовательно, число перестановок при фиксированном n_1 равно $n - n_1 + 1$. Суммируя это выражение по n_1, находим кратность вырождения n-го энергетического уровня:

$$K_n = \sum_{n_1=0}^{n}(n - n_1 + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

Основное состояние трехмерного гармонического осциллятора $(n = 0)$ оказывается невырожденным $(K_0 = 1)$. Первое возбужденное состояние $(n = 1)$ имеет кратность вырождения $K_1 = 3$, ему соответствуют тройки квантовых чисел (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1). ■

5. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ АТОМА

Атомные системы являются объектами, для описания которых следует использовать законы квантовой механики. Именно поэтому в классической физике значительная часть экспериментальных результатов атомной физики не была объяснена.

Первая попытка внести в теорию атомных систем идею квантования была предпринята Н. Бором в 1913 г. Для простейшего атома водорода эта идея была реализована путем формального введения некоторых постулатов, решающим из которых был постулат квантования момента импульса электрона. Эта теория с большой точностью позволила рассчитать оптический спектр излучения атома водорода. Однако попытки обобщить теорию Бора на более сложные атомы не увенчались успехом.

Квантовая физика рассматривает атом как систему, в которой электроны движутся в кулоновском поле ядра. Квантовая теория атома базируется на уравнении Шредингера, решение которого позволяет полностью описать свойства атома.

В нерелятивистской квантовой механике атомных систем в качестве дополнительной гипотезы была сформулирована гипотеза о спине (собственном моменте) электрона, позволяющая согласовать результаты теории и эксперимента. В релятивистской квантовой механике представление о спине электрона является естественным следствием уравнения Дирака, лежащего в основе этой теории.

Успехи квантовой теории атомных систем позволили предсказать ряд эффектов, которые были использованы при создании приборов и установок, широко применяемых в науке и технике, например приборов квантовой электроники. В частности, создание оптических квантовых генераторов (лазеров), разработанных на основе квантовой теории излучения атомных систем, стимулировало развитие новых направлений науки и техники в конце XX в.

5.1. Квантовые свойства атомов

Излучение атомов. Важную информацию об атомах можно получить при исследовании их электромагнитного излучения. Опыты показывают, что оптические *спектры* атомов являются *линейчатыми*. Это означает, что спектры излучения атомов состоят из отдельных спектральных линий. При этом каждый атом имеет свой характерный линейчатый оптический спектр.

Так, для простейшего атома водорода еще в 1885 г. эмпирически была найдена формула, получившая название *обобщенной формулы Бальмера*. Оказалось, что с большой точностью длины волн излучения или часто́ты для всех спектральных линий атома водорода описываются удивительно простыми по форме соотношениями:

$$\frac{1}{\lambda_{nk}} = \tilde{R}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right), \quad k > n, \tag{5.1а}$$

$$\omega_{nk} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right), \quad k > n. \tag{5.1б}$$

Здесь $\tilde{R} = R/(2\pi c) = 109678 \ \text{с}\cdot\text{м}^{-1}, R = 2{,}067\cdot 10^{16} \ \text{с}^{-1}$ — постоянная Ридберга; n и k — целые числа.

Известны следующие *серии спектральных линий* излучения атома водорода, названные в честь их первооткрывателей:

$n = 1$ — серия Лаймана (ультрафиолетовое излучение),

$n = 2$ — серия Бальмера (видимый свет),

$n = 3$ — серия Пашена (инфракрасное излучение),

$n = 4$ — серия Брэккета (инфракрасное излучение) и др.

Схема линий серии Бальмера в видимой части спектра атома водорода приведена на рис. 5.1: символами H_α, H_β, H_γ и H_δ обозначены характерные линии спектра излучения, а $H_\text{г}$ указывает коротковолновую границу серии, соответствующую в формуле (5.1а) значениям $n = 2$ и $k \to \infty$.

Отметим, что в соотношении (5.1б) частота любой линии спектра излучения атома водорода может быть представлена в виде разности двух однотипных выражений, которые зависят от цело-

численных параметров и называются *спектральными термами*. Действительно, соотношение (5.1б) можно записать в виде

$$\omega_{nk} = T(n) - T(k), \tag{5.2}$$

для которого терм

$$T(n) = \frac{R}{n^2}.$$

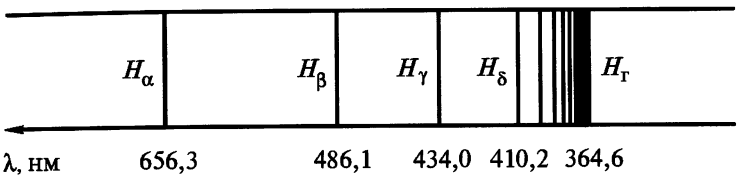


Рис. 5.1. Линии серии Бальмера в спектре излучения атома водорода

Исследование оптических спектров излучения других более сложных атомов показывает, что формула (5.2) также может быть использована для расчета частот их излучения, однако для таких атомов термы имеют более сложный вид, чем для атома водорода.

Соотношения (5.1а), (5.1б) и (5.2) отражают присущую атомам квантовую природу. Действительно, если с помощью формулы Планка связать частоту излучения атома с его энергией, то из линейчатости спектра излучения мы придем к выводу о дискретности, т. е. о квантовании энергии атома.

Опыт Франка — Герца. Одним из простых опытов, убедительно подтверждающих квантовые свойства атомов, связанные с дискретностью их энергий, является эксперимент, впервые выполненный в 1913 г. Дж. Франком и Г. Герцем. Основным элементом экспериментальной установки (рис. 5.2) является трехэлектродная лампа, заполненная газом, например парами ртути, под давлением 1 мм рт. ст. В отличие от стандартного включения такой лампы, в опыте Франка — Герца сетка имеет положительный потенциал V относительно катода К и играет роль ускоряющего электрода.

Электроны, вылетающие из катода вследствие термоэлектронной эмиссии, ускоряются разностью потенциалов V, которая может изменяться с помощью потенциометра П и измеряться вольтметром V.

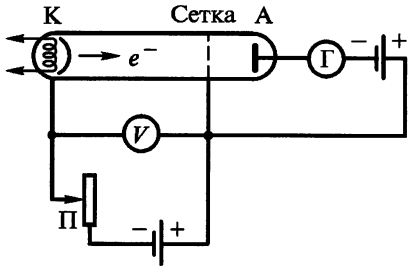


Рис. 5.2. Схема установки в опыте Франка — Герца

Между сеткой и анодом-коллектором А создается слабое тормозящее поле за счет разности потенциалов между ними порядка 1 В. Часть электронов, пролетающих через сетку и способных преодолеть тормозящее поле, попадает на коллектор, вызывая некоторый ток, который измеряется гальванометром Г.

Двигаясь от катода к сетке, электроны сталкиваются с атомами ртути, находящимися в основном энергетическом состоянии. Если энергия атома может принимать только определенные дискретные значения и энергетическое расстояние между основным и первым возбужденным состояниями атома равно ΔE, то характер столкновений электрона с атомом будет существенно зависеть от значения кинетической энергии электрона $W_к = eV$. Здесь V — ускоряющая разность потенциалов (напряжение) между катодом и сеткой.

Если $W_к < \Delta E$, т. е. $V < V_1 = \Delta E/e$, то электрон при столкновении с атомом не сможет передать ему значительную часть своей энергии. Как говорят, соударение электрона с атомом в этом случае будет упругим. При таком столкновении кинетическая энергия электрона не переходит во внутреннюю энергию атома, и в силу большого различия масс соударяющихся частиц электрон будет двигаться в газовом промежутке между катодом и сеткой практически без потерь энергии. Такие электроны, пролетев сквозь сетку лампы, легко преодолеют слабое тормозящее поле между сеткой и анодом-коллектором и обеспечат протекание тока в цепи коллектора. Как и в обычной вакуумной лампе, при увеличении V сила тока в цепи коллектора будет монотонно возрастать.

Однако если при движении в ускоряющем поле электрон приобретет кинетическую энергию, достаточную для возбуждения атома, то соударение такого электрона с атомом станет неупругим. Теперь значительная часть кинетической энергии электрона будет переходить во внутреннюю энергию атома, т. е. расходоваться на возбуждение атома.

Неупругие столкновения электронов с атомами начинают происходить при подлете электронов к сетке. После столкновений энергетически "ослабленные" электроны уже не смогут преодолеть тормозящее поле и попасть на анод-коллектор. Следовательно, когда ускоряющее напряжение на сетке достигнет значения V_1, сила тока I в цепи коллектора должна резко уменьшиться.

При дальнейшем увеличении ускоряющего напряжения сила тока, регистрируемая гальванометром, будет снова возрастать. Однако, когда значение ускоряющего напряжения станет равным $V_2 = 2V_1$, ток в цепи коллектора снова резко уменьшится, так как в этих условиях электрон, двигаясь в газовом промежутке, может дважды испытать неупругие столкновения с атомами. Соответственно возможны режимы с тремя неупругими столкновениями при $V = 3V_1$ и т. д.

Итак, если имеет место квантование энергии атома, то при значениях ускоряющего напряжения V на сетке, кратных V_1, на кривой зависимости силы тока I в цепи коллектора от ускоряющего напряжения V на сетке должны наблюдаться резко выраженные спады. При этом расстояние ΔV между началами этих спадов по шкале ускоряющего напряжения связано с энергией возбуждения ΔE атома соотношением $\Delta E = e\Delta V$.

Зависимость $I = I(V)$, полученная в опыте Франка — Герца (рис. 5.3), прекрасно подтвердила этот вывод. Такая зависимость является убедительным экспериментальным доказательством дискретности энергетических состояний атомов. В частности, из представленного на рис. 5.3 графика следует, что первое возбужденное состояние атома ртути отделено от основного состояния энергетическим промежутком в 4,9 эВ.

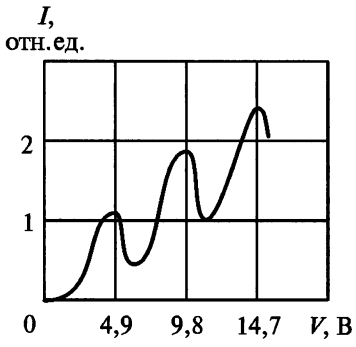


Рис. 5.3. Зависимость анодного тока в лампе, заполненной газом, от ускоряющего напряжения на сетке

Аналогичные закономерности наблюдаются и при заполнении лампы другими газами, например

неоном и гелием. При этом более тщательная постановка опыта позволяет обнаружить также спады в зависимости $I = I(V)$, обусловленные другими возбужденными состояниями атома и даже его ионизацией.

Другой важный результат опыта Франка — Герца с атомами ртути связан с испусканием лампой ультрафиолетового света с длиной волны $\lambda = 253$ нм, которое начинается как только разность потенциалов между катодом и сеткой достигает значения 4,9 В. Это излучение можно наблюдать, если колбу лампы изготовить из кварца или стекла, пропускающего ультрафиолетовое излучение. Такое излучение объясняется тем, что возбужденные электронными ударами атомы ртути возвращаются в основное состояние путем испускания излучения. В соответствии с (1.41) длина волны такого излучения с энергией фотона $\varepsilon_ф = \Delta E = 4{,}9$ эВ $= 7{,}84 \cdot 10^{-19}$ Дж равна

$$\lambda = \frac{hc}{\varepsilon_ф} = \frac{6{,}62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{7{,}84 \cdot 10^{-19}} = 2{,}53 \cdot 10^{-7}\ \text{м} = 253\ \text{нм}.$$

5.2. Теория Бора атома водорода

Постулаты Бора. В 1911 г. после проведения опытов по рассеянию α-частиц на атомах Дж. Резерфорд на основании анализа результатов эксперимента выдвинул и обосновал планетарную модель строения атома. Согласно этой модели, атом состоит из тяжелого положительно заряженного ядра очень малых размеров ($\sim 10^{-15}$ м), вокруг которого по некоторым орбитам движутся электроны. Радиусы этих орбит имеют размеры порядка 10^{-10} м. Название "планетарная" такой модели атома отражает очевидную аналогию между атомом и Солнечной системой, в которой планеты движутся по некоторым определенным орбитам вокруг массивного притягивающего центра — Солнца. В отличие от планетарной модели Солнечной системы планетарная модель атома оказывается внутренне противоречивой с точки зрения классической физики. И это прежде всего связано с наличием у электрона заряда.

Согласно законам классической электродинамики, вращающийся вокруг ядра электрон, как и любая ускоренно движущаяся заряженная частица, будет излучать электромагнитные волны. Спектр такого излучения должен быть непрерывным, т. е. содержать электромагнитные волны любой длины. Уже этот вывод противоречит линейчатости спектров излучения атомов, наблюдаемой в опытах.

Кроме того, непрерывное излучение уменьшает энергию электрона. Поэтому за счет излучения радиус орбиты движущегося электрона должен уменьшаться, и, в конце концов, электрон обязан был бы упасть на ядро. Иными словами, планетарная модель атома в классической физике оказывается неустойчивой.

В 1913 г. Н. Бор показал, что "спасти" планетарную модель атома можно, вводя в теорию атома идеи квантования и выделяя при этом некоторые орбиты, разрешенные для движения электрона. Очевидно, что в правилах квантования должна фигурировать квантовая постоянная Планка. И так как квант действия $\hbar$ имеет размерность момента импульса, то Бор добавил в теорию условие квантования момента импульса движущегося вокруг ядра электрона.

Простейшим атомом является атом водорода, содержащий один-единственный электрон, движущийся по замкнутой орбите в кулоновском поле ядра. В первом приближении ядро атома можно считать неподвижным, а электронные орбиты — круговыми орбитами.

С учетом этих предположений Бор сформулировал основные положения теории атома водорода в виде трех постулатов.

1. Электрон в атоме может двигаться только по определенным стационарным орбитам, каждой из которых можно приписать определенный номер n = 1, 2, 3, ... Такое движение соответствует стационарному состоянию атома, обладающему неизменной полной энергией E_n. Это означает, что движущийся по стационарной замкнутой орбите электрон, вопреки законам классической электродинамики, не излучает энергию.

2. Разрешенными стационарными орбитами являются только те, для которых угловой момент импульса L электрона равен целому кратному значению постоянной Планка $\hbar$. Поэтому для n-й стационарной орбиты выполняется условие квантования

$$L = n\hbar, \quad n = 1, 2, ... \tag{5.3}$$

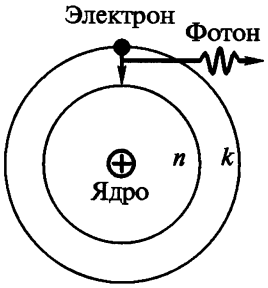


Рис. 5.4. Излучение атома

3. Испускание или поглощение кванта излучения происходит при переходе атома из одного стационарного состояния в другое (рис. 5.4). При этом частота ω излучения атома определяется разностью энергий атома в двух стационарных состояниях:

$$\hbar\omega_{nk} = E_k - E_n, \quad k > n. \qquad (5.4)$$

Квантование энергии атома. Запишем условие вращения электрона массой m_0 по круговой орбите радиуса r под действием кулоновской силы со стороны ядра и формулу Бора квантования момента импульса электрона:

$$\frac{m_0 v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2}; \qquad (5.5)$$

$$m_0 v r = n\hbar.$$

Решая эту систему уравнений, приходим к следующему выражению для радиусов допустимых (стационарных) орбит электрона в атоме водорода:

$$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 n^2}{m_0 e^2}, \quad n=1, 2, 3 \ldots \qquad (5.6)$$

Вводя в качестве универсальной константы теории боровский радиус

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2} = 0{,}529 \cdot 10^{-10} \text{ м} \qquad (5.7)$$

как радиус первой стационарной орбиты электрона в атоме водорода, запишем формулу (5.6) в виде

$$r_n = an^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (5.8)$$

Важно отметить, что оценка размера атома водорода ($\sim 10^{-10}$ м), полученная из (5.7) и (5.8), совпадает с соответствующей оценкой в газокинетической теории.

Из (5.5) получаем значение скорости электрона на n-й стационарной орбите

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar n}. \tag{5.9}$$

Отсюда находим, в частности, что на первой стационарной орбите электрон движется со скоростью $2{,}2 \cdot 10^6$ м/с, совершая один полный оборот за время $T_1 = 1{,}5 \cdot 10^{-16}$ с.

Полная энергия электрона, движущегося по n-й стационарной орбите, складывается из его кинетической энергии

$$E_к = \frac{m_0 v_n^2}{2} = \frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \tag{5.10}$$

и потенциальной энергии кулоновского взаимодействия электрона с ядром

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n} = -\frac{m_0 e^4}{16\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2}. \tag{5.11}$$

Поэтому с учетом (5.10) и (5.11) получаем важную формулу теории Бора — формулу квантования энергии электрона в атоме водорода:

$$E = E_к + U = -\frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13{,}6}{n^2} \text{ эВ}. \tag{5.12}$$

Полная энергия электрона в атоме оказалась отрицательной, так как, по определению, отрицательна потенциальная электростатическая энергия взаимодействия электрона с ядром. С увеличением номера орбиты полная энергия электрона в атоме возрастает. При этом номер орбиты n является квантовым числом.

На рис. 5.5 в соответствии с (5.12) изображен *энергетический спектр электрона в атоме водорода*. В области положительных энергий энергетический спектр свободного электрона является сплошным спектром. В области отрицательных значений полной

энергии энергетический спектр связанного с атомом электрона становится дискретным. Для наглядности на рис. 5.5 каждому возможному значению энергии соответствует энергетический уровень. В стационарном состоянии электрон может находиться на одном из этих дискретных энергетических уровней. Переход электрона с одного уровня на другой на этом рисунке изображен соответствующей стрелкой, начало и конец которой указывают энергетические уровни, между которыми происходит переход.

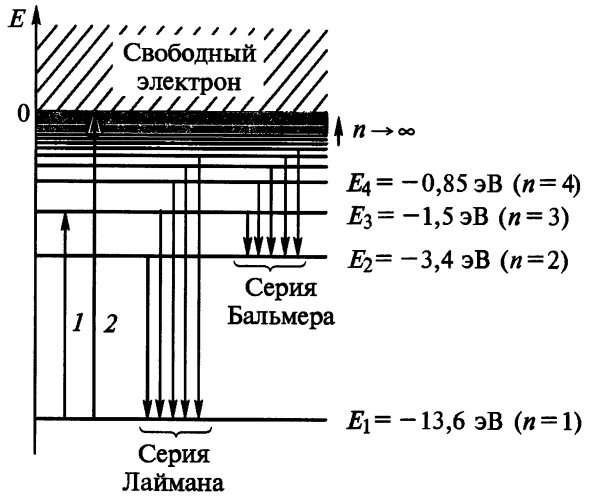


Рис. 5.5. Энергетический спектр электрона в атоме водорода

Обычно атом находится в основном состоянии с наименьшим значением энергии, равным E_1. В таком состоянии атома электрон движется по первой стационарной орбите, имеющей минимальный радиус, равный a.

Если атому сообщить дополнительную энергию, то он может перейти в возбужденное состояние (переход *1* на рис. 5.5). Электрон при этом переходит на орбиту большего радиуса. Возбуждение атомов может инициироваться различными способами, например столкновением атомов газа в хаотическом тепловом движении, пропусканием через газ потока частиц с высокой энергией (электронов, α-частиц и др.) и, наконец, поглощением атомами излучения.

Если энергия, переданная электрону, будет достаточно велика, то электрон может преодолеть силу притяжения к ядру и ото-

рваться от атома. Такой процесс называют ионизацией атома. Из рис. 5.5 следует, что минимальная энергия, необходимая для ионизации атома водорода (переход 2), равна

$$E_i = |E_1| = 13{,}6\ \text{эВ}. \tag{5.13}$$

Это значение хорошо согласуется с экспериментальными данными, полученными для энергии ионизации атома водорода.

В возбужденном состоянии атом долго находиться не может. Как и любая физическая система, атом стремится перейти в состояние с наименьшей энергией. Поэтому приблизительно через 10^{-8} с возбужденный атом самопроизвольно (спонтанно) переходит в состояние с меньшей энергией, испуская при этом квант энергии излучения. Такой процесс продолжается до тех пор, пока атом не окажется в основном состоянии.

Если определена структура энергетических уровней, то можно рассчитать и структуру оптического спектра излучения атома водорода. Действительно, частоту излучения при переходе электрона с k-й, более удаленной, орбиты на n-ю $(k > n)$ можно определить, используя правило частот из третьего постулата теории Бора. С учетом (5.4) и формулы квантования энергии (5.12) получаем выражение для частот излучения атома водорода при различных переходах $k \to n$:

$$\omega_{nk} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right). \tag{5.14}$$

Здесь постоянная

$$R = \frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} = 2{,}07 \cdot 10^{16}\ \text{с}^{-1} \tag{5.15}$$

точно соответствует постоянной Ридберга, найденной из оптических экспериментов.

Полученная формула для частот излучения атома водорода точно совпадает с обобщенной формулой Бальмера (5.1б). Не удивительно поэтому, что за создание теории атома водорода, в основе которой лежит постулат квантования (5.3), в 1922 г. Н. Бор был удостоен Нобелевской премии по физике.

Изложенная выше теория может быть обобщена на случай эллиптических орбит (теория Бора — Зоммерфельда, 1915 г.) и для описания свойств любых водородоподобных атомов — атомных систем, содержащих один электрон, движущийся в поле ядра с положительным зарядом $+Ze$. Это — однократно ионизированный гелий He^{+} ($Z = 2$), двукратно ионизированный литий Li^{++} ($Z = 3$), трехкратно ионизированный бериллий Be^{+++} ($Z = 4$) и т. д. Простой пересчет показывает, что энергетический спектр водородоподобного иона получается из формулы (5.12) умножением на Z^2, а радиус орбит электрона оказывается в Z раз меньше, чем в атоме водорода.

Н. Бор в своей теории атома водорода впервые реализовал идею квантования энергии частицы, движущейся в силовом поле. Однако эта теория не может рассматриваться как законченная теория атомных явлений. Описывая атом законами классической физики, Бор просто "запретил" электрону, движущемуся по стационарной орбите, излучать электромагнитные волны. При этом условие квантования момента импульса электрона (5.3) не имеет общего физического обоснования и фактически угадано (в дальнейшем будет показано даже, что угадано не совсем верно) для атома водорода. Попытки Бора обобщить теорию и сформулировать постулаты квантования для более сложных атомов не увенчались успехом. Однако, будучи первой квантовой теорией атома, теория Бора имела большое значение для развития правильных физических представлений об атомных явлениях.

С позиции современной физики атом является физической системой, которая заведомо не может быть описана классической теорией, не учитывающей волновых свойств движущегося в атоме электрона.

В последующих параграфах этой главы будет рассмотрено, как в современной квантовой теории формулируется и решается проблема описания атомных систем.

□ **Задача 5.1.** Покажите, как условие квантования момента импульса электрона в теории Бора атома водорода можно сформулировать с учетом гипотезы де Бройля о наличии у электрона волновых свойств.

Решение. Для электрона, движущегося по круговой орбите радиуса r, момент импульса L связан с импульсом p простым соотношением: $L = pr$. Поэтому условие квантования (5.3) можно преобразовать к виду ▽

$$2\pi r = n\frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Согласно гипотезе де Бройля, движение электрона следует связать с волновым процессом, длина волны которого

$$\lambda_{\text{Б}} = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Следовательно, условие квантования Бора можно записать как

$$2\pi r = n\lambda_{\text{Б}}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Это соотношение утверждает, что стационарными являются только такие орбиты, на длине которых укладывается целое число длин волн де Бройля движущегося по орбите электрона.

Задача 5.2. Покажите, как изменится частота излучения атома водорода, если учесть конечное значение массы ядра.

Решение. В такой постановке задачи электрон и ядро вращаются вокруг неподвижного центра масс. Если через r_e и $r_{\text{я}}$ обозначить радиусы круговых орбит электрона и ядра, то, согласно определению центра масс, $m_0 r_e = M r_{\text{я}}$, где m_0 и M — массы электрона и ядра соответственно. Из равенства ускорений электрона и ядра вытекает условие равенства их угловых скоростей вращения:

$$\frac{v_e}{r_e} = \frac{v_{\text{я}}}{r_{\text{я}}} = \omega,$$

где v_e и $v_{\text{я}}$ — скорости электрона и ядра соответственно.

С учетом движения ядра момент импульса атома

$$L = m_0 v_e r_e + M v_{\text{я}} r_{\text{я}} = m_0 \omega r_e^2 + M \omega r_{\text{я}}^2.$$

В качестве основных уравнений теории запишем условие вращения электрона по круговой орбите и условие Бора квантования момента импульса атома:

$$m_0 \omega^2 r_e = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 (r_e + r_{\text{я}})^2},$$

$$m_0 \omega r_e^2 + M \omega r_{\text{я}}^2 = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Если расстояние между электроном и ядром обозначить через $r = r_e + r_я = r_e(1 + m_0 / M)$, то после преобразований эти соотношения примут вид

$$\mu\omega^2 r = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2},$$

$$\mu\omega r^2 = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, ...$$

Здесь введена приведенная масса системы электрон — ядро

$$\mu = \frac{m_0 M}{m_0 + M}.$$

Решая полученную систему уравнений, находим для стационарных состояний атома ($n = 1, 2, ...$)

$$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 n^2}{\mu e^2} \quad \text{и} \quad \omega_n = \frac{\mu e^4}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3 n^3}.$$

Полная энергия атома

$$E = \frac{m_0 v_e^2}{2} + \frac{M v_я^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 (r_e + r_я)} = \frac{\mu\omega^2 r^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

Подставляя значения r_n и ω_n, получаем формулу квантования энергии атома

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, \ 2, \ldots .$$

Отсюда находим частоты спектральных линий излучения такого атома

$$\omega_{nk} = \frac{E_k - E_n}{\hbar} = \tilde{R}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right),$$

где модифицированная постоянная Ридберга

$$\tilde{R} = \frac{\mu e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3} = \frac{R}{1 + \dfrac{m_0}{M}}.$$

Расчет показывает, что поправка частоты (или длины волны) излучения атома водорода за счет учета движения ядра составляет доли процента. Однако благодаря чрезвычайной точности спектроскопических методов появляется возможность экспериментально обнаружить различие (изотопический сдвиг) в спектрах излучения изотопов водорода — атомов, отличающихся массами ядер. Практически именно так, спектроскопическими методами, был открыт изотоп тяжелого водорода — дейтерий D, для которого $M_D = 2M_н$, и изотопический сдвиг длин волн головных линий в серии Бальмера H_α (λ = = 656,28 нм) и D_α ($\lambda = 656{,}11$ нм) составляет 0,17 нм.

Задача 5.3. Оцените уширение спектральных линий излучения атомов.

Решение. Можно выделить две основные причины уширения спектральных линий.

1. Радиационное уширение. Атом в возбужденном состоянии находится конечное время τ порядка 10^{-8} с. Это приводит к неопределенности энергии возбужденного атома, которую, как отмечалось в 2.3, можно оценить с помощью соотношения неопределенностей: $\Delta E = \hbar/\tau$.

Вследствие этого частота излучения атома имеет неопределенность

$$\delta\omega_0 = \frac{\Delta E_n}{\hbar} + \frac{\Delta E_k}{\hbar} = \frac{1}{\tau_n} + \frac{1}{\tau_k},$$

значение которой порядка 10^8 рад/с ($\delta\lambda_0 = 10^{-5}$ нм).

2. Доплеровское уширение. Природа этого эффекта связана с тепловым движением излучающих атомов. Пусть атом массой m_0, имеющий импульс $\vec{p}_0$, испускает в некотором направлении фотон с импульсом $\vec{p}_ф = \hbar\vec{k}$, где $\left|\vec{k}\right| = \frac{\omega}{c} \approx \frac{\omega_0}{c}$.

Закон сохранения импульса позволяет определить импульс атома после излучения: $\vec{p} = \vec{p}_0 - \hbar\vec{k}$. Поэтому в результате излучения фотона атом приобретает дополнительную кинетическую энергию отдачи

$$E_{отд} = \frac{(\vec{p}_0 - \hbar\vec{k})^2}{2m_0} - \frac{\vec{p}_0^{\,2}}{2m_0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{\hbar}{m_0}\vec{p}_0\vec{k} =$$

$$= \frac{\hbar^2\omega_0^2}{2m_0c^2} - \frac{\hbar p_0\omega_0}{m_0c}\cos\alpha.$$

Здесь α — угол между направлением первоначального движения атома и направлением излучения фотона. Этот угол может изменяться в пределах от $-\pi$ до $+\pi$.

Частоту излучения движущегося атома определим из закона сохранения энергии:

$$\hbar\omega = (E_k - E_n) - E_{\text{отд}}.$$

Отсюда

$$\omega = \omega_0 - \Delta\omega_0 \pm \delta\omega_{\text{Д}}.$$

Сдвиг середины спектральной линии при этом незначителен и равен

$$\Delta\omega_0 = \frac{\hbar\omega_0^2}{2m_0c^2}.$$

При $\omega_0 = 3\cdot10^{15}$ рад/с и $m_0 = 10^{-25}$ кг получаем $\Delta\omega_0 = 5\cdot10^4$ рад/с ($\Delta\lambda_0 = 10^{-8}$ нм). Таким сдвигом в силу его малости можно пренебречь.

Величина

$$\delta\omega_{\text{Д}} = \frac{p_0\omega_0}{m_0c} = \frac{v_0}{c}\omega_0$$

называется доплеровской шириной спектральной линии. Если в качестве характерной скорости движения атома взять его среднюю скорость при $T = 1000$ K, которая составляет приблизительно 10^3 м/с, то для $\omega_0 = 3\cdot10^{15}$ рад/с получаем $\delta\omega_{\text{Д}} = 10^{10}$ рад/с ($\delta\lambda_{\text{Д}} = 2\cdot10^{-3}$ нм).

5.3. Квантово-механическое описание водородоподобных атомов

Как следует из соотношений, полученных при решении задачи 5.1, длина волны де Бройля движущегося в атоме электрона сравнима с размером атома. Мы знаем, что в этих условиях нельзя пренебречь волновыми свойствами электрона и его движение в атоме не может быть описано законами классической физики. Поэтому атомные системы являются важнейшими объектами физики, для описания которых следует обязательно использовать законы квантовой механики. При этом существенно, что для такого описания квантовая механика не требует каких-либо дополнительных предположений, условий и постулатов, аналогичных постулатам в теории Бора.

Сформулируем постановку стационарной задачи квантовой механики для водородоподобного атома, описывающей движение электрона в электрическом поле неподвижного ядра с зарядом $+Ze$, где $Z=1$ для атома водорода и $Z=2, 3, 4, \ldots$ для других водородоподобных атомов (ионов). Такая модель является важнейшей моделью атомной физики. Для этой модели потенциал поля, в котором движется электрон, может быть записан точно. Поэтому все выводы квантовой теории водородоподобных атомов могут быть проверены непосредственно в эксперименте.

Потенциальная энергия электрона в электрическом поле ядра определяется как

$$U(r)=-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}. \qquad (5.16)$$

Движение электрона в таком поле можно рассматривать как движение в некоторой сферической потенциальной яме (рис. 5.6).

По аналогии с задачей о движении частицы в потенциальной яме простой формы, рассмотренной в 4.2, можно ожидать, что спектр энергии электрона в атоме будет дискретным, т. е. состоять из отдельных энергетических уровней со значениями полной энергии электрона E_1, E_2, E_3 и т. д. Для атома водорода этот энергетический спектр должен совпасть с полученным в теории Бора спектром энергий (см. формулу (5.12)), который подтверждается в оптических экспериментах.

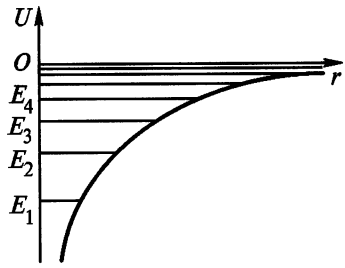


Рис. 5.6. Сферическая потенциальная яма для водородоподобного атома

Итак, для описания возможных квантовых состояний электрона в водородоподобном атоме и определения спектра полной энергии электрона в этих состояниях необходимо найти регулярные решения стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad (5.17а)$$

с гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + \hat{U}. \qquad (5.17б)$$

Здесь E — полная энергия электрона в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией ψ, а m_0 — масса электрона. При этом оператор потенциальной энергии $\hat{U}$ есть оператор умножения на функцию $U(r)$, заданную соотношением (5.16).

Искомые решения уравнения Шредингера (5.17а), (5.17б) являются собственными функциями оператора полной энергии $\hat{H}$, и их нахождение связано с решением достаточно сложного дифференциального уравнения. Учитывая, что эта задача является одной из важных задач квантовой физики, изложим схему нахождения таких решений достаточно подробно. При этом нам придется использовать специальные функции математической физики — сферические функции. Для некоторых конкретных квантовых состояний они будут выписаны в точной аналитической форме как комбинации известных элементарных функций. Более подробные сведения о свойствах сферических (шаровых) функций можно найти в справочной математической литературе.

Движение электрона в атоме удобнее исследовать, вводя сферическую систему координат, центр которой совпадает с центром ядра атома. В такой системе координат волновая функция электрона имеет вид $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$, а оператор Лапласа

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}$$

можно определить как оператор, содержащий радиальную часть

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \qquad (5.18)$$

и угловую часть

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \qquad (5.19)$$

Согласно формулам (3.32), оператор квадрата момента импульса в сферической системе координат определяется как $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi}$. Следовательно уравнение Шредингера (5.17а) преобразуется к виду

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta_r \psi + \frac{1}{2m_0 r^2}\hat{L}^2 \psi - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi = E\psi. \qquad (5.20)$$

Решение этого уравнения будем искать в виде произведения двух функций с разделяющимися переменными:

$$\psi = X(r)Y(\theta,\varphi). \qquad (5.21)$$

Заметим, что если два оператора содержат дифференциальные операции по разным переменным, то результат их последовательного действия на волновую функцию не зависит от порядка их следования, т. е. два таких оператора коммутируют. Поэтому коммутируют операторы Δ_r и $\Delta_{\theta,\varphi}$, а также оператор $\Delta_{\theta,\varphi}$ и оператор умножения на функцию $U(r)$, зависящую только от радиальной координаты.

Отсюда следует, что оператор квадрата момента импульса $\hat{L}^2$ коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}$ в форме (5.17б), записанной для сферически симметричного поля кулоновских сил. Согласно общим положениям квантовой механики, изложенным в гл. 3, это означает, что в любом стационарном состоянии атома электрон имеет не только определенное значение полной энергии E, но и определенное, не изменяющееся со временем значение модуля момента импульса $L = \sqrt{L^2}$.

Этот вывод квантовой теории атома полностью соответствует классическому результату, согласно которому момент импульса является интегралом движения и не изменяется со временем при движении частицы в поле центральных сил. Значит, функция $Y(\theta,\varphi)$ в (5.21) должна быть собственной функцией оператора $\hat{L}^2$, т. е. удовлетворять уравнению

$$\hat{L}^2 Y_{l,\,m} = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,\,m}. \qquad (5.22)$$

Функции $Y_{l,\,m} = Y_{l,\,m}(\theta, \varphi)$ называются сферическими, или шаровыми, функциями (см. формулы (3.70)). Эти функции определяются двумя целочисленными параметрами l и m, которые называют квантовыми числами.

Орбитальное (азимутальное) квантовое число l принимает значения $l = 0, 1, 2, \ldots$ Квантовое число $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$ называют магнитным квантовым числом. Физический смысл этих квантовых чисел и их названий мы обсудим ниже.

Подставив в уравнение (5.20) волновую функцию в виде (5.21), где $Y(\theta, \varphi) = Y_{l,\,m}(\theta, \varphi)$, и разделив его на этот угловой множитель, получим уравнение для радиальной функции $X(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dX}{dr}\right) + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_0 r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]X = EX. \qquad (5.23)$$

Решение этого уравнения будем искать в виде

$$X(r) = \frac{R(r)}{r}. \qquad (5.24)$$

Подставив искомую функцию $X(r)$ такого вида в уравнение (5.23), получим более простое по форме уравнение для функции $R(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2R}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_0 r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]R = ER. \qquad (5.25)$$

Перейдем в этом уравнении к безразмерным величинам

$$\rho = Z\frac{r}{a} \quad \text{и} \quad \varepsilon = -\frac{1}{Z^2}\frac{E}{W}, \quad \varepsilon > 0, \qquad (5.26)$$

выбрав в качестве характерного размера боровский радиус

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2},$$

а в качестве характерной энергии — энергию ионизации атома водорода, найденную в теории Бора:

$$W = E_i = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a} = \frac{\hbar^2}{2m_0 a^2} = \frac{m_0 e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}.$$

Тогда уравнение (5.25) примет вид

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \varepsilon\right]R = 0. \qquad (5.27)$$

Точное решение этого дифференциального уравнения с переменными коэффициентами следует искать в виде произведения двух функций:

$$R(\rho) = u(\rho)\exp(-\alpha\rho), \quad \alpha = \sqrt{\varepsilon}. \qquad (5.28)$$

Подставляя (5.28) в (5.27), находим уравнение для новой искомой функции $u(\rho)$. После несложных вычислений получаем

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} - 2\alpha\frac{du}{d\rho} + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u = 0. \qquad (5.29)$$

Функцию $u(\rho)$, являющуюся решением этого уравнения, будем искать в виде степенного ряда

$$u(\rho) = \rho^{l+1}\sum_{k=0}^{\infty} a_k\rho^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\rho^{k+l+1}. \qquad (5.30)$$

Для нахождения коэффициентов этого ряда a_k подставим (5.30) в (5.29) и соберем члены ряда с одинаковой степенью ρ. Такая подстановка дает

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k\left[(k+l+1)(k+l)-l(l+1)\right]\rho^{k+l-1}+$$

$$+\sum_{k=0}^{\infty}\left[2-2\alpha(k+l+1)\right]\rho^{k+l}=0. \qquad (5.31)$$

В первой сумме при $k=0$ выражение в квадратных скобках обращается в нуль. Поэтому суммирование в ней фактически начинается с $k=1$. Следовательно, сдвинув на единицу индекс суммирования в первой сумме, формулу (5.31) можно преобразовать к виду

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left\{a_{k+1}\left[(k+l+2)(k+l+1)-l(l+1)\right]+\right.$$

$$\left.+a_k\left[2-2\alpha(k+l+1)\right]\right\}\rho^{k+l}=0.$$

Чтобы это равенство выполнялось при всех ρ, коэффициент при каждой степени ρ должен быть равным нулю. Значит, ряд (5.30) будет решением уравнения (5.29), если выполняется следующее рекуррентное соотношение для его коэффициентов:

$$a_{k+1}=a_k\frac{2\alpha(k+l+1)-2}{(k+l+2)(k+l+1)-l(l+1)}. \qquad (5.32)$$

Однородность уравнения (5.29) позволяет, выбрав значение коэффициента a_0, по формуле (5.32) определить a_1, затем найти a_2 и т. д. Вычисляя таким образом все коэффициенты a_k, находим искомое решение уравнения (5.29) в виде ряда (5.30) по степеням ρ с известными коэффициентами.

Из (5.32) следует, что для достаточно больших значений k связь между коэффициентами ряда (5.30) имеет вид $a_{k+1}\approx\frac{2\alpha}{k}a_k$. Но именно такая связь существует между коэффициентами ряда

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2\alpha)^k}{k!}\rho^k=\exp(2\alpha\rho),$$

представляющего собой разложение экспоненты с показателем степени $2\alpha\rho$. Следовательно, если ряд (5.30) имеет бесконечное число слагаемых, то для достаточно больших значений ρ функция $u(\rho)$ будет иметь следующую асимптотику:

$$u(\rho) \approx \rho^{l+1} \exp(2\alpha\rho).$$

Но тогда из (5.28) следует, что даже после умножения на $\exp(-\alpha\rho)$ радиальная составляющая $R(\rho)$ будет неограниченно возрастать при $\rho \to \infty$. С учетом (5.21) и (5.24) такой же неограниченный рост на бесконечности будет наблюдаться и у искомого решения уравнения Шредингера. Такая функция не удовлетворяет условию нормировки и, следовательно, не может рассматриваться как волновая функция электрона.

Построенное решение уравнения Шредингера, однако, будет убывать при $r \to \infty$ и удовлетворять всем условиям регулярности, если ряд (5.30) оборвется на каком-либо конечном члене, т. е. будет многочленом конечной степени. Только в этом случае экспоненциальный множитель в (5.28) обеспечит убывание квадрата модуля волновой функции на бесконечности.

Из (5.32) следует, что обрыв ряда (5.30) на номере $k = n_r$ произойдет, если выполнится следующее условие:

$$2\alpha(n_r + l + 1) = 2. \tag{5.33}$$

Обозначим целое число $n_r + l + 1 = n$, назвав n_r радиальным квантовым числом, а n — главным квантовым числом. Очевидно, что $n \geq l + 1$, т. е. $l \leq n - 1$.

Условие (5.33) в этом случае принимает вид $\alpha n = 1$ или $\varepsilon = 1/n^2$. С учетом соотношений (5.26) это условие можно сформулировать как условие квантования полной энергии электрона в атоме

$$E_n = -\frac{Z^2 m_0 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{5.34}$$

Итак, условие регулярности волновой функции привело к условию квантования энергии атома, которое при $Z=1$ точно совпало с условием квантования энергии (5.12) в теории Бора. Поэтому из (5.34) также следует экспериментально подтвержденная формула Бальмера (5.14).

Таким образом, радиальная часть волновой функции электрона в водородоподобном атоме зависит от двух квантовых чисел n и l и может быть записана в виде

$$X_{nl}(\rho)=\rho^l \exp\left(-\frac{\rho}{n}\right)\sum_{k=0}^{n_r} a_k \rho^k, \qquad (5.35)$$

где $\rho=Z\frac{r}{a}$, $n_r=n-(l+1)$, причем $l\le n-1$, а коэффициенты a_k для $k>0$ находятся из рекуррентных соотношений (5.32). Значение коэффициента a_0 в конечном итоге выбирается из условия нормировки волновой функции, которое в сферической системе координат запишется в виде

$$\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left|\psi(r,\theta,\varphi)\right|^2 r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi=1. \qquad (5.36)$$

Здесь $r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi=dV$ — элемент объема в сферических координатах.

Следовательно, волновая функция, определяющая квантовое состояние электрона в атоме, найдена. Она имеет вид

$$\psi_{nlm}(\rho,\theta,\varphi)=X_{nl}(\rho)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

и зависит от трех квантовых чисел — n, l и m.

Для обозначения квантовых состояний с заданным значением орбитального квантового числа l используют следующие спектроскопические символы:

Значение l	0	1	2	3	4	5	...
Символ состояния	s	p	d	f	g	h	...

В частности, состояние с $l=0$ называется s-состоянием, а электрон в таком состоянии — s-электроном. Состояние с $l=1$ называется p-состоянием и т. д.

Для более полного обозначения квантового состояния электрона необходимо указать также значение главного квантового числа n. Оно приводится перед символом состояния. Так, электрон в квантовом состоянии с $n=2$ и $l=0$ обозначается символом $2s$, в состоянии с $n=4$ и $l=2$ — символом $4d$ и т. д.

Поскольку всегда $l \le n-1$, то возможны следующие состояния электрона:

$n=1 \to 1s$

$n=2 \to 2s,\ 2p$

$n=3 \to 3s,\ 3p,\ 3d$

$n=4 \to 4s,\ 4p,\ 4d,\ 4f$ и т. д.

Анализ свойств сферических функций $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ показывает, что все s-состояния электрона, т. е. состояния с $l=0$ и $m=0$, являются сферически симметричными состояниями. Волновая функция в этих состояниях не зависит от угловых переменных θ и φ.

Приведем в табл. 5.1. некоторые нормированные волновые функции ψ_{nlm} для ряда квантовых состояний водородоподобных атомов $\left(\rho = Z\frac{r}{a}\right)$.

Таблица 5.1

n	l	m	ψ_{nlm}	Состояние
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\exp(-\rho)$	$1s$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}(2-\rho)\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)$	$2s$
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\rho\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\cos\theta$	$2p$

n	l	m	ψ_{nlm}	Состояние
2	1	+1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\rho\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\sin\theta\exp(i\varphi)$	$2p$
2	1	−1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\rho\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\sin\theta\exp(-i\varphi)$	$2p$

На рис. 5.7 для некоторых квантовых состояний атома водорода, описываемых найденными волновыми функциями, показана радиальная электронная плотность вероятности в виде облака, густота которого в разных точках пространства пропорциональна этой плотности вероятности. Именно так, в виде облака плотности вероятности, может быть представлен образ атома в квантовой теории.

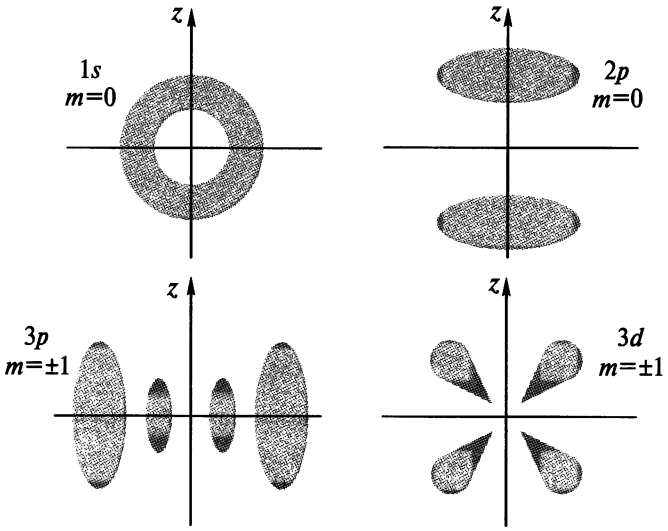


Рис. 5.7. Пространственное распределение плотности вероятности обнаружения электрона в различных квантовых состояниях атома водорода

Задача 5.4. Определите, на каком расстоянии от ядра с наибольшей вероятностью можно обнаружить электрон в атоме водорода в $1s$- и $2p$-состояниях.

Решение. В заданном квантовом состоянии электрон можно обнаружить на различных расстояниях от ядра. При этом вероятность нахождения электрона на расстоянии r от ядра, точнее в узком шаровом слое радиусов от r до $r+dr$, определяется как

$$dP = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi.$$

Эта вероятность пропорциональна толщине слоя dr, т. е.

$$dP = w(r)dr.$$

Наиболее вероятным расстоянием электрона от ядра будет такое расстояние $r_в$, для которого радиальная плотность вероятности $w(r)$ будет максимальна.

Взяв волновые функции электрона в атоме водорода из табл. 5.1, найдем, что в $1s$-состоянии

$$w_1(r) = Ar^2 \exp\left(-\frac{2r}{a}\right), \quad A = \text{const},$$

а в $2p$-состояниях

$$w_2(r) = Br^4 \exp\left(-\frac{r}{a}\right), \quad B = \text{const}.$$

Приравнивая производные этих функций нулю, находим, что в $1s$-состоянии $r_{в1} = a$, т. е. в этом состоянии наиболее вероятно обнаружить электрон на расстоянии, равном радиусу первой боровской орбиты.

Для $2p$-состояний получаем, что $r_{в2} = 4a$. И в этих состояниях наиболее вероятное расстояние электрона от ядра равно радиусу соответствующей (второй) боровской орбиты.

Таким образом, хотя в квантовой механике не используется представление о движении электрона по определенным траекториям, радиусам боровских орбит и в этой теории можно придать физический смысл наиболее вероятных расстояний электрона от ядра.

Задача 5.5. Определите потенциал электрического поля для основного состояния атома водорода на различных расстояниях от ядра.

Решение. Искомый потенциал складывается из потенциала поля ядра и потенциала электронного облака, связанного с движением электрона вокруг ядра: $\varphi = \varphi_я + \varphi_e$.

Согласно вероятностному смыслу волновой функции, объемная плотность электрического заряда в электронном облаке равна $\rho_e = -e|\psi_{100}|^2$. Потенциал поля такого распределенного в пространстве заряда можно определить, решив уравнение Пуассона для потенциала:

$$\Delta\varphi_e = -\frac{\rho_e}{\varepsilon_0}.$$

Если в качестве масштаба расстояний и характерного потенциала в атоме водорода выбрать боровский радиус a и потенциал поля ядра на этом расстоянии $\varphi_0 = e/(4\pi\varepsilon_0 a)$, то в безразмерном виде уравнение Пуассона запишется как

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\varphi_e}{dr}\right) = 4\exp(-2r).$$

Это уравнение представим в виде

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\varphi_e) = 4\exp(-2r).$$

Решением этого неоднородного дифференциального уравнения является функция

$$\varphi_e = \left(\frac{1}{r}+1\right)\exp(-2r) - \frac{1}{r}.$$

Так как потенциал поля ядра в используемых безразмерных переменных имеет вид $\varphi_я = 1/r$, то окончательно для потенциала электрического поля в атоме получаем

$$\varphi = \varphi_я + \varphi_e = \left(\frac{1}{r}+1\right)\exp(-2r).$$

Возвращаясь к размерным величинам, запишем для основного состояния атома водорода распределение в пространстве потенциала электрического поля:

$$\varphi(r)=\frac{e}{4\pi\varepsilon_0 a}\left(\frac{a}{r}+1\right)\exp\left(-\frac{2r}{a}\right).$$

Анализ этого выражения показывает, что вблизи ядра ($r << a$)

$$\varphi(r)=\frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

т. е. электрический потенциал в этой области пространства определяется практически только положительным зарядом ядра.

При удалении от ядра поле отрицательно заряженного электронного облака начинает экранировать поле ядра и на достаточно больших расстояниях от ядра ($r >> a$)

$$\varphi(r)=\frac{e}{4\pi\varepsilon_0 a}\exp\left(-\frac{2r}{a}\right),$$

т. е. потенциал очень быстро (экспоненциально) убывает по мере удаления от ядра.

5.4. Квантовые числа и их физический смысл

Как следует из решения уравнения Шредингера для атома водорода, квантовое состояние электрона в этом атоме (можно сказать и квантовое состояние атома) полностью определяется тремя квантовыми числами. "Задайте значения квантовых чисел, и я полностью опишу свойства атома", — так может современный физик перефразировать известное изречение Архимеда.

Каждое из квантовых чисел принимает только целочисленные значения и определяет, т. е. предсказывает, результаты измерения основных физических величин в заданном квантовом состоянии атома.

1. Главное квантовое число n. Это квантовое число принимает значения

$$n=1, 2, 3, \ldots$$

и определяет *полную энергию электрона* в любом квантовом состоянии

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13{,}6}{n^2} \text{ эВ}. \qquad (5.37)$$

Можно отметить, что эти значения энергии являются собственными значениями гамильтониана (5.17а). Поэтому в связанном состоянии электрон в атоме водорода имеет дискретный энергетический спектр, лежащий в области отрицательных значений и имеющий точку сгущения $E = 0$.

2. Орбитальное (азимутальное) квантовое число l. В квантовых состояниях с заданным значением главного квантового числа n азимутальное квантовое число может иметь следующие значения:

$$l = 0, 1, 2, 3, \ldots, (n-1).$$

Стационарные волновые функции $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$, описывающие различные квантовые состояния атома (см. 5.3), являются собственными функциями не только оператора полной энергии $\hat{H}$, но и оператора квадрата момента импульса $\hat{L}^2$, т. е.

$$\hat{L}^2 \psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2 \psi_{nlm}.$$

Следовательно, в любом квантовом состоянии атом обладает определенным значением квадрата момента импульса, причем модуль орбитального момента импульса движущегося в атоме электрона однозначно определяется орбитальным квантовым числом:

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}. \qquad (5.38)$$

Проанализируем эту *формулу квантования момента импульса* (5.38). Сравнивая ее с условием (5.3) квантования момента импульса движущегося электрона в теории Бора, можно заметить, что эти условия не совпадают. И дело не только в различии числовых значений, рассчитанных по этим формулам. Принципиальное

отличие этих соотношений состоит в том, что в квантовой теории возможны состояния атома с нулевым моментом импульса. Во всех s-состояниях и, в частности, в основном $1s$-состоянии, когда $l=0$, из формулы (5.38) получаем $L=0$. При классическом описании движения электрона в атоме по определенной траектории (орбите) в любом состоянии атом должен обладать ненулевым моментом импульса.

Опыт подтверждает существование квантовых состояний атома с нулевыми орбитальными моментами. Следовательно, опыт подтверждает, что только отказ от классического траекторного способа описания движения электрона в атоме позволяет правильно рассчитать и предсказать свойства атома. Вероятностный способ описания движения частиц в квантовой механике является единственно правильным способом описания свойств атомных систем — таков вывод современной физики.

Так как движущийся вокруг ядра электрон является заряженной частицей, то такое движение обусловливает протекание некоторого замкнутого тока в атоме, который можно охарактеризовать *орбитальным магнитным моментом* $\vec{p}^{\,м}$.

В теории Бора, когда с позиции классической теории рассматривается круговое движение электрона по орбите радиуса r со скоростью v, модуль орбитального механического момента равен $L=m_0vr$. Если время полного оборота электрона T, то такому движению соответствует замкнутый ток

$$i=\frac{e}{T}=\frac{ev}{2\pi r},$$

который можно охарактеризовать магнитным моментом:

$$p^{м}=i\pi r^2=\frac{evr}{2}.$$

Связь механического и магнитного моментов при этом определяется *гиромагнитным отношением*

$$\Gamma_0=\frac{p^{м}}{L}=\frac{e}{2m_0}. \qquad (5.39)$$

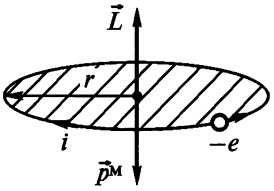


Рис. 5.8. Орбитальные моменты атома

Так как заряд электрона отрицателен, то для орбитального движения направление вектора магнитного момента $\vec{p}^{\text{м}}$ противоположно направлению вектора механического момента импульса $\vec{L}$ (рис. 5.8).

Для расчета орбитального магнитного момента в квантовой теории следует определить пространственную плотность электрического тока $\vec{j}_e$ через плотность потока вероятностей $\vec{j}$ по формуле $\vec{j}_e = -e\vec{j}$. Плотность потока вероятности при этом можно найти по формуле (3.23), зная волновую функцию электрона в заданном квантовом состоянии атома. Точный квантово-механический расчет гиромагнитного отношения также приводит к формуле (5.39).

Итак, в любом квантовом состоянии атом водорода обладает не только механическим моментом $\vec{L}$, модуль которого определяется по формуле (5.38), но и магнитным моментом

$$p^{\text{м}} = \Gamma_0 L = \mu_{\text{Б}} \sqrt{l(l+1)}. \qquad (5.40)$$

Здесь универсальная постоянная

$$\mu_{\text{Б}} = \frac{e\hbar}{2m_0} = 0{,}927 \cdot 10^{-23} \ \text{Дж/Тл}$$

служит единицей измерения магнитных моментов атомов и называется *магнетоном Бора.*

Если атом переходит из одного квантового состояния в другое с испусканием (поглощением) фотона излучения, то возможны лишь такие переходы, для которых орбитальное квантовое число l изменяется на единицу. Это правило, согласно которому для оптических переходов $\Delta l = \pm 1$, называется *правилом отбора.* Наличие такого правила отбора обусловлено тем, что электромагнитное излучение (фотон) уносит или вносит не только квант энергии, но и вполне определенный момент импульса, изменяющий орбитальное квантовое число электрона всегда на единицу.

3. Магнитное квантовое число m. В квантовом состоянии с заданным значением орбитального квантового числа l магнитное квантовое число может принимать $2l+1$ различных значений из ряда

$$m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ldots,\ \pm l.$$

Физический смысл магнитного квантового числа вытекает из того, что волновая функция $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$, описывающая квантовое состояние электрона в атоме водорода, является собственной функцией оператора проекции момента импульса $\hat{L}_z$, причем

$$\hat{L}_z \psi_{nlm} = m\hbar\psi_{nlm}.$$

Поэтому из общих положений квантовой механики (см. 3.5) следует, что проекция момента импульса электрона на выделенное в пространстве направление z может иметь только определенные значения, равные

$$L_z = m\hbar. \qquad (5.41)$$

Направление z в пространстве обычно выделяется внешним полем (например, магнитным или электрическим), в котором находится атом.

Так как формула квантования проекции механического момента (5.41) соответствует вполне определенным направлениям ориентации в пространстве вектора $\vec{L}$ (рис. 5.9), эту формулу обычно называют *формулой пространственного квантования*.

С точки зрения классического представления об электронной орбите с учетом перпендикулярности вектора $\vec{L}$ к плоскости орбиты, из выражения (5.41) определяются возможные дискретные расположения электронных орбит в пространстве по отношению к направлению внешнего поля.

Сравнивая (5.38) и (5.41), можно заметить, что максимальное значение проекции

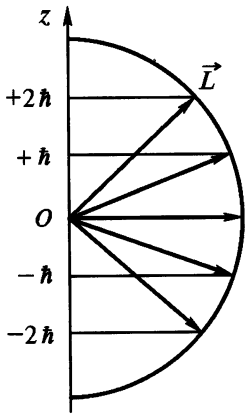


Рис. 5.9. Пространственное квантование момента импульса электрона

момента импульса $\hbar l$ не равно модулю момента импульса $\hbar\sqrt{l(l+1)}$, а меньше его. Это связано с тем, что, как показано в 3.7, проекции момента на две различные координатные оси не могут быть определены одновременно точно. Поэтому невозможно точное совпадение направления вектора орбитального момента импульса с направлением оси z.

Отмеченная выше связь механического и магнитного моментов атома позволяет с учетом (5.41) записать также возможные значения проекции магнитного момента атома на выделенное направление z:

$$p_z^{\text{м}} = \Gamma_0 L_z = m\mu_{\text{Б}}, \qquad (5.42)$$

зависящие от значения магнитного квантового числа m.

5.5. Опыт Штерна — Герлаха. Гипотеза о спине электрона

Опыт Штерна — Герлаха. Оптические эксперименты дают вполне достаточные доказательства квантования энергии атомов. Другой вид квантования — пространственное, утверждающее дискретность проекции магнитного момента атома на направление внешнего магнитного поля, демонстрирует опыт с атомными пучками, выполненный О. Штерном и В. Герлахом в 1922 г.

Пространственное квантование орбитального магнитного момента для атома водорода описывается формулой (5.42). Для более сложных многоэлектронных атомов эта формула несколько видоизменяется (см. 5.6). Однако и для них остается в силе основной вывод квантовой теории: проекция магнитного момента атома на направление внешнего магнитного поля может иметь только дискретные квантовые значения.

В опыте Штерна — Герлаха пространственное квантование для атомных систем демонстрируется следующим образом. Путем испарения в вакуумной печи атомов серебра или другого металла с помощью тонких щелей формируется узкий атомный пучок (рис. 5.10, *а*). Этот пучок пропускают через неоднородное магнитное поле с существенным градиентом магнитной индукции. Индукция магнитного поля $\vec{B}$ в опыте достаточно велика и направлена вдоль оси z.

Для создания такого магнитного поля используют магнит с ножевидным полюсным наконечником вблизи которого проходит атомный пучок (рис. 5.10, *б*).

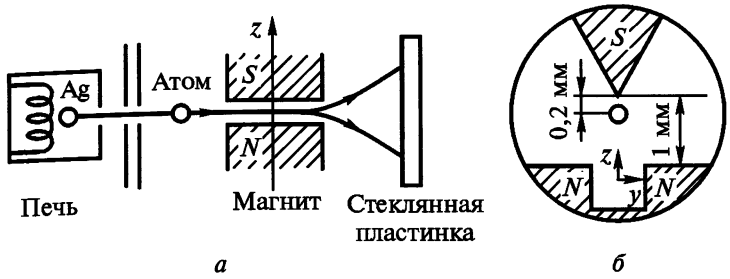


Рис. 5.10. Схема опыта Штерна — Герлаха:
а — схема установки; *б* — форма межполюсного канала магнита

На пролетающие в зазоре магнита атомы вдоль направления магнитного поля действует сила

$$F_z = p_z^{\text{м}} \frac{\partial B}{\partial z}, \tag{5.43}$$

обусловленная градиентом индукции неоднородного магнитного поля и зависящая от значения проекции магнитного момента атома на направление поля. Эта сила отклоняет движущийся атом в направлении оси z, причем за время пролета магнита движущийся атом отклоняется тем больше, чем больше сила F_z. При этом одни атомы отклоняются вверх, а другие — вниз.

С позиций классической физики магнитный момент атомов вследствие их хаотичного теплового движения при влете в магнитное поле может иметь любое направление в пространстве. Это соответствует непрерывному распределению значений F_z для различных атомов и, следовательно, любым отклонениям атомов. В результате пролетевшие через магнит атомы серебра должны были образовать сплошную широкую зеркальную полосу на стеклянной пластинке.

Если же, как предсказывает квантовая теория, имеет место пространственное квантование и проекция магнитного момента $p_z^{\text{м}}$ атома принимает только определенные дискретные значения, то под

действием силы F_z атомный пучок должен расщепиться на дискретное число пучков, которые, оседая на стеклянной пластинке, дают серию узких дискретных зеркальных полосок из напыленных атомов. Именно этот результат наблюдался в эксперименте.

Таким образом, опыт Штерна — Герлаха доказал правильность выводов квантовой теории о наличии пространственного квантования магнитных моментов атомов.

Спин электрона. Из квантовой теории следует, что вследствие симметрии электронного облака механический и магнитный моменты атома, находящегося в основном состоянии, равны нулю. Следовательно, если в опыте Штерна — Герлаха обеспечить условия, при которых в атомном пучке будут двигаться невозбужденные атомы, то такой атомный пучок не должен расщепляться магнитным полем. Поэтому на стеклянной пластинке мы увидели бы в центре одну узкую зеркальную полоску.

Однако эксперимент не подтвердил такой вывод квантовой теории. Пучок невозбужденных атомов серебра расщепился на два пучка, которые напылили на стеклянной пластинке две узкие зеркальные полоски, сдвинутые симметрично вверх и вниз. Измерение этих сдвигов позволило определить магнитный момент невозбужденного атома серебра. Его проекция на направление магнитного поля оказалась равной $+\mu_Б$ или $-\mu_Б$.

Это противоречие квантовой теории и опыта было не единственным, обнаруженным в различных экспериментах. Такое же противоречие наблюдалось при изучении тонкой структуры оптических спектров щелочных металлов. В опытах с ферромагнетиками было обнаружено аномальное значение гиромагнитного отношения, отличающееся от ожидаемого значения (5.39) в два раза.

Все эти трудности квантовой теории были преодолены, когда в 1925 г. С. Гаудсмит и Дж. Уленбек выдвинули смелую теорию о том, что сам электрон является носителем "собственных" механического и магнитного моментов, не связанных с движением электрона в пространстве. Эта гипотеза получила название *гипотезы о спине электрона* (от англ. *spin* — кружение, верчение).

Первоначально предполагалось, что спин обусловлен вращением электрона вокруг своей оси. Однако такая модель вращающегося заряженного шарика оказалась несостоятельной. Прежде всего расчет показал, что ни при каких допустимых скоростях (т. е. меньше скорости света) нельзя вращением электрона инду-

цировать магнитный момент, равный по величине магнетону Бора. Кроме того, значение гиромагнитного отношения собственного магнитного и механического моментов, рассчитанное для модели вращающегося электрона, оказалось в 2 раза меньше, чем получаемое в опытах.

Модель электрона, вращающегося вокруг своей оси подобно тому, как вращается Земля, двигаясь по околосолнечной орбите, в настоящее время может использоваться только при популярном изложении свойств атома. Однако термин "спин" сохранился и является общепринятым в современной квантовой физике.

Спин электрона не имеет классического аналога. Он характеризует внутреннее свойство квантовой частицы, связанное с наличием у нее дополнительной степени свободы. Количественная характеристика этой степени свободы — спин $s = \frac{1}{2}$ — является для электрона такой же величиной, как, например, его масса m_0 и заряд $-e$.

Для согласования теории и эксперимента Гаудсмит и Уленбек предположили, что по аналогии с орбитальными моментами значения *собственных механического и магнитного моментов электрона* определяются по формулам

$$L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar, \tag{5.44}$$

$$p_s^{\text{м}} = 2\mu_{\text{Б}}\sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3}\mu_{\text{Б}}. \tag{5.45}$$

Для таких моментов гиромагнитное отношение

$$\Gamma_s = \frac{p_s^{\text{м}}}{L_s} = \frac{2\mu_{\text{Б}}}{\hbar} = \frac{e}{m_0} \tag{5.46}$$

оказывается в 2 раза больше гиромагнитного отношения для орбитального движения (5.39).

Проекции собственных моментов на выделенное направление z в такой теории определяются *спиновым квантовым числом* $m_s = \pm s = \pm\frac{1}{2}$. При этом

$$L_{sz} = m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2}, \tag{5.47}$$

$$p_{sz}^{\text{м}} = 2 m_s \mu_{\text{Б}} = \pm \mu_{\text{Б}}. \tag{5.48}$$

Из (5.44)—(5.48) следует, что значение спинового момента электрона постоянно, а с дополнительной степенью свободы электрона связана z-проекция этого момента, которая определяется спиновым квантовым числом m_s и принимает два значения. О таких двух квантовых состояниях обычно говорят как о состояниях со спином, направленным вверх $\left(m_s = +\frac{1}{2}\right)$ или вниз $\left(m_s = -\frac{1}{2}\right)$. Поэтому, определяя квантовое состояние электрона в любой системе, следует указать также и ориентацию спина.

В частности, это означает, что квантовое состояние электрона в атоме следует определять набором четырех квантовых чисел (табл. 5.2).

Таблица 5.2

Квантовое число	Символ	Возможные значения
Главное	n	1, 2, 3, ...
Орбитальное	l	0, 1, 2, 3, ... $(n-1)$
Магнитное	m	$-l$, ... , $-1, 0, +1$, ... , $+l$
Спиновое	m_s	$-\frac{1}{2}$, $+\frac{1}{2}$

При этом каждому значению главного квантового числа n соответствует

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2 \tag{5.49}$$

возможных комбинаций других квантовых чисел.

С учетом наличия у электрона спина найдем результирующий полный момент импульса атома водорода, обусловленный сложением орбитального и собственного моментов электрона. Как и для любого момента импульса в квантовой системе, результирующий момент определяется из выражения

$$L_j = \hbar\sqrt{j(j+1)}, \tag{5.50}$$

в котором квантовое число j может иметь значения

$$j = l + s \quad \text{и} \quad j = |l - s|.$$

Так как спин электрона $s = \frac{1}{2}$, то для квантового числа полного момента получаем полуцелые значения

$$j = l + \frac{1}{2} \quad \text{и} \quad j = \left| l - \frac{1}{2} \right|.$$

Если $l = 0$, то квантовое число j имеет только одно значение, равное $\frac{1}{2}$. При l, отличном от нуля, возможны два значения $j = l + \frac{1}{2}$ и $j = l - \frac{1}{2}$, которые соответствуют двум различным ориентациям спинового момента относительно орбитального.

Для квантового числа полного момента импульса атома выполняется правило отбора

$$\Delta j = 0, \ \pm 1.$$

С механическими моментами связаны магнитные моменты, которые взаимодействуют друг с другом подобно тому, как взаимодействуют два замкнутых тока. Это взаимодействие называется *спин-орбитальным*. Оно изменяет полную энергию атома, и, следовательно, в квантовых состояниях с различными квантовыми числами j атом должен обладать различными энергиями. Такое различие в энергиях приводит к расщеплению линий в оптическом спектре атома. Это расщепление очень мало́. Оно обусловливает

тонкую структуру оптического спектра атома водорода, в которой спектральные линии наблюдаются как дублетные (двойные). И хотя расстояние между линиями тонкой структуры в сотни тысяч раз меньше расстояний между основными линиями, тонкая структура водородного спектра была обнаружена экспериментально с помощью спектральных приборов с большой разрешающей способностью.

Какова же физическая природа наличия у электрона спина? Ответа на этот вопрос нет не только в классической физике, но и в нерелятивистской квантовой механике, в основе которой лежит уравнение Шредингера. В эту теорию представление о спине внесено в виде дополнительной гипотезы, не вытекающей из основных положений теории, но необходимой для согласования эксперимента и теории.

В 1928 г. П. Дирак обобщил квантовую теорию на случай релятивистского движения частицы. В основе релятивистской квантовой механики лежит *уравнение Дирака*, записанное первоначально для релятивистского электрона. Это уравнение значительно сложнее уравнения Шредингера по своей структуре и математическому аппарату, используемому при его записи. В рамках нашего курса мы не имеем возможности обсуждать это уравнение. Скажем лишь, что из уравнения Дирака четвертое спиновое квантовое число получается так же естественно, как и первые три квантовых числа при решении уравнения Шредингера. В частности, в релятивистской квантовой теории расстояние между энергетическими уровнями, обусловливающими тонкую структуру водородного спектра, определяется соотношением

$$\Delta E = \frac{\alpha^2}{16} E_i,$$

где E_i — энергия ионизации атома водорода, а $\alpha = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} \approx \dfrac{1}{137}$ — универсальная мировая константа, которая получила название *постоянной тонкой структуры*.

Итак, в самых общих словах можно сказать, что собственные механический и магнитный моменты у электрона появляются как следствие релятивистских эффектов в квантовой теории.

Отметим также, что не только электрон, но и многие другие элементарные частицы обладают спином s, имеющим целые зна-

чения для одних частиц и полуцелые значения для других. Так, например, составные частицы ядер атомов — нейтрон и протон — имеют спин $s=\frac{1}{2}$. Поэтому и ядро атома водорода обладает механическим и магнитным моментами. Взаимодействием магнитных моментов электрона и ядра объясняется *сверхтонкая структура оптического спектра* с дополнительным "сверхмалым" расщеплением спектральных линий.

Задача 5.6. Атом водорода в основном состоянии находится на оси кругового тока $I=10$ А радиуса $R=5$ см. Расстояние от атома до центра кругового тока $z=10$ см. Определите силу, действующую на атом со стороны магнитного поля тока в вакууме, с учетом спина электрона. Магнитный момент ядра не учитывать.

Решение. Индукцию магнитного поля на оси кругового тока на расстоянии z от его центра определим по известной формуле магнитостатики

$$B(z)=\frac{\mu_0 IR^2}{2\left(R^2+z^2\right)^{3/2}}.$$

Дифференцируя B по переменной z, находим значение градиента индукции магнитного поля на расстоянии z от центра кругового тока

$$\left|\frac{\partial B}{\partial z}\right|=\frac{3}{2}\frac{\mu_0 IR^2 z}{\left(R^2+z^2\right)^{5/2}}.$$

Если не учитывать магнитный момент ядра, то магнитный момент атома водорода в $1s$-состоянии $(l=0)$ обусловлен только спином электрона. Поэтому

$$p_z^{\text{м}}=p_{sz}^{\text{м}}=\pm\mu_{\text{Б}}.$$

Следовательно, на атом со стороны магнитного поля тока будет действовать сила, модуль которой

$$F=\mu_{\text{Б}}\left|\frac{\partial B}{\partial z}\right|=\frac{3}{2}\frac{\mu_0 IR^2 z}{\left(R^2+z^2\right)^{5/2}}\mu_{\text{Б}}.$$

Эта сила направлена вдоль оси кругового тока к его центру, если магнитный момент электрона параллелен магнитному полю, и от центра, если направление спина противоположно. Подставляя числовые значения, находим, что $F=2{,}5\cdot10^{-26}$ Н.

5.6. Атом в магнитном поле

Магнитный момент атома. В сложном многоэлектронном атоме каждый из N электронов обладает орбитальным и спиновым механическим и магнитным моментами. При сложении моментов отдельных электронов в результирующий момент атома возможны два случая.

1. Орбитальный и спиновой моменты каждого электрона складываются в суммарный момент. Затем эти моменты объединяются в результирующий момент атома. Такой вид связи называется *JJ*-связью. Обычно такая связь наблюдается у тяжелых атомов.

2. Наиболее часто встречающаяся у легких и средних атомов *LS*-связь (*связь Рассел — Саундерса*) осуществляется по следующей схеме:

А. Все орбитальные механические моменты отдельных электронов складываются в орбитальный момент

$$\mathcal{L}_L = \hbar\sqrt{L(L+1)}, \tag{5.51}$$

который определяется квантовым числом L суммарного орбитального момента атома. Число L всегда является целым числом либо нулем.

Б. Спиновые моменты импульса всех электронов многоэлектронного атома складываются в суммарный спиновой момент:

$$\mathcal{L}_S = \hbar\sqrt{S(S+1)}. \tag{5.52}$$

При этом в атомах с четным числом электронов квантовое число S принимает все целые значения от нуля, когда спины электронов попарно компенсируют друг друга, до целого значения $\frac{1}{2}N$, когда спины всех электронов направлены в одну сторону. При нечетном N квантовое число S может принимать все полуцелые значения от $\frac{1}{2}$ до $\frac{1}{2}N$.

В. Результирующий момент всего атома $\mathcal{L}_J$ есть результат квантово-механического сложения моментов $\mathcal{L}_L$ и $\mathcal{L}_S$, которое сводится к правилу сложения квантовых чисел L и S. Все воз-

можные значения результирующего механического момента атома определяются по формуле

$$\mathcal{L}_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}, \tag{5.53}$$

в которой квантовое число J имеет одно из следующих значений:

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

У атомов с четным числом электронов число J целое, а у атомов с нечетным числом электронов — полуцелое.

Проекцию результирующего механического момента атома на выделенное направление z находим по формуле пространственного квантования

$$\mathcal{L}_{Jz} = m_J\hbar. \tag{5.54}$$

Здесь квантовое число m_J принимает $2J+1$ значений:

$$m_J = -J,\ -J+1,\ ...,\ (J-1),\ +J.$$

Для обозначения квантовых чисел в многоэлектронном атоме используется условное обозначение терма атома в определенном квантовом состоянии в виде

$$^{2S+1}L_J,$$

где под L подразумевается одна из следующих букв[1]:

L...	0	1	2	3	4	...
Буква...	S	P	D	F	G	...

Терм содержит в себе сведения о значении трех квантовых чисел L, S и J. Например, для терма $^4D_{1/2}$ значения этих чисел следующие: $L=2$, $S=\frac{3}{2}$ и $J=\frac{1}{2}$, а для $^5F_2$, соответственно, $L=3$, $S=2$ и $J=2$.

[1] Не путать букву S с суммарным спиновым квантовым числом

Число $\nu = 2S + 1$ называется мультиплетностью терма. В случае, когда $S < L$, это число дает количество подуровней, отличающихся значением числа J.

Гиромагнитное отношение для суммарных механического и магнитного моментов многоэлектронного атома отличается как от орбитального (см. (5.39)), так и от спинового (см. (5.46)) отношений. Соответствующий квантово-механический расчет приводит к следующей формуле для результирующего магнитного момента атома:

$$\mathcal{P}_J^{\text{м}} = g\mu_{\text{Б}}\sqrt{J(J+1)}, \tag{5.55}$$

в которой множитель

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \tag{5.56}$$

зависящий от всех трех квантовых чисел L, S и J, называется *фактором Ланде.*

Анализ соотношения (5.56) показывает, что фактор Ланде может иметь значения меньше единицы и даже быть равным нулю (например, когда $L = 3$, а $J = 1$). Последнее означает, что у многоэлектронного атома магнитный момент может быть равным нулю, даже если механический момент отличен от нуля.

При расчетах полезно помнить, что $g = 1$, если результирующий спин $S = 0$, и $g = 2$, если $L = 0$.

Проекция результирующего магнитного момента атома на выделенное направление z внешнего магнитного поля определяется по формуле

$$\mathcal{P}_{Jz}^{\text{м}} = g\mu_{\text{Б}} m_J. \tag{5.57}$$

Для заданного значения J существует $2J + 1$ различных ориентаций магнитного момента атома по отношению к внешнему магнитному полю.

Квантовая теория обосновывает правила отбора для квантовых чисел L, S и J при переходах атома из одного квантового состояния в другое. Существенно отличные от нуля вероятности имеют только такие переходы, в которых

$$\Delta L = 0, \ \pm 1; \ \ \Delta S = 0; \ \ \Delta J = 0, \ \pm 1.$$

Эффект Зеемана. При помещении магнитного момента $\vec{\mathcal{P}}^{\text{м}}$ во внешнее магнитное поле с индукцией $\vec{B}$ он приобретает дополнительную энергию W за счет магнитного взаимодействия:

$$W = -\vec{\mathcal{P}}^{\text{м}}\vec{B} = -\mathcal{P}_z^{\text{м}} B\,. \tag{5.58}$$

Поэтому, если изолированный атом в состоянии с квантовым числом J попадает в магнитное поле, то энергия его уровня E изменяется так, что это изменение ΔE_J в зависимости от взаимной ориентации магнитного момента и поля соответствует одному из $2J+1$ возможных значений

$$\Delta E_J = \mathcal{P}_{Jz}^{\text{м}} B = g\mu_{\text{Б}} m_J B. \tag{5.59}$$

В системе излучающих атомов (например, в газе), помещенной в магнитное поле, появятся атомы с различными энергиями исходного уровня. Эту ситуацию удобнее описать, рассмотрев расщепление энергетического уровня атома на $2J+1$ эквидистантных подуровня с расстоянием между соседними подуровнями

$$\Delta E = g\mu_{\text{Б}} B = g\Delta E_0, \tag{5.60}$$

где величину $\Delta E_0 = \mu_{\text{Б}} B$ называют нормальным расщеплением энергетического уровня.

Следствием этого является расщепление спектральных линий излучения газа атомов, помещенных в магнитное поле, которое впервые наблюдал П. Зееман в 1896 г. при исследовании свечения паров натрия в магнитном поле. Поэтому такой эффект расщепления спектральных линий в магнитном поле получил название эффекта Зеемана.

Наиболее простой случай соответствует расщеплению одиночной линии, обусловленной переходами между энергетическими уровнями, для которых $S = 0$. Для этого случая $g = 1$ и поэтому $\Delta E = \Delta E_0$ при расщеплении каждого уровня. При внесении таких атомов в магнитное поле исходная спектральная линия с частотой ω_0 расщепляется на три линии с частотами $\omega_1 = \omega_0 - \Delta\omega_0$, ω_0, $\omega_2 = \omega_0 + \Delta\omega_0$. При этом смещение частоты

$$\Delta\omega_0 = \frac{\Delta E_0}{\hbar} = \frac{\mu_Б}{\hbar} B \qquad (5.61)$$

называется нормальным смещением. Такое смещение пропорционально индукции внешнего магнитного поля, причем для $B = 1$ Тл $\Delta\omega_0 = 8{,}8 \cdot 10^{10}\ с^{-1}$. В области видимого света это соответствует $\Delta\lambda_0 = 0{,}02$ нм.

Рассмотренный случай расщепления спектральной линии на зеемановский триплет называется *простым*, или *нормальным*, *эффектом Зеемана.*

Все три линии зеемановского триплета наблюдаются, если направление наблюдения перпендикулярно магнитному полю. При наблюдении вдоль поля несмещенная линия частотой ω_0 не наблюдается.

Это объясняется тем, что проекция спина фотона на направление магнитного поля может иметь только два значения: +1 и −1. Поэтому в направлении магнитного поля излучаются только такие переходы, для которых $\Delta m_J = +1$, что соответствует смещенным компонентам.

На рис. 5.11 схематично изображен нормальный эффект Зеемана для перехода между уровнями с $J = 1$ и $J = 0$. Уровни с другими значениями J расщепляются на большее число подуровней. Так, например, уровень с $J = 2$ расщепляется на пять подуровней. Однако и в этом случае, если для обоих уровней $S = 0$, в магнитном поле будет наблюдаться расщепление спектральной линии только на три компоненты. Это объясняется тем, что для оптических переходов число m_J подчиняется правилу отбора: $\Delta m_J = 0, \pm 1$.

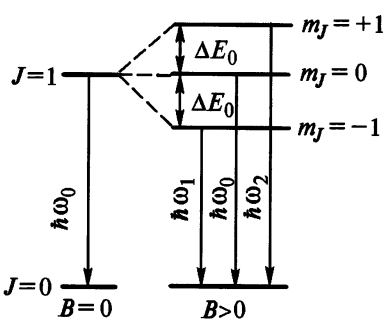


Рис. 5.11. Нормальный эффект Зеемана

Для переходов между уровнями с $S \neq 0$ у расщепленной спектральной линии оказывается больше трех компонент, а величина расщепления отличается от нормального смещения. Это связано с зависимостью фактора

Ланде g от значения всех трех квантовых чисел L, S и J. Такое расщепление спектральных линий при помещении излучающих атомов в магнитное поле называется *сложным*, или *аномальным*, *эффектом Зеемана.*

В качестве примера аномального эффекта Зеемана рассмотрим расщепление линии спектра натрия, обусловленное переходом $^2P_{3/2} \to {}^2S_{1/2}$. В отсутствие магнитного поля $(B=0)$ этому переходу соответствует спектральная линия с длиной волны $\lambda_0 = 589{,}6$ нм и частотой $\omega_0 = 3{,}19 \cdot 10^{15}$ Гц.

Для терма $^2S_{1/2}\left(L=0,\ S=\frac{1}{2},\ J=\frac{1}{2}\right)$ фактор Ланде $g_1 = 2$, а для терма $^2P_{3/2}\left(L=1,\ S=\frac{1}{2},\ J=\frac{3}{2}\right)$ этот фактор $g_2 = \frac{4}{3}$.

В магнитном поле $(B>0)$ верхний уровень $\left(J=\frac{3}{2}\right)$ расщепляется на $2J+1=4$ подуровня (рис. 5.12) с энергетическим расстоянием между ними, равным $\Delta E_2 = g_2 \mu_Б B = g_2 \Delta E_0$. Эти подуровни соответствуют четырем значениям магнитного квантового числа $m_J^{(2)} = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}$. Энергии этих подуровней можно определить по формуле

$$E'' = E_2 + g_2 \mu_Б m_J^{(2)} B = E_2 + g_2 m_J^{(2)} \Delta E_0. \qquad (5.62)$$

Нижний уровень $\left(J=\frac{1}{2}\right)$ в магнитном поле расщепляется на $2J+1=2$ подуровня, отстоящие друг от друга по шкале энергии на расстоянии $\Delta E^{(1)} = g_1 \mu_Б B = g_1 \Delta E_0$ и соответствующие двум значениям $m_J^{(1)} = \pm\frac{1}{2}$. Энергии этих подуровней равны

$$E' = E_1 + g_1 m_J^{(1)} \Delta E_0. \qquad (5.63)$$

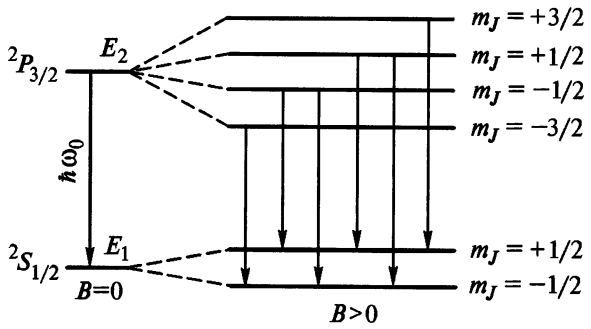


Рис. 5.12. Аномальный эффект Зеемана

Следовательно, для оптических переходов с верхних подуровней на нижние частоты расщепленных магнитным полем спектральных линий находим из соотношения

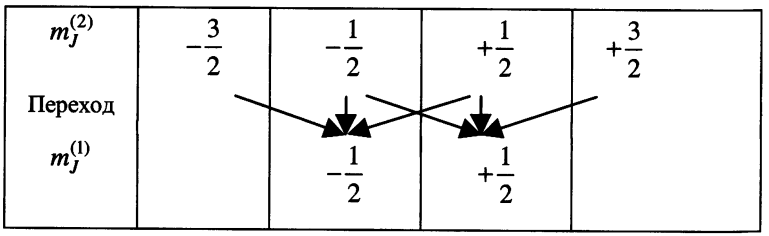
$$\omega = \frac{E'' - E'}{\hbar} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} + \left\{ g_2 m_J^{(2)} - g_1 m_J^{(1)} \right\} \frac{\Delta E_0}{\hbar}, \qquad (5.64)$$

которое преобразуем к виду

$$\Delta\omega = \omega - \omega_0 = \left\{ \frac{4}{3} m_J^{(2)} - 2 m_J^{(1)} \right\} \Delta\omega_0. \qquad (5.65)$$

Здесь $\Delta\omega_0 = \dfrac{\Delta E_0}{\hbar} = \dfrac{\mu_Б}{\hbar} B$ — расщепление, наблюдаемое в нормальном эффекте Зеемана.

При расчетах по формуле (5.64) следует иметь в виду, что квантовые правила отбора разрешают только такие переходы (см. рис. 5.12), для которых $\Delta m_J = m_J^{(2)} - m_J^{(1)} = 0, \pm 1$. Поэтому возможны лишь шесть переходов, изображенных условно стрелками:



При этом у получающихся шести спектральных линий смещения частот относительно исходной частоты ω_0, рассчитанные по формуле (5.64), равны

$$\Delta\omega = \Delta\omega_0 \left[\pm\frac{1}{3}, \pm 1, \pm\frac{5}{3} \right]. \qquad (5.66)$$

Результаты проведенного расчета хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В сильном магнитном поле, когда магнитное расщепление линий становится больше спин-орбитального расщепления, связь между орбитальными и спиновыми магнитными моментами разрывается и в результате для любых переходов наблюдается нормальный зеемановский триплет. Это явление называется *эффектом Пашена — Бака* (1912).

Электронный парамагнитный резонанс. Из формулы (5.60) следует, что при помещении атома в магнитное поле с индукцией $B = 1$ Тл энергетические уровни атома расщепляются на подуровни, отличающиеся по энергии на $\Delta E \approx 10^{-23}$ Дж. Длина волны излучения, соответствующая переходу между такими подуровнями, составляет несколько сантиметров. Это излучение находится в микроволновой СВЧ-области радиодиапазона. Следовательно, в веществе, помещенном в сильное магнитное поле, можно инициировать переходы между зеемановскими подуровнями, если воздействовать на вещество радиочастотным излучением. При этом вещество должно сильно поглощать это микроволновое излучение на резонансной частоте

$$\omega_{\text{рез}} = \frac{g\mu_{\text{Б}}}{\hbar} B. \qquad (5.67)$$

Это явление было обнаружено Е.К. Завойским в 1944 г. и получило название электронного парамагнитного резонанса (ЭПР).

В таком опыте (рис. 5.13) исследуемое парамагнитное вещество (у диамагнетиков магнитные моменты атомов близки к нулю) объемом несколько кубических миллиметров помещают в резонатор Р, настроенный на частоту $\omega \approx 10^{10}$ Гц и находящийся между полюсами электромагнита. Радиочастотное излучение, создаваемое генератором Г, подводится к резонатору и отводится от него с помощью волноводов. Приемник П настраивается на частоту генератора.

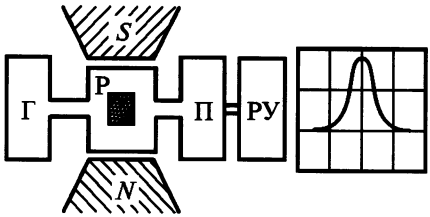


Рис. 5.13. Схема установки для наблюдения электронного парамагнитного резонанса

Плавным изменением индукции магнитного поля электромагнита можно добиться условия $\omega_{рез} = \omega$. При этом за счет ЭПР вещество начинает сильно поглощать радиочастотное излучение. Резонансное поглощение энергии уменьшает амплитуду сигнала в приемнике, которое фиксируется регистрирующим устройством РУ. При этом обычно на экран осциллографа выводится зависимость коэффициента поглощения от отношения частот $\frac{\omega_{рез}}{\omega}$.

ЭПР широко применяется в экспериментальной физике. Из условия резонанса можно получить значение g-фактора и с его помощью определить электронную структуру атома и его магнитный момент. ЭПР является эффективным методом изучения взаимодействия частиц в твердых телах и жидкостях. По спектрам ЭПР можно определить структуру кристаллов, природу и локализацию дефектов кристаллической решетки. Метод ЭПР широко используется в химии и биологии для изучения свободных радикалов и ферментов.

На основе электронного парамагнитного резонанса созданы квантовые магнетометры — приборы для прецизионного измерения слабых магнитных полей.

Отметим, что в настоящее время обнаружены другие виды магнитного резонанса — *ферромагнитный резонанс* (ФРМ) и *ядерный магнитный резонанс* (ЯМР). Метод ферромагнитного резонанса основан на использовании переходов между подуровнями веществ с ферромагнитной структурой. Ядерный магнитный резонанс обусловлен переходами между зеемановскими подуровнями ядер атомов в сильных магнитных полях.

Задача 5.7. Найдите механический момент атома, находящегося в состоянии с $L=2$ и $S=3/2$, если известно, что магнитный момент атома равен нулю.

Решение. При заданных значениях L и S квантовое число J не может быть равно нулю. Поэтому магнитный момент атома равен нулю вследствие равенства нулю фактора Ланде g. Если ввести обозначение $x=J(J+1)$, то условие $g=0$ приведет к соотношению

$$3x=L(L+1)-S(S+1).$$

Отсюда для $L=2$ и $S=3/2$ находим, что $x=3/4$ и $J=1/2$. Поэтому механический момент атома

$$\mathcal{L}_J=\hbar\sqrt{J(J+1)}=\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar, \quad \mathcal{L}_J=0{,}91\cdot10^{-34}\ \text{кг}\cdot\text{м}^2/\text{с}.$$

Задача 5.8. Найдите минимальное значение индукции магнитного поля, при которой спектральным прибором с разрешающей способностью $R=10^5$ можно разрешить все компоненты спектральной линии $\lambda_0=536$ нм при ее расщеплении в простом эффекте Зеемана.

Решение. Так как

$$\Delta\omega=\frac{2\pi c}{\lambda^2}\Delta\lambda,$$

то длины волн зеемановского триплета будут отличаться на величину

$$\Delta\lambda=\frac{\Delta\omega_0\lambda_0^2}{2\pi c}=\frac{\mu_Б\lambda_0^2}{2\pi c\hbar}B.$$

Разрешающая способность спектрального прибора

$$R=\frac{\lambda_0}{\Delta\lambda_{\min}}=\frac{2\pi c\hbar}{\mu_Б\lambda_0 B_{\min}}.$$

Отсюда находим минимальное значение индукции магнитного поля

$$B_{\min}=\frac{2\pi c\hbar}{\mu_Б\lambda_0 R}, \quad B_{\min}=0{,}4\ \text{Тл}.$$

5.7. Вынужденное излучение атомов

Квантовая теория равновесного излучения. А. Эйнштейн в 1916 г. с позиции квантовой теории теоретически рассмотрел проблему равновесного излучения (см. 1.1), когда при некоторой температуре T вещество находится в термодинамическом равновесии с излучением, заполняющим объем некоторой полости.

Излагая основные положения теории Эйнштейна, введем в физическую модель такого процесса ряд допущений, которые, не меняя общности выводов, позволят упростить используемые соотношения квантовой теории. Будем считать вещество состоящим из одинаковых не взаимодействующих друг с другом атомов, которые могут находиться только в двух квантовых состояниях. Первое состояние с энергией E_1 представляет собой основное состояние атома. Без внешнего воздействия атом может находиться в этом состоянии неограниченно долго. Второе состояние атома с энергией E_2 представляет собой возбужденное состояние $(E_2 > E_1)$. В это состояние атом переходит под действием внешних возбуждающих факторов, сообщающих ему дополнительную энергию. Исключим из рассмотрения все причины возбуждения атома, кроме возбуждения при поглощении атомом излучения с частотой ω, удовлетворяющей квантовому условию

$$\hbar\omega = E_2 - E_1. \tag{5.68}$$

В рассматриваемой модели излучение в полости будет монохроматическим и именно такой частоты. Объемную плотность энергии этого излучения в полости обозначим как $u_{\omega, T}$, считая температуру системы заданной и равной T.

Пусть N_1 — число атомов в рассматриваемой системе, находящихся в основном состоянии, N_2 — число возбужденных атомов, а $N = N_1 + N_2$ — общее число атомов. Величины N_1 и N_2 называют *заселенностью* (населенностью) соответствующих *энергетических уровней.*

Оба энергетических уровня E_1 и E_2 предполагаются невырожденными. Поэтому в состоянии термодинамического равновесия

известная формула распределения Больцмана позволяет записать соотношение между N_1 и N_2 при температуре T в виде

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}}, \tag{5.69}$$

где k — постоянная Больцмана.

Из этого соотношения следует, что при любой температуре для равновесной системы $N_2 < N_1$, но с увеличением температуры различие между N_1 и N_2 уменьшается и при больших температурах ($T \to \infty$) заселенности обоих энергетических уровней будут выравниваться, т. е. $N_1 \to N_2$.

Атом в возбужденном состоянии может находиться в течение очень малого промежутка времени ($\sim 10^{-8}$ с). Через такой промежуток времени даже при отсутствии внешнего воздействия атом самопроизвольно перейдет в основное состояние, испустив квант энергии излучения $\hbar\omega$. Такое самопроизвольное, не обусловленное внешними причинами излучение возбужденного атома называется *спонтанным излучением* (рис. 5.14).

Каждый возбужденный атом имеет определенную вероятность за единицу времени самопроизвольно, без внешнего воздействия испустить квант энергии. Эта вероятность спонтанного излучения в теории Эйнштейна определяется значением некоторого коэффициента A, такого, что в рассматриваемой системе в единицу времени будет наблюдаться

$$Z_{21} = AN_2 \tag{5.70}$$

спонтанных переходов атомов из возбужденного состояния в основное. Величину Z_{21} можно назвать скоростью таких переходов, которые увеличивают энергию излучения за счет уменьшения энергии вещества.

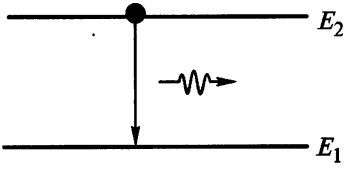


Рис. 5.14. Спонтанное излучение атома

Спонтанное излучение различных атомов и даже одного атома в различные моменты времени не

коррелировано. Это значит, что такое излучение имеет случайное направление распространения и произвольные плоскость поляризации и фазу. Последнее означает, что спонтанное излучение тел неполяризованно и некогерентно или, точнее, имеет очень малое время когерентности. Такое излучение испускают обычные источники света — лампы накаливания, люминесцентные лампы, нагретые тела, Солнце и др.

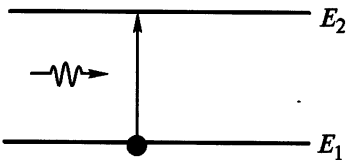


Рис. 5.15. Поглощение излучения атомом

Для объяснения равновесия системы вещество — излучение следует учесть также другой процесс (рис. 5.15), когда невозбужденный атом, поглощая излучение, переходит в возбужденное состояние. Такой процесс может произойти только в том случае, если фотон излучения встретится с невозбужденным атомом. Если вероятность такого процесса за единицу времени охарактеризовать значением коэффициента B_{12}, то скорость перехода атомов из основного в возбужденное состояние можно найти из выражения

$$Z_{12} = B_{12} N_1 u_{\omega, T}. \qquad (5.71)$$

Действительно, такой процесс невозможен ($Z_{12} = 0$), если нет невозбужденных атомов ($N_1 = 0$) или нет излучения ($u_{\omega, T} = 0$).

Очевидно, что при равновесии системы вещество — излучение скорости рассмотренных двух процессов должны быть равны: $Z_{12} = Z_{21}$. Только в этом случае средние значения энергии излучения и вещества не будут изменяться со временем. Поэтому для равновесного излучения в полости

$$B_{12} N_1 u_{\omega, T} = A N_2. \qquad (5.72)$$

Однако Эйнштейн заметил, что это условие равновесия не может выполняться при высоких температурах. Действительно, записав (5.72) в виде

$$u_{\omega, T} = \frac{A}{B_{12}} \frac{N_2}{N_1} = \frac{A}{B_{12}} e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}}, \qquad (5.73)$$

можно убедиться, что это равенство при возрастании температуры нарушается. Как следует из опыта, плотность энергии равновесного излучения при $T \to \infty$ неограниченно растет. Однако правая часть равенства в (5.73) при неограниченном росте температуры будет стремиться к конечному пределу, равному A/B_{12}.

Эйнштейн отметил, что такое противоречие теории и опыта снимается, если считать, что в рассматриваемой равновесной системе происходит еще один процесс — процесс *вынужденного излучения*. Такое излучение также называют стимулированным излучением, ибо оно стимулируется (индуцируется) излучением, падающим на возбужденный атом. С некоторой вероятностью, которая характеризуется в теории коэффициентом B_{21}, может происходить процесс, изображенный на рис. 5.16. Падающее излучение вынуждает атом излучать. В рассматриваемой системе скорость такого процесса определяется как

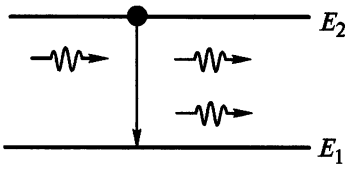


Рис. 5.16. Вынужденное излучение атома

$$Z'_{21} = B_{21} N_2 u_{\omega, T}. \tag{5.74}$$

Теперь условие равновесия системы будет содержать скорости трех процессов:

$$Z_{12} = Z_{21} + Z'_{21},$$

или

$$B_{12} N_1 u_{\omega, T} = A N_2 + B_{21} N_2 u_{\omega, T}. \tag{5.75}$$

Записав (5.75) в виде

$$B_{12} u_{\omega,T} = A \frac{N_2}{N_1} + B_{21} \frac{N_2}{N_1} u_{\omega,T}, \tag{5.76}$$

мы замечаем, что оно непротиворечиво даже при $T \to \infty$. Действительно, теперь и левая и правая части равенства содержат неогра-

ниченно растущий при $T \to \infty$ множитель $u_{\omega,T}$. Более того, учитывая, что $N_2 \to N_1$ при $T \to \infty$, мы приходим к равенству коэффициентов

$$B_{12} = B_{21} = B. \tag{5.77}$$

Таким образом, в теории остаются два коэффициента A и B, характеризующие вероятности рассматриваемых в системе процессов взаимодействия излучения и вещества (атомов).

В пользу гипотезы Эйнштейна о вынужденном излучении атомов говорит тот факт, что из (5.75) следует формула Планка (1.38) для плотности энергии равновесного излучения.

Преобразуем (5.75) к виду

$$u_{\omega,T} = \frac{A}{B\left(\dfrac{N_1}{N_2} - 1\right)} = \frac{A}{B\left[\exp\left(\dfrac{E_2 - E_1}{kT}\right) - 1\right]}.$$

Так как $E_2 - E_1 = \hbar\omega$, то для объемной плотности энергии излучения получаем

$$u_{\omega,T} = \frac{A}{B}\frac{1}{\left[\exp\left(\dfrac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1\right]}. \tag{5.78}$$

Сравнивая (5.78) и (1.38), видим, что эти формулы совпадают, если считать, что между коэффициентами Эйнштейна A и B есть связь, которая выражается формулой

$$B = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} A. \tag{5.79}$$

В чем же отличия вынужденного излучения атомов от спонтанного? Отметим следующие свойства вынужденного излучения:

1. Вынужденное излучение распространяется строго в том же направлении, что и излучение, его вызвавшее.

2. Фаза волны вынужденного излучения, испускаемого атомом, точно совпадает с фазой падающей волны.

3. Вынужденное излучение линейно поляризовано с той же плоскостью поляризации, что и падающее излучение.

Таким образом, кванты вынужденного излучения неотличимы от первичных стимулирующих квантов. Поэтому вынужденное излучение при распространении в веществе отличается от спонтанного излучения ничтожно малой расходимостью пучка, а также когерентностью и линейной поляризацией волны.

Перечисленные особенности вынужденного излучения являются следствием законов сохранения энергии, импульса и момента импульса (А. Эйнштейн, П. Дирак, 1927 г.).

Среды с инверсной заселенностью энергетических уровней. Опыт показывает, что вещество в обычных равновесных условиях поглощает излучение и по мере распространения излучения в веществе его энергия уменьшается. Это уменьшение энергии излучения в пучке, распространяющемся вдоль направления оси z, описывается законом Бугера, который соответствует экспоненциальному убыванию интенсивности излучения:

$$I(z) = I_0 \exp(-\mu z). \qquad (5.80)$$

Здесь $I(z)$ — интенсивность излучения в веществе на глубине $z > 0$; I_0 — интенсивность излучения на входе в слой вещества. Коэффициент μ называется коэффициентом поглощения вещества. Для сред, поглощающих излучение, коэффициент μ положителен (рис. 5.17).

А возможно ли создать среду, при распространении в которой электромагнитное излучение будет усиливаться? Существуют ли среды с отрицательным коэффициентом поглощения (см. рис. 5.17)?

Утвердительный ответ на эти вопросы был дан в 1939 г. профессором В.А. Фабрикантом, который показал, что среда может усиливать вынужденное излучение, но такая активная среда должна иметь *инверсную заселенность энергетических уровней*. Инверсия (от лат. *inversio* —

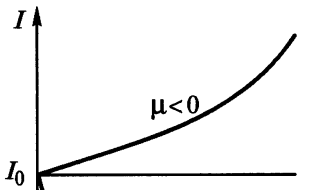


Рис. 5.17. Изменение интенсивности излучения при распространении в веществе

переворачивание, перестановка) заселенностей энергетических уровней соответствует нестандартной заселенности, когда в среде число атомов в возбужденном состоянии превышает число атомов в основном состоянии.

Физический механизм усиления вынужденного излучения при распространении его в активной среде очевиден. Направленный пучок вынужденного излучения встречает на пути распространения атомы вещества. Если такой атом находится в основном состоянии, то он может поглотить квант энергии излучения $\hbar\omega$ (см. рис. 5.15). Если же атом находится в возбужденном состоянии, то под действием падающего излучения он может вынужденно испустить еще один квант излучения (см. рис. 5.16), увеличивая энергию распространяющегося в веществе излучения на $\hbar\omega$.

Вероятности этих процессов взаимодействия вынужденного излучения с атомами в любом состоянии одинаковы (см. (5.77)). Поэтому при прохождении за время τ достаточно тонкого слоя вещества, содержащего N_1 невозбужденных атомов и N_2 атомов в возбужденном состоянии, будет наблюдаться относительное изменение энергии излучения, равное

$$\frac{\Delta u_{\omega,T}}{u_{\omega,T}} = B\hbar\omega\left(N_2 - N_1\right)\tau. \qquad (5.81)$$

Из (5.81) следует, что $\Delta u_{\omega,T} < 0$ (среда поглощает излучение), если $N_2 < N_1$, и $\Delta u_{\omega,T} > 0$ (среда усиливает излучение), если $N_2 > N_1$.

Замечание. В случае, когда энергетические уровни E_1 и E_2 вырождены и кратности их вырождения равны b_1 и b_2, условие усиления вынужденного излучения имеет вид

$$\frac{N_2}{b_2} > \frac{N_1}{b_1}.$$

В обычном равновесном состоянии вещества, как это следует из формулы Больцмана (5.69), число N_1 атомов в основном состоянии всегда больше числа атомов N_2 в возбужденном состоянии. Это означает, что для создания активной среды с инверсной

заселенностью энергетических уровней необходимы специальные условия, обеспечивающие дополнительную генерацию возбужденных атомов. Некоторые из способов создания сред с инверсной заселенностью уровней будут рассмотрены далее при обсуждении приборов и устройств квантовой электроники.

Отметим, что иногда активные среды с инверсной заселенностью энергетических уровней называют средами с отрицательными температурами. Такое необычное название обусловлено тем, что если в формуле Больцмана (5.69) формально считать температуру среды отрицательной (!), то при $T < 0$ эта формула даст инверсную заселенность уровней, когда $N_2 > N_1$ при $E_2 > E_1$. В среде с отрицательной температурой число атомов с большей энергией превосходит число атомов с меньшей энергией.

Квантовые усилители и генераторы. Идея усиления и генерации вынужденного излучения активной средой была реализована в 1955 г. Н.Г. Басовым и А.М. Прохоровым в СССР и Ч. Таунсом, Дж. Вебером и другими в США.

В первом приборе квантовой электроники — молекулярном генераторе — активной средой являлся пучок молекул аммиака NH_3. Идея создания среды с инверсной заселенностью энергетических уровней была реализована достаточно просто. Из пучка молекул NH_3 выводились молекулы с меньшей энергией, а обогащенный возбужденными молекулами пучок представлял собой активную среду.

Система, сортирующая молекулы по энергиям, представляла собой сложный (квадрупольный) конденсатор, состоящий из четырех параллельных стержней, соединенных попарно с высоковольтным выпрямителем (~ 30 кВ). Ввиду наличия у молекул дипольного электрического момента, ориентация которого по отношению к электрическому полю различается у невозбужденных и возбужденных молекул, неоднородное электрическое поле конденсатора по-разному отклоняло молекулы аммиака, находящиеся в различных энергетических состояниях. Молекулы, находящиеся в состоянии с меньшей энергией, отклонялись в сторону от оси конденсатора и выводились из молекулярного пучка. Молекулы в возбужденном состоянии отклонялись к оси конденсатора и продолжали двигаться вдоль нее. Отсортированный таким образом молекулярный пучок с повышенной концентрацией возбужденных

молекул направлялся в объемный резонатор, в который подавалось электромагнитное излучение. Взаимодействуя с молекулярным пучком, вынужденное излучение частотой $\nu = 24840$ МГц ($\lambda = 1{,}24$ см) усиливалось. При достаточно большом значении коэффициента усиления в резонаторе наблюдалась генерация таких СВЧ-радиоволн.

Молекулярные квантовые генераторы такого типа получили название *мазеров*. Это название является аббревиатурой английского выражения *Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation* — (усиление микроволн с помощью вынужденного излучения).

Молекулярные квантовые усилители применяются в качестве входных каскадов радиоприемных устройств в диапазоне длин волн от 4 мм до 50 см. Благодаря применению таких усилителей в СВЧ-диапазоне значительно увеличилась дальность действия радиолокаторов, линий космической связи и радиотелескопов.

Молекулярные квантовые генераторы позволяют измерять частоты колебаний или промежутки времени с наибольшей достижимой в настоящее время точностью (квантовые стандарты частот, атомные часы). Относительная погрешность измерения частоты с помощью таких устройств составляет 10^{-12} — 10^{-13}, а погрешность хода атомных (квантовых) часов не превосходит одну секунду за несколько тысяч лет. Поэтому такие приборы квантовой электроники используются в службе времени и в системах радионавигации.

Успешное применение квантовой электроники в области радиоволн дало возможность ее использования и в области более коротких длин волн. Возможность усиления и генерации электромагнитного излучения в оптическом диапазоне была обоснована в работах Н.Г. Басова, А.М. Прохорова, Ч. Таунса, А. Шавлова.

В 1960 г. был создан (Т. Мейман, США) оптический квантовый генератор, получивший название *лазера* (*Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation* — усиление света с помощью вынужденного излучения). Первый твердотельный лазер был рубиновым лазером. Рабочим веществом такого лазера являлся монокристалл рубина (корунд Al_2O_3 с примесями ионов хрома Cr^{3+}) в виде цилиндра длиной около 5 см и диаметром приблизительно 1 см.

Для создания инверсии заселенностей энергетических уровней в лазерах наиболее часто используется метод трех уровней. Рассмотрим суть этого метода на примере рубинового лазера.

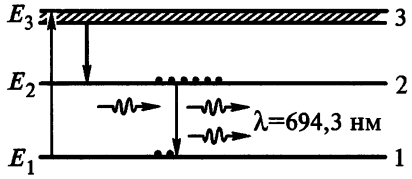


Рис. 5.18. Трехуровневая схема создания инверсной заселенности уровней

Энергетический спектр атомов (ионов) хрома содержит три уровня (рис. 5.18) с энергиями E_1, E_2 и E_3. Верхний уровень 3 на самом деле представляет собой достаточно широкую полосу, образованную совокупностью близко расположенных уровней.

Главная особенность трехуровневой системы состоит в том, что уровень 2, расположенный ниже уровня 3, должен быть *метастабильным уровнем*. Это означает, что переход $2 \to 1$ в такой системе запрещен законами квантовой механики. Этот запрет связан с нарушением правил отбора квантовых чисел для такого перехода. Правила отбора не являются правилами абсолютного запрета перехода $2 \to 1$. Однако их нарушение для некоторого квантового перехода значительно уменьшает его вероятность. Попав в такое метастабильное состояние, атом задерживается в нем. При этом время жизни атома в метастабильном состоянии ($\sim 10^{-3}$ с) в сотни тысяч раз превышает время жизни атома в обычном возбужденном состоянии ($\sim 10^{-8}$ с). Это обеспечивает возможность накопления возбужденных атомов с энергией E_2. Поэтому на достаточно большое с точки зрения атомных процессов время удается создать инверсную заселенность уровней 1 и 2.

Процесс сообщения рабочему телу лазера энергии для перевода атомов в возбужденное состояние называют накачкой. Существуют различные физические механизмы накачки. В рубиновом лазере (рис. 5.19) используется импульсная *оптическая накачка.*

Для этого кристалл рубина освещается ксеноновой газоразрядной лампой, работающей в импульсном режиме. Длительность вспышки имеет порядок 10^{-3} с, а мощность накачки в одном импульсе составляет десятки миллионов ватт. За счет прохождения

импульса тока через газовый промежуток ксенон нагревается до нескольких тысяч градусов и испускает мощный световой импульс, содержащий оптическое излучение различных длин волн.

Чтобы обеспечить попадание на рубин всего излучения ксеноновой лампы, кристалл рубина с лампой накачки помещают в фокусе эллиптической полости с хорошо отражающей внутренней поверхностью.

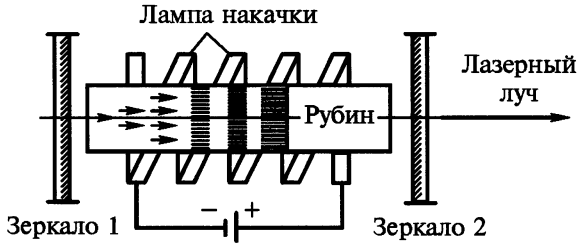


Рис. 5.19. Основные элементы рубинового лазера

Поглощая 10 ... 15 % лучистой энергии этого излучения, атомы хрома переходят в возбужденное состояние с энергией E_3 ($1 \to 3$ на рис. 5.18). Время жизни таких возбужденных атомов меньше 10^{-7} с. За это время атомы хрома переходят на более низкий метастабильный энергетический уровень с энергией E_2. Такой переход $3 \to 2$ является безызлучательным, т. е. происходит без испускания фотона, а избыток энергии при этом передается от атома хрома к кристаллической решетке рубина, в результате чего кристалл нагревается.

Метастабильность уровня 2 обеспечивает на некоторое время инверсию заселенностей уровней 1 и 2. На это время рубиновый стержень превращается в активную среду, которая может усиливать вынужденное излучение с длиной волны $\lambda = 694{,}3$ нм, соответствующее переходу $2 \to 1$. Если в результате спонтанного перехода вблизи левого торца стержня рождается фотон с такой длиной волны, то, взаимодействуя с атомами хрома, он индуцирует новые фотоны, точно копирующие первоначальный. Процесс рождения вынужденных фотонов при распространении в рубине излучения носит лавинообразный характер. В результате вынужденное излучение с длиной волны $\lambda = 694{,}3$ нм (красный свет), распространяясь вдоль оси рубинового стержня, усиливается.

Для того чтобы такой оптический усилитель превратить в оптический генератор когерентного лазерного излучения, необходимо обеспечить положительную обратную связь, т. е. усиленный пучок излучения снова направить в активную среду. Такую обратную связь обеспечивает *оптический резонатор*, состоящий из двух строго параллельных плоских зеркал (см. рис. 5.19), расположенных вблизи торцов рубинового стержня. Отражающими зеркалами могут служить и хорошо отполированные и посеребренные торцы самого кристалла.

Отражение излучения от двух параллельных зеркал оптического резонатора приводит к тому, что в нем могут существовать лишь такие электромагнитные волны, для которых выполняется условие образования стоячей волны: $2l = m\lambda$, $m = 1, 2, \ldots$ Здесь l — размер оптического резонатора, т. е. расстояние между зеркалами.

Такие резонансные колебания в оптическом резонаторе лазера называются *модами*. В наиболее благоприятном режиме усиления оказываются моды, частоты которых находятся вблизи вершины спектральной линии излучения активной среды (рис. 5.20). Более удаленные от вершины моды при генерации лазерного излучения подавляются. В результате лазер испускает когерентное излучение, распространяющееся вдоль оси оптического резонатора и содержащее несколько мод излучения, частоты которых располагаются на равных расстояниях друг от друга.

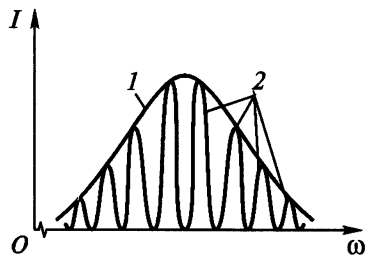


Рис. 5.20. Спектральная линия активной среды (*1*) и моды оптического резонатора (*2*)

Каждая из таких спектральных линий не является строго монохроматической. Ее ширина зависит от добротности оптического резонатора, определяемой потерями энергии излучения. Причинами таких потерь, уменьшающими добротность резонатора и приводящими к уширению линий излучения лазера, являются непараллельность зеркал, спонтанное излучение, поглощение и рассеяние света в активной среде, зеркалах и других элементах. При уменьшении таких потерь энергии излучения, а также при увеличении расстояния между зеркалами ширина спектральных линий

отдельных мод уменьшается, достигая значений, в несколько раз меньших естественной ширины спектральных линий, испускаемых обычными источниками. Таким образом, лазер испускает интенсивный световой пучок с чрезвычайно высокой монохроматичностью, которая не может быть достигнута другими методами.

Для улучшения когерентных свойств излучения лазера следует добиваться режима генерации только с одной модой. Такой одномодовый режим удается осуществить, вводя в резонатор дополнительные элементы (оптические призмы, дифракционные решетки и др.), выделяющие одну из мод резонатора и подавляющие все остальные.

В обычном свободном режиме генерации одно из зеркал, например зеркало 2, делается полупрозрачным. Поэтому после многократного отражения от зеркал и усиления лазерный пучок становится достаточно интенсивным и получает возможность выхода через полупрозрачное зеркало. Затем следует новая вспышка лампы накачки, и процесс повторяется.

В режиме генерации гигантских импульсов одно из зеркал закрывается оптическим затвором. Задерживая генерацию, такой затвор позволяет увеличить инверсию заселенностей уровней и накопить энергию активной среды. Если затвор открыть, то создаются условия быстрого развития генерации, которая реализуется в виде короткого (20...50 нс) мощного (гигантского) импульса с энергией 1...100 Дж, что соответствует мощности более 10^{10} Вт. Рубиновый лазер работает в импульсном режиме с частотой порядка нескольких импульсов в минуту. Для отвода теплоты рубиновый лазер приходится охлаждать с помощью жидкого воздуха.

К настоящему времени обнаружены сотни кристаллов с примесями, которые можно использовать в качестве активных сред в твердотельных лазерах. Созданы лазеры на иттриево-алюминиевом гранате, александрите, стекле с примесью неодима и на других материалах.

В 1961 г. был создан первый газовый гелий-неоновый лазер (А. Джаван, США). В таком лазере инверсия заселенностей уровней атомов неона создается за счет электрического разряда в смеси газов He и Ne. При электрической накачке возбуждение атомов неона происходит в результате столкновений их с электронами газоразрядной плазмы, образующейся в газоразрядной трубке, между электродами которой прикладывается постоянное напряжение

1...2 кВ. Применяются также безэлектродные трубки, в которых возбуждается высокочастотный разряд.

Газовый гелий-неоновый лазер работает в непрерывном режиме генерации, испуская когерентное излучение с длиной волны $\lambda = 638{,}2$ нм. Мощность такого лазера достигает нескольких десятых долей ватта при КПД 0,1 %. Оптимальной генерируемой мощности соответствует диаметр газоразрядной трубки около 7 мм при давлении газовой смеси 1 мм рт. ст. и соотношении Ne и He в ней 1:10.

Наиболее мощными газовыми лазерами являются молекулярные лазеры. Так, например, в газоразрядных CO_2-лазерах электроны в тлеющем разряде возбуждают колебательные уровни молекул CO_2 и N_2. В мощных CO_2-лазерах используется непрерывная прокачка газа. Быстропроточные CO_2-лазеры генерируют излучение с длинами волн 9,4 мкм и 10,6 мкм. Их мощность достигает десятков киловатт при КПД около 20 %.

В газовых молекулярных лазерах для создания инверсии заселенностей энергетических уровней кроме электрического разряда могут использоваться и другие способы. Так, например, в газодинамических лазерах активная среда создается при адиабатическом охлаждении газовых масс. При расширении нагретого газа ($T = 1000 \ldots 2000$ K) в сверхзвуковом сопле газ быстро охлаждается. В таких условиях быстрее теряют энергию молекулы газа, находящиеся в состояниях с меньшей энергией. Это приводит к инверсии заселенностей энергетических уровней молекул CO_2, NO_2 и CS_2. Газодинамические лазеры в непрерывном режиме генерируют мощности до сотен киловатт.

Возможно создание газовых лазеров, в которых инверсия заселенностей энергетических уровней образуется при протекании химических реакций в объеме активной среды. Большинство химических лазеров работают на колебательных переходах двухатомных молекул.

Наиболее мощные химические лазеры, работающие на основе цепной реакции фтора с водородом, обладают выходной мощностью в несколько киловатт и КПД 2...4 %.

Н.Г. Басовым были предложены лазеры, работающие на основе p—n-переходов в полупроводниковых материалах. Впервые та-

кой полупроводниковый лазер был изготовлен на основе полупроводникового кристалла арсенида галия GaAs. В качестве накачки в таких лазерах используется инжекция электронов через p—n-переход либо его электрический пробой. Особенностями полупроводниковых лазеров являются их компактность (размер несколько миллиметров), высокий КПД (до 50 %), возможность перестройки частоты генерации в широком спектральном диапазоне 0,3 … 30 мкм.

Приборы квантовой электроники — мазеры и лазеры — произвели настоящую революцию в конце XX в. в физике, технике и технологиях. Отметим только некоторые области применения этих приборов. Сварку, резание и плавление металлов осуществляют с помощью газовых лазеров. Лазеры применяют в медицине как бескровные скальпели. Когерентное излучение лазеров лечит глазные, кожные и другие болезни. Сверхкороткие лазерные импульсы нашли применение в оптических линиях связи. Сверхстабильные мазеры и лазеры являются основой стандартов времени и частоты. Лазерные локаторы могут контролировать распределение загрязнений в атмосфере. Лазерная локация космических объектов способствовала созданию систем космической навигации, позволила уточнить характеристики движения планет. Лазерное излучение используется и для управления движением ракет. При воздействии на мишени излучением мощных лазеров получают высокотемпературную ($\sim 10^7$ K) плазму. Таким способом может быть решена проблема управляемого термоядерного синтеза. И это далеко не полный перечень применения приборов квантовой электроники.

С появлением лазеров связано зарождение новых разделов физики — голографии, нелинейной оптики, квантовых компьютеров и др. Физики обсуждают возможность применения рентгеновских лазеров, схемы которых прорабатываются уже сейчас в физических лабораториях. А ведь можно в рамках научной фантастики предсказать и существование космических гамма-лазеров.

Бурное развитие квантовой электроники базируется на идеях, высказанных еще в первых работах Н.Г. Басова, А.М. Прохорова и Ч. Таунса. Вот почему именно этим ученым за фундаментальные исследования в области квантовой электроники в 1964 г. была присуждена Нобелевская премия по физике.

Задача 5.9. Плотность потока энергии излучения лазера равна 10^{15} Вт/м^2. Определите амплитуду напряженности электрического поля такой электромагнитной волны.

Решение. По формуле Пойнтинга для среднего значения плотности потока энергии электромагнитной волны

$$S = \frac{E_0 H_0}{2} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}}\,\frac{E_0^2}{2} = \frac{\varepsilon_0 c E_0^2}{2}$$

находим амплитудное значение напряженности электрического поля

$$E_0 = \sqrt{\frac{2S}{\varepsilon_0 c}}.$$

Подставляя заданное значение плотности потока энергии, получаем

$$E_0 = \sqrt{\frac{2\cdot 10^{15}}{8{,}85\cdot 10^{-12}\cdot 3\cdot 10^{8}}} = 8{,}7\cdot 10^{8}\ \text{В/м}.$$

Такой же порядок значения имеет напряженность электрических полей в атомах. Именно поэтому лазерное излучение эффективно воздействует на атомные системы. ■

Задача 5.10. Оцените ширину линии излучения рубинового лазера, работающего в одномодовом режиме, если лазер испускает красный свет ($\lambda = 694$ нм), рубиновый стержень имеет длину $l = 10$ см, а на торцах стержня расположены зеркала каждое с коэффициентом отражения $r = 0{,}95$. Показатель преломления рубина принять равным $n = 1{,}5$.

Решение. Относительную ширину спектральной линии излучения лазера можно оценить как

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{1}{Q}.$$

Здесь Q — добротность оптического резонатора, которая определяется через относительные потери энергии излучения за один период колебаний:

$$Q = 2\pi\frac{W}{\Delta W}.$$

▽ Будем считать, что основные потери энергии в оптическом резонаторе связаны с отражением излучения от зеркал. Тогда за время $\tau = \dfrac{2ln}{c}$ при отражении от двух зеркал энергия излучения уменьшится на $\Delta W_\tau = W - r^2 W = \left(1 - r^2\right) W$. Поэтому, оценив потери энергии излучения за один период колебаний T

$$\Delta W = \Delta W_\tau \frac{T}{\tau} = \left(1 - r^2\right) \frac{cW}{2ln\nu},$$

находим добротность оптического резонатора

$$Q = 2\pi \frac{W}{\Delta W} = 2\pi \frac{2ln\nu}{\left(1 - r^2\right)c} = \frac{4\pi ln}{\left(1 - r^2\right)\lambda}.$$

В нашем случае

$$Q = \frac{4\pi \cdot 0{,}1 \cdot 1{,}5}{\left(1 - 0{,}95^2\right) \cdot 694 \cdot 10^{-9}} = 2{,}8 \cdot 10^7,$$

и, следовательно, относительная ширина линии излучения лазера

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{1}{Q} = 3{,}6 \cdot 10^{-8}.$$

Отметим, что добротность оптического резонатора возрастает при улучшении качества зеркал и при увеличении расстояния между ними. ■

6. КВАНТОВЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Квантовые особенности поведения микрочастиц, их отличия от свойств макроскопических объектов проявляются не только при рассмотрении движения одной частицы, но и при анализе поведения системы микрочастиц. Наиболее отчетливо это видно на примере физических систем, состоящих из одинаковых частиц, — систем электронов, протонов, нейтронов и т. д.

При рассмотрении таких объектов используется принцип тождественности одинаковых частиц в квантовой механике, согласно которому одинаковые частицы, из которых состоит система, принципиально неразличимы. Такой подход позволяет получить волновые фукции, описывающие состояние системы одинаковых микрочастиц, и установить связь свойств симметрии волновых функций со спином частиц. Эти свойства оказываются различными для частиц с нулевым или целым значением спина (бозонов) и частиц с полуцелым значением спина (фермионов). В силу этого и поведение систем бозе- и ферми-частиц оказывается существенно различным.

Квантовая статистика описывает свойства фотонного газа, газа электронов в металле, системы атомных электронов, системы нуклонов, образующих ядро, и т. д. Наиболее яркими макроскопическими явлениями, обусловленными свойствами микрочастиц, являются сверхтекучесть и сверхпроводимость.

6.1. Квантово-механическое описание системы многих частиц

Важной особенностью микромира является не только то, что микрочастицы обладают существенно иными свойствами по сравнению с макроскопическими телами, но и то, что поведение сис-

темы микрочастиц также кардинально отличается от поведения систем, состоящих из макроскопических тел.

Основное внимание в предыдущих главах было уделено квантовым системам, состоящим, как правило, из одной частицы. Некоторые задачи, для которых характерно наличие не одной, а нескольких частиц, например задача об электроне в атоме водорода или водородоподобном атоме, также были сведены к изучению движения одной частицы — электрона. В данной главе приведено квантово-механическое описание систем, состоящих из большого числа микрочастиц.

Рассмотрим систему, состоящую из N частиц с массами $m_{0_1}, m_{0_2}, \ldots, m_{0_i}, \ldots, m_{0_N}$. Обозначим координаты i-й частицы через q_i. Под q_i будем понимать координаты центра тяжести частицы x_i, y_i, z_i; в качестве обобщенной координаты может выступать и спин частицы. Будем считать, что силы, действующие между частицами, зависят лишь от мгновенных значений их координат и скоростей в данный момент времени, т. е. полагать, что запаздывающее взаимодействие между частицами отсутствует. Тогда волновая функция системы частиц может быть представлена в виде

$$\Psi(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_i, y_i, z_i, \ldots, x_N, y_N, z_N, t) \equiv$$
$$\equiv \Psi(q_1, \ldots, q_i, \ldots, q_N, t).$$

Рассмотрим элементарный объем $dV_i = dx_i dy_i dz_i$. Величина

$$w(q_1, \ldots, q_i, \ldots, q_N, t) = \left|\Psi(q_1, \ldots, q_i, \ldots, q_N, t)\right|^2 dV_1 \cdots dV_i \cdots dV_N$$

определяет вероятность того, что одна частица находится в объеме dV_1, другая — в объеме dV_2 и т. д. Таким образом, зная волновую функцию $\Psi(q_1, \ldots, q_i, \ldots, q_N, t)$, можно найти вероятность любой пространственной конфигурации системы микрочастиц. Кроме того, как и в случае одной частицы, можно определить вероятность какого-либо значения любой механической величины как у системы в целом, так и у отдельной частицы, а также вычислить среднее значение механической величины.

Волновую функцию системы частиц $\Psi(q_1,\dots,q_i,\dots,q_N,t)$ находим из уравнения Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi,$$

где $\hat{H}$ — оператор функций Гамильтона для системы частиц. Этот оператор представляет собой обобщение гамильтониана для одной частицы на случай системы многих частиц и имеет вид

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{0_i}}\Delta_i+U_i(x_i,y_i,z_i,t)\right]+$$

$$+\sum_{i\neq j=1}^{N}U_{ij}(x_i,y_i,z_i,x_j,y_j,z_j). \qquad (6.1)$$

Здесь $\Delta_i=\frac{\partial^2}{\partial x_i^{\,2}}+\frac{\partial^2}{\partial y_i^{\,2}}+\frac{\partial^2}{\partial z_i^{\,2}}$, $U_i(x_i,y_i,z_i,t)$ — силовая функция для i-й частицы во внешнем поле, а $U_{ij}(x_i,y_i,z_i,x_j,y_j,z_j)$ — энергия взаимодействия i-й и j-й частиц.

В простейшем случае системы, состоящей из двух частиц,

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m_{0_1}}\Delta_1+U_1(x_1,y_1,z_1,t)-\frac{\hbar^2}{2m_{0_2}}\Delta_2+$$

$$+U_2(x_2,y_2,z_2,t)+U_{12}(x_1,y_1,z_1,x_2,y_2,z_2). \qquad (6.2)$$

Неразличимость тождественных частиц в квантовой механике. Рассмотрим систему, состоящую из N тождественных микрочастиц, т. е. из частиц, обладающих одинаковыми массой, электрическим зарядом, спином и т. д. Естественно, что в одинаковых условиях эти частицы будут вести себя совершенно одинаковым образом. Гамильтониан такой системы может быть получен из (6.1), если считать одинаковыми массы всех частиц m_{0_i} и силовые функции U_i. Запишем его в виде

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta_i + U_i(x_i, y_i, z_i, t)\right] +$$

$$+ \sum_{i\neq j=1}^{N} U_{ij}(x_i, y_i, z_i, x_j, y_j, z_j). \qquad (6.3)$$

Если в системе поменять местами i-ю и j-ю частицы, то в силу тождественности одинаковых частиц состояние системы не должно измениться. Неизменной останется полная энергия системы, а также все физические величины, характеризующие ее состояние.

Введем оператор перестановки частиц в рассматриваемой системе $\hat{P}_{ij}$. Действие этого оператора заключается в том, что он переставляет местами i-ю и j-ю частицы системы. Так, например, если имеется функция $\Psi(q_1, ..., q_N, t)$, зависящая от координат частиц системы, то действие оператора перестановки $\hat{P}_{ij}$ на эту функцию можно представить следующим образом:

$$\hat{P}_{ij}\Psi(q_1, ..., q_i, ..., q_j, ..., q_N, t) =$$

$$= \Psi(q_1, ..., q_j, ..., q_i, ..., q_N, t). \qquad (6.4)$$

Условие неизменности состояния системы при перестановке i-й и j-й частиц можно записать с помощью оператора перестановки:

$$\hat{P}_{ij}\hat{H} = \hat{H}\hat{P}_{ij}. \qquad (6.5)$$

В справедливости этого соотношения легко убедиться, подействовав левой и правой частями этого равенства на функцию $\Psi(q_1, ..., q_N, t)$ и получив одинаковый результат. Это означает, что оператор перестановки $\hat{P}_{ij}$ коммутирует с гамильтонианом системы одинаковых частиц $\hat{H}$.

С помощью соотношения (6.5) можно показать, что если волновая функция Ψ является решением уравнения Шредингера, то и волновая функция $\hat{P}_{ij}\Psi$, т. е. функция, получающаяся из Ψ

перестановкой координат i-й и j-й частиц, также является решением уравнения Шредингера.

Действительно, пусть волновая функция Ψ является решением уравнения Шредингера, тогда

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi.$$

Подействуем на левую и правую части этого уравнения оператором $\hat{P}_{ij}$. Так как оператор перестановки не зависит от времени, то его можно внести под знак производной по времени

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\hat{P}_{ij}\Psi\right)=\hat{P}_{ij}\left(\hat{H}\Psi\right).$$

С учетом соотношения (6.5) получаем

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\hat{P}_{ij}\Psi\right)=\hat{H}\left(\hat{P}_{ij}\Psi\right).$$

Таким образом, волновая функция $\hat{P}_{ij}\Psi$ также является решением уравнения Шредингера.

Проводя перестановки любых других пар частиц, мы будем получать новые состояния системы, которые в силу тождественности частиц не будут отличаться от исходного состояния. Обобщение этого результата можно сформулировать следующим образом: в системе одинаковых частиц реализуются лишь такие состояния, которые не меняются при перестановке частиц местами. Данное утверждение получило название *принципа тождественности одинаковых частиц*. Это очень важное положение в квантовой механике. Оно не вытекает из основных постулатов квантовой механики, но и не противоречит им. Справедливость этого принципа подтверждается согласием полученных на его основе результатов с опытом.

Симметричные и антисимметричные состояния. Пусть волновая функция $\Psi(q_1,...,q_N,t)$ описывает состояние системы, содержащей N одинаковых частиц. Действуя на нее оператором перестановки $\hat{P}_{ij}$, получаем

$$\hat{P}_{ij}\Psi\left(q_1, ..., q_i, ..., q_j, ..., q_N, t\right) =$$

$$= \Psi\left(q_1, ..., q_j, ..., q_i, ..., q_N, t\right). \qquad (6.6)$$

Согласно принципу тождественности одинаковых частиц, получившаяся волновая функция $\Psi(q_1,..., q_j,..., q_i,..., q_N, t)$ должна описывать то же самое состояние, что и исходная волновая функция $\Psi(q_1, ..., q_i, ..., q_j, ..., q_N, t)$. Следовательно, эти две функции могут различаться только постоянным множителем. Обозначим его λ. Тогда уравнение (6.6) можно переписать в виде

$$\hat{P}_{ij}\Psi = \lambda\Psi. \qquad (6.7)$$

Уравнение (6.7) представляет собой уравнение на собственные функции и собственные значения оператора перестановки $\hat{P}_{ij}$. Для того чтобы найти λ, подействуем на левую и правую части уравнения (6.7) оператором перестановки

$$\hat{P}_{ij}^2\Psi = \lambda\hat{P}_{ij}\Psi.$$

Поскольку дважды применяемый оператор перестановки не меняет волновую функцию Ψ, то с учетом (6.7) получаем

$$\Psi = \lambda^2\Psi,$$

т. е. $\lambda^2 = 1$ и $\lambda = \pm 1$. Таким образом, собственными функциями оператора $\hat{P}_{ij}$ являются функции, которые при перестановке координат i-й и j-й частиц либо остаются неизменными ($\lambda = 1$), либо меняют знак ($\lambda = -1$). Эти функции называются соответственно симметричными и антисимметричными относительно перестановки частиц.

Полученный результат означает, что состояния системы из N одинаковых частиц описываются волновыми функциями, которые либо не меняются (симметричны), либо меняют знак (антисимметричны) при перестановке местами любой пары частиц. В ре-

шении задачи 6.1 показано, что волновые функции, описывающие состояние системы, не могут быть симметричными при перестановке одной части частиц системы и антисимметричными при перестановке другой части ее частиц. Симметрия или антисимметрия волновых функций сохраняется по отношению к перестановкам всех частиц системы.

Таким образом, принцип тождественности одинаковых частиц в квантовой механике приводит к тому, что все возможные состояния системы, образованной одинаковыми частицами, делятся на два типа:

симметричные, для которых

$$\hat{P}_{ij}\Psi_S\left(q_1, ..., q_i, ..., q_j, ..., q_N, t\right) = \\ = \Psi_S\left(q_1, ..., q_i, ..., q_j, ..., q_N, t\right),$$

антисимметричные, для которых

$$\hat{P}_{ij}\Psi_A\left(q_1, ..., q_i, ..., q_j, ..., q_N, t\right) = \\ = -\Psi_A\left(q_1, ..., q_i, ..., q_j, ..., q_N, t\right).$$

Здесь индексы S и A обозначают симметричную и антисимметричную волновые функции соответственно, а перестановки проводятся по всем парам частиц системы. Можно показать (см. решение задачи 6.2), что такое деление имеет абсолютный характер, т. е. вид симметрии волновых функций не меняется с течением времени. Если волновая функция, описывающая состояние системы, в какой-либо момент времени является симметричной (антисимметричной), то этот тип симметрии сохраняется и в любой другой момент времени.

Бозоны и фермионы. Частицы, состояния которых описываются симметричными волновыми функциями, называются *бозе-частицами* или *бозонами*. Такое название они получили потому, что системы, состоящие из таких частиц, подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна, разработанной индийским физиком Ш. Бозе для фотонов и развитой А. Эйнштейном для идеального газа. К бозонам относятся фотоны, π- и K-мезоны, фононы в твердом теле, экситоны в полупроводниках и диэлектриках и т. д. Важно

отметить, что все бозе-частицы обладают нулевым или целочисленным спином.

Частицы, состояния которых описываются антисимметричными волновыми функциями, называются *ферми-частицами* или *фермионами*. Это название принято потому, что системы, состоящие из таких частиц, подчиняются статистике Ферми — Дирака, развитой итальянским физиком Э. Ферми и английским физиком П. Дираком. К фермионам относятся электроны, протоны, нейтроны, нейтрино и все элементарные частицы и античастицы с полуцелым спином.

Эта связь между спином частиц, образующих квантовую систему, и типом статистики была установлена немецким физиком В. Паули. Она остается справедливой и в случае сложных частиц, состоящих из элементарных, таких, например, как атомные ядра, атомы, молекулы и т. д. Ответ на вопрос, является ли сложная частица бозоном или фермионом, зависит от того, каков результирующий спин этой частицы. Если суммарный спин сложной частицы равен целому числу или нулю, то эта частица является бозоном, если же он равен полуцелому числу, то частица является фермионом.

Рассмотрим в качестве примера ядро атома гелия $^4_2\mathrm{He}$, т. е. α-частицу. Оно состоит из двух протонов и двух нейтронов — четырех фермионов, спин каждой из которых равен $\frac{1}{2}$. Спин ядра $^4_2\mathrm{He}$ равен нулю, т. е. это ядро является бозоном. Атом гелия $^4_2\mathrm{He}$, содержащий кроме ядра еще и два электрона (два фермиона), также является бозоном. А вот ядро легкого изотопа гелия $^3_2\mathrm{He}$ состоит из двух протонов и одного нейтрона, т. е. нечетного числа (трех) ферми-частиц. Спин этого ядра полуцелый, следовательно, ядро $^3_2\mathrm{He}$ является фермионом. Также фермионом является и атом $^3_2\mathrm{He}$.

Различие между этими двумя изотопами гелия проявляется не только на микроскопическом, но и на макроскопическом уровне. Оно заключается в том, что жидкий $^4_2\mathrm{He}$ при температуре $T \approx 2\,\mathrm{K}$

обладает сверхтекучими свойствами, а жидкий $^3_2\mathrm{He}$ таких свойств не проявляет. Явление сверхтекучести у $^4_2\mathrm{He}$ экспериментально открыто советским физиком П.Л. Капицей в 1938 г и заключается в том, что жидкий $^4_2\mathrm{He}$ может протекать через узкие каналы и щели, не испытывая вязкости. Было показано, что сверхтекучесть может возникать только в системе бозонов и связана с образованием так называемого бозе-конденсата — наличием большого числа бозонов на самом нижнем энергетическом уровне.

Атомы легкого изотопа гелия $^3_2\mathrm{He}$ являются фермионами, поэтому первоначально казалось, что о сверхтекучести $^3_2\mathrm{He}$ не может быть и речи. Однако впоследствии выяснилось, что при очень низких температурах ($\sim 0{,}002$ K) атомы $^3_2\mathrm{He}$ объединяются в так называемые куперовские пары. Спин такой пары является целочисленным, т. е. куперовская пара представляет собой бозон. Следовательно, и жидкий $^3_2\mathrm{He}$ в этих условиях может проявлять сверхтекучие свойства. Сверхтекучесть $^3_2\mathrm{He}$ была экспериментально обнаружена в 1972 г. группой американских физиков.

Волновая функция системы невзаимодействующих частиц. Найдем с помощью полученных выше результатов вид волновых функций для системы, состоящей из тождественных микрочастиц. В целях упрощения задачи будем считать, что взаимодействие между частицами системы отсутствует, т. е. энергии взаимодействия U_{ij} в (6.1) и U_{12} в (6.2) равны нулю. Сначала проведем решение без учета спина частиц.

Рассмотрим систему, состоящую из двух одинаковых невзаимодействующих частиц. Согласно (6.2), гамильтониан такой системы

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2,$$

где $\hat{H}_1$ — гамильтониан одной частицы, а $\hat{H}_2$ — гамильтониан другой частицы, определяемые соотношением

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^{\,2}} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^{\,2}} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^{\,2}}\right) + U(x_i, y_i, z_i), \quad i = 1, 2.$$

Отметим, что вид операторов $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$ совершенно одинаков, поскольку одинаковы сами рассматриваемые частицы. Единственное их различие заключается в том, что операторы $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$ зависят от разных координат.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний системы частиц имеет вид

$$\hat{H}\Psi = \left(\hat{H}_1 + \hat{H}_2\right)\Psi = E, \tag{6.8}$$

где E — полная энергия системы. Будем решать это уравнение методом разделения переменных

$$\Psi(q_1, q_2) = \Psi_\alpha(q_1)\Psi_\beta(q_2). \tag{6.9}$$

Здесь волновая функция $\Psi_\alpha(q_1)$ описывает состояние одной частицы, а волновая функция $\Psi_\beta(q_2)$ — состояние другой частицы. Подставляя волновую функцию (6.9) в уравнение (6.8), получаем

$$\hat{H}\Psi_\alpha(q_1)\Psi_\beta(q_2) = \left[\hat{H}_1\Psi_\alpha(q_1)\right]\Psi_\beta(q_2) + \left[\hat{H}_2\Psi_\beta(q_2)\right]\Psi_\alpha(q_1) = \\ = E\Psi_\alpha(q_1)\Psi_\beta(q_2).$$

Разделим левую и правую части этого уравнения на произведение волновых функций $\Psi_\alpha(q_1)\Psi_\beta(q_2)$:

$$\frac{\hat{H}_1\Psi_\alpha(q_1)}{\Psi_\alpha(q_1)} + \frac{\hat{H}_2\Psi_\beta(q_2)}{\Psi_\beta(q_2)} = E. \tag{6.10}$$

Первое слагаемое в левой части уравнения (6.10) зависит только от координат q_1, второе слагаемое — от координат q_2, тогда как правая часть представляет собой постоянную величину — полную энергию системы E. Это равенство может выполняться только в том случае, если каждое из слагаемых в левой части (6.10) равно постоянной величине:

$$\frac{\hat{H}_1\Psi_\alpha(q_1)}{\Psi_\alpha(q_1)} = E_1, \quad \frac{\hat{H}_2\Psi_\beta(q_2)}{\Psi_\beta(q_2)} = E_2,$$

или

$$\hat{H}_1\Psi_\alpha(q_1)=E_1\Psi_\alpha(q_1),$$
$$\hat{H}_2\Psi_\beta(q_2)=E_2\Psi_\beta(q_2), \qquad (6.11)$$

где постоянные величины E_1 и E_2 удовлетворяют условию $E_1+E_2=E$.

Из уравнений (6.11) следует, что волновая функция $\Psi_\alpha(q_1)$ описывает состояние одной частицы с энергией E_1, а волновая функция $\Psi_\beta(q_2)$ — состояние другой частицы с энергией E_2. Поскольку частицы не взаимодействуют друг с другом, то полная энергия системы E равна сумме энергий отдельных частиц E_1 и E_2.

Обозначим решение первого уравнения в (6.11) через $\varphi_\alpha(q_1)$, а второго уравнения — через $\varphi_\beta(q_2)$. Тогда решение уравнения (6.8) для системы двух невзаимодействующих частиц принимает вид

$$\Psi(q_1, q_2)=\varphi_\alpha(q_1)\varphi_\beta(q_2). \qquad (6.12)$$

Укажем теперь, как учитывается наличие у частиц спина. Будем считать, что совокупность координат q_i включает в себя не только пространственные компоненты x_i, y_i, z_i, но и спиновую составляющую s_i — проекцию спина частицы на выделенное направление. Уравнение Шредингера, которым мы пользовались до сих пор, является уравнением нерелятивистской квантовой механики и не учитывает спин частицы. Поэтому для решения данной задачи необходимо воспользоваться более общим уравнением — уравнением Паули, — в котором спин частицы принимается во внимание. Рассмотрение этого уравнения выходит за рамки нашего курса. Отметим только, что решением уравнения Паули является волновая функция, имеющая вид, аналогичный (6.12), т. е. представляющая собой произведение двух волновых функций $\varphi_\alpha(q_1)$ и $\varphi_\beta(q_2)$, описывающих состояние каждой частицы. Поэтому в дальнейшем мы будем пользоваться волновой функцией (6.12), считая, что переменные q_i включают в себя как пространственные, так и спиновые координаты.

Воспользуемся теперь принципом тождественности частиц. Если в волновой функции (6.12) поменять местами координаты частиц, то получившаяся волновая функция

$$\Psi(q_2, q_1) = \varphi_\alpha(q_2)\varphi_\beta(q_1) \tag{6.13}$$

в силу неразличимости частиц также должна быть решением данной задачи. Однако решения (6.12) и (6.13) не удовлетворяют рассмотренному выше принципу симметрии или антисимметрии волновых функций. Следовательно, состояния, описываемые такими волновыми функциями, не могут реализоваться в природе. Но из них можно составить симметричную

$$\Psi_S = \varphi_\alpha(q_1)\varphi_\beta(q_2) + \varphi_\alpha(q_2)\varphi_\beta(q_1) \tag{6.14}$$

и антисимметричную

$$\Psi_A = \varphi_\alpha(q_1)\varphi_\beta(q_2) - \varphi_\alpha(q_2)\varphi_\beta(q_1). \tag{6.15}$$

волновые функции. В силу линейности уравнений квантовой механики эти функции являются решением данной задачи и могут описывать состояния двух одинаковых бозонов (Ψ_S) или двух одинаковых фермионов (Ψ_A).

Обобщим полученные результаты на случай системы, состоящей из N невзаимодействующих тождественных частиц. Используя метод разделения переменных, запишем волновую функцию системы частиц:

$$\Psi(q_1, q_2, ..., q_i, ..., q_N) = \varphi_\alpha(q_1)\varphi_\beta(q_2) ... \varphi_\tau(q_i) ... \varphi_\omega(q_N).$$

Перестановка местами каждых двух частиц системы дает новые состояния, например:

$$\begin{aligned} 1 \leftrightarrow 2 \quad & \Psi(q_2, q_1, q_3, ..., q_N) = \varphi_\alpha(q_2)\varphi_\beta(q_1)\varphi_\gamma(q_3)...\varphi_\omega(q_N), \\ 1 \leftrightarrow 3 \quad & \Psi(q_3, q_2, q_1, ..., q_N) = \varphi_\alpha(q_3)\varphi_\beta(q_2)\varphi_\gamma(q_1)...\varphi_\omega(q_N) \end{aligned} \tag{6.16}$$

и т. д.

В случае системы бозе-частиц состояния, реализуемые в природе, описываются симметричной комбинацией волновых функций (6.16):

$$\Psi_S = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \geq j}}^{N} \hat{P}_{ij} \varphi_\alpha(q_1) \ldots \varphi_\tau(q_i) \ldots \varphi_\delta(q_j) \ldots \varphi_\omega(q_N). \qquad (6.17)$$

Суммирование в (6.17) проводится по всем возможным перестановкам частиц.

Для системы, состоящей из ферми-частиц, антисимметричная волновая функция может быть представлена в виде определителя

$$\Psi_A(q_1, \ldots, q_N) = \begin{vmatrix} \varphi_\alpha(q_1) & \varphi_\alpha(q_2) & \ldots & \varphi_\alpha(q_N) \\ \varphi_\beta(q_1) & \varphi_\beta(q_2) & \ldots & \varphi_\beta(q_N) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \varphi_\omega(q_1) & \varphi_\omega(q_2) & \ldots & \varphi_\omega(q_N) \end{vmatrix}. \qquad (6.18)$$

Волновые функции (6.17) и (6.18) записаны в ненормированном виде, их нормировка может быть проведена стандартным способом.

Принцип Паули. При отсутствии взаимодействия между частицами системы можно рассматривать не только состояние системы в целом, но и состояние отдельной частицы. Так, например, можно считать, что состояние одной частицы описывается волновой функцией φ_α, другой — волновой функцией φ_β и т. д. Такой подход выявляет кардинальное различие между волновыми функциями системы ферми- и бозе-частиц.

Предположим, что в системе ферми-частиц две частицы находятся в одном и том же состоянии, т. е. что $\varphi_\alpha \equiv \varphi_\beta$. Тогда волновая функция системы $\Psi_A(q_1, \ldots, q_N)$ обращается в нуль. Действительно, определитель в выражении (6.18) в этом случае имеет две одинаковые строки, а такой определитель, как известно, равен нулю. Равенство волновой функции нулю означает, что данное состояние системы физически не реализуемо, т. е. два фермиона — два электрона, два протона, два нейтрона — не могут находиться в одном и том же состоянии.

Это положение сформулировано В. Паули в 1925 г. и называется принципом, или запретом, Паули. Принцип Паули гласит: в системе тождественных фермионов не может быть двух частиц, находящихся в одном и том же квантовом состоянии.

Этот принцип имеет очень важное значение для понимания особенностей поведения систем фермионов. Он сыграл большую роль в обосновании периодической системы элементов Д.И. Менделеева, а также позволил объяснить ряд закономерностей атомных и молекулярных спектров.

Что же касается системы, состоящей из бозе-частиц, то принцип симметрии волновых функций не накладывает каких-либо ограничений на состояния системы. В одном и том же состоянии может находиться любое число тождественных бозе-частиц.

□ **Задача 6.1.** Докажите, что состояния системы тождественных частиц не могут описываться волновыми функциями, которые были бы симметричны при перестановке одной части частиц системы и антисимметричны при перестановке другой части частиц.

Решение. Пусть система, состоящая из N тождественных частиц, находится в состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi(q_1, ..., q_N, t)$. Предположим, что волновая функция системы симметрична (не меняет знак) при перестановке i-й и j-й частиц, а также j-й и k-й частиц, но антисимметрична (меняет знак) при перестановке i-й и k-й частиц. Тогда, осуществляя последовательные перестановки $i \leftrightarrow k$, $i \leftrightarrow j$, $j \leftrightarrow k$ и $j \leftrightarrow i$, получаем

$$\begin{aligned}
&\Psi(q_1, ..., q_i, ..., q_j, ..., q_k, ..., q_N, t) = \\
&= -\Psi(q_1, ..., q_k, ..., q_j, ..., q_i, ..., q_N, t) = \\
&= -\Psi(q_1, ..., q_k, ..., q_i, ..., q_j, ..., q_N, t) = \\
&= -\Psi(q_1, ..., q_j, ..., q_i, ..., q_k, ..., q_N, t) = \\
&= -\Psi(q_1, ..., q_i, ..., q_j, ..., q_k, ..., q_N, t).
\end{aligned}$$

Отсюда следует, что $2\Psi(q_1, ..., q_i, ..., q_j, ..., q_k, ..., q_N, t) = 0$, т. е. $\Psi(q_1, ..., q_N, t) = 0$. Следовательно, такое состояние невозможно. Это означает, что состояния системы тождественных частиц могут описываться либо только симметричными волновыми функциями, либо только антисимметричными волновыми функциями. ■

Задача 6.2. Докажите, что если в какой-либо момент времени квантовая система, состоящая из одинаковых частиц, находится в состоянии, описываемом симметричной волновой функцией Ψ_S, то она всегда будет описываться симметричной волновой функцией.

Решение. Запишем уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

в виде

$$\delta_t\Psi = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi dt,$$

где $\delta_t\Psi$ — приращение волновой функции за время dt. Пусть в момент времени $t = t_0$ волновая функция Ψ, описывающая состояние системы, является симметричной функцией координат частиц, т. е. $\Psi = \Psi_S$. Покажем, что приращение этой функции за время dt также будет симметричной функцией координат частиц.

Поскольку гамильтониан $\hat{H}$ симметричен относительно координат частиц системы, то функция $\hat{H}\Psi_S$ также является симметричной функцией координат частиц. Следовательно, и приращение $\delta_t\Psi$ будет симметричной функцией координат.

Таким образом, если волновая функция Ψ, описывающая состояние системы тождественных частиц, в некоторый момент времени является симметричной, то она остается симметричной и в любой другой момент времени. Поскольку знак dt может быть как положительным, так и отрицательным, то это означает, что симметрия волновой функции как в прошлом, так и в будущем является одной и той же.

Аналогичным способом решается задача и для антисимметричной волновой функции, т. е. доказывается, что если волновая функция системы тождественных частиц в какой-либо момент времени является антисимметричной функцией координат частиц, то она будет антисимметричной и в любой другой момент времени.

Решение данной задачи показывает, что деление волновых функций на симметричные Ψ_S и антисимметричные Ψ_A имеет "абсолютный" характер. Это означает, что если в какой-либо момент времени установлена симметрия волновой функции системы тождественных частиц, то эта симметрия в дальнейшем остается неизменной. Переходы из состояний, описываемых симметричными волновыми функциями, в состояния, описываемые антисимметричными волновыми функциями, и наоборот, невозможны.

6.2. Плотность квантовых состояний

Рассмотренные в 6.1 особенности поведения частиц, связанные с неразличимостью тождественных частиц в квантовой механике, проявляются и в статистических свойствах систем, состоящих из одинаковых частиц. Это приводит к тому, что статистические распределения частиц в квантовой механике отличаются от статистических распределений, известных из классической физики. Кроме того, статистические свойства бозонов и фермионов в силу кардинального отличия в поведении этих частиц также оказываются различными.

Найдем число квантовых состояний, по которым могут распределяться частицы, при условии, что энергия этих состояний не превышает некоторого значения E. Определим это число для случая частицы, находящейся в трехмерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками. Согласно (4.27), энергия частицы в такой яме описывается выражением

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\frac{n_1}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{a_3}\right)^2\right], \qquad (6.19)$$

где a_1, a_2 и a_3 — стороны прямоугольного параллелепипеда, а n_1, n_2, $n_3 = 1, 2, 3, \ldots$ — квантовые числа. Из (6.19) следует, что энергия частицы меняется не непрерывным образом, а дискретно, поскольку квантовые числа n_1, n_2 и n_3 могут принимать только целочисленные значения. Однако нас будут интересовать значения энергии E, существенно превышающие энергию основного состояния, для которого $n_1 = n_2 = n_3 = 1$. В этом случае изменение энергии ΔE от уровня к уровню будет значительно меньше самого значения энергии E, так что можно считать, что энергия частицы меняется практически непрерывно (квазинепрерывно).

Рассмотрим пространство квантовых чисел, т. е. трехмерное пространство, вдоль трех взаимно перпендикулярных осей которого отложены квантовые числа n_1, n_2, n_3 (рис. 6.1). Точку этого пространства, которая отвечает определенному набору целых чисел (n_1, n_2, n_3), будем называть узлом. Каждому узлу в

пространстве квантовых чисел соответствует определенное квантовое состояние частицы, точнее, не одно, а несколько состояний, которые могут различаться, например, проекциями спина частицы. Обозначим число этих состояний, не связанных с движением частицы, J_z. В частности, для электрона проекции спина на выделенное направление принимают значения $\pm\frac{1}{2}$, следовательно, для него $J_z = 2$.

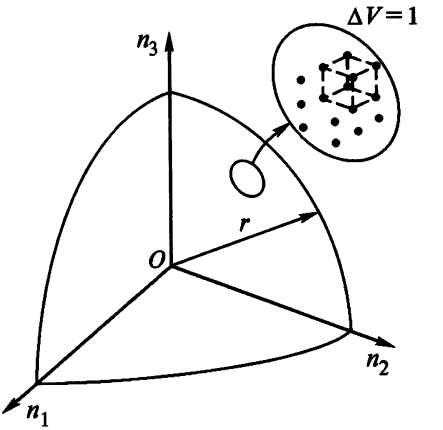


Рис. 6.1. Пространство квантовых чисел

Объем ΔV в пространстве квантовых чисел, приходящийся на один узел, равен единице, т. е. $\Delta V = 1$.

Найдем число G состояний частицы, энергия которых не превышает некоторого фиксированного значения E. Введем обозначение

$$r^2 = \frac{(n_1 a_2 a_3)^2 + (n_2 a_1 a_3)^2 + (n_3 a_1 a_2)^2}{(a_1 a_2 a_3)^{4/3}}$$

и перепишем соотношение (6.19) в виде

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 (a_1 a_2 a_3)^{2/3}} r^2. \qquad (6.20)$$

Выражая отсюда r, получаем

$$r = \frac{(a_1 a_2 a_3)^{1/3} \sqrt{2m_0 E}}{\pi\hbar}. \qquad (6.21)$$

Рассмотрим сферу радиусом r (рис. 6.1). Искомое число квантовых состояний определяется числом узлов, находящихся внутри

положительного октанта сферы радиуса r. То обстоятельство, что мы рассматриваем не всю сферу, а только ее октант с положительными значениями квантовых чисел n_1, n_2 и n_3, обусловлено тем, что в нашей задаче $n_1, n_2, n_3 > 0$.

Чтобы найти число состояний G, нужно объем октанта (т. е. 1/8 часть объема сферы) разделить на объем ΔV, приходящийся на один узел, и умножить получившееся выражение на множитель J_z, определяющий число возможных проекций спина частицы:

$$G = \frac{1}{8}\frac{4}{3}\pi r^3 \frac{1}{\Delta V} J_z = \frac{1}{6}\pi r^3 \frac{1}{\Delta V} J_z.$$

Подставляя в это соотношение выражение (6.21) и учитывая, что $\Delta V = 1$, получаем

$$G = \frac{1}{6}\pi \frac{\left(\sqrt{2m_0 E}\right)^3}{\pi^3 \hbar^3} J_z a_1 a_2 a_3. \qquad (6.22)$$

Поскольку произведение $a_1 a_2 a_3$ представляет собой объем потенциальной ямы V, а $\sqrt{2m_0 E}$ есть нерелятивистский импульс частицы p, то соотношение (6.22) можно представить в виде

$$G = \frac{4}{3}\pi p^3 V \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} J_z. \qquad (6.23)$$

Для того чтобы наиболее отчетливо выявить смысл полученного выражения, рассмотрим *фазовое пространство* — шестимерное пространство с взаимно перпендикулярными осями x, y, z, p_x, p_y, p_z. Полный объем в этом пространстве $V_{\text{фаз}}$ равен произведению объема в пространстве координат V и объема в пространстве импульсов $\frac{4}{3}\pi p^3$ (здесь p — импульс частицы, соответствующий максимальной энергии E). Таким образом,

$$V_{\text{фаз}} = V\frac{4}{3}\pi p^3, \tag{6.24}$$

и выражение (6.23) принимает вид

$$G = \frac{V_{\text{фаз}}}{(2\pi\hbar)^3} J_z. \tag{6.25}$$

Множитель J_z в (6.25), как уже отмечалось, определяет число возможных проекций спина частицы, а множитель $\dfrac{V_{\text{фаз}}}{(2\pi\hbar)^3}$ — число состояний, связанных с движением частицы в потенциальной яме. Подчеркнем, что число состояний G пропорционально фазовому объему $V_{\text{фаз}}$.

Напомним, что проведенное выше рассмотрение относилось к случаю движения частицы в трехмерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками (потенциальном ящике). Можно показать, что обобщение полученных результатов на случай ямы произвольной формы не меняет общего выражения для числа квантовых состояний частицы (6.25).

Из выражения (6.25) следует еще один важный результат: объем фазового пространства, приходящийся на одно квантовое состояние, равен $(2\pi\hbar)^3$. Запишем это утверждение следующим образом:

$$\Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = (2\pi\hbar)^3 = h^3, \tag{6.26}$$

где Δx, Δy, Δz, Δp_x, Δp_y, Δp_z — размеры ячейки в фазовом пространстве, приходящейся на одно состояние. Поскольку все пространственные координаты x, y и z равноправны, то для одной координаты, например x, получаем

$$\Delta x \Delta p_x = 2\pi\hbar. \tag{6.27}$$

Таким образом, в фазовом пространстве на одно состояние для каждой координаты приходится объем, равный $2\pi\hbar$.

Этот результат, как легко видеть, согласуется с принципом неопределенности. Действительно, размеры ячейки фазового пространства, приходящейся на одно состояние, должны определяться теми ограничениями на значения координаты и импульса, которые накладывают соотношения неопределенностей (2.16).

Найдем теперь *плотность квантовых состояний* $g(E)$, т. е. число состояний, приходящихся на единичный интервал энергий. Согласно определению,

$$g(E)=\frac{G(E+dE)-G(E)}{dE}=\frac{dG(E)}{dE}.$$

Перепишем это выражение в виде

$$g(E)=\frac{dG}{dp}\frac{dp}{dE}.$$

С учетом (6.24) и (6.25) получаем

$$g(E)=J_z\frac{dp}{dE}\frac{d}{dp}\left(\frac{4}{3}\frac{\pi p^3 V}{(2\pi\hbar)^3}\right),$$

или в окончательном виде

$$g(E)=J_z\frac{4\pi p^2 V}{(2\pi\hbar)^3}\frac{dp}{dE}. \qquad (6.28)$$

Выражение (6.28) является общим, т. е. справедливым для любых частиц. Найдем с его помощью плотность квантовых состояний для электронов и фотонов.

Для нерелятивистских электронов $p=\sqrt{2m_0E}$, а множитель $J_z=2$. Подставляя эти значения в (6.28), получаем

$$g_э(E)=\frac{\sqrt{2}\,m_0^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}V\sqrt{E}. \qquad (6.29)$$

Для фотонов $p = \frac{E}{c}$, где c — скорость света в вакууме, а множитель J_z также равен двум, поскольку вследствие поперечности световой волны фотон может находиться в двух состояниях с разной поляризацией. Следовательно,

$$g_{\text{ф}}(E) = \frac{V}{\pi^2 c^3 \hbar^3} E^2. \qquad (6.30)$$

6.3. Распределение Бозе — Эйнштейна

В классической физике распределение частиц по энергиям описывается хорошо известными из курса молекулярной физики *распределением Максвелла*

$$dN_{\text{М}} = A_{\text{М}} e^{-\frac{E_{\text{к}}}{kT}} dp_x dp_y dp_z \qquad (6.31а)$$

и *распределением Больцмана*

$$dN_{\text{Б}} = A_{\text{Б}} e^{-\frac{U}{kT}} dx dy dz. \qquad (6.31б)$$

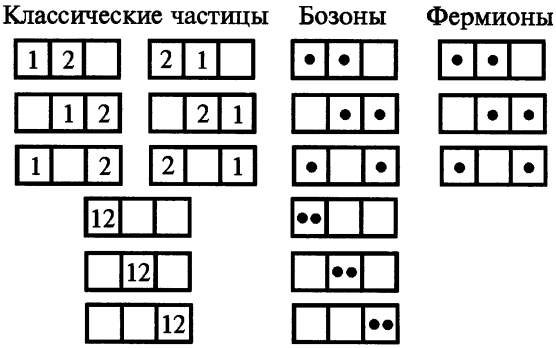
Здесь $A_{\text{М}}$ и $A_{\text{Б}}$ — нормировочные константы; $E_{\text{к}}$ и U — кинетическая и потенциальная энергии частицы соответственно; k — постоянная Больцмана; T — температура.

Напомним, что при выводе статистических распределений отыскивается наиболее вероятное распределение частиц, т. е. распределение, которое может быть реализовано наибольшим числом способов. Согласно основному постулату статистической физики, именно это распределение является равновесным. Будем считать, что частицы не взаимодействуют друг с другом (модель идеального газа), а также полагать, что все распределения, которые приводят к одной и той же суммарной энергии частиц, реализуются с одинаковой вероятностью.

В классической физике при выводе распределений считается, что одинаковые частицы принципиально различимы. Это, в частности,

приводит к тому, что распределение, в котором одна из двух одинаковых частиц (частица 1) находится в состоянии A, а другая (частица 2) в состоянии B, и распределение, в котором частица 1 находится в состоянии B, а частица 2 — в состоянии A, являются двумя разными распределениями. В квантовой механике эти два распределения в силу тождественности одинаковых частиц следует считать одним распределением. Кроме того, ввиду различия в свойствах ферми- и бозе-частиц, статистические распределения этих частиц должны существенно отличаться друг от друга.

Проиллюстрируем различие в распределении классических и квантовых частиц (фермионов и бозонов) на следующем примере. Пусть нам нужно распределить две частицы по трем состояниям (ячейкам). Классические частицы вследствие их различимости, будем отмечать номерами 1 и 2. Квантовые частицы одного вида принципиально неразличимы, будем изображать их черными кружочками. При этом ферми-частицы в соответствии с принципом Паули могут находиться в каждой ячейке только поодиночке, что же касается бозе-частиц, то никаких ограничений на распределение их по ячейкам не накладывается. Результаты распределения приведены ниже.



Для классических частиц число возможных распределений (микросостояний) равно девяти, а вероятность каждого распределения — 1/9. Для бозе-частиц получается шесть распределений, соответственно вероятность каждого из них равна 1/6. Для ферми-частиц реализуются только три распределения с вероятностью выпадения каждого из них, равной 1/3.

Вывод распределения Бозе — Эйнштейна. Приступим теперь к выводу закона распределения бозе-частиц по энергиям.

Предварительно решим следующую вспомогательную задачу. Пусть имеется длинный пенал, который может быть разделен на Z ячеек с помощью $Z-1$ перегородок (рис. 6.2). Найдем число способов, с помощью которых N неразличимых частиц могут быть распределены по ячейкам этого пенала. Поскольку мы имеем дело с бозе-частицами, то будем считать, что в каждой ячейке может находиться произвольное число частиц.

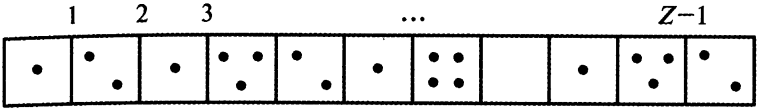


Рис. 6.2. Возможное распределение бозе-частиц по ячейкам

Следовательно, эта система состоит из N частиц и $Z-1$ перегородок, т. е. из $N+Z-1$ элементов. Рассмотрим все возможные перестановки элементов этой системы. Следует отметить, что речь идет о перестановке не только частиц с частицами, но и перегородок с перегородками, что меняет нумерацию ячеек и, вообще говоря, число частиц в них. Кроме того, могут переставляться перегородки вместе с частицами, что приводит к изменению нумерации ячеек. Общее число таких перестановок, согласно комбинаторике, равно $(N+Z-1)!$. Однако не все они приводят к новым распределениям. Так, перестановки частиц ввиду их неразличимости не дают новых распределений. Число таких перестановок равно $N!$. Перестановки только перегородок тоже не приводят к новым распределениям, их число равно $(Z-1)!$. Таким образом, число способов Ω, с помощью которых N тождественных частиц могут быть распределены по Z ячейкам, равно

$$\Omega = \frac{(N+Z-1)!}{N!(Z-1)!}. \tag{6.32}$$

Проиллюстрируем полученный результат на следующем примере. Рассмотрим возможные распределения трех частиц по трем ячейкам (рис. 6.3). Всего таких распределений 10. Точно такой же результат дает выражение (6.32) при $N=3$ и $Z=3$:

$$\Omega = \frac{5!}{3!2!} = 10.$$

Поскольку считалось, что в ячейке может находиться любое число частиц, то выражение (6.32) определяет число способов, с помощью которых N бозонов могут быть распределены по Z состояниям. Каждый способ размещения частиц представляет собой определенное микросостояние системы. Следовательно, Ω определяет число микросостояний, с помощью которых реализуется конкретное макросостояние системы. Таким образом, Ω есть термодинамическая вероятность, или *статистический вес*, макросостояния системы.

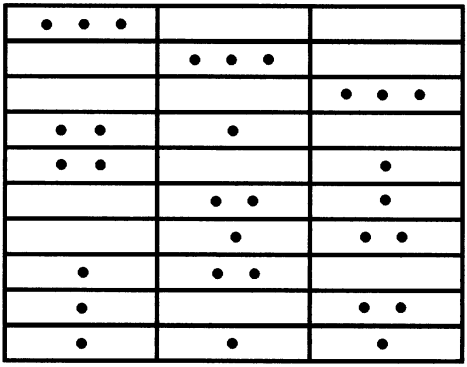


Рис. 6.3. Распределение трех бозе-частиц по трем ячейкам

Рассмотрим шестимерное фазовое пространство с координатами x, y, z, p_x, p_y, p_z. В этом пространстве уравнение

$$f\left(x,\ y,\ z,\ p_x,\ p_y,\ p_z\right) = E = \text{const},$$

где E — полная энергия частицы, определяет изоэнергетическую поверхность, т. е. поверхность, все точки которой отвечают одному и тому же значению энергии частицы.

Разобьем с помощью изоэнергетических поверхностей фазовое пространство на тонкие энергетические слои. Пусть i-й слой ограничен поверхностями

$$f\left(x,\ y,\ z,\ p_x,\ p_y,\ p_z\right) = E_i$$

и

$$f\left(x,\ y,\ z,\ p_x,\ p_y,\ p_z\right)=E_{i+1}.$$

Будем считать слой тонким, если $\left|E_{i+1}-E_i\right|<< E_i$. В этом случае энергию всех частиц, попадающих в i-й слой, можно считать одинаковой и равной E_i.

Пусть объем i-го слоя составляет $Z_i\left(2\pi\hbar\right)^3$. Это означает, что с учетом выражения (6.26) число квантовых состояний (ячеек) для этого слоя равно Z_i. Примем, что в пределах i-го слоя находится N_i частиц. Тогда, согласно (6.32), статистический вес подсистемы, содержащей N_i частиц, составит

$$\Omega_i=\frac{\left(N_i+Z_i-1\right)!}{N_i!\left(Z_i-1\right)!}.$$

Статистический вес всей системы равен произведению статистических весов отдельных ее подсистем:

$$\Omega=\prod_i\Omega_i=\prod_i\frac{\left(N_i+Z_i-1\right)!}{N_i!\left(Z_i-1\right)!}. \qquad (6.33)$$

Как уже отмечалось, нас интересует распределение, которое может быть реализовано наибольшим числом способов, т. е. распределение, для которого статистический вес Ω максимален. Таким образом, нужно найти максимум выражения (6.33). При этом следует иметь в виду, что полное число частиц системы

$$N=\sum_i N_i$$

и полная энергия системы

$$E=\sum_i N_iE_i$$

должны оставаться постоянными.

Исследование на экстремум выражения (6.33) представляет собой достаточно сложную задачу, поэтому вместо максимума

статистического веса Ω будем искать максимум энтропии S, которая связана со статистическим весом соотношением

$$S = k \ln \Omega. \tag{6.34}$$

Подставляя выражение (6.32) в (6.34), получаем

$$S = k \ln \prod_i \frac{(N_i + Z_i - 1)!}{N_i!(Z_i - 1)!} = k \sum_i \left[\ln (N_i + Z_i - 1)! - \ln N_i! - \ln (Z_i - 1)! \right].$$

Для дальнейших преобразований воспользуемся формулой Стирлинга $\ln n! \approx n \ln n - n$, справедливой при $n >> 1$. Считая, что $N_i >> 1$ и $Z_i >> 1$, получаем

$$S = k \sum_i \left[(N_i + Z_i - 1) \ln (N_i + Z_i - 1) - (N_i + Z_i - 1) - \right.$$
$$\left. - N_i \ln N_i + N_i - (Z_i - 1) \ln (Z_i - 1) + Z_i - 1 \right].$$

Перепишем это выражение в виде

$$S = k \sum_i \left[(N_i + Z_i - 1) \ln (N_i + Z_i - 1) - N_i \ln N_i \right] + C, \tag{6.35}$$

где $C = k \sum_i (Z_i - 1) \ln (Z_i - 1)$. Слагаемое C в (6.35) не зависит от числа частиц N_i, поэтому при отыскании максимума функции S его можно не учитывать, так как в задаче на экстремум будет варьироваться только число частиц в слое N_i.

Для отыскания максимума энтропии (см. выражение (6.35)) при условии постоянства полного числа частиц системы N и полной энергии E воспользуемся методом множителей Лагранжа. Этот метод заключается в следующем. Пусть нам нужно найти экстремум функции

$$f(x_1, x_2, ..., x_n),$$

аргументы которой удовлетворяют условиям

$$y_1(x_1,\ x_2,\ ...,\ x_n) = C_1,$$
$$y_2(x_1,\ x_2,\ ...,\ x_n) = C_2,$$
$$.....$$
$$y_n(x_1,\ x_2,\ ...,\ x_n) = C_n,$$

где $y_1, y_2, ...,\ y_n$ — некоторые известные функции, а $C_1, C_2, ...,\ C_n$ — константы. Для этого, согласно методу множителей Лагранжа, нужно построить функцию

$$F = f + \lambda_1 y_1 + \lambda_2 y_2 + ... + \lambda_n y_n.$$

Здесь $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$ — постоянные коэффициенты, называемые множителями Лагранжа. Затем следует взять частные производные функции F по всем переменным x_i и приравнять их нулю. В итоге получим систему n уравнений, решение которой даст нам значения переменных x_i, при которых достигается условный экстремум.

Напомним, что в нашей задаче переменной величиной является число частиц N_i, а дополнительно накладываемые условия сводятся к требованию постоянства числа частиц системы N и энергии E. Поэтому функция F в данном случае имеет вид

$$F = S + \lambda_1 N + \lambda_2 E =$$
$$= k\sum_i \left[(N_i + Z_i - 1)\ln(N_i + Z_i - 1) - N_i \ln N_i\right] + \lambda_1 \sum_i N_i + \lambda_2 \sum_i N_i E_i.$$

Приравнивая производную $\dfrac{\partial F}{\partial N_i}$ нулю, получаем

$$k\left[\ln(N_i + Z_i - 1) + (N_i + Z_i - 1)\frac{1}{N_i + Z_i - 1} - \ln N_i - N_i \frac{1}{N_i}\right] +$$
$$+ \lambda_1 + \lambda_2 E_i = 0.$$

Преобразуем это выражение к виду

$$\ln\frac{N_i+Z_i-1}{N_i}=-\frac{\lambda_2 E_i+\lambda_1}{k}.$$

Отсюда следует, что

$$\frac{N_i+Z_i-1}{N_i}=\exp\left(-\frac{\lambda_2 E_i-\lambda_1}{k}\right).$$

Разделим числитель и знаменатель левой части полученного равенства на Z_i:

$$\frac{\frac{N_i}{Z_i}+1-\frac{1}{Z_i}}{\frac{N_i}{Z_i}}=\frac{\langle n_i\rangle+1-\frac{1}{Z_i}}{\langle n_i\rangle}=\exp\left(-\frac{\lambda_2 E_i-\lambda_1}{k}\right).$$

Отношение $\frac{N_i}{Z_i}=\langle n_i\rangle$ представляет собой среднее число частиц, приходящихся на одну ячейку фазового пространства, т. е. на одно состояние в i-м энергетическом слое.

Поскольку $Z_i>>1$, то слагаемым $-\frac{1}{Z_i}$ в числителе можно пренебречь. Таким образом, получаем

$$\langle n_i\rangle=\frac{1}{\exp\left(-\frac{\lambda_2 E_i+\lambda_1}{k}\right)-1}.$$

Найдем теперь выражения для множителей Лагранжа λ_1 и λ_2. Множитель λ_2 можно отыскать следующим образом. Поскольку все частные производные функции F по N_i равны нулю, то это означает, что равен нулю и дифференциал этой функции dF, т. е.

$$dF=dS+\lambda_1 dN+\lambda_2 dE=0.$$

Но так как число частиц системы N постоянно, то $dN = 0$ и, следовательно,

$$dS = -\lambda_2 dE. \tag{6.36}$$

Предположим теперь, что рассматриваемая система получает в обратимом процессе некоторое количество теплоты δQ при неизменном объеме V. В результате этого энтропия системы увеличивается на $dS = \delta Q/T$. Поскольку $V = \text{const}$, то работа при получении теплоты не совершается и $\delta Q = dE$, следовательно,

$$dS = \frac{dE}{T}. \tag{6.37}$$

Сравнивая (6.36) и (6.37), находим, что $\lambda_2 = -\frac{1}{T}$.

Множитель λ_1 представим в виде

$$\lambda_1 = \frac{\mu}{T}, \tag{6.38}$$

где μ — некоторая функция параметров состояния системы, в частности температуры. Эту функцию называют химическим потенциалом. Понятие химического потенциала оказывается очень важным для анализа термодинамического равновесия систем: одним из условий равновесия является равенство химического потенциала для всех частей системы.

С учетом выражений для λ_1 и λ_2 находим, что

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) - 1}.$$

Освобождаясь от индекса i, окончательно получаем

$$\langle n \rangle_{\text{Б–Э}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) - 1}. \tag{6.39}$$

Выражение (6.39) называется *распределением Бозе — Эйнштейна*. Оно описывает распределение бозонов по энергиям и определяет среднее число бозонов $\langle n \rangle$, находящихся в квантовом состоянии с энергией E при температуре системы T. Величину $\langle n \rangle$ называют также числом заполнения энергетического уровня с энергией E.

Проанализируем следствия, вытекающие из вида распределения Бозе — Эйнштейна. Как следует из выражения (6.39), число бозонов, находящихся на одном энергетическом уровне (в одном состоянии), ничем не ограничено и при малых значениях параметра $(E-\mu)/(kT)$ может оказаться очень большим. Это важная отличительная особенность бозонов.

Отметим, что химический потенциал μ для систем бозе-частиц с постоянным числом частиц N может принимать только отрицательные значения, т. е. $\mu<0$. Действительно, если бы μ мог быть положительным, то при $E<\mu$ экспонента в знаменателе выражения (6.39) была бы меньше единицы

$$\exp\left(\frac{E-\mu}{kT}\right)<1$$

и соответствующие числа заполнения $\langle n \rangle$ стали бы отрицательными, что невозможно.

Рассмотрим случай малых чисел заполнения, т. е. будем считать, что $\langle n \rangle_{\text{Б–Э}} << 1$. Из выражения (6.39) следует, что это условие выполняется при $\exp\left[(E-\mu)/(kT)\right] >> 1$ или при $(E-\mu)/(kT) >> 1$. Пренебрегая единицей по сравнению с экспонентой в знаменателе выражения (6.39), получаем

$$\langle n \rangle_{\text{Б–Э}} \approx \exp\left(-\frac{E-\mu}{kT}\right) = A\exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \qquad (6.40)$$

где $A=\exp\left(\frac{\mu}{kT}\right)$. Отсюда следует, что при малых числах запол-

нения, или, как говорят, в случае *разреженного газа бозонов* (*бозе-газа*), распределение Бозе — Эйнштейна переходит в классическое распределение Максвелла — Больцмана.

Газ, свойства которого в силу неразличимости тождественных частиц в квантовой механике отличаются от свойств классического идеального газа, называется *вырожденным газом*. Поскольку распределение Бозе — Эйнштейна существенным образом отличается от распределения Максвелла — Больцмана, то газ бозонов является вырожденным газом. И только в случае $\langle n \rangle_{\text{Б–Э}} \ll 1$, как показывает проведенный анализ, вырождение снимается и разреженный бозе-газ ведет себя подобно классическому газу.

На рис. 6.4 приведены графики распределений Бозе — Эйнштейна и Максвелла — Больцмана. Как уже отмечалось, при $(E-\mu)/(kT) \gg 1$ эти распределения совпадают. Различие между распределениями обнаруживается при $(E-\mu)/(kT) < 1$. Именно в этом случае будут проявляться свойства бозе-газа, обусловленные квантовой природой его частиц.

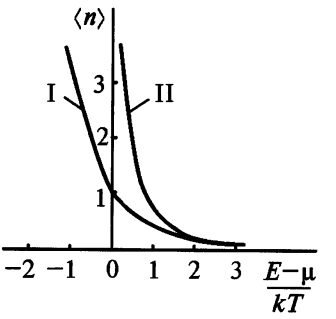


Рис. 6.4. Статистические распределения:
I — Максвелла — Больцмана;
II — Бозе — Эйнштейна

Число бозонов, находящихся на одном энергетическом уровне, может быть очень большим. Как известно, значительное скопление частиц на нижних энергетических уровнях имеет место и в классической статистике, однако для бозонов это скопление проявляется более ярко. Кроме того, при определенных условиях в системе бозе-частиц может происходить *бозе-конденсация* — скопление очень большого числа частиц в состоянии с энергией $E = 0$. Именно с бозе-конденсацией связаны такие явления, как сверхтекучесть и сверхпроводимость.

Распределение Бозе — Эйнштейна используется для описания свойств систем, состоящих из бозе-частиц как простых, например фотонов, фононов, так и более сложных, составных, например атомов ^{4}He, электронов, образующих куперовские пары, и т. д. С его помощью описываются свойства теплового излучения, теп-

лоемкость кристаллов и многие другие физические явления. Что же касается поведения обычных газов, атомы которых являются бозонами, то анализ показывает, что при нормальных температурах и давлениях эти газы не являются вырожденными и подчиняются классической статистике. Вырождение наступает либо при очень низких температурах, либо при очень высоких давлениях, т. е. при тех условиях, при которых газы перестают быть идеальными. Таким образом, для этих газов статистика Бозе — Эйнштейна в той области, в которой справедлива кинетическая теория газов, практически не отличается от классической статистики Максвелла — Больцмана.

Случай переменного числа частиц. При выводе распределения Бозе — Эйнштейна (6.39) мы полагали, что число частиц системы N остается постоянным. Найдем теперь распределение Бозе — Эйнштейна для системы с переменным числом частиц. Примером такой системы, в частности, является тепловое излучение внутри замкнутой полости. Стенки полости непрерывно поглощают и испускают излучение, поэтому число фотонов внутри полости постоянно меняется. Фотоны являются бозе-частицами и при не очень сильных (нелазерных) интенсивностях излучения не взаимодействуют друг с другом. Так что излучение в замкнутой полости представляет собой идеальный бозе-газ фотонов с переменным числом частиц.

Рассмотрим систему бозе-частиц с переменным числом частиц N. Будем решать задачу тем же самым методом, который был использован выше. Поскольку в данном случае

$$\sum_i N_i = N \neq \text{const},$$

то при нахождении условного экстремума энтропии S методом множителей Лагранжа вместо функции

$$F = S + \lambda_1 N + \lambda_2 E$$

следует взять функцию

$$F = S + \lambda_2 E. \tag{6.41}$$

Такой вид функции F объясняется тем, что из условий, накладываемых на аргументы функции S, исчезло условие постоянства числа частиц системы.

Из выражения (6.41) следует, что множитель Лагранжа $\lambda_1 = 0$. В силу того что химический потенциал μ и множитель λ_1 связаны соотношением $\mu = \lambda_1 T$, получаем $\mu = 0$. Таким образом, химический потенциал системы бозонов с переменным числом частиц равен нулю и распределение Бозе — Эйнштейна для систем с переменным числом частиц принимает вид

$$\langle n \rangle_{\text{Б–Э}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E}{kT}\right) - 1}. \tag{6.42}$$

Запишем это распределение для случая фотонного газа. Поскольку для фотонов $E = \hbar\omega$, то

$$< n_{\text{ф}} > = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}. \tag{6.43}$$

Задача 6.3. Пользуясь распределением Бозе — Эйнштейна, получите формулу Планка для равновесного теплового излучения.

Решение. Рассмотрим излучение, находящееся внутри замкнутой полости, стенки которой нагреты до некоторой температуры T. Как отмечалось выше, это излучение представляет собой идеальный газ фотонов. Распределение по энергиям частиц этого газа описывается выражением (6.43).

Найдем энергию излучения в узком энергетическом интервале от E до $E + dE$. Эта энергия складывается из энергий отдельных фотонов. Плотность квантовых состояний $g(E)$, т. е. число состояний, приходящихся на единичный энергетический интервал, для фотонов описывается выражением (6.30). Умножая $g(E)$ на dE, находим число квантовых состояний, заключенных внутри интервала dE. Умножая затем это число на среднее число фотонов $< n_{\text{ф}} >$ в данном состоянии и на энергию фотона E, получаем суммарную энергию фотонов в интервале dE, которая равна $< n_{\text{ф}} > g(E) E dE$.

Рассмотрим теперь частотный интервал, соответствующий данному энергетическому интервалу, т. е. интервал частот от $\omega = \frac{E}{\hbar}$ до

$\omega + d\omega = \frac{E}{\hbar} + \frac{dE}{\hbar}$. Получим выражение для той же самой энергии с помощью объемной спектральной плотности энергии излучения $u_{\omega,T}$. Напомним, что $u_{\omega,T}$ представляет собой энергию излучения в единичном частотном интервале, отнесенную к единице объема. Энергия фотонов в частотном интервале $d\omega$ равна $u_{\omega,T} V d\omega$, где V — объем полости. Приравнивая эти два выражения, получаем

$$u_{\omega,T}\, V d\omega = < n_{\phi} > g(E)\, E dE.$$

С учетом соотношений (6.30) и (6.43) приходим к формуле Планка

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

Отметим, что именно с этой формулы началось становление квантовой механики.

Задача 6.4. Найдите с помощью формулы Планка при T = 300 K: а) наиболее вероятную энергию фотонов $E_{в}$; б) среднюю энергию фотонов $\langle E \rangle$.

Решение. а. Найдем сначала функцию распределения фотонов по частотам n_{ω}. Эта функция определяет число фотонов в единичном интервале частот в единице объема. Число фотонов dn в единице объема, энергия которых лежит в интервале от E до $E + dE$, равно

$$dn = \frac{g(E)\ dE}{V} < n_{\phi} >.$$

С учетом соотношений (6.30), (6.43), принимая также во внимание, что $E = \hbar\omega$, получаем

$$dn = n_{\omega} d\omega = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} d\omega.$$

Таким образом, функция распределения фотонов по частотам имеет вид

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

Наиболее вероятная частота фотонов находится из условия $\frac{dn_\omega}{d\omega} = 0$. Дифференцируя n_ω по частоте, получаем уравнение

$$2 - x = 2e^{-x},$$

где $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$. Корнем этого уравнения является $x_0 = 1{,}6$. Таким образом, наиболее вероятная энергия фотонов при $T = 300$ K

$$E_в = \hbar\omega_в = 1{,}6kT = 0{,}042 \text{ эВ}.$$

б. Найдем теперь среднюю энергию фотонов $\langle E \rangle$. Пользуясь распределением фотонов по частотам n_ω, получаем выражение для средней частоты фотонов $\langle \omega \rangle$ в равновесном излучении при температуре T. По определению,

$$\langle \omega \rangle = \frac{\int_0^\infty \omega n_\omega d\omega}{\int_0^\infty n_\omega d\omega} = \frac{I_1}{I_2}.$$

Вычислим интегралы I_1 и I_2:

$$I_1 = \int_0^\infty \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3 d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} = \frac{1}{\pi^2 c^3} \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1},$$

где $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$.

Поскольку

$$\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15},$$

то получаем

$$I_1 = \frac{1}{\pi^2 c^3}\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \frac{\pi^4}{15}.$$

Интеграл I_2 имеет следующий вид:

$$I_2 = \frac{1}{\pi^2 c^3}\int_0^\infty \frac{\omega^2 d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)-1} = \frac{1}{\pi^2 c^3}\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^3 \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^x - 1}.$$

В силу того что

$$\int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = 2{,}405,$$

получаем

$$I_2 = \frac{1}{\pi^2 c^3}\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^3 \cdot 2{,}405.$$

Таким образом, средняя частота фотонов составляет

$$\langle\omega\rangle = \frac{I_1}{I_2} = \frac{1}{2{,}405}\,\frac{kT}{\hbar}\,\frac{\pi^4}{15} = 2{,}69\,\frac{kT}{\hbar}.$$

Отсюда находим среднее значение энергии фотонов

$$\langle E\rangle = \langle\hbar\omega\rangle = \hbar\langle\omega\rangle = 2{,}69\,kT.$$

С учетом численных значений величин, входящих в это выражение, получаем

$$\langle E\rangle = 0{,}069 \text{ эВ}.$$

■

6.4. Распределение Ферми — Дирака

Перейдем к анализу статистических свойств ферми-частиц, т. е. частиц, обладающих полуцелым спином. Напомним, что ферми-частицы подчиняются принципу Паули, согласно которому в одном и том же состоянии одновременно не может находиться более одной частицы. Таким образом, фермионы являются частицами-индивидуалистами. Рассмотрим идеальный ферми-газ, т. е. систему, состоящую из невзаимодействующих фермионов.

Как и в 6.3, решим сначала вспомогательную задачу: найдем число возможных распределений N шаров по Z ячейкам пенала при условии, что в каждой ячейке не может находиться более одного шара (рис. 6.5) . Темными кружками будем отмечать шары, находящиеся в ячейках, светлыми — отсутствие шара в ячейке. Число ячеек Z и число шаров N должны удовлетворять условию $Z \geq N$.

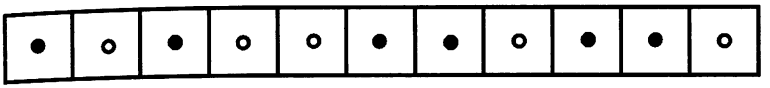


Рис. 6.5. Возможное распределение ферми-частиц по ячейкам

Число всевозможных перестановок черных и белых кружков по ячейкам пенала равно $Z!$. При этом перестановки только черных кружков в силу тождественности одинаковых частиц не приводят к новым распределениям. Число таких перестановок равно $N!$. Перестановки светлых кружков (пустых ячеек) тоже не дают новых распределений, их число равно $(Z-N)!$. Таким образом, число различных распределений N шаров по Z ячейкам в данном случае равно

$$\Omega = \frac{Z!}{N!(Z-N)!}. \tag{6.44}$$

Для иллюстрации полученного результата рассмотрим распределение двух шаров по четырем ячейкам (рис.6.6). Число таких распределений равно шести. Точно такой же ответ следует из (6.44)

$$\Omega = \frac{4!}{2!2!} = 6.$$

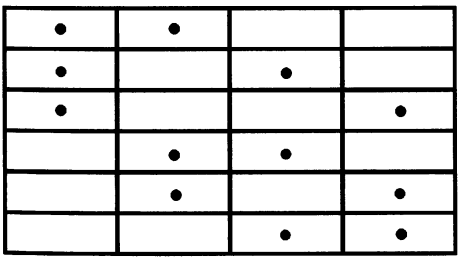


Рис. 6.6. Распределение двух ферми-частиц по четырем ячейкам

Поскольку фермионы, согласно принципу Паули, являются частицами-индивидуалистами, то выражение (6.44) определяет число возможных распределений N фермионов по Z ячейкам, т. е. статистический вес макросостояния системы фермионов.

Вывод статистического распределения, которому подчиняются ферми-частицы, проводится подобно тому, как это было сделано выше для бозе-частиц. Рассмотрим шестимерное фазовое пространство с координатами $x,\ y,\ z,\ p_x,\ p_y,\ p_z$. Разобьем его с помощью изоэнергетических поверхностей

$$f\left(x,\ y,\ z,\ p_x,\ p_y,\ p_z\right) = E_i = \text{const}$$

и

$$f\left(x,\ y,\ z,\ p_x,\ p_y,\ p_z\right) = E_{i+1} = \text{const}$$

на тонкие энергетические слои, так, что $\left|E_{i+1} - E_i\right| << E_i$. Пусть в пределы i-го слоя попадает Z_i ячеек (каждая объемом $\left(2\pi\hbar\right)^3$) и N_i частиц. Тогда, согласно (6.44), статистический вес подсистемы из N_i частиц

$$\Omega_i = \frac{Z_i!}{N_i!\left(Z_i - N_i\right)!}.$$

Статистический вес всей системы равен произведению статистических весов ее отдельных подсистем:

$$\Omega = \prod_i \Omega_i = \prod_i \frac{Z_i!}{N_i!\left(Z_i - N_i\right)!}. \qquad (6.45)$$

Для того чтобы найти наиболее вероятное распределение частиц по ячейкам, нужно определить максимум статистического веса (6.45) при условии, что полное число частиц системы N и полная энергия системы E остаются постоянными, т. е.

$$\sum_i N_i = N = \text{const} \quad \text{и} \quad \sum_i N_i E_i = E = \text{const}.$$

Как и в случае бозе-частиц, вместо максимума статистического веса Ω будем искать максимум энтропии $S = k \ln \Omega$. С учетом (6.45) для энтропии системы ферми-частиц получаем следующее выражение:

$$S = k \sum_i \left[\ln Z_i ! - \ln N_i ! - \ln (Z_i - N_i)! \right].$$

Воспользуемся формулой Стирлинга $\ln n! \approx n \ln n - n$, справедливой при $n >> 1$. Поскольку $Z_i >> 1$ и $N_i >> 1$, то

$$S = k \sum_i \left[Z_i \ln Z_i - Z_i - N_i \ln N_i + N_i - (Z_i - N_i) \times \right.$$
$$\left. \times \ln (Z_i - N_i) + (Z_i - N_i) \right],$$

или

$$S = -k \sum_i \left[N_i \ln N_i + (Z_i - N_i) \ln (Z_i - N_i) \right] + C', \qquad (6.46)$$

где $C' = k \sum_i Z_i \ln Z_i$. Слагаемое C' в (6.46) можно в дальнейшем не учитывать, поскольку при решении задачи на экстремум энтропии S варьироваться будут только числа частиц в слое N_i, а C' от них не зависит.

Для отыскания максимума энтропии (6.46) воспользуемся, как и в 6.3, методом множителей Лагранжа. Рассмотрим функцию

$$F = S + \lambda_1 N + \lambda_2 E =$$
$$= -k \sum_i \left[N_i \ln N_i + (Z_i - N_i) \ln (Z_i - N_i) \right] + \lambda_1 \sum_i N_i + \lambda_2 \sum_i N_i E_i,$$

где λ_1 и λ_2 — множители Лагранжа. Приравнивая нулю частные производные этой функции по N_i, получаем

$$\frac{\partial F}{\partial N_i} = -k \left[\ln N_i + N_i \frac{1}{N_i} - \ln (Z_i - N_i) - (Z_i - N_i) \frac{1}{Z_i - N_i} \right] + \lambda_1 +$$
$$+ \lambda_2 E_i = k \ln \frac{Z_i - N_i}{N_i} + \lambda_1 + \lambda_2 E_i = 0.$$

Отсюда следует, что

$$\ln\frac{Z_i - N_i}{N_i} = -\frac{\lambda_2 E_i + \lambda_1}{k},$$

или

$$\frac{Z_i - N_i}{N_i} = \frac{1 - \dfrac{N_i}{Z_i}}{\dfrac{N_i}{Z_i}} = \exp\left(-\frac{\lambda_2 E_i + \lambda_1}{k}\right).$$

Отношение $\dfrac{N_i}{Z_i}$ представляет собой среднее число фермичастиц $\langle n_i \rangle$, приходящихся на одну ячейку, т. е. на одно квантовое состояние. Наиболее вероятным значением $\langle n_i \rangle$, как следует из решения задачи на экстремум, является

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(-\dfrac{\lambda_2 E_i + \lambda_1}{k}\right) + 1}. \qquad (6.47)$$

Множители Лагранжа λ_1 и λ_2 находятся точно так же, как и в случае бозе-частиц. Используя тот же самый метод, что и в 6.3, определяем

$$\lambda_2 = -\frac{1}{T}.$$

Записывая λ_1 в виде $\lambda_1 = \dfrac{\mu}{T}$, где μ — химический потенциал, и подставляя λ_1 и λ_2 в (6.47), получаем

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\dfrac{E_i - \mu}{kT}\right) + 1}.$$

Освобождаясь от индекса i, приходим к окончательному выражению

$$\langle n\rangle_{\text{Ф–Д}} = \frac{1}{\exp\left(\dfrac{E-\mu}{kT}\right)+1}. \qquad (6.48)$$

Соотношение (6.48) называется *распределением Ферми — Дирака*. Оно определяет среднее число ферми-частиц, находящихся в квантовом состоянии с энергией E при температуре T.

Обсудим следствия, вытекающие из распределения Ферми — Дирака. Прежде всего отметим, что $\langle n\rangle_{\text{Ф–Д}}$ не может быть больше единицы, поскольку числитель выражения (6.48) равен единице, а в знаменателе к единице прибавляется положительная величина — экспонента. Это означает, что в одном квантовом состоянии не может находиться более одной ферми-частицы, что согласуется с принципом Паули. Поскольку $\langle n\rangle_{\text{Ф–Д}} \le 1$, то говорят, что распределение (6.48) определяет вероятность заполнения энергетического уровня с энергией E при температуре T.

Химический потенциал μ для ферми-частиц может быть только положительным, т. е. $\mu > 0$. Иначе при $T \to 0$ экспонента в знаменателе в (6.48) обратилась бы в бесконечность, а числа заполнения стали бы равными нулю, чего, естественно, быть не может. Напомним, что для бозе-частиц химический потенциал μ неположителен.

Рассмотрим случай малых чисел заполнения, т. е. будем считать, что

$$\langle n\rangle_{\text{Ф–Д}} = \frac{1}{\exp\left(\dfrac{E-\mu}{kT}\right)+1} << 1.$$

Это условие выполняется при $\exp\left(\dfrac{E-\mu}{kT}\right) >> 1$ или $\dfrac{E-\mu}{kT} >> 1$.

Пренебрегая единицей в знаменателе выражения (6.48), получаем

$$\langle n\rangle_{\text{Ф–Д}} \approx \exp\left(-\frac{E-\mu}{kT}\right) = A\exp\left(-\frac{E}{kT}\right),$$

где $A = \exp\left(\frac{\mu}{kT}\right)$. Таким образом, мы приходим к заключению, что распределение Ферми — Дирака при малых числах заполнения, или, как говорят, в случае *разреженного ферми-газа*, переходит в классическое распределение Максвелла — Больцмана. В 6.3 было показано, что в это же распределение в случае малых чисел заполнения переходит и распределение Бозе — Эйнштейна. Следовательно, можно сделать вывод, что разреженные квантовые газы (и в случае бозонов, и в случае фермионов) не являются вырожденными и подчиняются классической статистике. Подчеркнем, что, хотя квантовая статистика в данном случае приводит к тем же результатам, что и классическая, квантовая природа частиц газа остается неизменной.

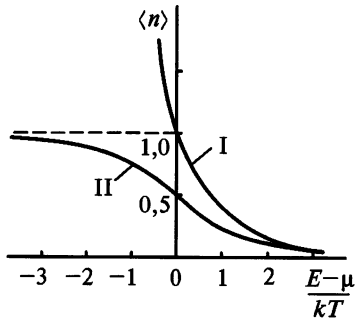


Рис. 6.7. Статистические распределения:
I — Максвелла — Больцмана;
II — Ферми — Дирака

На рис. 6.7 приведены графики распределений Ферми — Дирака и Максвелла — Больцмана. При $\frac{E-\mu}{kT} >> 1$ эти распределения, как уже отмечалось, совпадают. Кардинальное различие между ними наблюдается при $\frac{E-\mu}{kT} < 1$. Классические частицы могут накапливаться в одном и том же состоянии в большом количестве. Для них $\langle n \rangle$ тем больше, чем меньше их энергия E. Что же касается ферми-частиц, то максимальное их число в одном квантовом состоянии не может превышать единицу, что согласуется с принципом Паули.

Химический потенциал μ, который, как уже отмечалось, имеет размерность энергии, в случае ферми-частиц называют *энергией Ферми или уровнем Ферми* и обозначают E_F. При этом распределение Ферми — Дирака (6.48) принимает вид

$$\langle n \rangle_{\text{Ф–Д}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)+1}. \qquad (6.49)$$

Именно это выражение мы и будем использовать в дальнейшем изложении.

Отметим, что поскольку для фермионов $\mu > 0$, то E_F также больше нуля. Далее будет показано, что энергия Ферми E_F является медленно меняющейся функцией температуры T. Вид этой функции для электронного газа в металле рассмотрен в 6.5.

Чтобы выявить физический смысл энергии Ферми, проанализируем зависимость распределения Ферми — Дирака от энергии E. Начнем анализ со случая $T = 0$. Конечно, утверждение о том, что абсолютный нуль температур не достижим, остается в силе. Говоря о $T = 0$, будем считать, что температура T может быть сколь угодно близка к абсолютному нулю, т. е. $T \to 0$. Обозначим через $E_F(0)$ значение энергии Ферми при $T = 0$.

Из вида распределения (6.49) следует, что в случае $T = 0$

$$\langle n \rangle_{\text{Ф–Д}} = 1 \text{ при } E < E_F(0)$$

и

$$\langle n \rangle_{\text{Ф–Д}} = 0 \text{ при } E > E_F(0).$$

Это означает, что все квантовые состояния с энергиями $E < E_F(0)$ оказываются занятыми фермионами, а все состояния с энергиями $E > E_F(0)$ — свободными. Таким образом, при $T = 0$ энергия Ферми $E_F(0)$ является максимальной энергией, которой могут обладать ферми-частицы.

График зависимости $\langle n \rangle_{\text{Ф–Д}}$ от E при $T = 0$ приведен на рис. 6.8. Распределение Ферми — Дирака в этом случае представляет собой ступенчатую функцию единичной высоты обрывающуюся при $E = E_F(0)$.

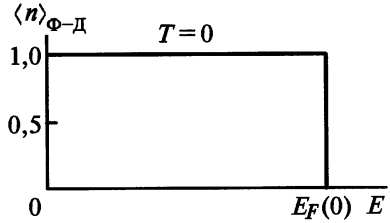


Рис. 6.8. Распределение Ферми — Дирака при $T = 0$

Вид зависимости $\langle n \rangle_{\text{Ф–Д}}$ от энергии частиц E при температу-

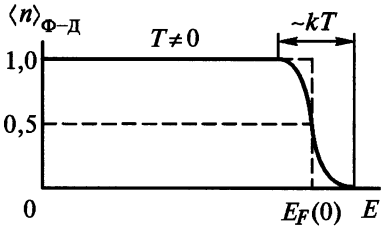


Рис. 6.9. Распределение Ферми — Дирака при $T \neq 0$

рах, отличных от нуля, приведен на рис. 6.9.

В этом случае резкий скачок $\langle n \rangle_{Ф-Д}$ от единицы до нуля становится более размытым и происходит в области энергий, ширина которой порядка kT. Чем выше температура, тем шире область, в которой $\langle n \rangle_{Ф-Д}$ меняется от единицы до нуля, и тем более плавно происходит переход от заполненных состояний к незаполненным. Отметим, что, как следует из (6.49), при любой температуре значение $\langle n \rangle_{Ф-Д}$ при $E = E_F$ равно $\frac{1}{2}$.

Наряду с энергией Ферми E_F при анализе поведения ферми-частиц вводятся также *импульс Ферми* p_F и *скорость Ферми* v_F, определяемые соотношениями

$$p_F = \sqrt{2m_0 E_F} \quad \text{и} \quad v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m_0}}. \tag{6.50}$$

При $T = 0$ это максимальные импульс и скорость, которыми может обладать ферми-частица.

6.5. Электронный газ в металлах

Применим статистику Ферми — Дирака к описанию поведения электронов проводимости в металлах. Будем пользоваться *моделью свободных электронов*, согласно которой часть атомных электронов может свободно перемещаться внутри проводника. Модель свободных электронов в металлах предполагает, что при образовании кристаллической решетки от атомов отщепляются некоторые слабее всего связанные с ними (валентные) электроны. Отщепленные электроны становятся общими для всех атомов и могут свободно перемещаться в кристалле. Именно эти электроны, в отличие от электронов, заполняющих внутренние электронные оболочки атомов, обеспечивают электропроводность металлов. Поэтому их называют электронами проводимости.

Следует отметить, что электроны проводимости в металлах, вообще говоря, не являются абсолютно свободными и испытывают взаимодействие с ионами, находящимися в узлах кристаллической решетки. Однако в первом приближении этим взаимодействием можно пренебречь. Справедливость такого подхода подтверждается, в частности, высокой проводимостью металлов, что может иметь место только в случае достаточно свободного движения электронов внутри проводника. Таким образом, мы будем рассматривать идеальный газ свободных электронов, для которых металлический образец является потенциальной ямой (см. 4.4).

Проанализируем поведение электронного газа при $T = 0$. В этом случае электроны располагаются на самых нижних доступных для них энергетических уровнях. Согласно принципу Паули, в каждом состоянии может находиться не более одного электрона, но так как электроны могут различаться проекцией спина $\left(\pm\frac{1}{2}\right)$, то на каждом энергетическом уровне будет находиться по два электрона с различной ориентацией спинов. Схематическое распределение электронов по энергетическим уровням показано на рис. 6.10. Отметим, что число этих уровней очень велико.

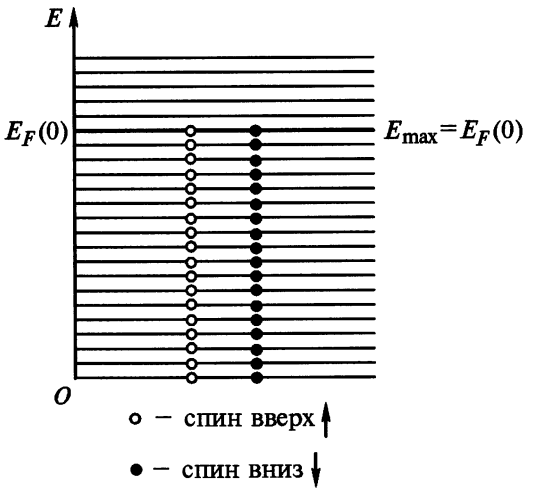


Рис. 6.10. Заполнение энергетических уровней электронами при $T = 0$

Два электрона заполняют самый нижний энергетический уровень. Третий и четвертый электроны находятся на первом возбужденном энергетическом уровне, следующая пара электронов — на втором возбужденном уровне и т. д. Если число электронов в металле равно N, то при $T=0$ будут заполнены первые $\frac{N}{2}$ уровней с энергией $E \le E_{\max}$. Все остальные уровни с энергией $E > E_{\max}$ будут свободны. Сравнивая полученный результат с распределением Ферми — Дирака при $T=0$, приходим к выводу, что максимальная энергия электронов $E_{\max}$ совпадает с энергией Ферми $E_F(0)$.

Следует отметить, что, хотя энергия электронов в металле квантуется и энергетический спектр электронов является дискретным (см. выражение (6.19)), энергетические уровни расположены настолько плотно, что энергетический спектр электронов можно считать практически непрерывным (квазинепрерывным). Численные оценки, подтверждающие справедливость такого подхода, выполнены в задаче 6.5.

Найдем функцию распределения электронов проводимости по энергиям. Плотность квантовых состояний электронов в металле, т. е. число состояний, приходящихся на единичный энергетический интервал, согласно (6.29), имеет вид

$$g(E) = \frac{\sqrt{2}\, m_0^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} V \sqrt{E}. \qquad (6.51)$$

Число состояний, приходящихся на интервал энергий от E до $E + dE$, получаем, умножая число квантовых состояний $g(E)$ на ширину энергетического интервала dE. Умножая затем это произведение на $\langle n \rangle_{\Phi-Д}$, т. е. на вероятность заполнения данного энергетического состояния, находим число электронов dN, энергия которых лежит в интервале от E до $E + dE$:

$$dN = g(E) \langle n \rangle_{\Phi-Д}\, dE. \qquad (6.52)$$

Интегрируя это выражение по энергии, получаем полное число свободных электронов в металле:

$$N = \int_0^{\infty} g(E)\langle n\rangle_{\Ф-Д}\, dE. \tag{6.53}$$

Выражения (6.52) и (6.53) удобно записывать не для полного числа электронов в металле N, а для концентрации электронов $n = \frac{N}{V}$. С учетом (6.51) получаем

$$dn = \frac{\sqrt{2}\, m_0^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}\, \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} dE \tag{6.54}$$

и

$$n = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{2} m_0^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}\, \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}\, dE. \tag{6.55}$$

Функция

$$F(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{\sqrt{2} m_0^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}\, \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}, \tag{6.56}$$

входящая в выражения (6.54) и (6.55), называется *функцией распределения свободных электронов по энергиям*. При $T = 0$ функция $F(E)$ имеет вид

$$F(E) = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{2} m_0^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}, & E < E_F(0), \\ 0, & E > E_F(0) \end{cases} \tag{6.57}$$

и распределение электронов по энергиям описывается выражением

$$dn = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{2}m_0^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E}dE, & E < E_F(0), \\ 0, & E > E_F(0). \end{cases} \tag{6.58}$$

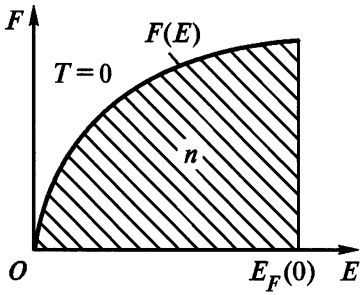


Рис. 6.11. Вид функции распределения $F(E)$ при $T = 0$

Зависимость функции рапределения (6.57) от энергии при $T = 0$ приведена на рис. 6.11. Из физического смысла функции распределения следует, что площадь под кривой $F(E)$ численно равна концентрации n свободных электронов в металле.

Отметим, что функции распределения играют в статистической физике очень важную роль. Так, например, если известна функция распределения частиц по энергиям $F(E)$, то в рассматриваемой системе можно найти среднее значение любой физической величины f, зависящей от E. Оно определяется следующим образом:

$$\langle f \rangle = \frac{\int_0^\infty f(E)F(E)dE}{\int_0^\infty F(E)dE} = \frac{1}{n}\int_0^\infty f(E)F(E)dE. \tag{6.59}$$

Получим выражение для энергии Ферми $E_F(0)$ при $T = 0$. Для этого воспользуемся соотношением (6.55). Поскольку при абсолютном нуле температуры $\langle n \rangle_{\text{Ф–Д}} = 1$ при $E < E_F(0)$ и $\langle n \rangle_{\text{Ф–Д}} = 0$ при $E > E_F(0)$, то верхний предел интеграла в (6.55) нужно заменить на $E_F(0)$. Интегрируя, получаем

$$n = \int_0^{E_F(0)} \frac{\sqrt{2}m_0^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E}dE = \frac{2}{3}\frac{\sqrt{2}m_0^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\left(E_F(0)\right)^{3/2}.$$

Отсюда находим $E_F(0)$:

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}. \qquad (6.60)$$

Это очень важное соотношение, которое позволяет, зная концентрацию электронов n, найти энергию Ферми $E_F(0)$, или, наоборот, по известной энергии Ферми найти концентрацию свободных электронов в металле.

Оценим значение энергии Ферми для свободных электронов в металле при $T = 0$. Пусть $n = 5\cdot10^{22}$ см$^{-3}$ = $5\cdot10^{28}$ м$^{-3}$, тогда

$$E_F(0) = \frac{\left(1{,}05\cdot10^{-34}\right)^2}{2\cdot0{,}91\cdot10^{-30}}\left(3\cdot3{,}14^2\cdot5\cdot10^{28}\right)^{\frac{2}{3}} = 8\cdot10^{-19}\ \text{Дж} = 5\ \text{эВ}.$$

Таким образом, в общем случае энергия Ферми электронного газа в металлах составляет несколько электрон-вольт.

Наряду с энергией Ферми вводится понятие *температуры Ферми* T_F, которая определяется следующим образом:

$$kT_F = E_F(0) \text{ или } T_F = \frac{E_F(0)}{k}. \qquad (6.61)$$

При значении $E_F(0)$ = 5 эВ температура Ферми составляет T_F = = 60 000 К, что более чем в 200 раз превышает комнатную температуру.

Значения энергии Ферми, рассчитанные с помощью соотношения (6.60) для различных металлов, приведены в табл. 6.1. Здесь же даны значения температуры Ферми T_F и скорости Ферми электронов v_F, найденные из соотношений (6.61) и (6.50).

Таблица 6.1

Металл	$E_F(0)$, эВ	T_F, К	v_F, 10^6 м/с
Li	4,72	55 000	1,31
Na	3,12	37 000	1,07
K	2,14	24 000	0,85
Rb	1,82	21 000	0,75
Cs	1,53	18 000	0,75
Cu	7,04	82 000	1,58
Ag	5,51	64 000	1,40
Au	5,51	64 000	1,40

Рассмотрим теперь случай ненулевых температур (см. рис. 6.9). Как уже отмечалось, ступенька в распределении, характерная для $T=0$, в этом случае размывается и переход от заполненных электронами уровней к незаполненным происходит более плавным образом. Схематическое распределение электронов по энергетическим уровням при $T>0$ показано на рис. 6.12.

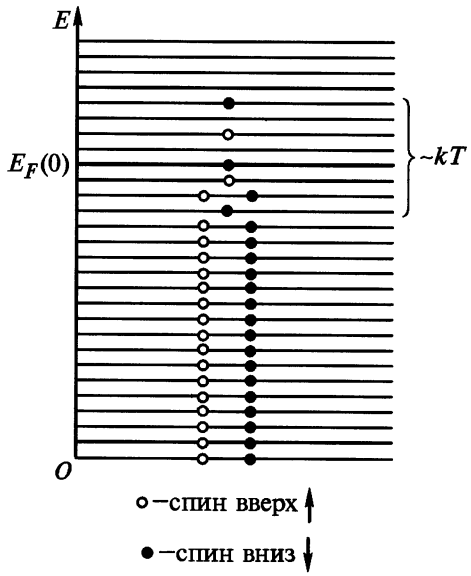


Рис. 6.12. Заполнение энергетических уровней электронами при $T \neq 0$

Все состояния, энергия которых меньше энергии Ферми на величину порядка kT, заняты электронами. Все состояния, энергия которых превосходит энергию Ферми на величину порядка kT, оказываются свободными. И только в области энергий шириной порядка kT вблизи энергии Ферми имеются уровни, частично заполненные электронами. Отметим, что, хотя ширина этой области, как правило, невелика по сравнению с энергией Ферми, эта область играет очень важную роль. Только электроны, заполняющие уровни в этой области, могут принимать участие в различных физических процессах, происходящих в металлах. Только их энергия может изменяться в ходе этих процессов.

Зависимость функции распределения $F(E)$ от энергии электронов при $T>0$ представлена на рис. 6.13. Поскольку, как и в случае $T=0$, площадь под кривой $F(E)$ численно равна концентрации n свободных электронов в металле, то площади участков S_1 и S_2 оказываются равными. Площадь каждого из этих участков определяет число электронов в единице объема металла, перешедших при нагреве образца с заполненных уровней на незаполненные.

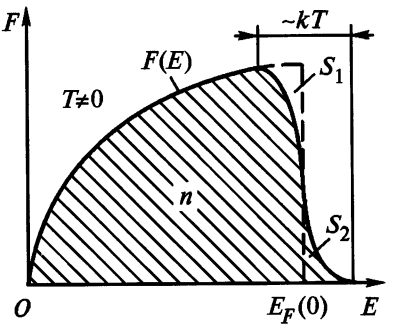


Рис. 6.13. Вид функции распределения $F(E)$ при $T \neq 0$

Получим выражение для энергии Ферми E_F при отличной от нуля температуре металла, используя соотношение (6.55):

$$n=\frac{\sqrt{2}m_0^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\int\limits_0^{\infty}\frac{\sqrt{E}\,dE}{\exp\left(\dfrac{E-E_F}{kT}\right)+1}. \qquad (6.62)$$

Это выражение позволяет в принципе найти энергию Ферми E_F как функцию температуры T и концентрации электронов n. Од-

нако в общем случае интеграл в (6.62) точно не берется. Приближенное значение интеграла удается получить при $kT \ll E_F$. В этом случае

$$E_F \approx E_F(0)\left[1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{E_F(0)}\right)^2\right]. \qquad (6.63)$$

Из приведенных выше оценок для $E_F(0)$ следует, что условие $kT \ll E_F(0)$ выполняется для всего диапазона температур, при котором металлы существуют в твердом виде. Это означает, что соотношение (6.63) справедливо для всех реализуемых на практике случаев. Более того, во многих ситуациях поправка к $E_F(0)$, определяемая выражением (6.63), оказывается ничтожно малой, так что ею можно пренебречь и считать, что $E_F \approx E_F(0)$. Действительно, если взять $E_F(0)=5$ эВ, то при комнатной температуре, т. е. при $kT=0{,}025$ эВ, относительная поправка к $E_F(0)$ в выражении (6.63) составляет

$$\frac{E_F-E_F(0)}{E_F(0)}=2\cdot10^{-5}=0{,}002\ \%.$$

Однако для понимания ряда физических явлений, таких, например, как изменение теплоемкости металлов при низких температурах или объяснение термоЭДС, зависимость E_F от T имеет принципиальное значение.

Выше мы рассмотрели распределение свободных электронов в металле по энергиям. Наряду с распределением по энергиям при анализе поведения электронов в металлах используются также *распределения электронов по импульсам* p *и по скоростям* v. Эти распределения получаются из (6.54) и (6.56) с учетом того, что $p=\sqrt{2m_0E}$, а $v=\sqrt{\frac{2E}{m_0}}$. Они имеют следующий вид:

$$dn_p = \frac{1}{\pi^2\hbar^3}\frac{p^2dp}{\exp\left(\dfrac{p^2/(2m_0)-E_F}{kT}\right)+1} = F(p)dp, \qquad (6.64)$$

$$dn_v = \frac{m_0{}^3}{\pi^2\hbar^3}\frac{v^2dv}{\exp\left(\dfrac{m_0v^2/2-E_F}{kT}\right)+1} = F(v)dv. \qquad (6.65)$$

В частности, они позволяют найти средний импульс $\langle p \rangle$ и среднюю скорость $\langle v \rangle$ свободных электронов в металле.

Вырожденный электронный газ. Проведенное рассмотрение относится главным образом к случаю вырожденного электронного газа, т. е. газа, свойства которого существенно отличаются от свойств классического идеального газа вследствие неразличимости одинаковых частиц в квантовой механике. Отметим, что газ, состоящий из квантовых частиц, оказывается вырожденным тогда, когда среднее расстояние между частицами $\langle a \rangle$ становится меньше или сравнимым с дебройлевской длиной волны частицы $\lambda_Б$, т. е. $\langle a \rangle \leq \lambda_Б$. Именно с этим связано то обстоятельство, что квантовые распределения Бозе — Эйнштейна и Ферми —Дирака в случае разреженных газов, когда это условие нарушается, переходят в классическое распределение Максвелла — Больцмана.

Поведение газа в существенной степени зависит от его температуры. *Температурой вырождения* называется температура, ниже которой проявляются квантовые свойства газа, обусловленные тождественностью его частиц. Для газа, состоящего из бозе-частиц, температура вырождения определяется как температура, ниже которой происходит бозе-конденсация, т. е. переход заметной доли частиц в состояние с энергией $E = 0$. Именно с бозе-конденсацией связаны такие интересные физические явления, как сверхтекучесть жидкого гелия, т. е. его способность протекать через тонкие щели и капилляры без какой-либо вязкости, и сверхпроводимость некоторых металлов и сплавов.

Для газа, состоящего из ферми-частиц, температурой вырождения является температура Ферми T_F, определяемая из соотношения (6.61). Как следует из (6.60) и (6.61), температура вырождения тем больше, чем меньше масса частиц и чем больше их концентрация, поэтому T_F особенно велика у электронного газа в металлах. Действительно, масса электрона очень мала $\left(m_0 = 0{,}91 \cdot 10^{-30}\text{кг}\right)$, а концентрация электронов в металлах достаточно велика $\left(10^{28}...10^{29}\ \text{м}^{-3}\right)$, что, согласно (6.60), приводит к значению температуры Ферми порядка 10^4 К (см. табл. 6.1). При температуре $T < T_F$, т. е. при $kT < E_F(0)$, электронный газ в металлах является вырожденным, а при температуре $T > T_F$, т. е. при $kT > E_F(0)$, — невырожденным. Поскольку температура Ферми для металлов имеет значение порядка 10^4 К, то электронный газ в металлах оказывается вырожденным при всех температурах, при которых металл остается в твердом состоянии.

В полупроводниках характер поведения электронного газа зависит от концентрации носителей заряда (электронов и дырок), которая обычно значительно меньше, чем концентрация электронов в металле. Для многих чистых беспримесных полупроводников электронный газ может оказаться невырожденным уже при температуре $T \geq 300$ К. Такой электронный газ следует рассматривать как классический газ, подчиняющийся статистике Максвелла — Больцмана.

В примесных полупроводниках при высокой концентрации донорной примеси электронный газ может оказаться вырожденным вплоть до температуры $T \sim 10^3$ К. Такие полупроводники называются *вырожденными полупроводниками*.

Для обычных газов, состоящих из атомов или молекул, являющихся ферми-частицами, температура вырождения близка к абсолютному нулю. Поэтому такие газы во всей области температур вплоть до температуры сжижения являются невырожденными и для описания их статистических свойств используется классическая статистика Максвелла — Больцмана.

Подводя итог описанию поведения электронного газа в металлах, остановимся на явлении сверхпроводимости. Сверхпроводимость была обнаружена в 1911 г. Х. Камерлинг-Оннесом в опытах по измерению сопротивления ртути при очень низких температурах. Она заключается в том, что при температуре T_c, называемой критической (для ртути $T_c = 4{,}15$ K), металл переходит в сверхпроводящее состояние, находясь в котором не оказывает никакого сопротивления движению потока электронов.

Таким образом, сверхпроводимость представляет собой сверхтекучесть электронного газа. Но электроны являются фермичастицами, а сверхтекучесть, как уже отмечалось в 6.1 и 6.3, может наблюдаться только в системе бозе-частиц. В 1957 г. Дж. Бардин, Л. Купер и Дж. Шриффер показали, что электроны, взаимодействуя через решетку кристалла, могут объединяться в так называемые куперовские пары. Суммарный спин такой пары равен нулю, а это означает, что куперовская пара является бозоном. Направленное сверхтекучее движение куперовских пар электронов и создает сверхпроводящий ток в металлах.

□ **Задача 6.5.** Вычислите интервал между соседними энергетическими уровнями свободных электронов в металле при $T = 0$ вблизи уровня Ферми. Считайте, что концентрация свободных электронов $n = 2 \cdot 10^{22}$ см$^{-3}$.

Решение. Воспользуемся выражением (6.58), переписав его в виде

$$\Delta n = \frac{\sqrt{2}\, m_0^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}\, \Delta E,$$

где Δn — изменение числа электронов при переходе на соседний энергетический уровень, а ΔE — разность значений энергий ближайших энергетических уровней. Поскольку, как уже отмечалось, на каждом уровне при $T = 0$ находится два электрона, то $\Delta n = 2$. Подставляя в приведенное соотношение выражение для энергии Ферми (6.60), получаем

$$\Delta E = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_0} \frac{1}{\left(3\pi^2 n\right)^{1/3}} \approx 2 \cdot 10^{-22} \text{ эВ}.$$

Это значение настолько мало, что обнаружить его практически невозможно. Поэтому энергетический спектр свободных электронов в металле можно считать непрерывным (квазинепрерывным). ■

□ **Задача 6.6.** До какой температуры нужно нагреть классический электронный газ, чтобы средняя энергия его электронов была равна средней энергии свободных электронов в серебре при $T = 0$ К? Энергия Ферми для серебра $E_F(0) = 5{,}51$ эВ.

Решение. Среднее значение энергии свободных электронов в металле определяется в соответствии с (6.59) как

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty EF(E)\,dE}{\int_0^\infty F(E)\,dE}.$$

При $T = 0$ функция распределения свободных электронов по энергиям $F(E)$ имеет вид (6.57), поэтому верхний предел интегрирования следует заменить на $E_F(0)$. Интегрируя, получаем

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^{E_F(0)} E^{3/2}\,dE}{\int_0^{E_F(0)} E^{1/2}\,dE} = \frac{3}{5}E_F(0).$$

Средняя энергия электронов в случае классического электронного газа

$$\langle E \rangle_{\text{кл}} = \frac{3}{2}kT.$$

Поскольку по условию задачи $\langle E \rangle = \langle E \rangle_{\text{кл}}$, то температура T, при которой выполняется это равенство,

$$T = \frac{2}{5}\frac{E_F(0)}{k}.$$

Подставляя в это выражение значение $E_F(0)$ для серебра, получаем $T = 2{,}55 \cdot 10^4$ К.

Отметим одно важное обстоятельство. При нагреве вырожденного электронного газа лишь очень незначительная часть электронов изменяет свою энергию. Это те электроны, энергия которых лежит в интервале $(E_F(0) - kT,\ E_F(0))$. Действительно, поскольку ▽ вплоть до температуры плавления металла выполняется условие

$kT << E_F(0)$, то доля электронов, изменяющих свою энергию при нагреве металла, оказывается ничтожно малой. Поэтому средняя энергия электронов при изменении температуры меняется столь незначительно, что этим изменением можно пренебречь и считать, что $\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F(0)$ и не зависит от температуры. Таким образом, из квантовой теории следует, что электронный газ в металле, в отличие от классического газа, для которого $\langle E \rangle_{кл} = \frac{3}{2} kT$, не обладает теплоемкостью. Этот результат согласуется с экспериментальными данными по теплоемкости твердых тел.

Задача 6.7. Сколько свободных электронов приходится на один атом калия, если энергия Ферми калия $E_F = 2{,}14$ эВ? Плотность калия $\rho = 862$ кг/м^3.

Решение. Энергия Ферми при не очень высоких температурах зависит от температуры слабо (см. соотношение (6.63)). Поскольку в широком диапазоне температур вплоть до температуры плавления калия выполняется условие $kT << E_F(0)$, то с достаточной точностью можно считать, что

$$E_F \approx E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(3\pi^2 n\right)^{\frac{2}{3}}.$$

Пусть на один атом калия приходится η свободных электронов, тогда концентрация свободных электронов n и концентрация атомов калия n_a связаны соотношением $n = \eta n_a$.

Найдем концентрацию атомов калия n_a. Относительная атомная масса калия $A_r = 39{,}1$, молярная масса $M = 0{,}001 \cdot A_r = 0{,}0391$ кг/моль. Число молей в единице объема вещества $\nu = \frac{\rho}{M}$, а количество частиц в одном моле равно постоянной Авогадро N_A. Следовательно, концентрация атомов калия $n_a = \frac{\rho}{M} N_A$, а концентрация свободных электронов $n = \eta \frac{\rho}{M} N_A$. Подставляя n в выражение для энергии Ферми, получаем

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left(3\pi^2\eta\frac{\rho}{M}N_A\right)^{\frac{2}{3}}.$$

Отсюда

$$\eta = \frac{M}{3\pi^2\rho N_A}\left(\frac{2m_0}{\hbar^2}E_F\right)^{\frac{3}{2}}.$$

С учетом численных значений входящих в это выражение величин находим, что на один атом калия приходится η = 1,07 свободных электронов. Это означает, что концентрация свободных электронов в металле может быть сравнима с концентрацией атомов.

Задача 6.8. Найдите среднюю скорость свободных электронов в металле при $T = 0$, если энергия Ферми для этого металла $E_F(0)$ = = 5,51 эВ.

Решение. При решении этой задачи можно использовать распределение электронов как по энергиям (6.56), так и по скоростям (6.65). Продемонстрируем оба метода решения.

Воспользуемся сначала распределением электронов по энергиям. Скорость свободных электронов в металле связана с их кинетической энергией соотношением

$$v(E) = \sqrt{\frac{2E}{m_0}} = \sqrt{\frac{2}{m_0}}\sqrt{E}.$$

Полагая в выражении (6.59) $f(E) = v(E)$, находим, что

$$\langle v\rangle = \frac{\int\limits_0^\infty \sqrt{\frac{2}{m_0}}\sqrt{E}F(E)dE}{\int\limits_0^\infty F(E)dE}.$$

При $T = 0$, заменяя верхний предел интегрирования на $E_F(0)$, получаем

$$\langle v\rangle = \sqrt{\frac{2}{m_0}}\frac{\int\limits_0^{E_F(0)}\sqrt{E}\sqrt{E}\,dE}{\int\limits_0^{E_F(0)}\sqrt{E}\,dE} = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{2E_F(0)}{m_0}} = \frac{3}{4}v_F,$$

▽ где v_F — скорость Ферми (максимальная скорость электронов в металле при $T = 0$). Подставляя численные значения, получаем $\langle v \rangle = 1{,}05 \cdot 10^6$ м/с.

Используем теперь распределение электронов по скоростям. В этом случае

$$\langle v \rangle = \frac{\int_0^\infty v F(v) dv}{\int_0^\infty F(v) dv},$$

где функция распределения $F(v)$ представлена выражением (6.65). При $T = 0$

$$F(v) = \begin{cases} \dfrac{m_0^3}{\pi^2 \hbar^3} v^2, & v < v_F \\ 0, & v > v_F \end{cases}.$$

Подставляя $F(v)$ в подынтегральные выражения и заменяя верхний предел интегрирования на v_F, получаем

$$\langle v \rangle = \frac{\int_0^{v_F} v v^2 dv}{\int_0^{v_F} v^2 dv} = \frac{3}{4} v_F.$$

■

□ **Задача 6.9.** Найдите коэффициент сжимаемости (коэффициент упругости) α электронного газа в меди при температуре $T = 0$ К.

Решение. Коэффициент сжимаемости, или упругости газа характеризует относительное изменение объема газа при изменении давления:

$$\alpha = -\frac{1}{V}\frac{dV}{dp} = -\frac{d(\ln V)}{dp},$$

где V — объем газа; p — давление. Поскольку число частиц газа N остается постоянным, то при сжатии газа его концентрация будет ▽ возрастать, причем

$$n = \frac{N}{V}, \quad \ln V = \ln N - \ln n,$$

где $\ln N = \text{const}$.

В соответствии с этим

$$\alpha = -\frac{d(\ln V)}{dp} = \frac{d(\ln n)}{dp}.$$

Из кинетической теории известно, что давление, которое оказывает газ на стенку, определяется средней энергией поступательного движения частиц этого газа $\langle E \rangle$

$$p = \frac{2}{3} n \langle E \rangle.$$

Для вырожденного электронного газа при $T = 0$ K (см. задачу 6.6)

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F(0),$$

или, с учетом (6.60),

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(3\pi^2 n\right)^{2/3}.$$

Поэтому зависимость давления электронного газа p от его концентрации n при $T = 0$ K имеет вид

$$p = \frac{2}{3} n \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(3\pi^2 n\right)^{2/3} = \frac{1}{5} \frac{\hbar^2}{m_0} \left(3\pi^2\right)^{2/3} n^{5/3}.$$

Отсюда

$$n = \left[5 \frac{m_0}{\hbar^2} \left(3\pi^2\right)^{-2/3} \right]^{3/5} p^{3/5} = A p^{3/5},$$

где $A = \text{const}$. Таким образом,

$$\ln n = \ln A + \frac{3}{5} \ln p.$$

▽ Подставляя это соотношение в выражение для коэффициента сжимаемости, получаем

$$\alpha = \frac{d(\ln n)}{dp} = \frac{3}{5}\frac{d(\ln p)}{dp} = \frac{3}{5}\frac{1}{p}.$$

Воспользовавшись найденной выше зависимостью p от n, придем к выражению

$$\alpha = \frac{3}{5}\left[\frac{1}{5}\frac{\hbar^2}{m_0}\left(3\pi^2\right)^{2/3} n^{5/3}\right]^{-1} = \frac{3m_0}{\hbar^2}\left(3\pi^2\right)^{-2/3} n^{-5/3}.$$

Коэффициент сжимаемости электронного газа можно также выразить через энергию Ферми $E_F(0)$. С учетом (6.60) получаем

$$\alpha = \frac{36\pi^2\hbar^3}{(8m_0)^{3/2}}\left(E_F(0)\right)^{-5/2}.$$

Взяв значение энергии Ферми для меди $E_F(0) = 7{,}04$ эВ = $= 1{,}13\cdot 10^{-18}$ Дж, получим численное значение коэффициента сжимаемости электронного газа в меди

$$\alpha = \frac{36(3{,}14)^2\left(1{,}05\cdot 10^{-35}\right)^3}{\left(8\cdot 9{,}1\cdot 10^{-31}\right)^{3/2}}\cdot\left(1{,}14\cdot 10^{-18}\right)^{-5/2} = 1{,}33\cdot 10^{-11}\ \text{Па}^{-1} =$$

$$= 1{,}38\cdot 10^{-6}\ \text{атм}^{-1}.$$

Отметим, что давление электронного газа является одним из основных факторов, определяющих сжимаемость металлов. ■

6.6. Эмиссия электронов из металла

Одним из наиболее важных практических приложений квантовой статистики Ферми — Дирака является изучение эмиссии электронов из металлов — физического явления, заключающегося в испускании электронов металлом. Эмиссия электронов может возникать при нагреве металлов (термоэлектронная эмиссия), при облучении металлов различными частицами, например фотонами (фо-

тоэлектронная эмиссия), при приложении к металлу сильных электрических полей (холодная, или автоэлектронная, эмиссия) и т. д. Фотоэлектронная эмиссия (внешний фотоэффект) подробно рассмотрена в 1.4. Здесь же основное внимание уделено термоэлектронной и холодной эмиссии электронов из металлов.

Работа выхода электронов из металла. Рассмотрим металл как систему заряженных частиц. Известно, что в металле имеются газ свободных электронов и положительно заряженные ионы, расположенные в узлах кристаллической решетки. Эти ионы создают внутри металла электрическое поле, потенциал которого φ периодически меняется вдоль прямой, проходящей через узлы решетки (рис. 6.14, *а*). Усредняя этот потенциал, будем считать, что всюду внутри металла он одинаков и равен φ_0 (внутренний потенциал металла). Таким образом, свободный электрон, находящийся в металле, обладает потенциальной энергией $-e\varphi_0$.

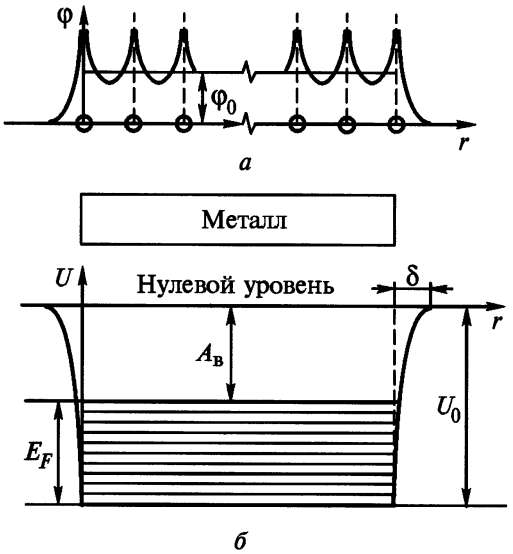


Рис. 6.14. Свободные электроны в металле:
а — внутренний потенциал φ; *б* — энергетические уровни электронов в металле при $T = 0$

При переходе электрона из металла в вакуум его потенциальная энергия U становится равной нулю. Это изменение потенциальной энергии с расстоянием r, хотя и носит достаточно резкий

характер, происходит не скачком, а на некотором расстоянии δ, сравнимом с постоянной решетки кристалла (рис. 6.14, *б*). Отметим, что мы здесь не принимаем во внимание вклад в потенциальную энергию, связанный с зеркальным изображением электрона, находящегося вблизи поверхности металла. Учет этого вклада проведен далее при рассмотрении эффекта Шоттки.

Таким образом, как уже отмечалось ранее, металл является для электрона потенциальной ямой. Чтобы извлечь электрон из металла, необходимо совершить работу выхода. Определим эту работу.

Если бы электроны в металле не обладали кинетической энергией, то для их освобождения потребовалось бы совершить работу, равную глубине потенциальной ямы U_0. Однако, как показано выше (см. 6.5), даже при абсолютном нуле температуры электроны обладают заметной кинетической энергией, заполняя все нижние энергетические уровни потенциальной ямы вплоть до уровня Ферми E_F. Поэтому работа, которую необходимо совершить для выхода электронов из металла, будет меньше, чем U_0. В связи с этим работа выхода электронов из металла $A_в$ определяется следующим образом:

$$A_в = U_0 - E_F. \tag{6.66}$$

При $T = 0$ это выражение характеризует наименьшую работу, которую нужно совершить, чтобы удалить из металла электроны, находящиеся на уровне Ферми.

Отметим, что при температуре металла, отличной от нуля, работа выхода как минимальная работа по извлечению электронов из металла в некотором смысле теряет свою определенность, поскольку при $T \neq 0$ тепловое возбуждение приводит к появлению в металле электронов с энергией $E > E_F$. Тем не менее и при $T \neq 0$ работу выхода определяют с помощью соотношения (6.66).

Работа выхода является важной характеристикой поверхности металла и зависит от ее состояния, в частности чистоты. Интересно отметить, что грани кристалла, образованные разными кристаллографическими плоскостями, могут иметь разное значение работы выхода. Так, для монокристалла вольфрама значение работы выхода для различных граней находится в пределах от 4,4 до 5,3 эВ.

Работу выхода можно существенно изменить, если на поверхность металла нанести тонкий слой атомов или молекул другого вещества. В частности, нанесение на поверхность вольфрама тонкого слоя атомов цезия позволяет снизить работу выхода с 4,50 до 1,36 эВ.

Термоэлектронная эмиссия. При повышении температуры металла кинетическая энергия теплового хаотического движения электронов увеличивается и может стать настолько большой, что некоторые из электронов смогут преодолевать потенциальный барьер на границе металла и выходить наружу. Чтобы проиллюстрировать сказанное, рассмотрим график функции распределения электронов по энергиям $F(E)$ (6.56) при двух значениях температуры металла (рис. 6.15, *а*) и энергетическую схему вольфрама (рис. 6.15, *б*), отсчитывая значения энергии электронов от дна потенциальной ямы.

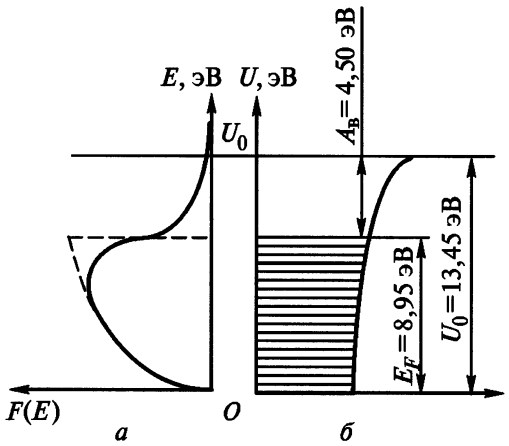


Рис. 6.15. К объяснению термоэлектронной эмиссии:
а — функция распределения $F(E)$ при $T_1 = 0$ (пунктирная линия) и при $T_2 \neq 0$ (сплошная линия); *б* — значения U_0, $E_F(0)$ и $A_в$ для вольфрама

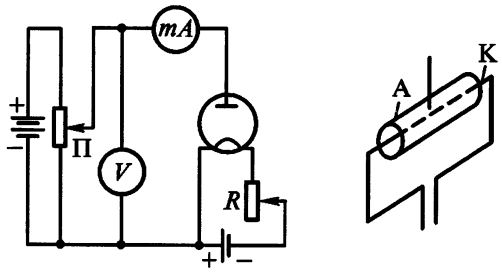
При $T_1 = 0$ свободные электроны не могут покинуть вольфрам, поскольку глубина потенциальной ямы $U_0 = 13{,}45$ эВ превышает максимальное значение их кинетической энергии, равное $E_F = 8{,}95$ эВ. При нагреве металла до температуры $T_2 \sim 1000$ K

"хвост" функции распределения $F(E)$ заходит за уровень U_0 (см. рис. 6.15, *а*). Это означает, что у некоторой части электронов кинетическая энергия превышает глубину потенциальной ямы, а именно такие электроны могут покидать металл.

Испускание электронов нагретыми телами в вакуум или другую среду называется *термоэлектронной эмиссией*. Это явление было открыто Т. Эдисоном в 1883 г.

Если металл поместить в электрическое поле, напряженность которого $\vec{\mathcal{E}}$ направлена к поверхности металла, то это поле будет отводить вышедшие электроны от металла. Таким образом, в вакууме вблизи поверхности металла будет создаваться направленное движение электронов, т. е. электрический ток, который называется термоэлектронным током.

Термоэлектронную эмиссию можно наблюдать с помощью вакуумного диода — двухэлектродной лампы, из которой откачан воздух (рис. 6.16, *а*). В этой лампе в качестве катода используется нить из тугоплавкого металла (вольфрам, молибден), которая накаливается электрическим током. Анод А, как правило, имеет форму металлического цилиндра, коаксиального с катодом К (рис. 6.16, *б*).



а *б*

Рис. 6.16. Схема установки для наблюдения термоэлектронной эмиссии с помощью вакуумного диода:

а — электрическая схема включения диода; *б* — качественный вид катода и анода

Напряжение, подаваемое на диод, измеряется вольтметром V. Значение напряжения можно менять с помощью потенциометра П. Температура катода зависит от силы тока накала, которая регулируется реостатом R. При холодном катоде электронам не хва-

тает энергии, чтобы покинуть катод, следовательно, ток через диод не течет. Если катод нагреть до "белого каления", то в цепи появляется термоэлектронный ток, регистрируемый миллиамперметром. Температура накала различна для разных катодов, ее рабочее значение 900...2900 К. При таких температурах электроны выходят с поверхности катода и ускоряются электрическим полем, создавая ток, текущий через диод. Если поменять полярность напряжения, подаваемого на диод, то движение тока через лампу прекратится. Это доказывает, что ток, проходящий через диод, обусловлен движением отрицательно заряженных частиц — электронов.

Проанализируем зависимость силы тока I, проходящего через диод, от подаваемого на него напряжения U при постоянной температуре накала катода (рис. 6.17). Эта зависимость называется вольт-амперной характеристикой диода. При нагретом катоде ток через диод может протекать даже при отрицательных значениях подаваемого напряжения. Это означает, что наиболее энергичные электроны, покинувшие катод, доходят до анода, несмотря на небольшое тормозящее электрическое поле.

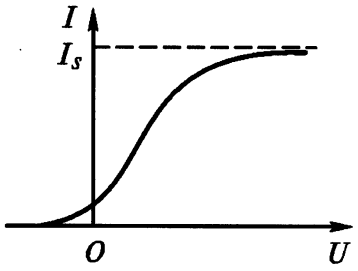


Рис. 6.17. Вольт-амперная характеристика вакуумного диода

При положительном значении напряжения U между анодом и катодом вылетающие электроны увлекаются электрическим полем к аноду, создавая текущий через диод ток. Сила тока в диоде возрастает с напряжением U, однако это возрастание не является линейным, так что закон Ома для вакуумного диода не выполняется. Начальный участок вольт-амперной характеристики достаточно хорошо описывается законом "трех вторых". Согласно этому закону, теоретически установленному И. Ленгмюром, сила тока I изменяется пропорционально $U^{3/2}$. Такой характер зависимости $I(U)$ обусловлен влиянием на движение электронов в лампе отрицательного пространственного заряда, формируемого электронами, не достигшими анода.

При дальнейшем увеличении U все бóльшая часть вылетевших с поверхности катода электронов будет увлекаться к аноду.

Наконец, начиная с некоторого напряжения, все испущенные катодом электроны будут попадать на анод. В этом случае термоэлектронный ток в диоде достигает своего максимального значения I_s, называемого током насыщения. Плотность этого тока j_s характеризует эмиссионные свойства катода: максимальное число электронов, которое может испустить катод с единицы площади в единицу времени при данной температуре.

Теория термоэлектронной эмиссии. Найдем плотность термоэлектронного тока, считая, что в металле имеется идеальный газ свободных электронов, подчиняющийся статистике Ферми — Дирака. Как следует из соотношения (6.25), число квантовых состояний dG_p в единице объема металла, для которых проекции импульсов электронов заключены в интервалах $\left(p_x,\ p_x + dp_x\right)$, $\left(p_y,\ p_y + dp_y\right)$, $\left(p_z,\ p_z + dp_z\right)$, т. е. импульсы которых находятся внутри элемента объема пространства импульсов $dV_p = dp_x dp_y dp_z$, равно

$$dG_p = \frac{2}{\left(2\pi\hbar\right)^3} dp_x dp_y dp_z.$$

Средняя концентрация электронов dn, обладающих такими импульсами, определяется произведением числа состояний dG_p и вероятности заполнения этих состояний, т. е. $\langle n \rangle_{\text{Ф–Д}}$:

$$dn = dG_p \langle n \rangle_{\text{Ф–Д}} = \frac{2}{\left(2\pi\hbar\right)^3} \frac{dp_x dp_y dp_z}{\exp\left(\dfrac{E - E_F}{kT}\right) + 1}. \qquad (6.67)$$

Для того чтобы электрон, движущийся к поверхности, вышел из металла, его кинетическая энергия должна превышать минимальное значение, равное $E_{\min} = E_F + A_{\text{в}}$. Только такие электроны могут покидать металл и давать вклад в термоэлектронный ток.

Вообще говоря, выход электронов из металла при термоэлектронной эмиссии несколько нарушает равновесное распределение

электронов по импульсам, однако здесь мы это обстоятельство учитывать не будем, полагая, что из металла выходит очень малая часть всех свободных электронов. Для выполнения этого условия, согласно (6.67), необходимо, чтобы $E - E_F >> kT$, т. е. $A_в >> kT$. При этом единицей в знаменателе в (6.67) по сравнению с экспонентой можно пренебречь. С учетом того, что энергия электронов $E = \left(p_x{}^2 + p_y{}^2 + p_z{}^2\right)\Big/\left(2m_0\right)$, получаем

$$dn = \frac{2}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\exp\left(\frac{E_F}{kT}\right)\exp\left[-\frac{\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)}{2m_0kT}\right]dp_x d_y dp_z.$$

Найдем теперь концентрацию электронов dn_z, у которых проекция импульса на ось z заключена между p_z и $p_z + dp_z$. Для этого проинтегрируем dn по p_x и p_y в пределах от $-\infty$ до $+\infty$:

$$dn_z = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dp_x \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dp_y \frac{2}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\exp\left(\frac{E_F}{kT}\right)\exp\left[-\frac{\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)}{2m_0kT}\right]dp_z.$$

Интегрирование по p_x дает

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{p_x^2}{2m_0kT}\right)dp_x = \sqrt{2m_0kT}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{p_x^2}{2m_0kT}\right)d\left(\frac{p_x}{\sqrt{2m_0kT}}\right) =$$

$$= \sqrt{2m_0kT}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-u^2\right)du = \sqrt{2m_0\pi kT},$$

поскольку интеграл $I = \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-u^2\right)du = \sqrt{\pi}$. Аналогичный результат получаем при интегрировании по p_y. Таким образом, при-

ходим к следующему выражению для dn_z:

$$dn_z = \frac{4}{(2\pi\hbar)^3}\pi m_0 kT \exp\left[-\frac{p_z^2/(2m_0) - E_F}{kT}\right] dp_z.$$

Выделим на плоской поверхности металла площадку единичной площади (рис. 6.18) и найдем число электронов, которое проходит через нее в единицу времени в направлении оси z, перпендикулярной поверхности металла. Для электронов, проекции импульсов которых на ось z лежат в интервале $(p_z,\ p_z + dp_z)$, это число равно

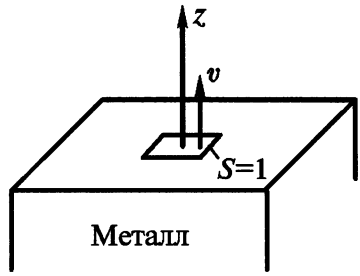


Рис. 6.18. К расчету плотности тока термоэлектронной эмиссии

$$dN_z = v_z dn_z = \frac{p_z}{m_0} dn_z,$$

где v_z — проекция скорости электронов на ось z. Для полного числа электронов N_z получаем

$$N_z = \int dN_z.$$

Здесь при интегрировании учитываются только те электроны, кинетическая энергия которых достаточна для того, чтобы выйти из металла, т. е. для которых $\frac{p_z^2}{2m_0} \geq E_F + A_в$. Таким образом,

$$N_z = \frac{1}{m_0}\frac{4}{(2\pi\hbar)^3}\pi m_0 kT \int\limits_{\sqrt{2m_0(E_F + A_в)}}^{\infty} p_z \exp\left[-\frac{p_z^2/(2m_0) - E_F}{kT}\right] dp_z.$$

Введем теперь новую переменную интегрирования $\xi = \dfrac{p_z^2/(2m_0) - E_F}{kT}$, тогда

$$N_z = \frac{4\pi m_0}{(2\pi\hbar)^3}(kT)^2 \int\limits_{A_в/(kT)}^{\infty} \exp\left(-\xi^2\right) d\xi = \frac{4\pi m_0}{(2\pi\hbar)^3}(kT)^2 \exp\left(-\frac{A_в}{kT}\right).$$

Умножая N_z на заряд электрона e, получаем выражение для плотности термоэлектронного тока насыщения

$$j_S = AT^2 \exp\left(-\frac{A_в}{kT}\right), \qquad (6.68)$$

где $A = 4\pi e m_0 k^2/(2\pi\hbar)^3$ — константа, численное значение которой составляет $1{,}20 \cdot 10^6$ А/(м$^2 \cdot$ К^2). Важно отметить, что значение константы A, полученное в теории, не зависит от работы выхода и одинаково для всех металлов, что связано с использованием в расчетах модели идеального газа свободных электронов.

Выражение (6.68) получило название *формулы Ричардсона—Дэшмана.* Зависимость плотности тока насыщения термоэлектронной эмиссии от температуры катода впервые установил О. Ричардсон, используя для электронного газа в металле классическую статистику, а С. Дэшман, исходя из квантовых представлений, получил формулу (6.68) и показал, что константа A является универсальной величиной.

Согласно выражению (6.68), плотность термоэлектронного тока насыщения j_s очень сильно (экспоненциально) зависит от работы выхода $A_в$ и температуры металла T. Так, повышение температуры вольфрамового катода от $T_1 = 1000$ К до $T_2 = 2500$ К увеличивает плотность тока эмиссии практически от нуля до 3000 А/м^2, а покрытие поверхности вольфрама мономолекулярным слоем оксида тория ThO_2, уменьшающее работу выхода, дает возможность при температуре 1900 К получать плотность тока термоэлектронной эмиссии $j_s = 10\,000$ А/м^2. Поэтому в настоящее время

катоды из чистых металлов практически не используются. При изготовлении электронных ламп проводится специальная обработка катодов, позволяющая существенно снизить работу выхода.

Отметим, что при выводе формулы Ричардсона — Дэшмана (6.68) не было учтено следующее обстоятельство. Не все электроны, энергия которых превышает высоту потенциального порога на границе металл — вакуум $E_F + A_в$, смогут выйти из металла. В соответствии с законами квантовой механики часть из них испытает надбарьерное отражение (см. 4.3). Это отражение можно учесть, введя усредненный по энергиям электронов коэффициент отражения $\overline{R}$ и умножая правую часть выражения (6.68) на множитель $(1-\overline{R})$.

Эффект Шоттки. Выясним, какие силы действуют на вылетевший из металла термоэлектрон и как они зависят от расстояния x от электрона до поверхности металла. Будем считать, что это расстояние значительно превышает период решетки, а также предполагать, что поверхность металла является плоской и непрерывной (рис. 6.19, *а*).

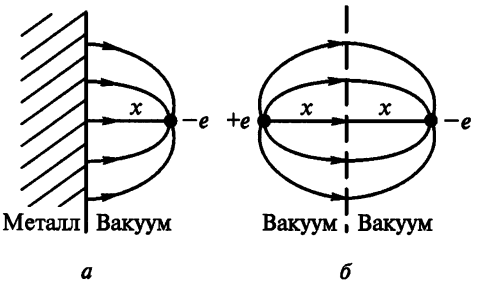


Рис. 6.19. Силовые линии электрического поля, действующего на электрон вблизи поверхности металла:

а — поле системы электрон — металл; *б* — поле, создаваемое электроном и его зеркальным изображением

Воспользуемся известным в электростатике методом зеркальных изображений. Согласно этому методу, сила зеркального изображения $F_{из}$, которая действует на электрон со стороны проводящей поверхности, отстоящей от него на расстояние x, будет такой же, как между зарядами $-e$ и $+e$, расположенными на расстоянии $2x$ друг от друга (рис. 6.19, *б*):

$$F_{из} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{(2x)^2} = \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 x^2}.$$

Потенциальная энергия электрона в таком силовом поле

$$U_{из} = -\frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 x}. \qquad (6.69)$$

Приложим теперь к поверхности металла внешнее электрическое поле, вектор напряженности которого $\vec{\mathcal{E}}$ направлен перпендикулярно поверхности металла так, чтобы способствовать выходу электронов из металла. В этом случае на электрон со стороны поля действует сила $\vec{F}_{эл} = -e\vec{\mathcal{E}}$, а его потенциальную энергию в электрическом поле можно представить в виде $U_{эл} = U_0 - e\mathcal{E}x$. Таким образом, суммарную потенциальную энергию электрона, находящегося вблизи поверхности металла, помещенного в электрическое поле, можно представить как

$$U = U_{из} + U_{эл} = U_0 - \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 x} - e\mathcal{E}x. \qquad (6.70)$$

Качественный вид зависимостей потенциальных энергий, описываемых выражениями (6.69) и (6.70), от расстояния x приведен на рис. 6.20 *а*, *б*.

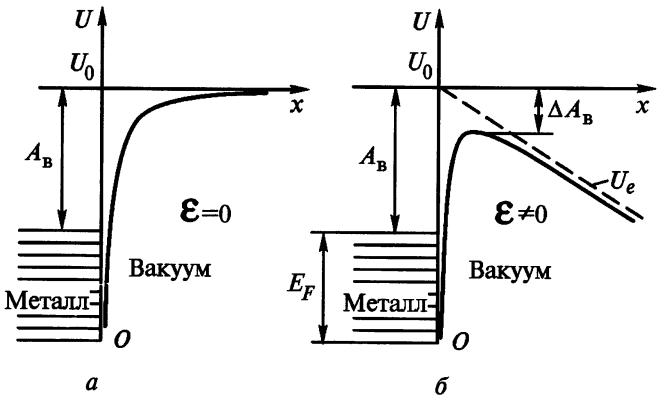


Рис. 6.20. Потенциальная энергия электрона вблизи металла: *а* — без внешнего электрического поля; *б* — во внешнем электрическом поле $\vec{\mathcal{E}}$

Проведенный анализ показывает, что во внешнем электрическом поле работа выхода электрона из металла уменьшается на величину $\Delta A_в$ (см. рис. 6.20, *б*). Это уменьшение приводит к тому, что большее число электронов преодолевает потенциальный барьер на границе металл — вакуум, что, в свою очередь, ведет к увеличению силы тока электронной эмиссии. Возрастание тока термоэлектронной эмиссии во внешнем электрическом поле получило название эффекта Шоттки по имени немецкого физика В. Шоттки, открывшего это явление.

Для вычисления $\Delta A_в$ найдем сначала положение x_0 максимума потенциальной энергии (6.70). Из уравнения $dU/dx = 0$ получим

$$\frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 x_0^2} - e\mathcal{E} = 0,$$

откуда следует, что

$$x_0 = \left(\frac{e}{16\pi\varepsilon_0\mathcal{E}}\right)^{1/2}.$$

Поскольку уменьшение работы выхода $\Delta A_в$ равно значению U в максимуме (см. рис. 6.20, *б*), то подставляя x_0 в (6.70), найдем:

$$\Delta A_в = U_0 - U(x_0) = \frac{e^{3/2}\mathcal{E}^{1/2}}{(4\pi\varepsilon_0)^{1/2}}.$$

С учетом эффекта Шоттки выражение для плотности тока термоэлектронной эмиссии (6.68) примет вид

$$\begin{aligned} j_S &= AT^2 \exp\left[-\frac{A_в - \Delta A_в}{kT}\right] = \\ &= AT^2 \exp\left[\frac{e^{3/2}\mathcal{E}^{1/2}}{(4\pi\varepsilon_0)^{1/2} kT}\right] \exp\left(-\frac{A_в}{kT}\right). \end{aligned} \tag{6.71}$$

Полученный результат свидетельствует о возрастании термоэлектронного тока во внешнем электрическом поле.

Из соотношения (6.71) следует, что при постоянной температуре металла $\ln j_s \sim \varepsilon^{1/2}$. Экспериментальные исследования этой зависимости находятся в хорошем согласии с результатами теоретического рассмотрения и, кроме того, позволяют найти внутренний потенциал φ_0 и экспериментальное значение константы A в выражении (6.68) для различных металлов.

Холодная эмиссия электронов из металла. Внешнее электрическое поле, приложенное к металлу, может не только уменьшать работу выхода электрона из металла, но и, уменьшая толщину потенциального барьера вблизи поверхности металла, способствовать испусканию электронов металлом за счет туннельного эффекта (см. 4.3). Это явление, получившее название холодной (автоэлектронной, или полевой) эмиссии, впервые наблюдалось Р.У. Вудом в 1897 г.

Пусть вблизи поверхности металла имеется электрическое поле напряженностью $\vec{\varepsilon}$, способствующее выходу электронов из металла. Потенциальная энергия электрона в таком поле описывается выражением (6.70), а потенциальный барьер на границе металл — вакуум имеет вид, представленный на рис. 6.20, *б*. Туннелирование электронов через такой барьер и объясняет явление холодной эмиссии — выход электронов из металла при низких температурах.

В рамках классической физики явление холодной эмиссии не находит объяснения. Действительно, поскольку электрическое поле в металл не проникает, то оно может изменить потенциальную энергию электронов лишь вне металла. А это приводит к возникновению потенциального барьера, преодолеть который, согласно представлениям классической физики, электрон не может.

В квантовой механике вероятность туннелирования электрона из металла определяется коэффициентом прохождения D через потенциальный барьер (6.70)

$$D = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_0^{x_0}\sqrt{2m_e\left[U(x)-E\right]}\,dx\right\}.$$

Отметим, что вклад в потенциальную энергию электрона, связанный с силой зеркального изображения (6.69), не оказывает существенного влияния на коэффициент прохождения D, но заметно усложняет вычисления. Поэтому при анализе холодной эмиссии

мы этот вклад учитывать не будем, считая, что потенциальная энергия электронов, отсчитываемая от дна потенциальной ямы в металле, описывается выражением

$$U(x) = U_0 - e\mathcal{E}x = \\ = E_F + A_в - e\mathcal{E}x, \qquad (6.72)$$

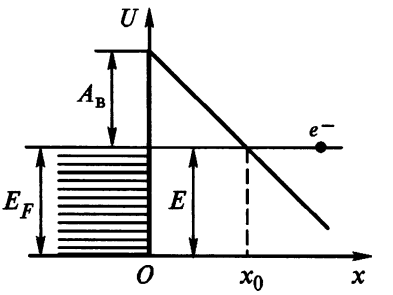


Рис. 6.21. Туннелирование электронов из металла при холодной эмиссии

т. е. будем рассматривать туннелирование электронов через треугольный потенциальный барьер (рис. 6.21).

Коэффициент прозрачности такого барьера

$$D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_0^{x_0}\sqrt{2m_0\left(E_F + A_в - e\mathcal{E}x - E\right)}\,dx\right],$$

где верхний предел интегрирования x_0 определяется из условия $U(x_0) = E$. Интегрируя, получаем

$$D(E) = \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m_0}}{3e\hbar}\frac{\left(E_F + A_в - E\right)^{3/2}}{\mathcal{E}}\right].$$

Введем обозначение

$$\mathcal{E}_0 = \frac{4\sqrt{2m_0}}{3e\hbar}\left(A_в + E_F - E\right)^{3/2},$$

где величина $\mathcal{E}_0$ имеет смысл напряженности эффективного электрического поля. Тогда коэффициент прохождения электронов через барьер принимает вид

$$D = \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right).$$

Отметим, что туннелировать через потенциальный барьер будут в основном электроны, энергия которых близка к энергии Ферми E_F. Это объясняется тем, что число электронов в металле, энергия которых E заметно превышает энергию Ферми E_F, весьма мало́, а вероятность туннелирования электронов с энергией, меньшей энергии Ферми, существенно уменьшается из-за увеличения ширины потенциального барьера. Действительно, как следует из эксперимента, энергетический спектр электронов, покинувших металл в результате холодной эмиссии, является достаточно узким. При не очень высоких температурах его ширина составляет примерно 0,1 эВ.

Плотность тока холодной эмиссии j пропорциональна коэффициенту прохождения D через барьер. Следовательно, плотность тока как функция напряженности электрического поля ε имеет следующий вид:

$$j = j_0 \exp\left(-\frac{\overline{\varepsilon}_0}{\varepsilon}\right), \qquad (6.73)$$

где $\overline{\varepsilon}_0$ — усредненное по энергиям электронов значение ε_0. Для большинства металлов $\overline{\varepsilon}_0 \sim 10^8 ... 10^9$ В/м . Это означает, что значительная сила тока холодной эмиссии может быть достигнута при приложении к металлу электрического поля, напряженность которого $\varepsilon \sim \varepsilon_0 \sim 10^8$ В/м. В частности, американский физик Р.Э. Милликен, подтвердивший в 1929 г. зависимость (6.73) на эксперименте, получал достаточно сильные токи холодной эмиссии уже при $\varepsilon \approx 4 \cdot 10^8$ В/м.

Холодная эмиссия электронов находит широкое применение при изучении физических свойств поверхностей, адсорбции газов, явлений катализа и коррозии. Эмиттеры с холодной эмиссией (автоэлектронные эмиттеры) используются в технике, особенно в тех случаях, когда необходимо получить высокую плотность тока j. В частности, такие эмиттеры применяются в качестве интенсивных точечных источников электронов, например в электронной микроскопии.Чтобы создать большую напряженность электрического поля ε вблизи поверхности металла, автоэлектронные

эмиттеры делают в виде поверхностей с малым радиусом кривизны: в виде острия, лезвия, торца нити и т. д.

На рис. 6.22 приведена электронная микрофотография эмиттера, полученного советскими учеными из Объединенного института ядерных исследований (г. Дубна). Плотность остриев эмиттера порядка 10^7 на квадратный сантиметр. По форме они представляют собой конусы высотой 6,6 мкм с диаметром основания 1,5 мкм. Средний радиус кривизны вершины конусов составляет 0,1 мкм, угол раствора конуса 12°.

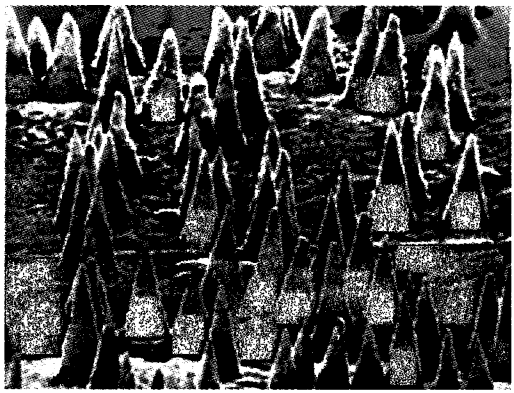


Рис. 6.22. Электронный эмиттер с коническими остриями

Автоэлектронная эмиссия наблюдается также в графите и графитоподобных материалах. Лучшие параметры автоэлектронной эмиссии достигаются в графитовых пленках, получаемых методом химического осаждения из газовой фазы. Так, например, для пленки из пластинчатых кристаллитов графита с плотностью эмитирующих центров порядка 10^6 см$^{-2}$ пороговая напряженность электрического поля, при которой возникает холодная эмиссия, составляет $1{,}5 \cdot 10^6$ В/м.

Важным достоинством эмиттеров с холодной эмиссией является то, что они не требуют энергетических затрат на подогрев, а также их безынерционность. Однако в ряде случаев холодная эмиссия может играть и негативную роль, способствуя утечкам тока и развитию вакуумного пробоя. Для снижения влияния хо-

лодной эмиссии в таких ситуациях необходимо уменьшить поле $\mathcal{E}$ у поверхности проводника или повысить работу выхода $A_в$, подбирая соответствующие материалы или покрытия.

6.7. Многоэлектронные атомы

Выше в качестве системы ферми-частиц была рассмотрена система свободных электронов в металле. Еще одним примером системы фермионов являются электроны многоэлектронного атома. Пусть заряд атомного ядра равен Ze, тогда в таком атоме вблизи ядра находится $N = Z$ электронов. Чтобы описать состояния этих электронов, нужно решить уравнение Шредингера для волновой функции системы N электронов с гамильтонианом $\hat{H}$ (6.1), учитывающим кулоновское взаимодействие электронов как с заряженным ядром, так и друг с другом. Решение такого уравнения для многоэлектронных атомов связано со значительными математическими трудностями, преодолеть которые в ряде случаев не удается даже с применением ЭВМ.

Метод Хартри — Фока. В квантовой механике были разработаны специальные методы нахождения приближенного решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Один из них, предложенный английским физиком Д. Хартри и развитый в дальнейшем советским физиком В.А. Фоком, получил название метода Хартри — Фока, или метода самосогласованного поля. В этом методе состояние каждого электрона в атоме описывается волновой функцией $\Psi_{n_i}(\vec{r})$, где n_i — набор четырех квантовых чисел n, l, m и m_s, а волновая функция всей системы атомных электронов представляется в виде произведения

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) = \Psi_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)...\Psi_{n_N}(\vec{r}_N). \qquad (6.74)$$

В нулевом приближении волновые функции $\Psi_{n_i}(\vec{r}_i)$ берутся из набора волновых функций водородоподобного атома, т. е. считается, что на движение отдельного электрона другие электроны не оказывают никакого влияния. Затем по этим волновым функци-

ям определяют энергию электрического взаимодействия каждого электрона со всеми остальными электронами атома. Эта энергия описывается выражением

$$U_i = \sum_{k \neq i} e^2 \int_{\mathfrak{R}^3} \frac{\left|\Psi_{n_k}(\vec{r}_k)\right|^2}{\left|\vec{r}_i - \vec{r}_k\right|} dV_k. \qquad (6.75)$$

Полученные значения энергии взаимодействия (6.75) вводят в виде поправок в гамильтониан (6.1), и с учетом этих поправок решают уравнение Шредингера для каждого электрона. В результате получают новые волновые функции, которые уже не совпадают с волновыми функциями водородоподобных атомов. С помощью этих новых волновых функций снова вычисляют поправки к гамильтониану и т. д. Такие итерационные операции повторяют до тех пор, пока последующие результаты не будут с достаточной точностью совпадать с предыдущими, т. е. пока эти результаты не станут самосогласованными. Обычно число таких итераций не превышает десяти.

В.А. Фок учел в таких расчетах принцип Паули для системы электронов. Требования этого принципа в данном случае состоят в том, что в комбинациях квантовых чисел n_i в выражении (6.74) не должны встречаться четыре одинаковых квантовых числа.

Методом Хартри — Фока были рассчитаны характеристики целого ряда многоэлектронных атомов, причем результаты расчетов оказались в хорошем согласии с данными экспериментальных исследований. Этот метод применяется также в теории рассеяния, физике твердого тела и ядерной физике.

Метод Томаса — Ферми. Для тяжелых атомов с большим числом электронов успешно применяется другой приближенный метод учета влияния электронов друг на друга, предложенный американским физиком Л. Томасом для электронного газа высокой плотности и развитый Э. Ферми применительно к многоэлектронным атомам. Этот метод основан на предположении, что на расстоянии порядка дебройлевской длины волны электрона потенциальная энергия электрона $U(r)$ изменяется достаточно медленно. Поэтому внутри объема, в котором изменения $U(r)$ невелики, может находиться достаточно большое число электронов. В этом

случае анализ поведения электронов в атоме можно проводить, используя рассмотренное выше (см. 6.4) статистическое распределение Ферми — Дирака. Поэтому метод Томаса — Ферми является статистическим методом.

Согласно этому методу, электрон в многоэлектронном атоме находится в суммарном поле атомного ядра и всех остальных электронов. Считается, что это поле обладает центральной симметрией, а также предполагается, что электрический заряд электронного облака в атоме распределен в пространстве непрерывным образом с объемной плотностью $\rho(r)$, зависящей только от расстояния r от электрона до ядра. Для расчета плотности $\rho(r)$ электроны в атоме рассматриваются как вырожденный идеальный газ ферми-частиц.

Пусть на расстоянии r от ядра потенциал суммарного электрического поля равен $\varphi(r)$, тогда полная энергия электрона

$$E = \frac{p^2}{2m_0} - e\varphi(r), \tag{6.76}$$

где p — импульс электрона, а m_0 — масса электрона. Для того чтобы электрон в атоме находился в связанном состоянии, его полная энергия E не должна быть положительной, т. е. $E \le 0$. Следовательно, электрон может находиться в связанном состоянии на расстоянии r от ядра только в том случае, если его импульс не превышает максимального (фермиевского) значения p_F, равного

$$p_F = \sqrt{2m_0 e\varphi(r)}. \tag{6.77}$$

Из условия квантования пространства импульсов (см. 6.2) следует, что в единице объема пространства число квантовых состояний электрона на расстоянии r от него до ядра не превышает значения

$$G = 2\frac{\frac{4}{3}\pi p_F^3}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3} = \frac{\left[2m_0 e\varphi(r)\right]^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}.$$

Таким образом, плотность заряда в электронном облаке на расстоянии r от ядра равна

$$\rho(r) = -eG = -\frac{e(2m_0e)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}\varphi(r)^{3/2}.$$

Потенциал усредненного электрического поля в атоме находят из уравнения Пуассона

$$\Delta\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}. \qquad (6.78)$$

Поскольку ρ и φ зависят только от расстояния r, т. е. задача имеет сферическую симметрию, уравнение (6.78) можно записать в виде

$$\frac{1}{r}\frac{d^2(r\varphi)}{dr^2} = \frac{e(2m_0e)^{3/2}}{3\pi^2\varepsilon_0\hbar^3}\varphi^{3/2}. \qquad (6.79)$$

Это нелинейное дифференциальное уравнение для потенциала $\varphi(r)$ следует решать с учетом граничных условий:

$$\varphi(r) \to \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r} \text{ при } r \to 0 \text{ и } \varphi(r) \to 0 \text{ при } r \to \infty. \qquad (6.80)$$

Первое из этих условий означает, что по мере приближения к ядру вклад поля ядра в общее электростатическое поле приобретает определяющее значение. Второе условие в (6.80) есть требование равенства потенциала нулю в бесконечно удаленной точке пространства.

Из электростатики известно, что для нейтральной в целом системы точечных зарядов, например для нейтрального атома, скорость убывания потенциала системы на больших расстояниях оказывается заметно выше, чем в случае точечного заряда, для которого потенциал $\varphi_{т.з} \sim \frac{1}{r}$. Таким образом, для потенциала φ суммарного электростатического поля, создаваемого ядром и атомными электронами, должно выполняться условие $r\varphi \to 0$ при $r \to \infty$.

Введем безразмерные величины

$$\Phi = \frac{\varphi}{\dfrac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r}} \quad \text{и} \quad x = \frac{r}{R},$$

где $R = \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{9\pi^2}{16}\right)^{1/3} \dfrac{1}{Z^{1/3}} \dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2} = \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{9\pi^2}{16}\right)^{1/3} \dfrac{a}{Z^{1/3}} = 0{,}885\dfrac{a}{Z^{1/3}}.$

Здесь a — радиус первой боровской орбиты (5.7). В этом случае уравнение (6.79) и граничные условия (6.80) принимают вид

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = \sqrt{\frac{\Phi^3}{x}}, \quad 0 < x < \infty,$$
$$\Phi \to 1 \text{ при } x \to 0, \qquad (6.81)$$
$$\Phi \to 0 \text{ при } x \to \infty.$$

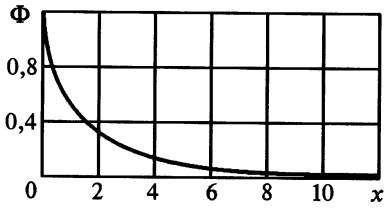


Рис. 6.23. Распределение усредненного потенциала электростатического поля в многоэлектронном атоме в модели Томаса — Ферми

Решение нелинейной краевой задачи (6.81) для функции $\Phi(x)$ находят с помощью численных методов. Результатом решения является монотонно убывающая функция, обращающаяся в нуль лишь на бесконечности (рис. 6.23).

Отметим, что, хотя метод Томаса — Ферми не передает всех деталей распределения электронной плотности заряда внутри атома, он дает возможность достаточно точно установить вид усредненной зависимости $\rho(r)$. Численный расчет электронной плотности заряда в зависимости от расстояния r до ядра позволяет, в частности, определить, что в сфере радиуса $R_* = 1{,}33aZ^{-1/3}$ заключена половина полного электронного заряда атома. Поэтому именно величину R_* обычно рассматривают как эффективный радиус атома.

С помощью метода Томаса — Ферми можно найти полную энергию ионизации атома, т. е. энергию, которую нужно затратить для того, чтобы удалить из атома все электроны. Потенциал электростатического поля, полученный методом Томаса — Ферми, может быть использован в расчетах по методу методу Хартри — Фока, уменьшая тем самым число необходимых итераций.

Использование метода Томаса — Ферми позволило объяснить порядок заполнения электронами электронных оболочек в атомах. Этот метод также применяется в ядерной физике, в частности для описания заполнения нуклонами оболочек ядра.

Свойства многоэлектронных атомов. Метод Хартри — Фока позволяет выделить в многоэлектронном атоме отдельные электроны, определяя для каждого из них четыре квантовых числа n, l, m и m_s. Самосогласованное поле не является кулоновским полем, поэтому энергия электрона в заданном квантовом состоянии зависит не только от главного квантового числа n, но и от значения орбитального числа l.

Электронную конфигурацию многоэлектронного атома можно описывать по аналогии с атомом водорода, указывая для каждого электрона значения главного и орбитального квантовых чисел. Если же несколько электронов в атоме находятся в состояниях с одинаковыми значениями n и l, то число таких электронов при записи электронной конфигурации атома обычно указывают в виде показателя степени. Так, например, электронная конфигурация нормального состояния атома кислорода $(N=8)$ записывается в виде $1s^2 2s^2 2p^4$. Это означает, что из восьми электронов атома кислорода два электрона находятся в состояниях с $n=1$ и $l=0$, еще два электрона — в состояниях с $n=2$ и $l=0$ и, наконец, четыре электрона – в состояниях с $n=2$ и $l=1$.

Совокупность всех состояний с заданными значениями квантовых чисел n и l называется электронной оболочкой. Оболочки, в свою очередь, объединяются в электронные слои. В каждом таком слое находятся электроны с одинаковыми значениями главного квантового числа n, причем число электронов, полностью заполняющих слой, равно $2n^2$. Это обусловлено тем, что, согласно принципу Паули, у электронов атома не может быть одинаковых значений всех четырех квантовых чисел.

Для обозначения электронных слоев атома используются символы, заимствованные из рентгеновской спектроскопии (табл. 6.2). Слой, отвечающий значению $n=1$, обозначается буквой K, слой, отвечающий значению $n=2$, — буквой L и далее по алфавиту.

Таблица 6.2

Квантовое число n	Символ слоя	Возможное число электронов
1	K	2
2	L	8
3	M	18
4	N	32
5	O	50

Электроны K-слоя обладают значением квантового числа $l=0$, т. е. в K-слое могут находиться только s-электроны. Электроны L-слоя могут иметь значения l, равные 0 и 1, это означает, что в L-слое находятся s- и p-электроны. Эти электроны образуют s- и p-оболочки L-слоя. Для электронов M-слоя l может принимать значения 0, 1 и 2, следовательно M-слой состоит из s-, p- и d-оболочек и т. д.

Анализ электронных конфигураций различных атомов показывает, что учет принципа Паули приводит к определенной периодичности в заполнении электронных оболочек и слоев атомов. Именно этим и объясняется периодическая повторяемость химических свойств атомов, отраженная в периодической системе элементов Д.И. Менделеева.

Электронные конфигурации первых одиннадцати элементов периодической системы приведены в табл. 6.3.

У атомов гелия и неона электроны полностью заполняют соответственно K- и L- слои. С этим связана химическая инертность этих элементов. И гелий, и неон относятся к благородным газам. Их атомы, находясь в основном состоянии, не объединяются в молекулы и не вступают в химические реакции.

Таблица 6.3

Атом элемента	Число электронов N	Распределение электронов по оболочкам и слоям					
		K	L		M		
		$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$
H	1	1					
He	2	2					
Li	3	2	1				
Be	4	2	2				
B	5	2	2	1			
C	6	2	2	2			
N	7	2	2	3			
O	8	2	2	4			
F	9	2	2	5			
Ne	10	2	2	6			
Na	11	2	2	6	1		

У атомов лития и натрия за пределами полностью заполненных K- и L- слоев имеется по одному электрону. Эти атомы входят в группу щелочных металлов и обладают высокой химической активностью. Сходство химических свойств этих атомов, как и свойств атомов всех щелочных металлов, объясняется тем, что на внешней электронной оболочке у них имеется один слабосвязанный электрон.

Еще одним примером, подтверждающим зависимость химических свойств элементов от структуры внешних электронных оболочек атомов, являются редкоземельные элементы. У атомов редкоземельных элементов по мере добавления нового электрона заполняются внутренние d- или f-оболочки, а электронное заполнение более удаленной 6f-оболочки остается неизменным. В результате добавление электронов не сказывается на химических свойствах атомов и все редкоземельные элементы оказываются химически очень сходными.

7. ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Ядра атомов, существование которых было доказано в опытах Резерфорда (1911), имеют пространственные размеры в сотни тысяч раз меньшие, чем сами атомы. При этом составные частицы ядер — протоны и нейтроны — удерживаются в ядрах за счет действия между ними мощных короткодействующих ядерных сил. В основе современной теории ядра лежит квантовая механика, которая дает качественное объяснение природы ядерных явлений. В сочетании с данными эксперимента она обеспечивает расчетный аппарат ядерной физики.

Несмотря на действие мощных ядерных сил между нуклонами, некоторые ядра оказываются нестабильными. Такие радиоактивные ядра распадаются с испусканием α-, β- и γ-излучений.

В ядрах атомов заключен колоссальный запас ядерной энергии. Возможность высвобождения части этой энергии была предсказана теоретически и реализована на практике при осуществлении ядерных реакций деления тяжелых ядер и синтеза легких ядер.

Изучение структуры ядерной материи позволило существенно расширить представление об элементарных частицах. В настоящее время известно несколько сотен элементарных частиц, их классификация проводится по типам взаимодействий, в которых может участвовать та или иная частица. Наиболее важное свойство всех элементарных частиц — способность рождаться или уничтожаться при взаимодействии с другими частицами.

Важнейшие этапы развития теории элементарных частиц связаны с релятивистской квантовой механикой, квантовой теорией поля, теорией электрослабого взаимодействия и кварковой теорией сильного взаимодействия — квантовой хромодинамикой.

7.1. Атомное ядро

Характеристики и состав ядра. Как показали опыты Резерфорда по рассеянию α-частиц с энергиями в несколько мегаэлек-

трон-вольт при прохождении их через вещество, основная масса материи в атоме не распределена равномерно по объему атома, а сконцентрирована в плотном ядре, размер которого ($\sim 10^{-15}$ м) составляет одну стотысячную часть размера самого атома. В таком субатомном объекте сосредоточено почти 99,9 % всей массы атома. Поэтому плотность ядерного вещества очень велика и близка к $2 \cdot 10^{17}$ кг/м^3. Атомное ядро имеет положительный заряд, кратный элементарному электрическому заряду e, и соответствующие спину ядра механический и магнитный моменты. Взаимодействие магнитных моментов электронов атома и его ядра приводит к расщеплению спектральных линий излучения атома, равному $\Delta\lambda \sim 10^{-12}$ м. Это расщепление обусловливает сверхтонкую структуру оптического спектра атома.

В 1932 г. Д.Д. Иваненко и В. Гейзенберг предположили, что атомное ядро состоит из двух видов элементарных частиц — протонов и нейтронов. В дальнейшем это предположение получило полное экспериментальное подтверждение.

Протон — стабильная положительно заряженная частица с зарядом $+e$ и массой $m_p = 1{,}67265 \cdot 10^{-27}$ кг. Масса протона превышает массу электрона в 1836 раз, а его энергия покоя равна 938,26 МэВ. Протон имеет полуцелый спин $s = \frac{1}{2}$, а его собственный магнитный момент $\mu_p = +2{,}7928\mu_я$, где ядерный магнетон определяется выражением

$$\mu_я = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5{,}051 \cdot 10^{-27} \text{ Дж/Тл}.$$

Эта единица измерения магнитных моментов в ядерной физике в 1836 раз меньше магнетона Бора. Поэтому собственный магнитный момент протона примерно в 660 раз меньше собственного магнитного момента электрона.

Нейтрон — открытая Д. Чедвиком в 1932 г. электрически незаряженная элементарная частица, масса которой $m_n = 1{,}67495 \cdot 10^{-27}$ кг, а энергия покоя 939,55 МэВ. Спин нейтрона $s = \frac{1}{2}$. Хотя нейтрон не имеет электрического заряда, он обладает

собственным магнитным моментом, равным $\mu_n = -1{,}9131\mu_я$. При этом знак минус указывает, что механический и магнитный моменты нейтрона имеют противоположные направления.

Нейтроны устойчивы только в составе стабильных ядер. Свободный нейтрон — нестабильная частица. Он самопроизвольно распадается, превращаясь в протон, электрон и антинейтрино (см. 7.4). Среднее время жизни свободного нейтрона составляет около 15 мин.

Поскольку по некоторым свойствам (масса, спин) протон и нейтрон близки друг к другу, а в ядерном взаимодействии эти частицы неразличимы, обе эти ядерные частицы называются нуклонами (от лат. nucleus — ядро). В таком представлении протон и нейтрон можно рассматривать как два разных зарядовых состояния ($Q = +1$ и $Q = 0$) одной частицы — нуклона.

Для обозначения структуры атомного ядра обычно применяется запись вида

$$^{A}_{Z}\mathrm{X},$$

где под X подразумевается химический символ атома, состав ядра которого описывается числами Z и A.

Число Z называется зарядовым числом. Оно равно количеству протонов в ядре. Кроме того, это число определяет заряд ядра, равный $+Ze$, и порядковый номер химического элемента в периодической системе, атом которого имеет Z электронов.

Число A нуклонов в ядре называется массовым числом. Зная числа Z и A, можно определить число нейтронов в ядре: $N = A - Z$.

В настоящее время известно около 1500 различных ядер с Z от 1 до 115 и с A от 1 до 271. Примерно одна пятая часть этих ядер устойчивы, остальные, испытывая радиоактивный распад, превращаются в другие ядра. Многие ядра, в частности ядра с Z от 93 до 115, были получены искусственным путем посредством ядерных реакций.

Размеры ядер зависят от числа содержащихся в них нуклонов. При этом средняя плотность числа нуклонов в ядре, т. е. число нуклонов в единице объема ядра, практически одинакова для всех ядер с $A > 10$. В этом случае объем ядра пропорционален числу нуклонов A и эффективный размер (радиус) большинства ядер довольно точно определяется формулой

$$R = 1{,}3A^{1/3}\text{Ф}. \qquad (7.1)$$

Здесь Ф — ферми — название применяемой в ядерной физике единицы длины, равной одному фемтометру (1 фм = 10^{-15} м).

Ядра с одинаковыми зарядовыми числами Z, но с разными массовыми числами A называются *изотопами*. У таких ядер одинаковое число протонов. Атомы изотопов имеют одинаковое строение электронных оболочек. Такие атомы отличаются лишь размерами и массами ядер и не различимы по химическим свойствам.

Большинство химических элементов имеет по нескольку изотопов. Так, например, водород имеет три изотопа: обычный водород H — протий, ядро которого ${}^{1}_{1}\text{H}$ представляет собой протон (p); тяжелый водород D — дейтерий, ядро которого ${}^{2}_{1}\text{H}$ — дейтрон (d) — состоит из протона и нейтрона; сверхтяжелый водород T — тритий, ядро которого ${}^{3}_{1}\text{H}$ — тритон (t) — содержит один протон и два нейтрона. Природный уран также содержит три изотопа ${}^{238}_{92}\text{U}$, ${}^{235}_{92}\text{U}$ и ${}^{234}_{92}\text{U}$, а у олова число изотопов достигает десяти.

Выделение отдельных изотопов из естественной их смеси или обогащение смеси отдельными изотопами является важной технической проблемой. Ее значение возросло с появлением ядерной энергетики.

Существует множество методов разделения изотопов, в которых используется разница масс и размеров ядер: центрифугирование, диффузионные методы, электролиз, электромагнитные методы и др. Так, в центрифуге, вращающейся с большой скоростью, более тяжелые атомы изотопов за счет центробежных сил скапливаются на периферии, а легкие — в центральной области вблизи оси вращения. Газообразное соединение разделяемого элемента во внешней и внутренней областях центрифуги прокачивается в противоположных направлениях. Объединение нескольких центрифуг в каскад обеспечивает необходимую степень обогащения. Такой способ пригоден для разделения изотопов как легких, так и тяжелых элементов.

Диффузионный метод основан на прокачивании при достаточно низком давлении (0,1 Па) газообразного соединения разделяемого элемента через систему пористых перегородок. Легкие моле-

кулы диффундируют через перегородку быстрее тяжелых. Такой процесс многократно повторяется. Диффузионный метод использовался, в частности, на первых заводах по обогащению урана изотопом $^{235}_{92}U$. Для получения нужной концентрации этого изотопа газообразное соединение UF_6 подвергалось обогащению повторно около 4000 раз.

При электролизе воды или водных растворов электролитов выделяющийся на катоде водород содержит меньше дейтерия, чем исходная вода. Оказалось, что легкий водород H_2 выделяется на катоде в 5—6 раз быстрее, чем тяжелый D_2. В результате в электролитической ванне растет доля тяжелой воды D_2O. Такой метод разделения изотопов применялся в промышленных масштабах для получения тяжелой воды в качестве замедлителя нейтронов в ядерных реакторах.

Свойства тяжелой воды D_2O отличаются от свойств обычной воды H_2O. Прежде всего, плотность D_2O примерно на 11 % превосходит плотность H_2O. Точка замерзания D_2O приблизительно на 3,8 K, а точка кипения на 1,4 K выше, чем у обычной воды.

В электромагнитном методе разделения изотопов ионный пучок, содержащий различные изотопы некоторого элемента, которые нужно разделить, попадает в вакуумную камеру с поперечным магнитным полем. Под действием магнитного поля ионы движутся по окружностям, радиусы которых зависят от масс ионов. Несмотря на высокую степень разделения изотопов, такой метод имеет достаточно низкую производительность при высоких эксплуатационных затратах. Впервые этот метод использовался в США (1943—1945) для получения изотопа урана $^{235}_{92}U$ в количестве нескольких килограммов.

Перспективным для создания промышленных установок по разделению изотопов является метод лазерного разделения изотопов. В этом методе используется влияние массы ядра и его магнитного момента на оптический спектр поглощения атома. В результате интенсивного монохроматического излучения лазера удается осуществлять избирательное резонансное воздействие только на выбранные атомы изотопа, приводя их в возбужденное состояние вплоть до ионизации. После этого становится возможным от-

деление возбужденных атомов или молекул различными физическими или химическими методами. При ионизации атомов такое отделение можно осуществить с помощью электрического поля.

Отметим также, что атомные ядра с одинаковым числом нуклонов, но с разным числом протонов, т. е. ядра, имеющие одинаковые массовые числа A, но различные зарядовые числа Z, называются *изобарами*. К изобарам относятся, например, ядра аргона $^{40}_{18}\mathrm{Ar}$ и кальция $^{40}_{20}\mathrm{Ca}$. Ядра с одинаковым числом нейтронов носят название *изотонов* $\left(^{13}_{6}\mathrm{C},\ ^{14}_{7}\mathrm{N}\right)$.

В теории атомного ядра используются различные модельные представления о структуре ядер. Наиболее известными являются капельная и оболочечная модели ядра.

В капельной модели (Я.И. Френкель, 1939) ядро рассматривается как заряженная капля некоторой несжимаемой "ядерной" жидкости. При возбуждении ядра капля начинает периодически изменять свою форму, совершая некоторые колебания.

В оболочечной модели ядра (М. Гепперт-Майер, Х. Йенсен, 1949) нуклоны ядра рассматриваются как независимые частицы с полуцелым спином $s=\frac{1}{2}$, движущиеся в некотором усредненном центральном поле ядерных сил. Как и в квантовой модели атома, в оболочечной модели ядра нуклоны последовательно заполняют дискретные энергетические уровни. При этом близкие по энергиям уровни группируются в оболочки. Переходы нуклонов на нижние энергетические уровни сопровождаются испусканием γ-излучения.

Как и любые модели, ядерные модели, являются ограниченными рабочими гипотезами. Ни одна из моделей не может исчерпывающе описать свойства атомного ядра. При этом в каждой модели имеются параметры, значения которых подбираются из сравнения выводов теории с экспериментальными данными. Тем не менее ядерные модели оказываются весьма полезными при расчетах различных характеристик ядер.

Ядерные силы. Между протонами и нейтронами действуют ядерные силы, обеспечивающие связанное состояние нуклонов в ядре. Перечислим основные свойства ядерных сил, которые были обнаружены и сформулированы на основании анализа большого числа экспериментальных данных.

1. Ядерные силы, действующие между нуклонами в ядре, велики по абсолютной величине. Они являются проявлением самого интенсивного в природе взаимодействия — сильного взаимодействия. Эти силы в сотни и тысячи раз интенсивнее электромагнитных сил. Поэтому ядерные силы удерживают нуклоны в ядре, несмотря на мощное кулоновское отталкивание между протонами.

2. Ядерные силы являются короткодействующими силами. Они проявляются как мощные силы притяжения только в том случае, если расстояние между центрами нуклонов меньше некоторого радиуса действия ядерных сил $r_я$ = 1,5 Ф. На больших расстояниях ядерные силы не проявляются. Следует отметить также, что на расстояниях, существенно меньших $r_я$, ядерные силы меняют свой характер и становятся силами отталкивания.

3. Ядерные силы обладают свойством зарядовой независимости. Опыт показывает, что ядерные силы, действующие между двумя протонами, между протоном и нейтроном и двумя нейтронами не зависят от электрических зарядов взаимодействующих нуклонов.

4. Ядерные силы не являются центральными силами. В классическом понимании это означает, что ядерные силы направлены под некоторым углом к прямой, соединяющей центры взаимодействующих нуклонов, а их значения зависят не только от расстояния между нуклонами, но и, например, от взаимной ориентации спинов нуклонов.

5. Ядерные силы обладают свойством насыщения. Насыщение этих сил проявляется в том, что в сферу силового действия одного нуклона может попасть лишь ограниченное число соседних нуклонов в ядре, а не все нуклоны ядра.

Перечисленные свойства свидетельствуют о сложном характере ядерных сил. Для объяснения природы таких сил еще в 1934 г. советский физик И.Е. Тамм высказал предположение о том, что ядерные силы носят обменный характер. Это означает, что ядерные силы между нуклонами возникают за счет обмена между нуклонами некоторыми частицами, которые и являются переносчиками ядерного взаимодействия. Квантовая теория показывает, что обмен частицами всегда приводит к появлению сил взаимодействия между двумя объектами. В частности, квантовая теория электромагнитного поля объяснила электромагнитное взаимодействие между заряженными частицами обменом фотонами. Можно сказать, что фундаментальным квантовым свойством в природе является обменный характер сил взаимодействий.

Развивая эту гипотезу, в 1935 г. японский ученый, лауреат Нобелевской премии по физике (1949) Х. Юкава показал, что некоторые основные свойства ядерных сил можно описать в рамках мезонной теории. Мезонная теория объясняет появление ядерных сил между нуклонами обменом частицами с ненулевой массой покоя. Такие частицы, которые испускаются и поглощаются нуклонами, Юкава назвал *мезонами.*

Отметим, что мезонная теория ядерных сил является существенно квантовой теорией, так как в классической теории покоящийся нуклон не может испустить мезон, оставаясь при этом нуклоном. В таком процессе нарушался бы закон сохранения энергии. Квантовая теория своеобразным образом снимает этот запрет на рождение мезона, так как в квантовой теории справедливо соотношение неопределенности для энергии системы (см. формулу (2.21)). Из этого фундаментального соотношения квантовой теории следует, что в течение некоторого конечного промежутка времени τ система может иметь неопределенность энергии ΔE, причем $\tau \cdot \Delta E = \hbar$.

Таким образом, вследствие неопределенности энергии нуклон может испустить мезон с ненулевой массой покоя $m_{\text{м}}$, если $\Delta E = m_{\text{м}}c^2$. Частицы, рождение которых происходит за счет неопределенности энергии квантовой системы, называются *виртуальными частицами.* Виртуальную частицу нельзя обнаружить за время ее существования, которое не может быть больше чем $\tau = \hbar/\Delta E$. Так как по истечении этого времени виртуальная частица должна исчезнуть, то обнаружить нарушение закона сохранения энергии при испускании такой частицы нельзя. Однако это не означает, что виртуальная частица является чисто воображаемым объектом. Если квантовой системе с виртуальной частицей сообщить дополнительно энергию, равную или бóльшую энергии виртуальной частицы, то она может быть экспериментально обнаружена как обычная реальная частица.

Итак, нуклон может испустить виртуальный мезон, который существует без нарушения закона сохранения энергии лишь в течение конечного промежутка времени. Этот промежуток времени не может быть больше чем

$$\tau = \frac{\hbar}{m_{\text{м}}c^2}. \qquad (7.2)$$

По истечении такого промежутка времени виртуальный мезон должен исчезнуть. Его может поглотить либо нуклон, сам испустивший его, либо другой нуклон, находящийся поблизости от первого. В последнем случае поглощение виртуального мезона приведет к появлению ядерных сил взаимодействия между нуклонами.

Образно можно представить, что любой нуклон как бы окружен облаком (шубой) виртуальных мезонов, которые безостановочно испускаются и поглощаются нуклоном, удаляясь от него лишь на конечное расстояние. Это расстояние, определяющее радиус $r_{\text{м}}$ облака виртуальных мезонов, можно оценить, учитывая, что скорость движения мезонов не может быть больше скорости света в вакууме. Поэтому

$$r_{\text{м}} = c\tau = c\frac{\hbar}{m_{\text{м}}c^2} = \frac{\hbar}{m_{\text{м}}c} = \Lambda_{\text{м}}. \qquad (7.3)$$

Здесь $\Lambda_{\text{м}}$ — комптоновская длина волны мезона.

Как только другой нуклон попадает в облако виртуальных мезонов вокруг первого нуклона и начинает поглощать их, между нуклонами возникают ядерные силы взаимодействия. Поэтому ядерные силы имеют конечный радиус действия, причем

$$r_{\text{я}} = \Lambda_{\text{м}} = \frac{\hbar}{m_{\text{м}}c}. \qquad (7.4)$$

Так теория Юкавы объясняет короткодействующий характер ядерных сил.

Из формулы (7.4) следует, что радиус действия ядерных сил определяется значением массы мезона. Поэтому, подставив в это соотношение значение $r_{\text{я}} = (1-2)\Phi$, можно оценить массу мезона. Оказывается, что переносчик ядерного взаимодействия между нуклонами должен иметь массу в 200—300 раз бóльшую массы электрона. В 1935 г. среди известных элементарных частиц частицы такой массы не было. Начался экспериментальный поиск частицы Юкавы.

В 1936 г. в космических лучах была обнаружена частица с массой, равной 207 m_e. Считая эту частицу переносчиком ядерного взаимодействия, ее назвали мю-мезоном (μ-мезоном). Однако вскоре выяснилось, что μ-мезон очень слабо взаимодействует с

нуклонами и не может быть ответственным за ядерное взаимодействие между нуклонами. Эту частицу пришлось даже переименовать, убрав из названия окончание "мезон". Теперь частица носит название мюона.

Только в 1947 г. в космических лучах были зарегистрированы (Ч. Латтес, Х. Мюирхед, Дж. Оккиалини, С. Пауэлл) частицы Юкавы, получившие название пи-мезонов (π-мезонов), или пионов. Эти частицы имеют нулевой спин.

Существуют два зарядовых состояния π-мезона с положительным (π^+) и отрицательным (π^-) зарядом $\pm e$ и одно электронейтральное состояние π^0. Масса заряженных π-мезонов одинакова и равна 273 m_e (E_0 = 140 МэВ), масса нейтрального π-мезона равна 264 m_e (E_0 = 135 МэВ). Свободный π-мезон в отсутствие других частиц нестабилен и распадается на элементарные частицы (мюоны, электроны, позитроны и γ-кванты).

Таким образом, в теории Юкавы поле ядерных сил — это мезонное поле. Так, например, ядерное взаимодействие между протоном и нейтроном обусловлено виртуальными процессами, происходящими по схеме

$$p + n \leftrightarrow n + \pi^+ + n \leftrightarrow n + p. \qquad (7.5)$$

Протон испускает виртуальный π^+-мезон, превращаясь в нейтрон. Мезон поглощается нейтроном, который вследствие этого превращается в протон. Затем процесс происходит в обратном направлении. Аналогично нуклоны могут обмениваться виртуальными π^-- и π^0-мезонами.

Если нуклону сообщить дополнительную энергию, не меньшую энергии покоя π-мезона, то виртуальный мезон может превратиться в реальный, который можно обнаружить экспериментально. Так, процесс рождения реальных пионов происходит при столкновении нуклонов достаточно больших энергий. В частности, экспериментально наблюдается процесс

$$p + n \rightarrow p + n + \pi^0, \qquad (7.6)$$

в котором рождается нейтральный π^0-мезон.

При очень больших энергиях столкновения может рождаться и множество реальных π-мезонов. Это происходит, например, когда быстрый протон первичных космических лучей сталкивается с ядром кислорода или азота в верхних слоях атмосферы. В результате столкновения появляется множество мезонов, которые, двигаясь к Земле и распадаясь при движении, образуют вторичные космические лучи в виде ливней множества элементарных частиц.

В мезонной теории Юкава определил вид потенциала поля короткодействующих ядерных сил притяжения:

$$\varphi(r) = -\varphi_0 \frac{\exp(-ar)}{r}, \qquad (7.7)$$

где φ_0 и a — постоянные, причем

$$a = \frac{1}{r_я} = \frac{m_м c}{\hbar}.$$

Однако полное количественное описание ядерного взаимодействия в рамках мезонной теории связано с определенными трудностями. Следующим этапом развития теории ядерных сил следует считать кварковую теорию сильного взаимодействия, основные положения которой обсуждаются в 7.4.

Энергия связи ядра. Энергией связи ядра $E_{св}$ называется энергия, которую необходимо сообщить ядру (или работа, которую необходимо затратить), чтобы разделить ядро на отдельные составляющие его нуклоны и удалить их на расстояния, при которых взаимодействием нуклонов можно пренебречь (рис. 7.1).

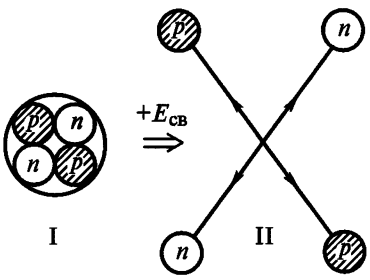


Рис. 7.1. Расщепление ядра на составляющие его нуклоны:
I — ядро; II — система изолированных нуклонов

Энергия связи ядра является одной из важнейших величин, характеризующих мощность ядерных сил и прочность связей нуклонов в ядре. При образовании ядра выделяется энергия, равная энергии его связи.

По определению, энергия системы невзаимодействующих нуклонов $E_п$ больше энергии покоя

ядра E_{I} на величину энергии связи, т. е. $E_{\text{св}} = E_{\text{II}} - E_{\text{I}}$. Но, согласно релятивистской формуле связи энергии и массы, $E_{\text{I}} = m_{\text{I}}c^2$, а $E_{\text{II}} = m_{\text{II}}c^2$ и $E_{\text{св}} = (m_{\text{II}} - m_{\text{I}})c^2$. Величина $\Delta m = m_{\text{II}} - m_{\text{I}}$ называется дефектом массы ядра. Дефект массы связан с энергией связи ядра соотношением $E_{\text{св}} = \Delta m c^2$. Поэтому для расчета энергии связи ядра ${}^{A}_{Z}\text{X}$ можно использовать формулу

$$E_{\text{св}} = \left[Zm_p + (A - Z)m_n - m_{\text{я}} \right] c^2. \qquad (7.9)$$

Так как 1 а.е.м. = $1{,}6606 \cdot 10^{-27}$ кг, то массе, равной 1 а.е.м., соответствует энергия покоя, равная 931,5 МэВ. Поэтому, если при расчете энергии связи ядра массы частиц выражать в атомных единицах массы, то формула (7.9) преобразуется к виду

$$E_{\text{св}} = 931{,}5 \left[Zm_p + (A - Z)m_n - m_{\text{я}} \right] \text{ МэВ}. \qquad (7.10)$$

Отметим также, что с большой степенью точности формулу (7.10) можно записать в виде

$$E_{\text{св}} = 931{,}5 \left[Zm_H + (A - Z)m_n - m_a \right] \text{ МэВ}. \qquad (7.11)$$

Такая формула удобна для расчетов энергии связи ядер, так как в таблицах обычно дают не массы ядер $m_{\text{я}}$, а массы атомов $m_{\text{а}}$. В (7.11) значения масс всех частиц также следует подставлять в атомных единицах массы ($m_{\text{H}} = 1{,}00783$ а.е.м., $m_n = 1{,}00867$ а.е.м.).

Ядерные энергии связи настолько велики, что их можно определять посредством точного измерения масс атомов (точнее ионов) с помощью приборов, которые называются масс-спектрографами. Один из типов масс-спектрографа схематически изображен на рис. 7.2. Пучок атомов, входящих в отверстие *1*, ионизируется быстрыми электронами *2*. Образующиеся ионы ускоряются и формируют ионный пучок с помощью системы диафрагм *3*. Затем ионы попадают в секторное поперечное магнитное поле *4*, которое за счет действия силы Лоренца сортирует ионы по массам. В результате в одно и то же место фотопластинки попадают только изото-

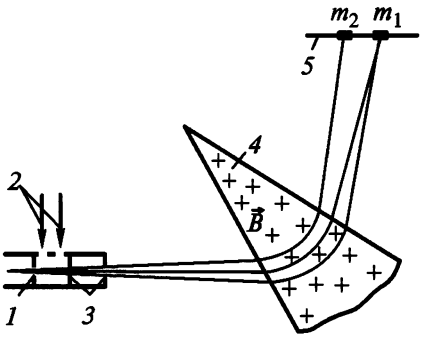


Рис. 7.2. Схематическое устройство масс-спектрографа:
1 — отверстие; *2* — быстрые электроны; *3* — диафрагмы; *4* — область магнитного поля; *5* — фотопластинка

пы с одинаковой массой (m_1), а изотопы с другой массой (m_2) попадают в другое место фотопластинки. Измеряя положение атомного следа на фотопластинке, можно измерить и массу изотопа с относительной точностью 10^{-6}, что позволит определить с помощью формулы (7.11) энергии связи ядер с точностью до десятых и даже сотых долей процента.

Энергия связи, приходящаяся на один нуклон, т. е. $\tilde{E}_{св} = E_{св}/A$, называется удельной энергией связи нуклонов в ядре. Рассмотрим график, аппроксимирующий экспериментальные значения удельных энергий связи ядер с различными массовыми числами (рис. 7.3). Анализ этой зависимости позволяет сделать следующие выводы.

1. Сильнее всего связаны нуклоны в ядрах с массовыми числами 50—60. Удельная энергия связи у таких средних по массе ядер достигает максимального значения, равного 8,7 МэВ/нуклон. Этот максимум удельной энергии связи иногда называют "железным", так как значение $A = 56$ соответствует ядру изотопа железа. Для тяжелых ядер удельная энергия связи немного уменьшается. Так, для ядра урана ($A = 238$) она составляет уже приблизительно 7,5 МэВ/нуклон.

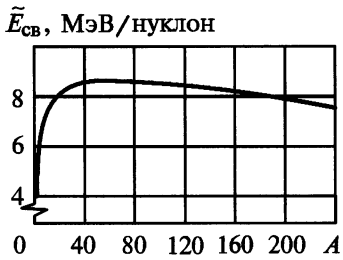


Рис. 7.3. Кривая удельной энергии связи ядер

2. Энергия связи нуклонов в ядре в миллионы раз больше энергии связи электронов в атомах. Таким образом, в ядре запасена огромная ядерная энергия, в миллионы раз превышающая энергию, которая выделяется при химических реакциях.

3. Так как для $A > 20$ удельная энергия связи ядер изменяется незна-

чительно и равна примерно 8 МэВ/нуклон, то такая зависимость свидетельствует о свойстве насыщения ядерных сил. Действительно, если бы каждый нуклон взаимодействовал со всеми остальными нуклонами ядра, то энергия связи должна была увеличиваться с ростом A квадратично, так как число пар, в которые можно объединить A нуклонов, равно $\frac{1}{2}A(A-1)$. В таком случае удельная энергия связи ядер линейно росла бы с увеличением числа нуклонов в ядре. Следовательно, каждый нуклон может взаимодействовать с помощью ядерных сил не со всеми нуклонами ядра, а только с несколькими соседними нуклонами.

4. Два вида ядерных процессов, если их удастся осуществить, будут протекать с выделением части внутриядерной энергии: деление тяжелых ядер на несколько более легких и слияние (синтез) нескольких легких ядер в одно ядро. Так, например, за счет разности значений удельной энергии связи ядер, равной 1 МэВ/нуклон, при делении ядра с массовым числом $A = 240$ на два ядра с массовыми числами $A = 120$ выделилось бы 240 МэВ ядерной энергии. Слияние двух ядер ${}_1^2\mathrm{H}$ в ядро ${}_2^4\mathrm{He}$ при разности значений удельной энергии связи этих ядер, равной 6 МэВ/нуклон, привело бы к высвобождению 24 МэВ энергии. Для сравнения, в химической реакции горения $\mathrm{C}+\mathrm{O}_2=\mathrm{CO}_2$ выделяется энергия, равная всего 5 эВ. Возможность практической реализации ядерных реакций такого типа будет рассмотрена в 7.3.

5. Более тщательный анализ зависимости удельной энергии связи ядер от зарядового Z и массового A чисел показывает, что у этой зависимости есть небольшие максимумы (пики), соответствующие магическим ядрам, у которых либо число протонов, либо число нейтронов равно одному из магических чисел: 2, 8, 20, 28, 50, 82. Магическим является также ядро, у которого число нейтронов $N = 126$. Ядра, у которых магическими являются и Z и N, называются дважды магическими. Таких ядер всего пять: ${}_2^4\mathrm{He}$, ${}_8^{16}\mathrm{O}$, ${}_{20}^{48}\mathrm{Ca}$, ${}_{82}^{208}\mathrm{Pb}$. Магические ядра наиболее устойчивы и поэтому наиболее распространены во Вселенной.

Задача 7.1. Оцените плотность вещества в атомных ядрах.

Решение. С учетом формулы (7.1), определяющей радиус ядра с массовым числом A, рассчитаем объем такого ядра:

$$V_я = \frac{4}{3}\pi R^3 = 9,20 \cdot 10^{-45} \cdot A \ \text{м}^3.$$

Если пренебречь различием масс протона и нейтрона, то массу ядра можно определить по формуле

$$m_я = Am_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot A \ \text{кг}.$$

Следовательно, средняя плотность вещества в атомных ядрах

$$\rho_я = \frac{m_я}{V_я} = \frac{1,67 \cdot 10^{-27}}{9,20 \cdot 10^{-45}} = 1,8 \cdot 10^{17} \ \text{кг/м}^3.$$

Задача 7.2. Масс-спектроскопическим методом определены массы атомов гелия $m_1 = 4,00260$ а.е.м. и дейтерия $m_2 = 2,01410$ а.е.м. Найдите разность удельной энергии связи ядер ^4_2He и ^2_1H.

Решение. Так как для ядра гелия $A_1 = 4$, $Z_1 = 2$, а для ядра дейтерия $A_2 = 2$, $Z_2 = 1$, то с учетом формулы (7.11) находим удельные энергии связи этих ядер в мегаэлектрон-вольтах:

$$\tilde{E}^{(1)}_{\text{св}} = \frac{931,5}{4}[2m_{\text{H}} + 2m_n - m_1],$$

$$\tilde{E}^{(2)}_{\text{св}} = \frac{931,5}{2}[m_{\text{H}} + m_n - m_2].$$

Отсюда определим разность удельной энергии связи ядер:

$$\Delta\tilde{E}_{\text{св}} = \frac{931,5}{4}[2m_2 - m_1].$$

Подставляя числовые значения масс атомов в атомных единицах массы, получаем $\Delta\tilde{E}_{\text{св}} = 5,96$ МэВ/нуклон. Такое большое различие удельной энергии связи обусловлено тем, что ядро ^4_2He является дважды магическим ядром.

7.2. Радиоактивный распад ядер

Радиоактивность. Самопроизвольное (спонтанное) превращение одних атомных ядер в другие, сопровождаемое испусканием

одной или нескольких частиц, называется радиоактивностью. Условились считать, что время радиоактивного распада ядер составляет не менее 10^{-12} с. За это время происходит большое число разнообразных внутриядерных процессов, полностью формирующих вновь образовавшееся ядро.

Ядра, испытывающие радиоактивный распад, называются радиоактивными. Ядра, не участвующие в радиоактивных превращениях, называются стабильными. Такое деление достаточно условно, поскольку практически все ядра могут претерпевать радиоактивный распад, однако скорость распада у разных ядер неодинакова.

Радиоактивность ядер, существующих в природных условиях, называется естественной. Радиоактивность ядер, полученных с помощью ядерных реакций в лабораторных условиях (например, на ускорителях), называется искусственной. Между ними нет принципиальных отличий. И в том и в другом случае радиоактивные превращения подчиняются одним и тем же закономерностям. Распадающиеся ядра называются материнскими, а ядра, образующиеся в результате распада, — дочерними.

К радиоактивному распаду относятся α-, β-распад, спонтанное деление тяжелых ядер, протонный распад и др. β-распад обусловлен слабым взаимодействием, все остальные виды радиоактивных процессов — сильным взаимодействием.

Закон сохранения энергии при радиоактивном распаде имеет следующий вид:

$$M_{\text{м}}c^2 = M_{\text{д}}\,c^2 + \sum_i m_i c^2 + E_{\text{к}}\,, \qquad (7.12)$$

где $M_{\text{м}}$ и $M_{\text{д}}$ — массы покоя материнского и дочернего ядер соответственно; m_i — массы образовавшихся частиц; $E_{\text{к}}$ — кинетическая энергия продуктов распада. Выражение (7.12) получено в предположении, что материнское ядро покоится.

Для того чтобы распад шел самопроизвольно, необходимо, чтобы $E_{\text{к}} > 0$. Это означает, что массы распадающегося ядра и продуктов распада должны удовлетворять соотношению

$$M_{\text{м}} > M_{\text{д}} + \sum_i m_i. \qquad (7.13)$$

Это ограничение, следующее из закона сохранения энергии, не является единственным. При радиоактивном распаде должны также выполняться законы сохранения импульса, момента импульса и др.

Явление радиоактивности было открыто в 1896 г. французским физиком А. Беккерелем, обнаружившим испускание солями урана неизвестного проникающего излучения, которое он назвал радиоактивным. Вскоре была обнаружена радиоактивность тория, а в 1898 г. французские физики П. Кюри и М. Склодовская-Кюри открыли два новых радиоактивных элемента — полоний и радий.

В работах Э. Резерфорда, П. Кюри и М. Склодовской-Кюри было установлено, что при радиоактивном распаде испускаются три вида радиоактивного излучения: α-излучение, β-излучение и γ-излучение.

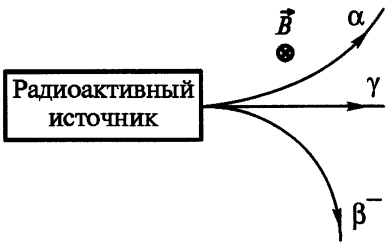


Рис. 7.4. Отклонение радиоактивных излучений магнитным полем

Они обнаружили, что под действием магнитного поля α-излучение отклоняется в ту же сторону, в которую отклонялся бы поток положительно заряженных частиц, β-излучение — в противоположную сторону, а γ-излучение не испытывает каких-либо отклонений (рис. 7.4). В дальнейшем было показано, что α-частицы представляют собой ядра гелия $^4_2\mathrm{He}$, β-частицы являются электронами e^- (хотя возможен β-распад с испусканием позитронов e^+), а γ-излучение представляет собой жесткое коротковолновое ($\lambda < 10^{-10}$ м) электромагнитное излучение, испускаемое ядрами.

Закон протекания радиоактивных процессов во времени одинаков для всех видов распадов. Поэтому, прежде чем подробно описывать каждый из них, сформулируем общие для всех радиоактивных превращений закономерности.

Закон радиоактивного распада. Радиоактивный распад является принципиально статистическим явлением. Нельзя предсказать, в какой момент времени распадется то или иное возбужденное ядро. Но можно с высокой степенью точности указать, какая

часть нестабильных ядер распадется за определенный промежуток времени. Выявляемые в радиоактивном распаде закономерности носят вероятностный характер и выполняются тем точнее, чем более велико число радиоактивных ядер.

Пусть в момент времени t имеется N одинаковых радиоактивных ядер. Будем считать, что ядра распадаются независимо друг от друга. Обозначим через λ вероятность распада ядра в единицу времени, эта величина называется *постоянной распада.* Смысл λ заключается в том, что из N нестабильных ядер в единицу времени распадается в среднем λN ядер. Тогда к моменту времени $t+dt$ число радиоактивных ядер изменится (уменьшиться) на

$$dN = -\lambda N dt. \tag{7.14}$$

Интегрируя (7.14) по времени и считая, что постоянная распада λ не зависит от времени, получаем

$$N(t) = N_0\, e^{-\lambda t}, \tag{7.15}$$

где $N(t)$ — число нераспавшихся ядер в момент времени t; N_0 — число нераспавшихся ядер в начальный момент времени $t=0$. Соотношение (7.15) выражает закон радиоактивного распада: число нераспавшихся ядер убывает с течением времени по экспоненциальному закону.

Число ядер, испытавших радиоактивный распад за время t, равно

$$N_0 - N(t) = N_0(1-e^{-\lambda t}). \tag{7.16}$$

Интенсивность распада, происходящего в радиоактивном препарате, характеризуется величиной, называемой активностью A. Активность определяется как число распадов, происходящих в радиоактивном препарате в единицу времени. Из физического смысла λ и определения A следует, что

$$A = \lambda N = -\frac{dN}{dt} = \lambda N_0 e^{-\lambda t} = A_0 e^{-\lambda t}, \tag{7.17}$$

где $A_0 = \lambda N_0$ — активность радиоактивного препарата в момент времени $t=0$.

Единицей активности в системе СИ является беккерель (Бк), равный одному распаду в секунду. Используется также внесистемная единица кюри (Ки), равная активности одного грамма изотопа радия $^{226}_{88}\mathrm{Ra}$ ($1\ \text{Ки} = 3{,}7 \cdot 10^{10}\ \text{Бк}$).

Активность единицы массы радиоактивного препарата $a = \dfrac{A}{m}$ называется удельной активностью.

Рассмотрим теперь временные характеристики радиоактивного распада — период полураспада $T_{1/2}$ и среднее время жизни ядра τ. Эти величины определяют скорость процессов распада и выражаются через постоянную распада λ.

Периодом полураспада $T_{1/2}$ называется время, за которое распадается половина первоначального количества радиоактивных ядер. Согласно определению,

$$\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\lambda T_{1/2}}.$$

Логарифмируя это равенство, получаем

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0{,}693}{\lambda}. \qquad (7.18)$$

Период полураспада разных ядер лежит в очень широких пределах. Он меняется от 10^{-6} с для изотопа радона $^{215}_{86}\mathrm{Rn}$ до $14 \cdot 10^{17}$ лет для изотопа свинца $^{204}_{82}\mathrm{Pb}$.

Найдем теперь среднее время жизни ядра τ. Из всех N_0 ядер $|dN| = \lambda N dt$ ядер распадается в промежуток времени между t и $t + dt$. Следовательно, можно считать, что время жизни каждого из этих ядер равно t. Тогда, по определению, среднее время жизни ядра

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

Таким образом, среднее время жизни радиоактивного ядра

$$\tau = \frac{1}{\lambda} \tag{7.19}$$

увеличивается при уменьшении вероятности распада ядра за единицу времени, которая определяется постоянной распада λ. Как следует из (7.18) и (7.19), период полураспада и среднее время жизни ядра связаны соотношением

$$T_{1/2} = 0{,}693\tau.$$

Закон сложного радиоактивного распада. Дочернее ядро, образующееся при распаде материнского ядра, также может быть нестабильным и испытывать радиоактивный распад. Пусть постоянная распада материнского ядра равна λ_1, а дочернего ядра λ_2. Найдем, как будут меняться с течением времени числа материнских (N_1) и дочерних (N_2) ядер.

Изменения N_1 и N_2 со временем определяются следующими дифференциальными уравнениями:

$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 N_1, \tag{7.20а}$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \lambda_1 N_1 - \lambda_2 N_2. \tag{7.20б}$$

Уравнение (7.20а), описывающее распад материнских ядер, с точностью до обозначений совпадает с (7.14). Уравнение (7.20б) характеризует изменение числа дочерних ядер. Первое слагаемое в правой части (7.20б) задает увеличение дочерних ядер за счет распада материнских ядер, а второе слагаемое — их убыль за счет радиоактивного распада.

Решение уравнений (7.20а) и (7.20б) имеет следующий вид:

$$N_1(t) = N_{10} e^{-\lambda_1 t}, \tag{7.21а}$$

$$N_2(t) = N_{10} \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} e^{-\lambda_1 t} + \left(N_{20} - N_{10} \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \right) e^{-\lambda_2 t}. \tag{7.21б}$$

Здесь N_{10} и N_{20} — числа материнских и дочерних ядер соответственно в начальный момент времени. Если первоначально имелись только материнские ядра, т. е. если $N_{20} = 0$, то выражение (7.21б) упрощается:

$$N_2(t) = N_{10} \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}).$$

Альфа-распад. α-распад представляет собой процесс самопроизвольного испускания радиоактивным ядром α-частиц (ядер гелия ${}^4_2\mathrm{He}$). Он происходит по схеме

$${}^A_Z\mathrm{X} \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}\mathrm{Y} + {}^4_2\mathrm{He},$$

где X и Y — химические символы распадающегося (материнского) и образующегося (дочернего) ядер соответственно. Как следует из схемы распада, массовое число дочернего ядра на четыре единицы, а зарядовое — на две единицы меньше, чем у материнского.

В качестве примера приведем схему α-распада ядра изотопа висмута, который протекает с образованием ядра таллия:

$${}^{212}_{83}\mathrm{Bi} \rightarrow {}^{208}_{81}\mathrm{Tl} + {}^4_2\mathrm{He}.$$

В настоящее время известно более двухсот ядер, испытывающих α-распад. Большинство из этих ядер получается искусственным путем.

α-частицы вылетают из ядер с очень большими скоростями ($v_\alpha \leq 0{,}1c$). Их кинетическая энергия E_α равна нескольким мегаэлектрон-вольтам. Распространяясь в среде, α-частица теряет свою энергию на ионизацию молекул вещества. Пробег α-частицы, т. е. расстояние, которое она проходит до полной остановки, зависит от плотности среды. Так, в воздухе при нормальном давлении ее пробег составляет несколько сантиметров, а в твердом теле примерно 10^{-3} см.

Кинетическая энергия α-частицы образуется за счет превышения энергии покоя материнского ядра над суммой энергий покоя

дочернего ядра и α -частицы (см. выражение (7.13)). Этот избыток энергии делится между α-частицей и дочерним ядром в отношении, обратно пропорциональном их массам. Действительно, поскольку при α-распаде выполняется закон сохранения импульса, то импульсы α-частицы и дочернего ядра должны быть равны по модулю:

$$p_\alpha = p_д = p.$$

Кинетические энергии продуктов α-распада составляют

$$E_\alpha = \frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} = \frac{p^2}{2m_\alpha}, \quad E_д = \frac{p_д^2}{2m_д} = \frac{p^2}{2m_д}.$$

Отсюда находим, что

$$\frac{E_\alpha}{E_д} = \frac{m_д}{m_\alpha}.$$

В силу того что масса дочернего ядра заметно превышает массу α-частицы, бóльшая часть избыточной энергии уносится α-частицей.

Обычно при α-распаде образуется несколько моноэнергетических групп α-частиц, незначительно отличающихся по энергиям (так называемая тонкая структура α-распада). Это объясняется тем, что дочернее ядро может образовываться не только в основном, но и в возбужденных состояниях. На рис. 7.5 представлена условная схема энергетических уровней материнского и дочернего ядер, на которой для простоты приведен только один возбужденный уровень дочернего ядра.

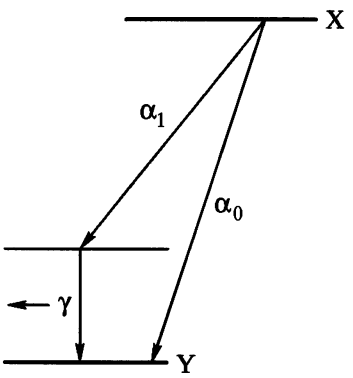


Рис. 7.5. К механизму возникновения γ-излучения, сопровождающего α-распад

Наиболее интенсивными являются группы α-частиц, связанные с образованием дочернего ядра в основном α_0 и в первом возбужденном α_1 состояниях. Так, в рассмотренном выше примере α-

распада висмута $^{212}_{83}Bi$ доля частиц α_0 составляет 27 %, а доля частицы α_1 — 70 % от общего числа всех α-частиц.

Время жизни большинства ядер, находящихся в возбужденном состоянии, 10^{-7}... 10^{-15} с. За это время возбужденное дочернее ядро переходит в основное или в возбужденное состояние. Избыток энергии при этом расходуется на испускание γ-квантов или каких-либо других частиц — протонов, нейтронов и т. д.

Основы теории α-распада были заложены в 1927 г. русским физиком Г.А. Гамовым и независимо от него американскими физиками Э. Кондоном и Р. Герни. В работах этих авторов была дана квантово-механическая трактовка α-распада, учитывающая волновые свойства α-частицы. Как уже отмечалось в 4.3, α-частица, покидая ядро, преодолевает потенциальный барьер, создаваемый силами ядерного притяжения и силами кулоновского отталкивания (см. рис. 4.11). Поскольку высота барьера заметно (в несколько раз) превышает энергию α-частицы, то выход α-частицы из ядра возможен только за счет туннельного эффекта. Теория α -распада, в основе которой лежит туннельный эффект, хорошо подтверждается результатами экспериментальных исследований.

Следует отметить, что радиоактивные ядра могут испускать и более крупные частицы, чем ядра гелия $^{4}_{2}He$ (α-частицы), например ядра углерода $^{14}_{6}C$ или ядра неона $^{24}_{10}Ne$. Такие распады были экспериментально обнаружены в 1984 и 1985 гг. Возможные схемы распадов имеют вид

$$^{222}_{88}Ra \rightarrow {}^{208}_{82}Pb + {}^{14}_{6}C, \quad {}^{233}_{92}U \rightarrow {}^{209}_{82}Pb + {}^{24}_{10}Ne.$$

В отличие от α-радиоактивности эти распады получили название *кластерной радиоактивности*. Поскольку массы ядер углерода и неона заметно превышают массу α-частицы, то вероятность таких распадов (вероятность туннелирования столь массивных частиц) очень невелика. Действительно, вероятность вылета ядра $^{14}_{6}C$ примерно в 10^{10} раз меньше вероятности вылета α-частицы. Для ядра неона $^{24}_{10}Ne$ это отношение достигает 10^{12} раз. В дальней-

шем было обнаружено самопроизвольное испускание тяжелыми ядрами ядер магния, кремния и серы.

Бета-распад. β-распадом называется самопроизвольное превращение радиоактивного ядра ${}^{A}_{Z}\mathrm{X}$ в ядро-изобар ${}^{A}_{Z+1}\mathrm{Y}$ или ${}^{A}_{Z-1}\mathrm{Y}$. В этом процессе один из нейтронов ядра превращается в протон или один из протонов — в нейтрон. Таким образом, β-распад является не внутриядерным, а внутринуклонным процессом. Ответственным за β-распад является слабое взаимодействие нуклонов в ядре (см. 7.4).

Существует три вида β-распада: электронный (β^--распад), позитронный (β^+-распад) и электронный захват.

1. *Электронный β-распад* (β^--распад). В этом случае материнское ядро ${}^{A}_{Z}\mathrm{X}$ испускает электрон, поэтому зарядовое число дочернего ядра ${}^{A}_{Z+1}\mathrm{Y}$ увеличивается на единицу. Электронный β-распад протекает по схеме

$$ {}^{A}_{Z}\mathrm{X} \to {}^{A}_{Z+1}\mathrm{Y} + {}^{0}_{-1}e + \tilde{\nu}_e. $$

При этом распаде наряду с дочерним ядром образуется электрон и электронное антинейтрино. Здесь мы приписали электрону зарядовое число $Z=-1$ и массовое число $A=0$, чтобы подчеркнуть сохранение электрического заряда и числа нуклонов в процессе распада.

Примером электронного β-распада может служить превращение углерода ${}^{14}_{6}\mathrm{C}$ в азот ${}^{14}_{7}\mathrm{N}$:

$$ {}^{14}_{6}\mathrm{C} \to {}^{14}_{7}\mathrm{N} + {}^{0}_{-1}e + \tilde{\nu}_e. $$

Из приведенной схемы распада видно, что массовые числа обоих ядер одинаковы, а зарядовое число дочернего ядра на единицу больше, чем у материнского.

В основе электронного β-распада, как уже отмечалось, лежит превращение в ядре нейтрона в протон:

$$ n \to p + e^- + \tilde{\nu}_e. $$

Поэтому можно определить β^--распад как процесс самопроизвольного превращения нейтрона в протон внутри атомного ядра.

Дочернее ядро, образующееся при β-распаде, может находиться в возбужденном состоянии. При переходе ядра в основное состояние испускается γ-излучение, поэтому β-распад, так же как и α-распад, может сопровождаться испусканием γ-квантов.

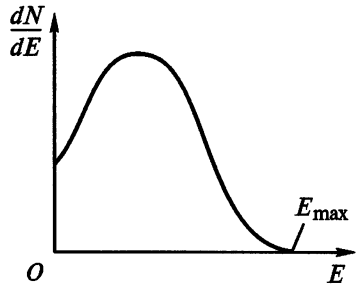


Рис. 7.6. Энергетический спектр электронов при β^--распаде

Как показывают экспериментальные исследования, электроны, образующиеся при β^--распаде, имеют широкий энергетический спектр от нуля до максимального значения $E_{\max}$ (рис. 7.6). Величина dN, определяет число электронов, энергия которых заключена в интервале от E до $E+dE$. Площадь под кривой (см. рис. 7.6) численно равна полному числу электронов, испускаемых радиоактивным препаратом в единицу времени. Энергия $E_{\max}$ определяется разностью значений массы материнского ядра и массы продуктов распада — электрона и дочернего ядра (см. выражение (7.12))

$$E_{\max} = \left[M_{\text{м}} - \left(M_{\text{д}} + m_e\right)\right]c^2.$$

Первоначально, до открытия нейтрино, казалось, что β^--распад протекает с нарушением закона сохранения энергии. Действительно, если бы материнское ядро распадалось только на дочернее ядро и электрон, то энергия электрона, согласно (7.12), не могла быть меньше $E_{\max}$. Для того чтобы объяснить "исчезновение" энергии $\left(\Delta E = E_{\max} - E\right)$, В. Паули в 1932 г. выдвинул гипотезу, согласно которой при β^--распаде испускается еще одна частица, которая и уносит энергию ΔE. Так как эта частица никак себя не проявляла, то следовало предположить, что она электронейтральна и обладает очень малой массой. Эта частица,

названная Э. Ферми нейтрино, что дословно означает "маленький нейтрон", была экспериментально обнаружена лишь в 1956 г. За проведение экспериментальных исследований по обнаружению нейтрино Ф. Райнес и К. Коуэн в 1995 г. были удостоены Нобелевской премии по физике.

Установлено, что существует несколько типов нейтрино: электронное ν_e, мюонное ν_μ, тау-лептонное ν_τ и их античастицы. Тип нейтрино определяется заряженной частицей, вместе с которой нейтрино рождается и с которой взаимодействует. β^--распад сопровождается испусканием электронного антинейтрино $\tilde{\nu}_e$. Именно эта частица и приведена в записанных выше схемах распада. Вопрос о массе нейтрино рассмотрен в 7.4.

2. *Позитронный* β-*распад* (β^+-распад). В случае позитронного β-распада ядро испускает позитрон, в результате чего его зарядовое число Z уменьшается на единицу. Позитронный β-распад осуществляется по схеме

$$^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A}_{Z-1}Y + {}^{0}_{+1}e + \nu_e.$$

В качестве примера приведем превращение азота $^{13}_{7}N$ в углерод $^{13}_{6}C$

$$^{13}_{7}N \rightarrow {}^{13}_{6}C + {}^{0}_{+1}e + \nu_e.$$

Позитронный β-распад сопровождается испусканием позитрона e^+ и нейтрино ν_e, т. е. тех частиц, которые представляют собой античастицы по отношению к частицам, испускаемым при электронном β-распаде (e^- и $\tilde{\nu}_e$).

В основе β^+-распада, как уже отмечалось, лежит превращение в ядре протона в нейтрон:

$$p \rightarrow n + e^+ + \nu_e.$$

Поскольку масса протона меньше массы нейтрона, то для свободного протона такой процесс невозможен по энергетическим соображениям (см. выражение (7.12)). Однако протон, находящийся в ядре, может получать необходимую энергию от других нуклонов ядра.

3. *Электронный захват.* Третий вид β-распада — электронный захват — представляет собой поглощение ядром одного из электронов электронной оболочки своего атома. Чаще всего поглощается электрон из *K*-оболочки, поэтому электронный захват называют еще *K*-захватом. Реже поглощаются электроны из *L*- или *M*-оболочек.

В результате *K*-захвата происходит превращение одного из протонов ядра в нейтрон, сопровождающееся испусканием нейтрино:

$$p + e^- \to n + \nu_e.$$

Схема *K*-захвата имеет следующий вид:

$${}^{A}_{Z}\mathrm{X} + {}^{0}_{-1}e \to {}^{A}_{Z-1}\mathrm{Y} + \nu_e.$$

На освободившееся в результате *K*-захвата место в электронной оболочке атома могут переходить электроны из вышележащих слоев, в результате чего возникает рентгеновское излучение. При исследовании этого излучения был открыт *K*-захват американским физиком Л. Альваресом в 1937 г.

Примером электронного захвата может служить превращение калия ${}^{40}_{19}\mathrm{K}$ в аргон ${}^{40}_{18}\mathrm{Ar}$:

$${}^{40}_{19}\mathrm{K} + {}^{0}_{-1}e \to {}^{40}_{18}\mathrm{Ar} + \nu_e.$$

Подводя итог описанию α- и β-распадов, следует отметить, что α-распад наблюдается только у тяжелых ядер и некоторых ядер редкоземельных элементов. Напротив, β-активные ядра более многочисленны. Практически для каждого атомного номера Z существуют нестабильные изотопы, обладающие $\beta^{\pm}$-активностью.

Энергия, выделяющаяся при β-распаде, лежит в пределах от 0,0186 МэВ $\left({}^{3}_{1}\mathrm{H} \to {}^{3}_{2}\mathrm{He}\right)$ до 16 МэВ $\left({}^{12}_{7}\mathrm{N} \to {}^{12}_{6}\mathrm{C}\right)$. Период полураспада β-активных ядер меняется от 10^{-2} с $\left(\text{для } {}^{12}_{4}\mathrm{Be}\right)$ до $4 \cdot 10^{12}$ лет $\left(\text{для } {}^{187}_{75}\mathrm{Re}\right)$.

Спонтанное деление тяжелых ядер. Самопроизвольное деление тяжелых ядер было впервые обнаружено советскими физиками Г.Н. Флеровым и К.А. Петржаком в 1940 г. у ядер урана. Оно осуществляется по схеме

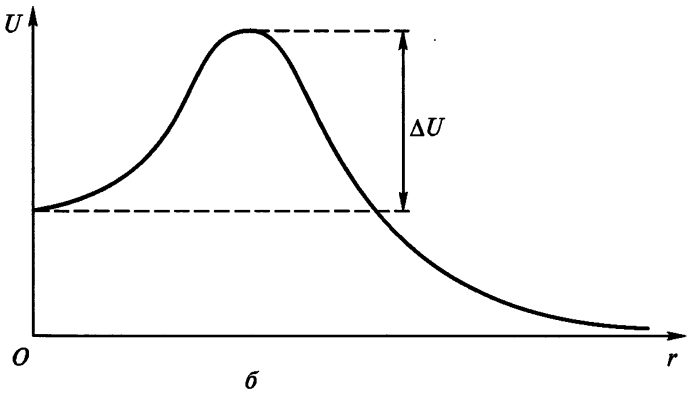
$$^{238}_{92}\mathrm{U} \rightarrow {}^{139}_{54}\mathrm{Xe} + {}^{96}_{38}\mathrm{Sr} + 3\,{}^{1}_{0}n,$$

т. е. ядро урана распадается на ядра ксенона и стронция с испусканием трех нейтронов.

Спонтанное деление, так же как и α-распад, происходит за счет туннельного эффекта. Пользуясь капельной моделью ядра, т. е. считая, что ядро подобно капле жидкости, можно выделить стадии, которые проходит ядро в процессе деления (рис. 7.7, *а*). Соответствующий вид потенциальной энергии ядра U для различных деформаций ядра r представлен на рис. 7.7, *б*.



а



б

Рис. 7.7. Спонтанное деление тяжелого ядра:
а — схема деления; *б* — потенциальный барьер деления

Как и при всяком туннельном эффекте, вероятность спонтанного деления очень сильно (по экспоненциальному закону) зависит от высоты барьера деления ΔU (см. формулу (4.53)). Для изотопов урана и соседних с ним элементов высота барьера деления составляет $\Delta U \approx 6$ МэВ.

Спонтанное деление является основным каналом распада сверхтяжелых ядер. Осколки деления ядер урана U и плутония Pu асимметричны по массе. С ростом массового числа распадающегося ядра осколки деления становятся более симметричными.

Протонная радиоактивность. При протонной радиоактивности ядро испытывает превращения, испуская при этом один или два протона. Протонная радиоактивность впервые была обнаружена в 1963 г. группой советских физиков под руководством Г.Н. Флерова.

Протонная радиоактивность возможна лишь у небольшого числа искусственно получаемых легких ядер, которые характеризуются относительно короткими временами жизни и большим избытком протонов. Однако при проведении эксперимента протонную радиоактивность очень трудно обнаружить из-за сильного фона конкурирующих α- и β^+-распадов, приводящих к образованию изотопов таких же химических элементов.

Радиоактивные ряды. Как уже отмечалось, ядра, возникающие в результате радиоактивных превращений, могут сами оказаться радиоактивными. Они распадаются со скоростью, которая характеризуется их постоянной распада. Новые продукты распада, в свою очередь, могут быть радиоактивными и т. д. В итоге возникает целый ряд радиоактивных превращений.

Все α- и β-радиоактивные элементы можно объединить в четыре радиоактивных ряда, или радиоактивных семейства. Каждый из членов такого ряда получается из предыдущего элемента за счет α- или β-распадов. Каждый ряд имеет своего родоначальника — ядро с наибольшим периодом полураспада. Внутри ряда массовые числа ядер A могут либо быть одинаковыми (при β-распаде), либо отличаться на число, кратное четырем (при α-распаде). Если для всех членов ряда $A = 4n$, где n — целое число, то этот ряд называется рядом $4n$. Соответственно для $A = 4n+1$, $A = 4n+2$, $A = 4n+3$ радиоактивные ряды называются рядом $4n+1$, рядом $4n+2$, рядом $4n+3$.

Родоначальниками этих рядов являются следующие ядра:

$$\text{ряд } 4n \rightarrow \text{уран } {}^{236}_{92}\text{U},$$
$$\text{ряд } 4n+1 \rightarrow \text{нептуний } {}^{237}_{93}\text{Np},$$
$$\text{ряд } 4n+2 \rightarrow \text{уран } {}^{238}_{92}\text{U},$$
$$\text{ряд } 4n+3 \rightarrow \text{уран } {}^{235}_{92}\text{U}.$$

Ряд $4n+1$ — ряд нептуния — состоит из изотопов, не встречающихся в природе, а получающихся искусственным путем (искусственная радиоактивность). Остальные три ряда обусловлены естественной радиоактивностью. Все они заканчиваются различными стабильными изотопами свинца ${}^{208}_{82}\text{Pb}$, ${}^{206}_{82}\text{Pb}$, ${}^{207}_{82}\text{Pb}$.

Приведем в качестве примера ряд $4n$ (рис. 7.8). Этот ряд называется рядом тория, хотя родоначальником его является уран ${}^{236}_{92}\text{U}$.

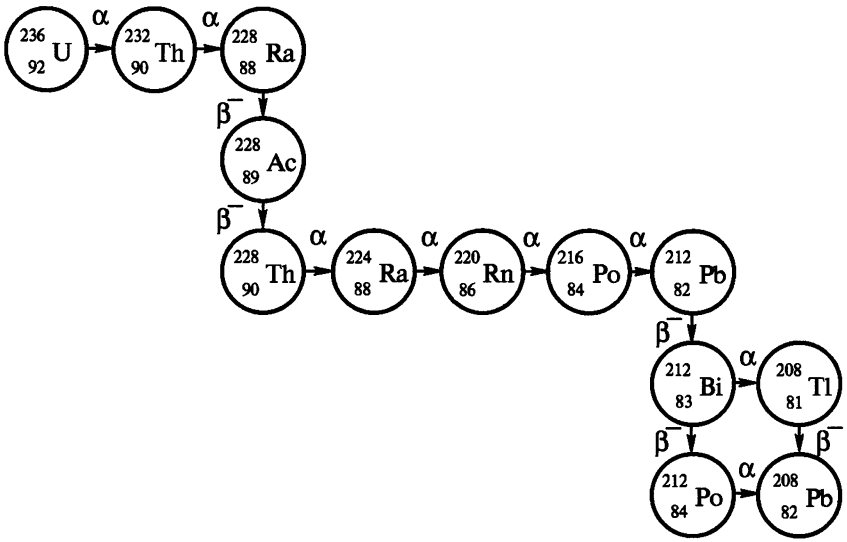


Рис. 7.8. Радиоактивный ряд $4n$ (ряд тория)

Гамма-излучение ядер. Это излучение представляет собой коротковолновое электромагнитное излучение, испускаемое ядрами при переходе из возбужденного состояния в состояние с меньшей энергией. Поскольку ядро является квантовой системой с дискретным набором энергетических уровней (см. задачу 4.5), то и спектр γ-излучения также дискретен.

Энергия γ-квантов E_γ, испускаемых различными ядрами, лежит в диапазоне

$$10 \text{ кэВ} \le E_\gamma \le 5 \text{ МэВ}.$$

Соответствующая длина волны γ-излучения составляет $2 \cdot 10^{-13} \text{ м} \le \lambda \le 10^{-10} \text{ м}$.

Отметим, что изолированный свободный нуклон не может испустить или поглотить γ-квант, так как при этом были бы нарушены законы сохранения энергии и импульса. Это означает, что при испускании γ-излучения ядром γ-квант обменивается импульсом не с одним, а с несколькими нуклонами. Таким образом, испускание γ-излучения является внутриядерным процессом.

Как уже отмечалось, γ-излучение сопровождает α- и β-распады ядер. Это происходит в тех случаях, когда распад с переходом материнского ядра в основное состояние дочернего ядра либо маловероятен, либо запрещен правилами отбора.

Среднее время жизни ядра в возбужденном состоянии различно для разных ядер и обычно находится в пределах $10^{-15} \text{ с} \le \le \tau_n \le 10^{-7} \text{ с}$. За это время ядро переходит на более низкий энергетический уровень, испуская при этом γ-излучение.

Возможен и другой канал перехода ядра в состояние с меньшей энергией — передача избытка энергии непосредственно одному из атомных электронов. Такой процесс называется *внутренней конверсией электронов*, а сами электроны — электронами внутренней конверсии (конверсионными электронами).

Конверсионный электрон (обычно это электрон *K*- или *L*-оболочки), получив энергию от ядра, вырывается из атома, поскольку энергия, передаваемая ему ядром, как правило, заметно превышает энергию связи электронов в атоме. На освободившееся место переходит один из электронов с вышележащих оболочек. Такой процесс сопровождается испусканием рентгеновского излучения.

Эффект Мессбауэра. Явление резонансного испускания и поглощения γ-квантов ядрами атомов кристалла называется эффектом Мессбауэра.

Рассмотрим сначала процесс испускания и поглощения γ-кванта свободным ядром. Пусть покоящееся ядро, переходя из возбужденного состояния в основное, испускает γ-квант с энергией E_γ и импульсом $\vec{p}_\gamma$. В результате ядро приобретает импульс отдачи $\vec{p}_n$ и кинетическую энергию (энергию отдачи) W_n. Если разность энергий основного и возбужденного состояний ядра равна E_0, то из законов сохранения энергии и импульса следует, что

$$E_0 = E_\gamma + W_n, \quad \vec{p}_\gamma + \vec{p}_n = 0. \tag{7.22}$$

Отсюда находим, что энергия отдачи W_n, которая передается ядру при испускании γ-кванта, равна

$$W_n = \frac{p_n^2}{2M_n} = \frac{p_\gamma^2}{2M_n},$$

где M_n — масса ядра. Так как $p_\gamma = \frac{E_\gamma}{c}$, то

$$W_n = \frac{E_\gamma^2}{2M_n c^2}. \tag{7.23}$$

Легко убедиться, что бóльшую часть энергии, выделяемой ядром при испускании γ-излучения, уносит γ-квант. Действительно,

$$\frac{E_\gamma}{W_n} = \frac{E_\gamma}{E_\gamma^2} 2M_n c^2 = \frac{2M_n c^2}{E_\gamma} >> 1,$$

поскольку энергия покоя ядра $M_n c^2$ значительно превышает энергию γ-кванта E_γ. Поэтому в выражении (7.23) можно заменить E_γ на E_0:

$$W_n = \frac{E_0^2}{2M_n c^2}. \qquad (7.24)$$

Именно это выражение и определяет энергию отдачи ядра при испускании γ-кванта.

Рассмотрим теперь процесс поглощения γ-кванта ядром. Ядро, поглощая γ-квант, получает импульс отдачи и энергию отдачи, которая также определяется выражением (7.24). Чтобы сообщить ядру энергию E_0, необходимую для перевода его из основного состояния в возбужденное, энергия налетающего γ-кванта E'_γ должна превысить энергию перехода E_0 на W_n, т. е.

$$E'_\gamma = E_0 + W_n.$$

Таким образом, линии испускания и поглощения γ-квантов ядрами (рис. 7.9) должны быть сдвинуты относительно друг друга по шкале энергии на величину

$$\Delta E = E'_\gamma - E_\gamma = 2W_n. \qquad (7.25)$$

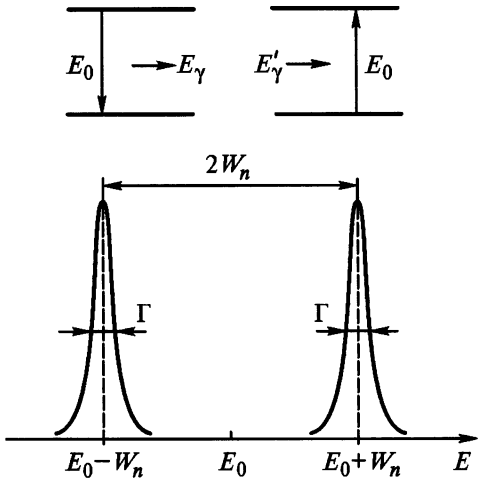


Рис. 7.9. Линии испускания и поглощения ядрами γ-излучения

Поскольку γ-излучение, испускаемое ядрами, имеет энергетическую линию конечной ширины Г, то, для того чтобы можно было наблюдать в эксперименте резонансное поглощение γ-квантов, т. е. поглощение ядром γ-излучения, энергия которого точно равна энергии перехода E_0, необходимо, чтобы линии испускания и поглощения перекрывались. Это означает, что должно выполняться соотношение

$$\Gamma \geq W_n. \qquad (7.26)$$

В рассматриваемом случае изолированного ядра ширина Γ линии излучения является естественной шириной, задаваемой соотношением неопределенностей (2.22)

$$\Gamma \approx \frac{\hbar}{\tau_n},$$

где τ_n — время жизни ядра в возбужденном состоянии.

Приведем оценки ширины линии излучения, испускаемого ядром, и энергии отдачи W_n при испускании γ-квантов ядром изотопа железа $^{57}\mathrm{Fe}$. Энергия перехода из возбужденного в основное состояние для этого ядра составляет $E_0 = 14{,}4$ кэВ, время жизни $\tau_n \approx 10^{-8}$ с, естественная ширина линии $\Gamma \approx 10^{-8}$ эВ. Согласно (7.24), энергия отдачи ядра изотопа железа, у которого $M_n c^2 = 5{,}35 \cdot 10^{10}$ эВ, равна $W_n = 0{,}00193$ эВ.

Поскольку энергия отдачи W_n значительно (на пять порядков) превышает естественную ширину спектральной линии Γ, то условие (7.26) заведомо не выполняется. Аналогичные оценки можно получить и для других ядер. Это означает, что резонансное поглощение γ-квантов изолированными ядрами свободных атомов невозможно.

Совсем иначе обстоит дело, если ядро принадлежит атому, находящемуся в узле кристаллической решетки. В этом случае существует вероятность того, что импульс отдачи будет передан не испускающему γ-квант ядру, а всему кристаллу в целом. При этом энергию отдачи можно определить из выражения (7.24), в котором массу ядра M_n нужно заменить на массу всего кристалла. Поскольку масса кристалла неизмеримо больше массы ядра, то энергия отдачи, передаваемая излучающим ядром кристаллу, ничтожно мала по сравнению с естественной шириной линии Γ

$$W_{\text{кр}} << \Gamma.$$

Таким образом, ядра, находящиеся в кристалле, могут испускать γ-кванты с энергией, практически точно равной энергии ядерного перехода $E_\gamma = E_0$, и с естественной шириной линии Γ.

Эти γ-кванты могут поглощаться такими же ядрами, находящимися в другом кристалле, причем импульс отдачи с определенной вероятностью также может быть передан не поглощающему ядру, а всему кристаллу. В таком процессе ядро поглощает энергию, точно равную энергии возбуждения (разности значений энергий основного и возбужденного состояний ядра) E_0. Это означает, что если ядра находятся в кристалле, т. е. в связанном состоянии, то для них становится возможным резонансное испускание и поглощение γ-излучения. В этом и состоит суть эффекта, открытого в 1958 г. немецким физиком Р. Мессбауэром и названного его именем. Ядра, для которых наблюдается эффект Мессбауэра, называются мессбауэровскими ядрами, а резонансное γ-излучение, испускаемое такими ядрами, — мессбауэровским γ-излучением.

Отметим, что в случае мессбауэровского γ-излучения отсутствует доплеровское уширение линии, связанное с тепловыми колебаниями атомов в узлах кристаллической решетки. Причина этого достаточно очевидна. Период тепловых колебаний атомов составляет $T \sim 10^{-12}...10^{-13}$ с, а время жизни мессбауэровского ядра в возбужденном состоянии τ_n оказывается намного больше. Для различных ядер $\tau_n \sim 10^{-7}...10^{-9}$ с. Находясь в возбужденном состоянии, ядро успевает много раз изменить направление своей скорости, так что ее среднее значение практически равно нулю.

Схема опыта по наблюдению эффекта Мессбауэра приведена на рис. 7.10. Мессбауэровское γ-излучение от источника S проходит через поглотитель A, содержащий резонансные ядра, и регистрируется детектором D. Двигая источник относительно поглотителя со скоростью v, можно за счет эффекта Доплера изменять частоту испущенных γ-квантов и тем самым нарушать условие резонанса.

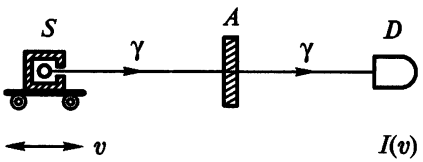


Рис. 7.10. Схема опыта по резонансному поглощению мессбауэровского γ-излучения

Первые опыты по наблюдению эффекта Мессбауэра были выполнены с использованием изотопа иридия ^{191}Ir при низких температурах, что повышало вероятность резонансного испускания и поглощения γ-квантов. В даль-

нейшем был найден ряд мессбауэровских изотопов, в частности изотоп ^{57}Fe, в котором эффект Мессбауэра наблюдается вплоть до температуры 1300 K и характеризуется очень узкой естественной шириной линии.

Характерный вид экспериментальной зависимости интенсивности прошедшего через поглотитель γ-излучения от скорости источника $I(v)$ приведен на рис. 7.11 (в этом эксперименте использовалось мессбауэровское γ-излучение изотопа ^{57}Fe). Кривая зависимости $I(v)$ имеет глубокий провал вблизи резонанса, обусловленный интенсивным поглощением мессбауэровских γ-квантов, и остается практически неизменной вне резонансной области.

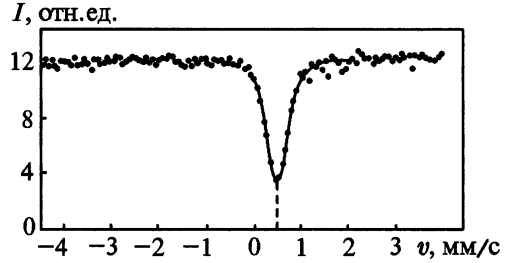


Рис. 7.11. Резонансное поглощение мессбауэровского γ-излучения

Отметим, что в данном опыте γ-резонанс смещен относительно значения $v = 0$. Такое смещение называется изомерным сдвигом, оно обусловлено тем, что мессбауэровские ядра в источнике и поглотителе, как правило, находятся в окружении различных атомов, что вызывает различный сдвиг ядерных уровней и нарушает условие точного резонанса.

Обращает на себя внимание чрезвычайно малая ширина мессбауэровской линии поглощения. Как следует из результатов эксперимента (см. рис. 7.11), чтобы нарушить ядерный γ-резонанс за счет эффекта Доплера, оказывается достаточно двигать источник относительно поглотителя со скоростью всего лишь около 1 мм/с.

Таким образом, благодаря эффекту Мессбауэра исследователи получили метод с уникальным энергетическим разрешением $\frac{\Delta E}{E} = \frac{\Gamma}{E_0}$. Для наиболее широко используемого на практике мес-

сбауэровского изотопа ^{57}Fe это разрешение составляет 10^{-13}, а для изотопа ^{67}Zn оно достигает $5 \cdot 10^{-16}$. Значение открытия Мессбауэра было столь велико, что уже через три года (в 1961 г.) Р. Мессбауэр был удостоен Нобелевской премии по физике.

В настоящее время эффект Мессбауэра находит очень широкое и разнообразное практическое применение. Он используется в физике твердого тела, ядерной физике, химии, биологии, геологии, медицине, археологии, многочисленных технических приложениях, представляя, с одной стороны, удивительный пример единства различных областей самой физики, а с другой — пример неразрывной связи физики с другими естественными науками.

С помощью эффекта Мессбауэра был выполнен ряд уникальных экспериментов, в том числе таких, осуществление которых до его открытия считалось невозможным. В первую очередь это относится к наблюдению предсказанного теорией относительности гравитационного красного смещения — изменения частоты фотона в гравитационном поле Земли. Исследователи назвали этот эксперимент опытом по измерению "кажущегося веса фотона". Расчеты (см. задачу 7.4) показывают, что относительное изменение частоты фотона при его подъеме на высоту $h = 20\,\text{м}$ составляет $\frac{\Delta\omega}{\omega_0} = 2 \cdot 10^{-15}$. Это ничтожно малое смещение частоты было обнаружено в эксперименте, проведенном Р. Паундом и Г. Ребкой с помощью эффекта Мессбауэра в 1959 г. Данные измерений составили $0{,}99 \pm 0{,}05$ от значения, предсказанного теорией.

Задача 7.3. Радиоактивное материнское ядро X с периодом полураспада T_1 превращается в дочернее ядро Y, которое, в свою очередь, распадается с периодом полураспада T_2. Считая, что в начальный момент времени $t = 0$ радиоактивный препарат содержит только материнские ядра, определите, через какое время количество дочерних ядер достигнет максимума. Рассмотрите случай, когда $T_1 = T_2 = T$.

Решение. Пусть в начальный момент времени число материнских ядер составляет N_{10}. Начальное число дочерних ядер, согласно условию задачи, равно нулю. Из закона сложного радиоактивного распада (7.21б) получаем

$$N_2(t) = N_{10}\frac{\lambda_1}{\lambda_2-\lambda_1}\left(e^{-\lambda_1 t}-e^{-\lambda_2 t}\right) = N_{10}\frac{T_2}{T_1-T_2}\left(2^{-t/T_1}-2^{-t/T_2}\right).$$

Взяв производную этого выражения по времени

$$\frac{dN_2}{dt} = \frac{N_{10}\ln 2}{T_1(T_1-T_2)}\left(T_1\cdot 2^{-t/T_2}-T_2\cdot 2^{-t/T_1}\right)$$

и приравняв ее нулю, находим, что в точке экстремума $t = t_m$

$$T_1\cdot 2^{t_m/T_2} = T_2\cdot 2^{t_m/T_1}.$$

Время, по прошествии которого число дочерних ядер Y станет максимальным, равно

$$t_m = \frac{T_1T_2}{T_2-T_1}\frac{\ln\frac{T_2}{T_1}}{\ln 2}.$$

Пусть теперь $T_1 = T$, а $T_2 = T+\varepsilon$, тогда

$$t_m = \frac{T(T+\varepsilon)}{\varepsilon}\frac{\ln\left(1+\frac{\varepsilon}{T}\right)}{\ln 2}.$$

Устремив ε к нулю, получим, что для случая $T_1 = T_2 = T$

$$t_m = \frac{T}{\ln 2}.$$

Задача 7.4. Найдите относительное уменьшение частоты фотона $\frac{\Delta\omega}{\omega_0}$ в гравитационном поле силы тяжести Земли (гравитационное красное смещение) при удалении его от поверхности Земли на расстояние $h = 20$ м.

Решение. Как известно, фотон с частотой ω обладает энергией $E = \hbar\omega$ и гравитационной массой $m_G = \frac{E}{c^2} = \frac{\hbar\omega}{c^2}$. При подъеме фотона в гравитационном поле Земли приращение его энергии на

элементарном перемещении $d\vec{r}$ определяется работой гравитационной силы $\vec{F}_G$ на этом пути

$$dE = d(\hbar\omega) = \left(\vec{F}_G d\vec{r}\right) = -G\frac{\frac{\hbar\omega}{c^2}M_3}{r^2}dr.$$

Здесь G — гравитационная постоянная, M_3 — масса Земли, а знак минус связан с тем, что векторы $\vec{F}_G$ и $d\vec{r}$ направлены противоположно друг другу.

Разделяя переменные ω и r, получаем

$$\frac{d\omega}{\omega} = -G\frac{M_3}{c^2}\frac{dr}{r^2}.$$

Интегрируя это выражение по частоте от ω_0 до ω, а по радиусу от R_3 до $R_3 + h$ (R_3 — радиус Земли), находим, что

$$\ln\frac{\omega}{\omega_0} = \frac{GM_3}{c^2}\left(\frac{1}{R_3+h} - \frac{1}{R_3}\right) = -\frac{GM_3}{R_3(R_3+h)}\frac{h}{c^2} \approx -g\frac{h}{c^2},$$

где g — ускорение свободного падения. При выводе этого соотношения предполагалось, что $h << R_3$.

В итоге, если учесть, что $\frac{gh}{c^2} \ll 1$, то зависимость ω от h примет следующий вид:

$$\omega = \omega_0 \exp\left(-\frac{gh}{c^2}\right) \approx \omega_0\left(1 - \frac{gh}{c^2}\right).$$

Относительное изменение частоты фотона равно

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} = \frac{\omega_0 - \omega}{\omega_0} \approx \frac{gh}{c^2}.$$

Подставляя в полученное выражение численные значения, находим, что для $h = 20$ м

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} = 2\cdot 10^{-15}.$$

Именно это ничтожно малое изменение частоты фотона в гравитационном поле Земли было экспериментально обнаружено Р. Паундом и Г. Ребкой с помощью эффекта Мессбауэра.

7.3. Ядерные реакции

Основные понятия и обозначения. Под термином "ядерная реакция" понимается процесс взаимного превращения атомных ядер при взаимодействии их с субатомными частицами или друг с другом. Обычно такой процесс инициируется столкновением простой или сложной частицы с атомным ядром. Ядерные реакции, как правило, осуществляются при бомбардировке мишеней пучками ускоренных частиц.

Изучение ядерных реакций дает основную научную информацию о структуре и свойствах атомных ядер. В прикладном отношении ядерные реакции служат для получения искусственных радиоактивных изотопов, а также используются в качестве источников получения внутриядерной энергии.

Для описания ядерной реакции обычно применяют универсальную запись, аналогичную принятой в химии. Например, в форме

$$a + {}^{A}_{Z}\mathrm{X} \rightarrow b + {}^{A_1}_{Z_1}\mathrm{Y} \tag{7.27}$$

может быть записана ядерная реакция, в которой в результате столкновения частицы a с ядром X рождается частица b и образуется новое ядро Y.

Запись реакции (7.27) может быть сокращена до обозначения

$${}^{A}_{Z}\mathrm{X}(a,b)\,{}^{A_1}_{Z_1}\mathrm{Y} \tag{7.28}$$

или даже до символа (a, b), в котором не указываются ядра, участвующие в реакции.

Для осуществления реакций с атомными ядрами используются протоны, нейтроны, дейтроны, α-частицы, фотоны, тяжелые ионы и другие частицы. Если испущенная частица тождественна захваченной ($a \equiv b$), то ядерный процесс называется рассеянием. Процесс, в котором ядра поглощают γ-кванты, называется фотоядерной реакцией. Примерами таких реакций являются реакции (γ, p) и (γ, n).

Впервые ядерную реакцию

$$\alpha + {}^{14}_{7}\mathrm{N} \rightarrow p + {}^{17}_{8}\mathrm{O} \tag{7.29}$$

наблюдал в 1919 г. Э. Резерфорд. В этой реакции при облучении

азота α-частицами некоторые ядра азота превращались в ядра кислорода, испуская при этом протоны.

Если ядерная реакция протекает быстро, т. е. за время порядка 10^{-21} с, сравнимое с временем пролета частицей ядра, то такая реакция называется прямой ядерной реакцией. К наиболее изученным прямым реакциям относятся реакции (n, n), (n, p), (p, n), (p, p), а также реакции срыва (d, p), (d, n) и обратные им реакции подхвата (p, d), (n, d). Фигурирующие здесь названия реакций указывают на механизмы их протекания. Так, в реакции срыва один из нуклонов дейтрона при пролете его вблизи ядра срывается ядром и застревает в нем. В реакции подхвата один из нуклонов ядра подхватывается налетающим нуклоном и вылетает вместе с ним из ядра в виде дейтрона.

Существуют, однако, ядерные реакции, которые протекают за время, значительно превышающее время пролета ядра. В этом случае реакция проходит через стадию составного ядра. Механизм осуществления такой ядерной реакции предсказал в 1936 г. Н. Бор. Ядерная реакция такого типа

$$a + {}^{A}_{Z}\mathrm{X} \rightarrow \Pi \rightarrow b + {}^{A_1}_{Z_1}\mathrm{Y} \qquad (7.30)$$

протекает в два этапа.

На первом этапе в результате захвата налетающей частицы a образуется промежуточное ядро Π, которое называется составным ядром. Составное ядро существует значительный с точки зрения ядерных масштабов промежуток времени ($\sim 10^{-16}$ с). За это время энергия налетающей частицы перераспределяется между всеми нуклонами возбужденного составного ядра. За счет флуктуации часть этой энергии может сконцентрироваться на одном или нескольких нуклонах этого ядра. Поэтому на втором этапе реакции эти нуклоны в виде частицы b испускаются составным ядром.

Обычно второй этап ядерной реакции с составным ядром слабо зависит от первого этапа. Поэтому составное ядро может распадаться несколькими различными способами (каналами). Эти способы конкурируют друг с другом, а вероятность реализации того или иного распада (выходного канала реакции) зависит прежде всего от энергии возбуждения составного ядра.

Примером реакции, в которой образуется составное ядро, может служить ядерная реакция

$$\alpha + {}^{8}_{4}\mathrm{Be} \rightarrow {}^{13}_{6}\mathrm{C} \rightarrow n + {}^{12}_{6}\mathrm{C}, \qquad (7.31)$$

которая протекает в альфа-бериллиевом источнике, являющемся одним из важных источников получения быстрых нейтронов в ядерной физике.

Устройство такого источника достаточно просто. В герметичную ампулу помещается смесь бериллия с α-активным препаратом — радием ${}^{226}_{88}\mathrm{Ra}$, полонием ${}^{210}_{84}\mathrm{Po}$, плутонием ${}^{239}_{94}\mathrm{Pu}$ или др. Внутри ампулы α-частицы вступают в реакцию (7.31), образуя нейтроны с энергией несколько мегаэлектрон-вольт, которые свободно выходят наружу из ампулы. Стандартный источник испускает приблизительно 10^6 нейтронов в секунду.

Выделяющуюся при ядерной реакции энергию Q часто вводят в формулу реакции, записывая реакцию X(a, b)Y в виде

$$a + \mathrm{X} \rightarrow b + \mathrm{Y} + Q. \qquad (7.32)$$

Если $Q > 0$, то реакция называется *экзотермической*, т. е. идущей с выделением энергии в виде кинетической энергии продуктов реакции.

Если же $Q < 0$, то реакция идет с поглощением энергии налетающей частицы и называется *эндотермической*. Эндотермические реакции обладают порогом. Так называется минимальная кинетическая энергия относительного движения сталкивающихся частиц, начиная с которой становится возможным протекание ядерной реакции.

Эффективное сечение ядерной реакции. Для оценки вероятности возникновения ядерной реакции X(a, b)Y при прохождении пучка частиц a через слой вещества, содержащий ядра X, рассмотрим сначала слой вещества площадью S и толщиной dx (рис. 7.12). Если концентрацию ядер (атомов) в веществе обозначить $n_я$, то в рассматриваемом слое число таких ядер будет $dN_я = n_я S dx$.

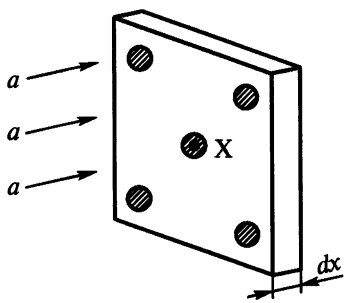


Рис. 7.12. К определению эффективного сечения ядерной реакции

Частица a, летящая перпендикулярно слою вещества, имеет некото-

рую вероятность принять участие в ядерной реакции с ядром X. Эту вероятность можно оценить, введя важную характеристику взаимодействия частиц — эффективное сечение ядерной реакции σ. Для пояснения этой характеристики привлечем следующий геометрический подход. Окружим каждое ядро X мишенью (на рис. 7.12 эти мишени заштрихованы), площадь σ которой такова, что если центр пролетающей частицы "заденет" мишень, то произойдет ядерная реакция. Очевидно, что, чем больше σ, тем больше вероятность ядерной реакции.

Величина

$$\frac{\sigma n_я S dx}{S} = \sigma n_я dx$$

представляет собой относительную долю площади S слоя, перекрытую мишенями. Поэтому именно эта величина определяет вероятность dP того, что частица a, налетающая на слой площадью S, испытает взаимодействие с одним из ядер, которое приведет к ядерной реакции. Следовательно,

$$dP = \sigma n_я dx. \qquad (7.33)$$

Поэтому, если поток частиц, падающих на поверхность за единицу времени, равен J, то общее число ядерных реакций, происшедших в слое за единицу времени, составит

$$JdP = J\sigma n_я dx.$$

Следовательно, ослабление пучка частиц при прохождении слоя толщиной dx определяется из соотношения

$$dJ = -J\sigma n_я dx.$$

Интегрируя это соотношение, получаем закон ослабления пучка частиц после прохождения слоя толщиной x:

$$J = J_0 \exp(-\sigma n_я x),$$

где J_0 — поток частиц при $x = 0$.

Таким образом, измеряя ослабление пучка частиц при прохождении слоя вещества толщиной d, можно экспериментально определить эффективное сечение ядерной реакции

$$\sigma = \frac{1}{n_я d} \ln \frac{J_0}{J(d)}. \qquad (7.34)$$

Эффективное сечение ядерной реакции, имеющее размерность площади, измеряют в барнах (1 барн = 10^{-28} м^2).

Эффективное сечение ядерных реакций обычно возрастает при уменьшении энергии налетающих частиц ($\sigma \sim E^{-\frac{1}{2}}$). Для большинства ядерных реакций эффективное сечение составляет 0,1...10,0 барн. Однако для некоторых реакций, вызываемых медленными нейтронами, σ имеет значение порядка 10^5 барн.

Деление ядер. Наиболее интересными с точки зрения получения ядерной энергии являются реакции деления тяжелых ядер, вызываемые попаданием в ядро нейтрона.

Впервые такую ядерную реакцию деления наблюдали в 1938 г. немецкие ученые О. Ган и Ф. Штрассман. Они обнаружили, что при облучении урана нейтронами образуются щелочные и щелочноземельные элементы периодической системы — барий, лантан, цезий и др. Вскоре австрийские физики Л. Мейтнер и О. Фриш показали, что такой эффект связан с делением ядра урана $^{235}_{92}U$ под действием нейтрона на два ядра-осколка. Принципиально важной особенностью такой реакции оказывается некоторая перегруженность образующихся атомов нейтронами, в результате чего они выделяют несколько нейтронов деления.

Исследования показали, что деление ядра урана может происходить различными способами. Поэтому массы, заряды и энергии возбуждения осколков, образующихся в отдельных актах деления, вообще говоря, могут различаться. Различно и число нейтронов, выделяющихся при делении тяжелого ядра урана. В среднем на каждый акт деления приходится 2,5 новых нейтронов с энергией 1...3 МэВ. Основная масса нейтронов испускается осколками почти мгновенно, т. е. за время, меньшее 10^{-14} с. Однако незначительная доля (около 0,75 %) нейтронов испускается с запаздыванием по времени от 0,5 с до 1 мин.

Одна из наиболее вероятных реакций деления ядра урана происходит следующим образом:

$$^{235}_{92}\mathrm{U} + n \rightarrow {}^{140}_{55}\mathrm{Cs} + {}^{94}_{37}\mathrm{Rb} + 2n + 200\ \text{МэВ}. \qquad (7.35)$$

Бóльшая часть ядерной энергии этой реакции (около 165 МэВ) выделяется в виде кинетической энергии ядер-осколков. Осколки быстро тормозятся в среде, вызывая ее нагрев. Эта нагретая среда и является результатом выделения ядерной энергии.

Испускание при делении ядра урана нескольких нейтронов делает возможным осуществление *цепной реакции деления*. Так называется реакция, в которой частицы, вызывающие реакцию, рождаются сами как продукт реакции. В такой реакции число актов деления растет лавинообразно во времени за счет быстрого возрастания числа нейтронов, способных делить тяжелые ядра.

Пусть, например, в результате реакции деления образуются два нейтрона, которые могут инициировать новые реакции деления. Тогда один исходный нейтрон в k-м поколении деления породит 2^k новых нейтрона. И если время жизни одного поколения составляет порядка $10^{-7}...10^{-8}$ с, то уже через одну микросекунду в среде появятся нейтроны 80 поколений в количестве $2^{80} \approx 10^{24}$ частиц. Эти нейтроны вызовут деление около 140 г урана и высвободят 10^{13} Дж энергии, т. е. столько же, сколько выделяется при сгорании тысячи тонн нефти.

Итак, цепная ядерная реакция деления наблюдается в среде, в которой происходит процесс размножения нейтронов. Такая среда называется активной средой. Важной характеристикой интенсивности размножения нейтронов является коэффициент размножения k. Этот коэффициент равен отношению количества нейтронов в двух последующих поколениях. Если в первом поколении в среде имеется N нейтронов, то в n-м поколении их будет Nk^n.

При $k < 1$ (подкритический режим) число нейтронов со временем не увеличивается и цепная реакция деления не может развиваться.

При $k = 1$ (критический режим) цепная реакция протекает стационарно и число делений в единицу времени в среде остается постоянным.

При $k > 1$ (надкритический режим) число нейтронов возрастает экспоненциально со временем, что соответствует протеканию неуправляемого ядерного взрыва.

Причиной уменьшения коэффициента размножения является прежде всего наличие в среде неделящихся ядер, которые могут захватывать нейтроны. Так, природный уран содержит 99,28 % изотопа $^{238}_{92}\mathrm{U}$ и лишь 0,71 % изотопа $^{235}_{92}\mathrm{U}$. Ядро $^{238}_{92}\mathrm{U}$ делится только под действием быстрых нейтронов, энергия которых $E > 1$ МэВ. При меньших энергиях нейтроны поглощаются этими ядрами без последующего деления (радиационный захват). Образующееся при этом нестабильное ядро $^{239}_{92}\mathrm{U}$ испытывает цепочку радиоактивных превращений

$$^{239}_{92}\mathrm{U} \xrightarrow{(25\ \text{мин})} {}^{239}_{93}\mathrm{Np} \xrightarrow{(2{,}3\ \text{дня})} {}^{239}_{94}\mathrm{Pu}. \qquad (7.36)$$

Период полураспада плутония составляет десятки тысяч лет. Поэтому его можно считать практически стабильным.

На каждое делящееся ядро $^{235}\mathrm{U}$ в природном уране приходится 140 ядер $^{238}\mathrm{U}$, которые захватывают не слишком быстрые нейтроны, не испытывая деления. Поэтому в природном уране цепная реакция развиваться не может. Для того чтобы коэффициент размножения стал больше единицы, необходимо увеличить в уране долю изотопа $^{235}\mathrm{U}$. Такой процесс обогащения урана может быть осуществлен методами разделения изотопов, описанными в 7.1.

К уменьшению коэффициента размножения приводит также выход нейтронов из активной среды, имеющей конечные размеры. Так как число рождающихся нейтронов пропорционально объему активной среды, а их вылет увеличивается с увеличением площади поверхности активной зоны, то цепная реакция деления возможна только в достаточно большом объеме активной среды. Например, для шара радиуса R отношение объема к поверхности равно $\frac{R}{3}$. Следовательно, с увеличением R доля вылетающих из активной зоны нейтронов уменьшается. Характерный размер активной зоны, при котором коэффициент размножения становится равным единице, называется критическим размером, а масса делящегося вещества в активной зоне таких размеров называется *критической массой*.

При массе делящегося вещества меньше критической цепная реакция не протекает. Наоборот, превышение критической массы

ведет к неуправляемой цепной реакции деления в виде ядерного взрыва. Для $^{235}_{92}\mathrm{U}$ в активной зоне сферической формы $R_{кр} = 10$ см, а $M_{кр} = 50$ кг. Считается, что с помощью специальных оболочек, отражающих нейтроны, эту критическую массу можно уменьшить до 250 г.

Ядерный взрыв в атомных бомбах был впервые осуществлен в США в 1945 г., а в СССР в 1949 г. В качестве делящегося материала в этих бомбах использовались изотопы урана $^{235}_{92}\mathrm{U}$ и плутония $^{239}_{94}\mathrm{Pu}$. До взрыва активный материал в таких бомбах находился в подкритическом состоянии в виде нескольких кусков, каждый массой, меньшей $M_{кр}$. Переход в надкритическое состояние осуществлялся быстрым сближением этих кусков с использованием химического взрыва, при котором развивалось высокое ($\approx 10^6$ атм) давление, способствующее сближению кусков и образованию массы делящегося материала больше критической.

Ядерная "взрывчатка" оказалась в миллионы раз эффективнее химической. В результате большого энерговыделения в центре бомбы развивались огромная температура ($\approx 10^8$ K) и давление ($\approx 10^{12}$ атм).

Ядерный реактор. Условия для протекания управляемой цепной реакции деления ($k = 1$) реализуются в ядерных (атомных) реакторах.

Рассмотрим принцип работы ядерного реактора на медленных нейтронах. В таком реакторе управляемая цепная ядерная реакция деления может протекать в природном или в слабо обогащенном изотопом $^{235}_{92}\mathrm{U}$ уране, что достигается введением в реактор специального вещества, которое называется замедлителем. Это вещество слабо поглощает нейтроны, но их энергия существенно уменьшается в результате соударений с ядрами замедлителя.

Необходимость замедления нейтронов обусловлена значительным увеличением эффективного сечения деления ядер урана $^{235}\mathrm{U}$ и уменьшением сечения захвата ядрами урана $^{238}\mathrm{U}$ при снижении энергии нейтрона. Наиболее благоприятным отношение этих сечений оказывается для тепловых нейтронов. Так называют нейтро-

ны, обладающие энергиями порядка kT, сравнимыми со средней энергией теплового движения атомов или молекул активной среды. Для комнатной температуры эта энергия составляет 0,025 эВ. В ядерных реакторах температура среды может значительно превышать комнатную. Поэтому к тепловым нейтронам относят обычно медленные нейтроны с энергией до 0,5 эВ.

Эксперименты показывают, что для тепловых нейтронов эффективное сечение деления ядер ^{235}U составляет $\sigma_1 = 582$ барна, а эффективное сечение захвата ядрами ^{238}U значительно меньше и равно $\sigma_2 = 2{,}73$ барна. Поэтому, хотя в природном уране нейтрон сталкивается с ядрами ^{238}U в 140 раз чаще, чем с ядрами ^{235}U, вероятность радиационного захвата оказывается меньше вероятности реакции деления ядер ^{235}U.

Для тепловых нейтронов в природном необогащенном уране коэффициент размножения $k = 1{,}32$, т. е. $k > 1$. Это означает, что 100 тепловых нейтронов порождают 132 новых нейтрона. Отсюда следует, что проведение реакции деления в природном уране возможно в случае замедления вторичных нейтронов до тепловых энергий.

В качестве замедлителей нейтронов используются водород, бериллий и углерод. На практике твердыми замедлителями являются графит и бериллий, а жидким — тяжелая вода. Уменьшение кинетической энергии нейтрона от 1 МэВ до 0,5 эВ в замедлителе происходит в результате многократных (около 50) соударений нейтрона с ядрами атомов замедлителя.

Активная зона реактора, состоящая из однородной смеси делящегося вещества и замедлителя, называется гомогенной, а система, состоящая из чередующихся твердых блоков ядерного топлива и замедлителя, — гетерогенной.

В *гомогенном реакторе* тяжелая вода и слабо обогащенный делящийся материал перемешаны и составляют жидкую смесь. Такой раствор, или суспензия, заполняет емкость из коррозионностойкой (нержавеющей) стали, окруженную защитным материалом, и циркулирует через теплообменник, где нагревает и испаряет воду в системе с паровой турбиной.

Наиболее распространенным *гетерогенным реактором* является уран-графитовый реактор, в котором блоки урана и графита чередуются, образуя в пространстве правильную решетку. Урановый

блок представляет собой кассету-стержень. Поскольку ядерная энергия выделяется именно в этих стержнях, их называют тепловыделяющими элементами. Активную зону обычно окружают отражателем нейтронов и заключают в стальной кожух (рис. 7.13).

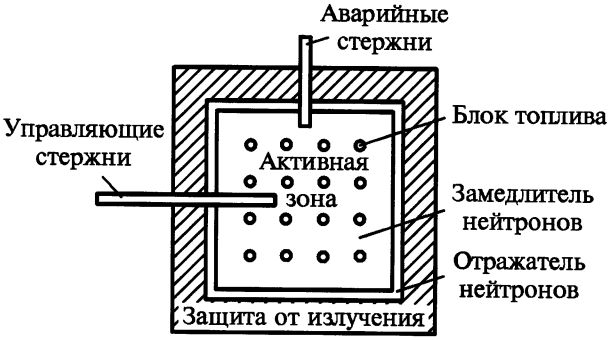


Рис. 7.13. Основные элементы гетерогенного уран-графитового реактора

Отвод теплоты реакции из активной зоны осуществляется теплоносителем, омывающим тепловыделяющий элемент. В качества теплоносителя используются газы, жидкости и жидкие металлы.

Стационарный критический режим в реакторе регулируется управляющими стержнями. Эти стержни выполнены из материалов, сильно поглощающих нейтроны (кадмий, бор). С помощью автоматической регулирующей аппаратуры, в которой используется индикатор мощности реактора, управляющие стержни вводятся в активную зону реактора или выводятся из нее для поддержания коэффициента размножения $k = 1$. Управление работой реактора значительно облегчается тем, что около 0,7 % вторичных нейтронов испускаются с запаздыванием, которое в среднем составляет 10 с. В случае внештатного режима, когда уровень мощности реактора достигает критического значения, аварийные стержни, поглощающие нейтроны, автоматически сбрасываются в зону реактора.

Разработаны и функционируют также ядерные *реакторы на быстрых нейтронах*. В таких реакторах отсутствует замедлитель нейтронов, и основная часть делений вызывается нейтронами с энергией, большей 10 кэВ. Однако такие реакторы могут работать только на обогащенном уране. В природном уране цепная ядерная реакция деления протекать не может. Практически оказывается, что реакцию деления с использованием быстрых нейтронов можно поддерживать

лишь в обогащенной смеси, содержащей не менее 15 % изотопа $^{235}_{92}\mathrm{U}$. В реакторах на быстрых нейтронах к теплоносителю предъявляется дополнительное требование наименьшего замедления нейтронов. Поэтому в таких реакторах, как правило, в качестве теплоносителя используются жидкие металлы (натрий, калий).

Отметим, что под действием нейтронов кроме ядер изотопа $^{235}_{92}\mathrm{U}$ делятся также ядра плутония $^{239}_{94}\mathrm{Pu}$ и изотопа урана $^{233}_{92}\mathrm{U}$. Эти делящиеся материалы получают в реакторах-размножителях. В таких реакторах получают не только полезную мощность, но и новое ядерное топливо, причем в количестве, даже превышающем потребляемое ядерное "горючее". Для этого используются нейтронные потоки из активной зоны реактора.

В реакторе-размножителе активная зона окружена слоем неделящегося вещества. В качестве такого вещества можно использовать природный уран. В этой оболочке ядра $^{238}_{92}\mathrm{U}$, захватывая нейтроны, превращаются в делящиеся ядра $^{239}_{94}\mathrm{Pu}$ в соответствии со схемой (7.36). В оболочке из природного тория $^{232}_{90}\mathrm{Th}$ после захвата нейтронов появляются делящиеся ядра $^{233}_{92}\mathrm{U}$.

Первый уран-графитовый реактор был построен в декабре 1942 г. в США под руководством Э. Ферми. Первый европейский реактор такого же типа был создан в декабре 1946 г. в Москве под руководством И.В. Курчатова. В 1954 г. под руководством Н.А. Доллежаля в СССР (г. Обнинск) была введена в эксплуатацию первая в мире атомная электростанция (АЭС), электрическая мощность которой составляла 5 МВт. В конце XX в. в мире работало уже свыше тысячи энергетических ядерных реакторов различного типа, а доля АЭС в общем энергетическом балансе развитых стран достигала 45 %.

Ядерный реактор является также производителем радиоактивных изотопов. Прежде всего сами продукты деления ядер представляют собой весьма мало распространенные в природе изотопы (например, изотоп $^{95}_{40}\mathrm{Zr}$). Кроме того, радиоактивные изотопы можно получать путем нейтронного облучения элементов, помещенных в активную зону реактора. (Так получают, например, изотоп $^{60}_{27}\mathrm{Co}$.)

Радиоактивные изотопы нашли широкое применение в науке и технике. Они используются для контроля качества литых и сварных изделий, для определения толщины металлического или пластмассового листа в процессе прокатки, для стериализации пищевых продуктов, полимеризации пластмасс, для обнаружения утечки в трубопроводах и др.

Энергия, выделяющаяся в процессе радиоактивного распада, может быть преобразована в другие виды энергии. В специальных световых источниках люминесценция возбуждается радиоактивным излучением. Созданы устройства прямого преобразования энергии излучения в электрическую энергию, мощность которых достигает нескольких киловатт. Такие источники применяются в труднодоступных районах Земли и в космосе. Их можно использовать для питания передающих устройств метеорологических станций, радиомаяков, оборудования на спутниках, а также в биологических экспериментах с искусственным сердцем и др.

Использование радиоактивных изотопов в медицине основано на избирательном накоплении определенных химических веществ в определенных органах тела. Если в состав таких химических соединений ввести радиоактивные ядра, то они могут быть сконцентрированы для облучения различных внутренних органов. Радиоактивные меченые атомы можно использовать для прослеживания путей атомов в биологических процессах и для изучения процессов белкового обмена.

Во всех опытах с радиоактивными изотопами необходимо соблюдать строгие меры радиационной безопасности, обеспечивая эффективную защиту персонала и специальные меры защиты при утилизации отработанных радиоактивных материалов.

Термоядерная реакция. Как уже указывалось в 7.1, ядерная энергия может высвобождаться также при слиянии легких ядер с образованием более тяжелого ядра.

Одной из возможных реакций синтеза легких ядер является ядерная реакция, которая может протекать в смеси из дейтерия и трития:

$$ {}_1^2\mathrm{H} + {}_1^3\mathrm{H} \rightarrow {}_0^1n + {}_2^4\mathrm{He} + 17{,}6 \ \text{МэВ}. \qquad (7.37) $$

Требующийся для этой реакции тритий может быть получен из лития:

$$ {}_0^1n + {}_3^6\mathrm{Li} \rightarrow {}_1^3\mathrm{H} + {}_2^4\mathrm{He}. \qquad (7.38) $$

В реакции синтеза (7.37) энерговыделение в расчете на один нуклон, а значит и на единицу массы ядерного "горючего", в четыре с лишним раза больше, чем в реакции деления (7.35). Однако, для того чтобы получить ядерную энергию в реакции синтеза легких ядер, следует сблизить ядра на расстояние порядка радиуса действия ядерных сил, под действием которых и происходит перестройка структуры нуклонов. Но ядра заряжены одноименным положительным зарядом. Поэтому при их сближении необходимо преодолеть кулоновский барьер высотой порядка 10^4 эВ. Для преодоления такого высокого барьера сталкивающемуся ядру следует сообщить достаточно высокую кинетическую энергию. Это можно сделать, разогрев смесь реагирующих ядер до температуры порядка десятков и даже сотен миллионов градусов. Именно поэтому такие ядерные реакции синтеза получили название термоядерных реакций.

В варианте неуправляемого термоядерного взрыва в водородной бомбе нагрев до таких температур осуществляется взрывом плутониевой атомной бомбы с последующим выделением гигантской энергии реакции синтеза. Первый термоядерный взрыв был осуществлен в СССР в 1953 г.

С более сложными проблемами приходится сталкиваться при осуществлении реакции *управляемого термоядерного синтеза* (УТС). Ясно, что никакой материал стенок термоядерного реактора не в состоянии длительно выдержать температуру порядка $10^7 \ldots 10^8$ К. При таких температурах любое вещество превращается в полностью ионизированную плазму. Но даже кратковременное взаимодействие горячей плазмы со стенкой реактора приведет к охлаждению плазмы до температуры, меньшей термоядерной.

На какое же время τ следует удержать от контакта со стенками высокотемпературную дейтериево-тритиевую плазму, нагретую до температуры 10^8 К? На этот вопрос дает ответ условие Лоусона. Если $n_я$ — объемная концентрация ядер в горячей плазме $d + t$, то, для того чтобы в плазме могла быть осуществлена управляемая термоядерная реакция, необходимо, чтобы параметр удержания $n_я\tau$ был не менее, чем

$$n_я\tau = 10^{14} \text{ с/см}^3 = 10^{20} \text{ с/м}^3. \qquad (7.39)$$

Условие (7.39) называется *критерием Лоусона.*

Таким образом, возникает проблема удержания высокотемпературной плазмы. В основе одной из первых идей магнитного удержания плазмы (И.Е. Тамм, А.Д. Сахаров, 1950) лежит известный в электродинамике пинч-эффект, когда при пропускании тока через проводящую газовую среду возникает взаимодействие тока с создаваемым им магнитным полем, которое сжимает токовый канал. Магнитное поле отжимает высокотемпературную плазму с током от стенок камеры. Соприкосновения плазмы с торцевыми элементами можно избежать, если сделать рабочую камеру в форме тора.

В таких установках, получивших название "Токамак", создание плазмы, ее нагрев до термоядерных температур и отрыв от стенок камеры осуществляют импульсным током газового разряда, вызываемого в плазме индукционным способом. Главная трудность практической реализации магнитной термоизоляции плазмы связана с неустойчивостью плазменного шнура с протекающим током. Например, прямой цилиндрический плазменный шнур, удерживаемый осевым током, не устойчив относительно образования перетяжек и перегибов шнура. Такие первоначально малые деформации экспоненциально нарастают, и за несколько микросекунд разрушают плазменный шнур. Борьба с такими неустойчивостями ведется во многих исследовательских лабораториях мира, и для разреженной плазмы уже достигнуто время удержания, приближающееся к значениям критерия Лоусона.

Другой способ осуществления управляемой термоядерной реакции связан с разогревом, сжатием и удержанием термоядерной мишени с помощью воздействия на нее мощных пучков лазерного излучения (Н.Г. Басов, О.Н. Крохин, 1962). В таких установках для протекания энергетически выгодной термоядерной реакции синтеза критерий Лоусона следует превзойти по крайней мере в сотни раз, так как световая энергия лазерного пучка составляет примерно 1 % от подводимой к лазеру электрической энергии.

Можно с уверенностью предсказать, что термоядерные энергетические установки в XXI в. обеспечат человечество практически неисчерпаемым экологически "чистым" источником энергии.

Термоядерные реакции синтеза играют существенную роль в энергетическом балансе видимой части Вселенной, около 70 % вещества которой составляет водород. Современная астрофизика утверждает, что в недрах звезд и, в частности, в недрах Солнца протекают реакции синтеза ядер. В результате цепи ядерных пре-

вращений, которые объединяются одним названием "цикл", из водорода образуются более тяжелые элементы. Один из возможных циклов протекает с участием ядер изотопа $^{12}_{6}C$, образовавшихся при слиянии трех ядер гелия $^{4}_{2}He$, и называется углеродным циклом (Г. Бете, 1939). Итогом углеродного цикла является превращение четырех ядер водорода (протонов) в ядро гелия. Этот процесс сопровождается выделением 26,8 МэВ энергии. Часть этой энергии в конечном итоге выделяется с поверхности Солнца в виде солнечного излучения, обеспечивающего энергией все жизненные процессы на Земле.

7.4. Элементарные частицы

Различные физические системы и явления, которые в этих системах происходят, можно рассматривать с разных точек зрения. Один из подходов, позволяющих провести анализ и классификацию таких систем, основывается на характерных масштабах системы, т. е. типичных размерах исследуемых объектов и типичных расстояниях R между ними.

Все, что нас окружает и воспринимается нашими органами чувств, представляет собой макромир. Он обладает "обычными", с нашей бытовой точки зрения, размерами и является предметом изучения макроскопической физики.

При анализе явлений, происходящих во Вселенной, т. е. в случае, когда характерные масштабы R очень велики и составляют порядка 10^6 световых лет, мы имеем дело с так называемым мегамиром. Процессы, происходящие в мегамире, изучают космология и астрофизика.

Физические системы, характерные масштабы которых не превышают $R \leq 10^{-8}$ м, относят к области микромира. Законы явлений, происходящих в микромире, изучает квантовая теория. Сказанное проиллюстрировано на рис. 7.14.

В рамках классической макроскопической физики, описывающей макромир, рассматривают два вида существования материи — вещество и поле, причем под полем главным образом понимается электромагнитное поле. Следует, однако, иметь в виду, что в современной физике грань между понятиями вещества и поля прак-

тически полностью стирается. Вещество может превращаться в поле (например, при аннигиляции электрона и позитрона), а поле — в вещество (рождение электрон-позитронных пар).

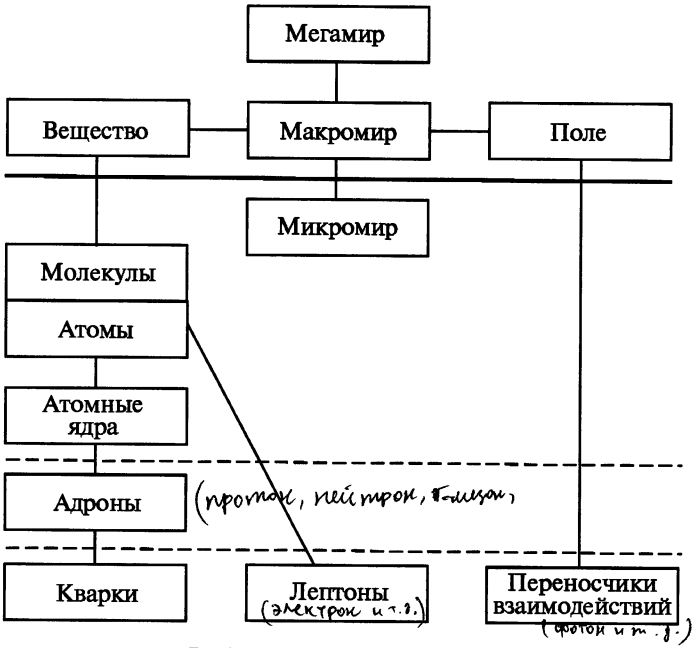


Рис. 7.14. Уровни строения материи

Как известно, в конце XIX в. было окончательно установлено, что вещество состоит из молекул, а молекулы — из атомов. Таким образом, первый уровень микромира — атомно-молекулярный (см. рис. 7.14). Характерный масштаб этого уровня

$$R_{\text{а-м}} \sim 10^{-8}...10^{-10} \text{ м}.$$

Опыты Резерфорда по рассеянию α-частиц привели к созданию планетарной (ядерной) модели атома. Они показали, что в состав атома входит положительно заряженное массивное ядро, которое определяет химическую индивидуальность элементов. Атомные ядра образуют следующий, ядерный, уровень строения материи, характерные масштабы которого

$$R_{\text{я}} \sim 10^{-14}...10^{-15} \text{ м}.$$

Составной частью атома являются также и электроны, но они находятся на более глубоком уровне микромира.

Атомные ядра состоят из нуклонов — протонов и нейтронов. Эти частицы представляют целый класс микрообъектов, которые называются адронами (разъяснение этой и другой терминологии, используемой в этом параграфе, дано далее). Масштабы адронного уровня микромира

$$R_{ад} \sim 10^{-15}\,м.$$

На самом нижнем уровне, доступном для экспериментальных исследований в настоящее время, находятся кварки, лептоны (родоначальником класса лептонов является электрон) и переносчики взаимодействий, в частности фотон.

О переносчиках взаимодействий следует сказать несколько подробнее. В соответствии с квантовой теорией поля взаимодействие между двумя частицами происходит за счет обмена между ними третьей частицей, которая и является переносчиком взаимодействия. В классической физике считается, что, например, электромагнитное взаимодействие осуществляется за счет электромагнитного поля. Согласно квантовой теории, электромагнитное взаимодействие двух заряженных частиц осуществляется за счет обмена между ними фотоном: одна частица испускает фотон, другая — поглощает. Таким образом, фотон является переносчиком электромагнитного взаимодействия. Поскольку наряду с электромагнитным существуют и другие фундаментальные взаимодействия, то существует и очень важный класс микрообъектов — переносчиков взаимодействий — родоначальником которого является фотон.

Уровень элементарных частиц. Строго говоря, элементарными частицами следует называть первичные, неделимые на составные части микрообъекты. Однако, говоря об элементарных частицах, необходимо учитывать интенсивную динамику развития ядерной физики и физики элементарных частиц, особенно в последние десятилетия. Еще совсем недавно считалось, что нуклоны, электроны и фотоны составляют единый уровень элементарных частиц и являются его равноправными членами. Дальнейшие исследования показали, что протон и нейтрон, как и вообще все адроны, являются составными частицами. Они состоят из более фундаментальных частиц — кварков.

В настоящее время по традиции элементарными частицами продолжают называть все субъядерные микрообъекты (на рис. 7.14

находятся под верхней пунктирной линией), хотя многие из них и не являются элементарными в первоначальном смысле этого слова. Термин "элементарная частица" повторил в своем развитии историю термина "атом", который, напомним, в переводе с греческого означает "неделимый".

На данный момент известно около 500 элементарных частиц. В их число наряду с протоном, нейтроном, электроном и фотоном входят π-мезоны, мюоны, τ-лептоны, нейтрино, K-мезоны, гипероны, резонансы и все античастицы. Большинство из этих частиц не являются стабильными, они спонтанно распадаются, превращаясь в другие частицы. Стабильными частицами, т. е. частицами, распад которых к настоящему времени не обнаружен экспериментально, являются фотон, электрон, протон, все виды нейтрино (электронное ν_{e}, мюонное ν_{μ} и τ-лептонное ν_{τ}), а также их античастицы.

Таким образом, согласно современным представлениям, уровень субъядерных элементарных частиц, ранее считавшийся единым, на самом деле разделяется на два уровня. Верхний из них, называемый адронным уровнем, содержит составные частицы. Этот уровень на рис.7.14 находится между верхней и нижней пунктирными линиями. В частности, на нем находятся протон и нейтрон.

На самом нижнем уровне расположены частицы, которые при современном состоянии науки и техники считаются истинно элементарными, т. е. неделимыми на более мелкие составные части. Их еще называют фундаментальными частицами. На этом уровне (на рис.7.14 под нижней пунктирной линией) находятся электрон (и другие лептоны), фотон (и другие переносчики взаимодействий), а также кварки.

Вопрос о том, существуют ли более глубокие уровни строения материи, в настоящее время остается открытым. Такие возможности обсуждаются в научной литературе и даже строятся конкретные теоретические модели, однако ответ на этот вопрос может дать только эксперимент.

Напомним, что, как следует из соотношения неопределенностей (2.16)

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2},$$

для того чтобы исследовать структуры с размерами Δx, нужны зондирующие частицы с импульсом $p \geq \hbar/(2\Delta x)$. Пучки таких

заряженных частиц, необходимых для проведения соответствующих исследований, получают в современных ускорителях. Поскольку полная энергия ультрарелятивистской частицы E связана с ее импульсом соотношением $E = pc$, то для энергии частицы находим

$$E \geq 10^{-7}/\Delta x,$$

где E измеряется в электрон-вольтах, а Δx — в метрах.

Максимальное значение энергии частиц E, достижимое в настоящее время, составляет $E \sim 10^{12}$ эВ $= 10^3$ ГэВ. Согласно полученной выше оценке, этой энергии соответствуют минимальные расстояния $\Delta x \sim 10^{-19}$ м. Отметим, что на этих расстояниях электрон остается бесструктурной, т. е. истинно элементарной, частицей. Но конструируются и строятся новые, еще более мощные ускорители, которые позволят сделать доступными для исследования еще меньшие расстояния.

Основные свойства элементарных частиц. Элементарные частицы имеют чрезвычайно малые массы и размеры. У большинства из них массы сравнимы с массой протона

$$m_p = 1{,}6726 \cdot 10^{-27} \text{ кг}.$$

В физике элементарных частиц принято выражать массу в электрон-вольтах, т. е. вместо массы частицы m_0 приводить значение энергии покоя m_0c^2. В этих единицах масса протона составляет $m_p = 938{,}3$ МэВ. Из всех частиц с ненулевой массой заметно меньшую (в 1836 раз) массу имеет лишь электрон: $m_e = 0{,}91 \cdot 10^{-30}$ кг, или $m_e = 0{,}511$ МэВ. Самая тяжелая из обнаруженных в настоящее время частиц — Z^0-бозон — почти в 100 раз превышает массу протона: $m_{Z^0} = 93$ ГэВ.

Размеры протона, нейтрона, π-мезона и других адронов сравнимы между собой и составляют порядка 10^{-15} м. Размеры электрона и мюона в настоящее время не определены, но они меньше чем 10^{-19} м, т. е. $r_e < 10^{-19}$ м.

Ничтожно малые массы и размеры элементарных частиц обусловливают квантовую специфику их поведения.

Одним из наиболее важных квантовых свойств всех элементарных частиц является способность при взаимодействии с другими частицами рождаться и распадаться, взаимопревращаясь друг в друга. При этом продукты распада частицы возникают только в самом процессе распада. Рассмотрим в качестве примера рождение электрон-позитронной пары. Эти пары образуются при соударении фотонов, обладающих энергией $E_\gamma > 2m_e c^2$, с заряженными частицами, обычно атомными ядрами:

$$\gamma + X \to X + e^- + e^+.$$

Здесь символ X обозначает атомное ядро, наличие которого необходимо для выполнения закона сохранения импульса. Отметим, что электрон и позитрон возникают только в самом процессе рождения пары. До этого их не было совсем, они не входили в состав фотона или атомного ядра.

Важными характеристиками элементарных частиц являются также среднее время жизни, спин, электрический заряд, магнитный момент. Существуют еще лептонный и барионный заряды, о них будет рассказано далее.

Остановимся подробнее на среднем времени жизни τ элементарных частиц. Оно характеризует стабильность частицы. Как следует из экспериментов, фотон, электрон, протон и все три вида нейтрино абсолютно стабильны, также стабильными являются и их античастицы. Во всяком случае, распады этих частиц до сих пор экспериментально не обнаружены.

Оценки времени жизни электрона и протона, полученные из эксперимента, составляют

$$\tau_{e^-} > 4{,}2 \cdot 10^{22} \text{ лет},$$

$$\tau_p > 5 \cdot 10^{32} \text{ лет}.$$

Напомним для сравнения, что время существования нашей Вселенной, по современным представлениям, составляет приблизительно 10^{10} лет.

Однако подавляющее большинство элементарных частиц нестабильно, они самопроизвольно распадаются с образованием дру-

гих частиц. Так, нейтрон является квазистабильной частицей. Среднее время жизни свободного нейтрона

$$\tau_n = 887 \pm 2\,\text{с}.$$

Существуют группы элементарных частиц, среднее время жизни которых имеет порядок 10^{-6}, 10^{-8}, 10^{-10}, 10^{-13} с и т. д. Для самых нестабильных (короткоживущих) частиц $\tau \sim 10^{-23}...10^{-24}$ с.

Важнейшим свойством элементарных частиц является то, что практически каждой частице соответствует своя античастица. Она обозначается с помощью того же символа, но с добавлением знака "тильда" над ним, например, протон p и антипротон $\tilde{p}$.

Существование античастиц предсказал П. Дирак в 1930 г. Согласно теории, частица и античастица должны иметь одинаковые массу, время жизни и спин. Это с высокой степенью точности подтверждается экспериментально. Другие характеристики, такие, например, как электрический заряд и магнитный момент, равны по модулю, но противоположны по знаку.

Приведем примеры частиц и античастиц:

электрон e^- — позитрон $\tilde{e}^-$ (e^+),
протон p — антипротон $\tilde{p}$,
нейтрон n — антинейтрон $\tilde{n}$.

Частицы и античастицы всегда различаются знаками электрических зарядов. Пара нейтрон n — антинейтрон $\tilde{n}$ имеет различные знаки магнитных моментов и барионных зарядов.

Существуют частицы, у которых все заряды (электрический, лептонный и барионный) равны нулю. Такие частицы называются истинно нейтральными, они тождественны своим античастицам. К числу таких частиц относятся фотон, π^0- и η-мезоны.

При столкновении частицы со своей античастицей может происходить их аннигиляция. Так, например, электрон и позитрон, встречаясь друг с другом, могут аннигилировать, рождая два фотона γ-излучения:

$$e^- + e^+ \to 2\gamma.$$

Термин "аннигиляция" в дословном переводе означает уничтожение, однако его не следует понимать буквально. Никакого

уничтожения материи в этом процессе не происходит. Просто один ее вид — вещество (электрон и позитрон) — переходит в другой вид — электромагнитное поле (фотон). При этом выполняется закон сохранения энергии: энергия покоя электрона и позитрона переходит в энергию излучения.

Виды взаимодействий элементарных частиц. В настоящее время известны четыре вида взаимодействий между элементарными частицами: сильное, электромагнитное, слабое и гравитационное. Интенсивность взаимодействия обычно характеризуют с помощью так называемой константы взаимодействия A, которая представляет собой безразмерный параметр. Сила, с которой взаимодействуют частицы, пропорциональна константе взаимодействия A, а вероятность взаимодействия пропорциональна A^2. Значения константы A для различных видов фундаментальных взаимодействий приведены в табл. 7.1. Здесь же даны радиусы действия сил и среднее время жизни частиц, распадающихся за счет данного вида взаимодействия (время распада).

Таблица 7.1

Вид взаимодействия	Константа взаимодействия A	Радиус действия сил r, м	Время распада τ, с
Сильное	1	10^{-15}	10^{-23}
Электромагнитное	10^{-2}	∞	10^{-16}
Слабое	10^{-6}	10^{-18}	10^{-8}
Гравитационное	10^{-38}	∞	—

Константа A для сильного взаимодействия условно принята за единицу, константы для остальных видов взаимодействий определяются относительно сильного взаимодействия. Строго говоря, константы A не являются неизменными, а зависят от энергии взаимодействующих частиц.

Сильное взаимодействие. Это наиболее интенсивное взаимодействие, существующее в природе. В сильное взаимодействие вступает подавляющее большинство всех известных элементарных частиц. Одним из проявлений сильного взаимодействия являются силы, которые связывают нуклоны в атомном ядре. В сильном взаимодействии также участвуют π-мезоны, K-мезоны, гипероны и

другие частицы. При столкновении быстрых частиц именно это взаимодействие приводит к интенсивному рождению новых частиц.

Наибольшее расстояние, на котором проявляется сильное взаимодействие, $r \sim 10^{-15}$ м. Это означает, что сильное взаимодействие является короткодействующим. Время распада частиц, происходящего за счет сильного взаимодействия, $\tau \sim 10^{-23}...10^{-24}$ с.

Частицы, участвующие в сильном взаимодействии, называются *адронами* (от др.-греч. αδρος — сильный). Адроны образуют большинство всех известных элементарных частиц, их общее число превышает 450.

Однако, несмотря на то что сильное взаимодействие обладает наибольшей интенсивностью, его влияние в ряде случаев оказывается ограниченным. Это связано со следующими причинами.

В сильное взаимодействие вступают не все частицы. Например, фотон и электрон в сильном взаимодействии не участвуют. В связи с этим говорят, что сильное взаимодействие не является универсальным, т. е. общим для всех элементарных частиц.

Сильное взаимодействие осуществляется только на очень малых расстояниях. Радиус его действия порядка 10^{-15} м.

Процессы, вызываемые сильным взаимодействием, подчиняются наибольшему числу законов сохранения. В связи с этим говорят, что сильное взаимодействие обладает самой высокой симметрией из всех видов фундаментальных взаимодействий. А каждый закон сохранения, независимо от своего содержания, является ограничением на процесс, в котором этот закон выполняется.

В тех случаях, в которых сильное взаимодействие не проявляется, становятся существенными другие, более слабые фундаментальные взаимодействия.

Электромагнитное взаимодействие. Константа электромагнитного взаимодействия $A \sim 10^{-2}$. Радиус действия электромагнитных сил не ограничен ($r = \infty$). Время распада за счет этого взаимодействия $\tau \sim 10^{-16}$ с.

Электромагнитное взаимодействие заметно слабее сильного, однако в ряде случаев вследствие большого радиуса действия (дальнодействия) электромагнитные силы играют определяющую роль. В частности, эти силы вызывают разлет осколков, образующихся при делении атомных ядер.

Наиболее широко явления, обусловленные электромагнитным взаимодействием, проявляются на расстояниях $10^{-14}\,\text{м} \le r \le 10^{5}$ м. Это взаимодействие ответственно за собственно электрические и магнитные явления, а также за оптические, тепловые, механические и химические явления. Выделение указанной области значений r для электромагнитного взаимодействия очевидно: на меньших расстояниях основную роль играет сильное взаимодействие, а на больших расстояниях становятся существенными еще и гравитационные силы.

Ограниченность проявлений электромагнитного взаимодействия обусловлена следующими обстоятельствами.

1. Поскольку существуют как положительные, так и отрицательные заряды, то имеется большое разнообразие электрически нейтральных систем (простейший пример — атомы). Силы взаимодействия между такими системами могут убывать с расстоянием гораздо быстрее, чем кулоновские силы.

2. Электромагнитное взаимодействие различных частиц может иметь неодинаковую интенсивность. Так, наиболее интенсивными являются кулоновские силы, действующие между заряженными частицами. А вот нейтральные частицы, обладающие спином, например нейтроны, взаимодействуют только через магнитное поле, источником которого являются магнитные моменты частиц. Эти силы гораздо слабее кулоновских. И наконец, такие частицы, как нейтрино, практически не участвуют в электромагнитных взаимодействиях.

3. Процессы, вызываемые электромагнитным взаимодействием, так же как и в случае сильного взаимодействия, подчиняются достаточно большому числу законов сохранения.

Слабое взаимодействие. В слабом взаимодействии участвуют все частицы за исключением фотона, что говорит об универсальности слабого взаимодействия. Константа слабого взаимодействия $A \sim 10^{-6}$.

Слабое взаимодействие является еще более короткодействующим, чем сильное: $r < 10^{-18}$ м. Время распада за счет слабого взаимодействия составляет $\tau \sim 10^{-8}$ с.

Слабое взаимодействие на всех изученных расстояниях существенно уступает сильному и электромагнитному взаимодействиям. Об этом, в частности, свидетельствует тот факт, что поток ней-

трино, которые участвуют только в слабом взаимодействии, практически не ослабляется, проходя через Солнце.

Интенсивность слабого взаимодействия быстро возрастает с уменьшением расстояния между частицами. И, как показывают расчеты, она может сравниться с интенсивностью сильного взаимодействия при расстояниях порядка 10^{-20} м. Однако такие расстояния пока еще недоступны при проведении экспериментальных исследований.

Несмотря на свою малую интенсивность и короткодействие, слабое взаимодействие играет очень важную роль в природе. Оно ответственно за все виды β-распада ядер, за многие распады элементарных частиц (мюонов, π-мезонов и др.), а также за все процессы взаимодействия нейтрино с веществом. Кроме того, слабое взаимодействие играет определяющую роль в реакциях, происходящих на Солнце и других звездах. Ключевым процессом, запускающим цепочку ядерных реакций, благодаря которым светит Солнце, является реакция

$$p + p \rightarrow {}^{2}_{1}\mathrm{H} + e^{+} + \nu_{e},$$

которая идет за счет слабых сил.

Гравитационное взаимодействие. Из всех фундаментальных взаимодействий гравитационное является самым слабым. Константа гравитационного взаимодействия $A \sim 10^{-38}$. Гравитационное взаимодействие испытывают все частицы без исключения, так что оно является абсолютно универсальным. Радиус действия сил гравитации не ограничен, эти силы всегда являются силами притяжения.

Отметим, что гравитационные силы играют существенную роль только для тел с достаточно большой массой. Для элементарных частиц, масса которых ничтожно мала, гравитационное взаимодействие не имеет сколько-нибудь существенного значения. В дальнейшем, говоря о фундаментальных взаимодействиях, мы будем рассматривать только три из них — сильное, электромагнитное и слабое.

Электрослабое взаимодействие. Весьма заманчивой и перспективной является идея, согласно которой рассмотренные выше взаимодействия представляют собой различные проявления одного фундаментального взаимодействия. Мысль о подобной возмож-

ности была высказана еще А. Эйнштейном, который пытался единым образом описать электромагнитное и гравитационное взаимодействия.

В конце 70-х годов XX в. американским физикам Ш. Глэшоу и С. Вайнбергу и пакистанскому физику А. Саламу удалось создать единую теорию электромагнитных и слабых взаимодействий. Эта теория получила название теории электрослабых взаимодействий.

Ранее уже отмечалось, что переносчиками электромагнитного взаимодействия являются фотоны. Согласно теории электрослабых взаимодействий, переносчиками слабых взаимодействий являются три частицы, названные промежуточными векторными бозонами. К ним относятся две заряженные частицы: W^+- и W^--бозоны, а также одна нейтральная частица — Z^0-бозон. Векторными эти частицы называются потому, что их спин равен единице. В этом смысле фотон, спин которого тоже равен единице, также является векторным бозоном.

В теории электрослабых взаимодействий константа слабого взаимодействия A выражается через постоянную тонкой структуры α и массу промежуточного векторного бозона. Теория позволила предсказать значения масс промежуточных бозонов, которые составляли примерно 100 ГэВ.

В 1983 г. промежуточные векторные бозоны были обнаружены экспериментально. Исследования показали, что масса $W^{\pm}$-бозонов $m_{W^{\pm}} = 81$ ГэВ, а масса Z^0-бозона $m_{Z^0} = 93$ ГэВ.

Промежуточные векторные бозоны являются нестабильными частицами, их время жизни $\tau \approx 3 \cdot 10^{-25}$ с. Отметим, что столь ничтожно малое значение τ не явилось препятствием для их достоверного экспериментального обнаружения.

Как уже отмечалось в 7.2, слабое взаимодействие ответственно за β-распад. Это означает, что β-распад (превращение нейтрона в протон или протона в нейтрон) должен проходить с участием промежуточного векторного бозона. Так, рассмотренный в 7.2 β-распад нейтрона $(n \to p + e^- + \tilde{\nu}_e)$ в действительности происходит в две стадии: первая сопровождается рождением промежуточного бозона W^-

$$n \to p + W^-,$$

а вторая — его распадом

$$W^- \to e^- + \tilde{\nu}_e.$$

Таким образом, теория электрослабых взаимодействий получила блестящее экспериментальное подтверждение. Стал актуальным вопрос о большом (или Великом) объединении, идея которого заключается в объединении сильного, слабого и электромагнитного взаимодействий в одно фундаментальное взаимодействие.

История открытия элементарных частиц. Возможность обнаружения элементарных частиц была подготовлена успехами в изучении строения материи, которых добились исследователи к концу XIX в. Первой открытой элементарной частицей был электрон, обнаруженный в 1897 г. Дж.Дж. Томсоном в составе катодных лучей. Экспериментальное доказательство существования фотона было дано в опытах Р. Милликена по фотоэффекту в 1912—1915 гг., а также в опытах А. Комптона по рассеянию рентгеновских лучей на электронах в 1922 г. Протон был обнаружен Э. Резерфордом в 1919 г. в экспериментах по исследованию взаимодействия α-частиц с атомными ядрами. Нейтрон впервые наблюдался в 1932 г. Дж. Чедвиком в опытах по столкновению α-частиц с ядрами бериллия.

Дальнейшее исследование элементарных частиц в 30—40-х годах XX в. было связано с изучением космических лучей. В 1932 г. в их составе К. Андерсоном была открыта первая античастица — позитрон $\tilde{e}$. В 1936 г. К. Андерсон и С. Неддермейер обнаружили в космических лучах мюоны с различными знаками электрического заряда: μ^+ и μ^-. В 1947 г. группой С. Пауэлла в составе космических лучей были открыты заряженные $\pi^{\pm}$-мезоны, а в 1950 г. был обнаружен нейтральный π^0-мезон.

В 1956 г. Ф. Райнес и К. Коуэн в потоке частиц, идущих от ядерного реактора, обнаружили электронное антинейтрино $\tilde{\nu}_e$.

С начала 1950-х годов основным инструментом в исследовании элементарных частиц стали ускорители. В 1955 г. группой Э. Сегре был открыт антипротон $\tilde{p}$, а в 1956 г. был обнаружен

антинейтрон $\tilde{n}$. Начиная с 1960-х годов с помощью ускорителей было открыто большое число элементарных частиц с временем жизни $10^{-22}...10^{-24}$ с. Эти частицы получили название резонансов, они составляют наиболее многочисленную часть всех открытых к настоящему времени элементарных частиц.

В 1962 г. было обнаружено мюонное нейтрино ν_μ, а в 1975 г. был открыт самый тяжелый из лептонов — τ-лептон.

В 1968 г. на Стэнфордском линейном ускорителе были обнаружены партоны — точечные объекты внутри протона, обладающие свойствами кварков.

В 1983 г. К. Руббиа и С. Ван дер Мер в экспериментах на протон-антипротонном коллайдере (установке для столкновений встречных пучков ускоренных частиц) открыли самые тяжелые из всех элементарных частиц — промежуточные векторные $W^{\pm}$- и Z^0-бозоны, подтвердив тем самым теорию электрослабых взаимодействий.

В 1995 г. в лаборатории им. Э. Ферми был обнаружен последний (шестой) t-кварк. В 2000 г. в этой же лаборатории было открыто τ-нейтрино ν_τ.

Классификация элементарных частиц. Элементарные частицы обычно подразделяют на четыре класса (табл. 7.2). Первый класс образуют переносчики взаимодействий. Второй класс составляют лептоны, третий — мезоны и четвертый — барионы.

Таблица 7.2

Переносчики взаимодействий	Лептоны	Адроны		
		Мезоны	Барионы	
			Нуклоны	Гипероны
γ, $W^{\pm}$, Z^0, глюоны	e, μ, τ ν_e, ν_μ, ν_τ	π, K, η и резонансы	p, n	Λ, Σ, Ξ, Ω и резонансы

К переносчикам взаимодействий относятся фотон, $W^{\pm}$- и Z^0-бозоны, а также глюоны. Как уже отмечалось, фотон является

переносчиком электромагнитного взаимодействия, а $W^{\pm}$ и Z^0-бозоны переносят слабое взаимодействие. Глюоны отвечают за сильное взаимодействие, более подробно о них рассказано далее.

Лептоны. Лептонами (от др.-греч. λεπτος — легкий) называются элементарные частицы, не участвующие в сильном взаимодействии и имеющие спин, равный $\frac{1}{2}$, т. е. лептоны являются ферми-частицами. К лептонам относятся: электрон e^-, мюон μ^-, τ^--лептон, все виды нейтрино (электронное ν_e, мюонное ν_μ, τ-лептонное ν_τ), а также их античастицы. Все лептоны участвуют в слабом взаимодействии. Лептоны, имеющие электрический заряд (электроны, мюоны и τ-лептоны), наряду со слабым испытывают также электромагнитное взаимодействие.

Для лептонов была введена новая физическая величина — лептонный заряд L (лептонное квантовое число). По определению, для всех лептонов $L=1$, для антилептонов $L=-1$, для всех остальных частиц $L=0$. На первый взгляд может показаться, что такое введение лептонного заряда носит чисто формальный характер. Однако, как показывает опыт, для лептонного заряда выполняется закон сохранения: при всех взаимодействиях элементарных частиц лептонный заряд остается постоянным.

Поэтому, например, реакция

$$\nu_e + p \to n + e^+,$$

$$L: \quad -1 + 0 = 0 + (-1),$$

в которой суммы лептонных зарядов частиц до взаимодействия и после взаимодействия равны, разрешена и реально протекает (в нижней строчке приведены лептонные заряды частиц). А реакция

$$\tilde{\nu}_e + p \not\to n + e^+,$$

$$L: \quad 1 + 0 = 0 + (-1),$$

в которой лептонный заряд не сохраняется, запрещена и ни разу не наблюдалась в эксперименте.

Отметим, что на самом деле для лептонов вводится не один, а три лептонных заряда. Для электрона e^- и электронного нейтрино ν_e вводится лептонный заряд L_e. Он равен единице для e^- и ν_e, минус единице для их античастиц и нулю для всех остальных частиц. Аналогично для мюона μ^- и мюонного нейтрино ν_μ вводится лептонный заряд L_μ, а для τ-лептона τ^- и τ-лептонного нейтрино ν_τ — лептонный заряд L_τ.

Внутренняя структура лептонов к настоящему времени экспериментально не обнаружена, поэтому их можно отнести к истинно элементарным частицам.

Масса мюона $m_\mu = 105{,}66$ МэВ, среднее время жизни $\tau_\mu = 2{,}2 \cdot 10^{-6}$ с. Масса τ-лептона $m_\tau = 1{,}782$ ГэВ, среднее время жизни $\tau_\tau = 3{,}5 \cdot 10^{-12}$ с.

Чрезвычайно актуальным является вопрос о массе нейтрино. Первоначально полагали, что масса покоя всех видов нейтрино равна нулю. Однако в дальнейшем это предположение было поставлено под сомнение. В настоящее время после многочисленных опытов удалось установить лишь верхние ограничения на массу нейтрино. Так, для электронного нейтрино $m_{\nu_e} < 3$ эВ. Если окажется, что хотя бы один из типов нейтрино имеет массу порядка 10 эВ, это приведет не только к существенным поправкам в картине микромира, но и может иметь фундаментальные космологические и астрофизические последствия. Например, в этом случае из модели горячей Вселенной следовало бы, что общая масса нейтрино во Вселенной превосходит общую массу остального вещества. При этом Вселенная оказалась бы замкнутой.

Образование галактик и скоплений галактик на ранней стадии развития Вселенной могло бы происходить из "конденсаций" нейтринного газа, а затем к таким нейтринным сгусткам стягивалось бы все остальное вещество. Это могло бы объяснить "скрытую" массу галактик, на существование которой указывают результаты наблюдений, а также ряд других астрофизических "загадок".

В итоге физики приходят к интересному заключению: от деталей структуры микрочастиц, в частности от массы нейтрино, зависят

наши представления о процессах, протекающих во Вселенной, т. е. в мегамире.

Мезоны. Как уже отмечалось, элементарные частицы, участвующие в сильном взаимодействии, называются адронами. Адроны, в свою очередь, подразделяются на два класса: мезоны и барионы.

Мезонами (от др.-греч. μέσος — средний, промежуточный) называются адроны, обладающие нулевым или целочисленным спином. К их числу относятся π-, K-, η-мезоны, а также мезонные резонансы, т. е. мезоны с временем жизни порядка 10^{-23} с. Все мезоны являются бозе-частицами.

Они получили такое название в связи с тем, что значения масс первых открытых мезонов (π- и K-мезона) занимали промежуточное положение между массами протона и электрона. В дальнейшем были обнаружены и другие мезоны, причем у некоторых из них масса оказалась больше массы протона.

Мезоны участвуют в сильном, электромагнитном (если имеют электрический заряд) и слабом взаимодействиях.

Барионы. Барионами (от др.-греч. βαρύς — тяжелый) называются адроны, обладающие полуцелым спином. Самым легким из барионов является протон, который, как известно, в 1836 раз тяжелее электрона. Все барионы являются ферми-частицами.

К барионам относятся нуклоны (протон и нейтрон), гипероны и барионные резонансы. Гиперонами называются нестабильные барионы, масса которых больше массы протона, а время жизни велико по сравнению с 10^{-23} с. За время $\tau \sim 10^{-10}...10^{-19}$ с гипероны распадаются с образованием нуклонов и легких частиц (π-мезонов, электронов, нейтрино, γ-квантов). Спин всех гиперонов равен $\frac{1}{2}$, исключением является лишь Ω-гиперон, спин которого составляет $\frac{3}{2}$.

Для барионов вводится барионный заряд B (барионное квантовое число) аналогично тому, как был введен лептонный заряд для лептонов. Считается, что для барионов $B = 1$, для антибарионов $B = -1$, для всех остальных частиц $B = 0$. Опыт показывает, что при всех взаимодействиях элементарных частиц барионный заряд остается постоянным. Это означает, что в микромире выполняется закон сохранения барионного заряда.

Все барионы, за исключением протона, нестабильны. Они распадаются на нуклоны и легкие частицы. Однако в связи с созданием различных моделей единой теории поля (Великого объединения), включающей в себя сильные, электромагнитные и слабые взаимодействия, стабильность протона поставлена под сомнение. В частности, согласно одной из моделей Великого объединения, предсказывается возможность распада протона, например, по каналу

$$p \to e^+ + \pi^0$$

со временем распада порядка $10^{30} \ldots 10^{32}$ лет. Напомним, что, согласно экспериментальным данным, время распада протона составляет более $5 \cdot 10^{32}$ лет. Нестабильность протона, будь она обнаружена, явилась бы подтверждением теории Великого объединения.

Кварковая модель адронов. Большое количество и разнообразие адронов не могло не вызвать сомнения в их "элементарности". Поэтому были предприняты поиски более фундаментальных, первичных частиц, из которых могли быть образованы адроны. В 1964 г. М. Гелл-Манн и Д. Цвейг выдвинули гипотезу, согласно которой все адроны построены из кварков. Гипотеза кварков позволила не только понять структуру уже известных адронов, но и предсказать существование новых частиц.

В настоящее время установлено, что существуют шесть типов кварков: u, d, s, c, b и t. Спин всех кварков равен $\frac{1}{2}$ (кварки являются фермионами), а барионный заряд $B = \frac{1}{3}$. Остальные характеристики кварков приведены в табл. 7.3.

Таблица 7.3

Кварк	Электрический заряд Q, e	Странность S	Шарм (очарование) C	Красота b	Правдивость (истинность) t
u	+2/3	0	0	0	0
d	−1/3	0	0	0	0
s	−1/3	−1	0	0	0
c	+2/3	0	1	0	0
b	−1/3	0	0	1	0
t	+2/3	0	0	0	1

Кварк s является носителем квантовой характеристики — странности S, кварк c — шарма (очарования) C, кварк b — красоты b, кварк t — правдивости (истинности) t. Соответствующие квантовые числа для этих величин приведены в табл. 7.3.

Следует отметить, что кварки существенно отличаются от всех известных частиц — они обладают дробным электрическим (в единицах e) и дробным барионным зарядами. Наличие дробных электрических зарядов у кварков было подтверждено в опытах по прямому просвечиванию нуклонов (и других адронов) быстрыми электронами. Результаты экспериментов показали, что внутри адронов электроны рассеиваются на точечных объектах с электрическими зарядами $+2/3e$ и $-1/3e$.

С точки зрения кварковой модели каждый барион состоит из трех кварков, поскольку только в этом случае барионный заряд составной частицы $B=1$. Так, протон состоит из двух u-кварков и одного d-кварка:

$$p = uud\left(\uparrow\downarrow\uparrow\right).$$

Стрелками здесь отмечена ориентация спинов кварков. В итоге, как и следовало ожидать, электрический заряд протона равен e, а спин $\frac{1}{2}$. Нейтрон состоит из одного u-кварка и двух d-кварков:

$$n = udd\left(\uparrow\downarrow\uparrow\right).$$

Такой кварковый состав обеспечивает электронейтральность нейтрона и спин, равный $\frac{1}{2}$.

У мезонов барионный заряд $B=0$, поэтому ясно, что образовывать мезоны могут только пары кварк — антикварк. Так, π^+-мезон состоит из кварка u и антикварка $\tilde{d}$:

$$\pi^+ = u\tilde{d}\left(\uparrow\downarrow\right).$$

Это обеспечивает электрический заряд π^+-мезона, равный e, и спин, равный нулю. Для π^--мезона соответственно получаем

$$\pi^- = \tilde{u}d\left(\uparrow\downarrow\right).$$

А вот нейтральный π^0-мезон представляет собой линейную суперпозицию состояний $u\tilde{u}$ и $d\tilde{d}$, т. е.

$$\pi^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u\tilde{u} - d\tilde{d}\right),$$

и может с равной вероятностью находиться в каждом из них.

Квантовая хромодинамика. Введение кварковой модели позволило объяснить внутреннюю структуру адронов и свести несколько сотен адронов к различным комбинациям шести кварков и антикварков, образующих связанные состояния. Это было несомненным успехом кварковой модели. Однако на этом пути возникли определенные трудности. Так, в частности, согласно этой модели, Ω^--гиперон (спин которого, напомним, равен $\frac{3}{2}$) должен состоять из трех *s*-кварков с параллельной ориентацией спинов:

$$\Omega^- = sss\left(\uparrow\uparrow\uparrow\right)$$

Но, как уже отмечалось, кварки являются ферми-частицами и, следовательно, подчиняются принципу Паули, согласно которому в одном квантовом состоянии может находиться не более одного фермиона. Здесь же в одном квантовом состоянии оказалась сразу три фермиона, причем подобные проблемы были характерны и для структур некоторых других адронов.

Чтобы снять это противоречие, было введено новое квантовое число — цвет, или цветовой заряд (его не следует связывать с обычным цветом). Цвет кварка может принимать три значения: желтый, красный и синий (голубой), смесь которых считается бесцветной. Именно в этом просматривается аналогия между оптическим и квантовым цветом. Равномерная смесь трех основных цветов и в том и в другом случае оказывается бесцветной (белой).

Очень важным положением квантовой хромодинамики является постулат, который получил название *принципа бесцветности адронов*. Согласно этому постулату, все наблюдаемые в природе адроны бесцветны, т. е. в адронах кварки разного цвета образуют бесцветные комбинации. Кроме того, антикварку приписывают "антицвет", т. е. цветовой заряд со знаком минус, который являет-

ся дополнительным к цвету соответствующего кварка, в результате пара кварк — антикварк также бесцветна.

Введение нового квантового числа — цвета — и принципа бесцветности адронов позволило разрешить отмеченные трудности со структурой Ω^--гиперона и некоторых других частиц. Поскольку Ω^--гиперон является бесцветной частицей, то образующие его три s-кварка должны иметь различный цвет, т. е. отличаться друг от друга значением этого квантового числа. Следовательно, они находятся в разных квантовых состояниях, так что рассмотренная структура Ω^--гиперона согласуется с принципом Паули.

Кварки участвуют в сильном взаимодействии. Переносчиками этого взаимодействия являются частицы, получившие название *глюонов* (от англ. glue — клей). Эти частицы удерживают, как бы "склеивают" кварки в адронах. Глюоны являются электронейтральными безмассовыми частицами. Как и у других переносчиков взаимодействия, спин глюона равен 1, т. е. они представляют собой бозоны.

Важной особенностью глюонов является наличие цвета, причем при испускании и поглощении глюонов цвет кварка может измениться. Таким образом, сильное взаимодействие представляет собой обмен глюонами, т. е. цветом. Поэтому теория, описывающая сильное взаимодействие, называется квантовой хромодинамикой (от др.-греч. χρώμα — цвет). Следует подчеркнуть, что цвет представляет собой очень важную характеристику кварков и глюонов. Для взаимодействий между кварками он играет примерно ту же роль, что и электрический заряд для электромагнитных взаимодействий. В квантовой хромодинамике сила взаимодействия пропорциональна цветовым зарядам (цветам) кварков и равна нулю для бесцветных состояний.

Силы, действующие между кварками, удивительным образом зависят от расстояния. Так, при сближении кварков на малые расстояния, силы взаимодействия убывают, и, чем ближе кварки друг к другу, тем больше они похожи на невзаимодействующие, свободные частицы. Это *свойство* получило название *асимптотической свободы*.

В то же время при увеличении расстояния между кварками сила притяжения между ними возрастает. Эту зависимость можно проиллюстрировать следующим образом. Рассмотрим бесцветный адрон, состоящий из кварка q и антикварка $\tilde{q}$. Силовые линии действующего между ними цветового поля на малых расстояниях по-

добны силовым линиям кулоновского поля двух точечных зарядов e^- и e^+. Однако с увеличением расстояния между частицами вид этих двух силовых полей оказывается существенно различным.

Как известно, при увеличении расстояния между зарядами плотность силовых линий электрического поля убывает, что приводит к уменьшению силы взаимодействия в полном соответствии с законом Кулона. В случае цветового поля в результате взаимодействия глюонов друг с другом силовые линии с увеличением расстояния между кварком и антикварком сжимаются в трубкообразную область (рис. 7.15). При этом плотность силовых линий, а следовательно, и сила взаимодействия между частицами увеличиваются. Значит, чтобы вырвать кварк из адрона, необходимо затратить бесконечно большую энергию.

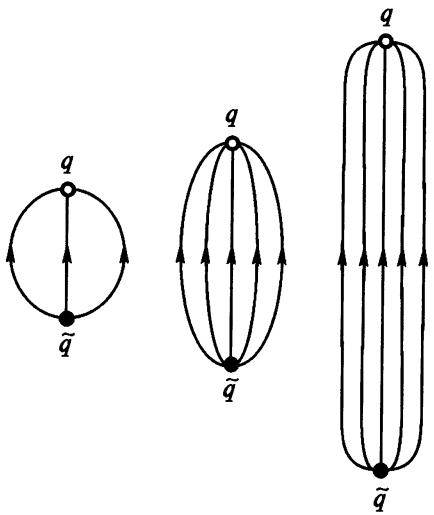


Рис. 7.15. Качественный вид силовых линий цветового поля при увеличении расстояния между кварками

С возрастанием расстояния между q и $\tilde{q}$ потенциальная энергия системы будет увеличиваться до тех пор, пока не станет достаточной для образования пары кварк — антикварк. Дальнейшее растяжение приводит к разрыву трубки цветовых силовых линий с образованием в точке разрыва кварка q и антикварка $\tilde{q}$ (рис. 7.16). При увеличении растяжения трубка делится на три, четыре и т. д. более коротких трубки с меньшей суммарной энергией. Видимо, именно поэтому кварки в свободном состоянии не обнаружены ни в одном эксперименте, несмотря на все попытки исследователей.

Невозможность выделения кварков из адронов получила название *удержание кварков*, или *конфайнмент* (от англ. confinement — пленение, тюремное заключение). "Если эта интерпретация ненаблюдаемости кварков верна, то она дает интересную возможность ограничить бесконечное дробление структуры материи. Атомы

можно разложить на электроны и ядра, ядра — на протоны и нейтроны, а протоны и нейтроны — на кварки, но теория неразделимости кварков предполагает, что на этом все кончается. Трудно представить себе, как частица может иметь внутреннюю структуру, если она даже не может быть образована". Эти слова, характеризующие современное состояние физики элементарных частиц, принадлежат одному из видных специалистов в этой области, лауреату Нобелевской премии по физике Ш. Глэшоу.

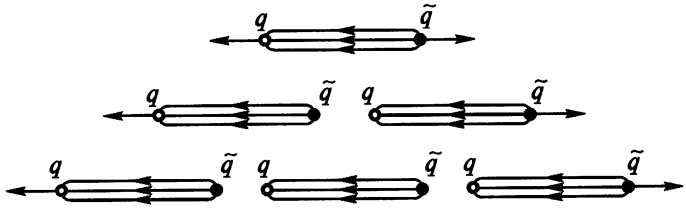


Рис. 7.16. Механизм удержания кварков в бесцветных адронах

Первые эксперименты, подтвердившие наличие кварков в адронах, были выполнены в 1968—1969 гг. на линейном ускорителе электронов в Стэнфорде (США). В этих опытах пучок электронов с энергией 20 ГэВ бомбардировал протоны. Поскольку электроны не участвуют в сильном взаимодействии, то они проникают в глубь протона и взаимодействуют с кварками за счет электромагнитных сил.

В эксперименте анализировались только так называемые глубоконеупругие события, т. е. такие, в которых большая часть энергии и импульса налетающего электрона расходовалась на изменение внутреннего состояния протона. Результаты опытов показали:

1. Внутри протона существуют частицы, названные партонами (от англ. part — часть), размер которых менее 10^{-18} м. В партонах сосредоточена практически вся масса протона, эти частицы могут иметь электрический заряд, а могут быть и электрически нейтральными.

2. Заряженные партоны обладают всеми свойствами кварков: их спин равен $\frac{1}{2}$, а электрический заряд составляет либо $+\frac{2}{3}e$, либо $-\frac{1}{3}e$.

3. Электронейтральные партоны отождествляются с глюонами. На их долю приходится около половины внутреннего импульса протона.

В дальнейшем аналогичные опыты были выполнены также с пучками других лептонов — мюонов и нейтрино, энергия которых составляла 15...200 ГэВ. Во всех этих опытах кварковая структура адронов была подтверждена экспериментально. Глубоконеупругое рассеяние лептонов адронами получило название опыта Резерфорда третьего поколения.

Законы сохранения в мире элементарных частиц. Огромный экспериментальный материал, накопленный в физике элементарных частиц, позволил сформулировать наблюдаемые закономерности в виде законов сохранения. Эти законы можно разделить на точные, т. е. такие, которые выполняются при любых взаимодействиях, и приближенные, которые справедливы не для всех, а лишь для некоторых взаимодействий. К точным законам сохранения относятся:

1. Закон сохранения энергии E.
2. Закон сохранения импульса $\vec{p}$.
3. Закон сохранения момента импульса $\vec{L}$.
4. Закон сохранения электрического заряда Q.
5. Закон сохранения трех лептонных зарядов L_e, L_μ, L_τ.
6. Закон сохранения барионного заряда B.

Приближенными являются законы сохранения странности, шарма (очарования), четности, изотопического спина и некоторые другие. Так, например, закон сохранения четности, выражающий симметрию между правым и левым, выполняется для сильных и электромагнитных взаимодействий, но не выполняется для слабых взаимодействий.

Подчеркнем, что в физике элементарных частиц законы сохранения играют гораздо бóльшую роль, чем в какой-либо другой области физики. Одна из причин этого заключается в том, что, хотя законы сохранения, установленные опытным путем, известны, последовательная теория, следствием которой они должны являться, еще не создана. Поэтому использование законов сохранения позволяет анализировать даже те явления, физическая суть которых еще не понята до конца. Некоторые из этих законов сохранения имеют место и в макроскопической физике, но часть из них является новой.

Кроме того, в области микромира законы сохранения приобретают новое качество по сравнению с аналогичными законами макромира. В макроскопической физике явление, удовлетворяющее всем законам сохранения, может произойти, а может и не произойти. В микромире любое явление, которое удовлетворяет всем законам сохранения, должно произойти обязательно. Вероятность этого явления может быть очень мала, но если только выполняются все законы сохранения, то рано или поздно это явление произойдет.

Все законы сохранения (точные и приближенные) можно разделить на три группы. К первой группе относятся законы, связанные с симметрией четырехмерного пространства — времени. Так, закон сохранения энергии E связан с однородностью времени t, закон сохранения импульса $\vec{p}$ — с однородностью пространства, закон сохранения момента импульса $\vec{L}$ — с изотропностью пространства.

Ко второй группе относятся законы сохранения зарядов — электрического Q, лептонных L_e, L_μ, L_τ и барионного B. Физический смысл симметрии, связанной с каждым из этих зарядов, пока не выяснен. Можно считать, что каждый из этих зарядов характеризует определенное внутреннее свойство частицы.

К третьей группе относятся законы сохранения, выполняемые не для всех, а лишь для некоторых видов фундаментальных взаимодействий: закон сохранения странности, шарма (очарования), четности, изотопического спина и др.

Исследование законов сохранения показывает, что разные взаимодействия обладают различной степенью симметрии. Чем сильнее взаимодействие, тем более оно симметрично, т. е. тем большее число законов сохранения для него выполняется.

Подводя итог описанию элементарных частиц, следует отметить, что в этой области в конце XX — начале XXI вв. произошли подлинно революционные изменения:

1. Установлена кварковая структура адронов, в том числе протона и нейтрона.

2. Создана квантовая хромодинамика — теория сильного взаимодействия кварков. Ряд предсказаний этой теории подтвержден экспериментально.

3. Выявлена общая природа электромагнитных и слабых взаимодействий. Обнаружены частицы, являющиеся переносчиками слабых взаимодействий, — $W^{\pm}$- и Z^0-бозоны.

4. Поставлен вопрос о единой природе всех сил (Великое объединение).

5. Установлена глубокая связь между физикой микромира (физикой элементарных частиц) и физикой мегамира (космологией).

□ **Задача 7.5.** Движущийся позитрон налетает на покоящийся электрон. В результате аннигиляции возникают два γ-кванта с одинаковыми энергиями, летящие так, что угол между направлениями их разлета равен $\theta = 90^\circ$. Определите кинетическую энергию позитрона.

Решение. Для рассматриваемой реакции аннигиляции электрона и позитрона (рис. 7.17) законы сохранения энергии и импульса следует записывать в релятивистской форме, так как энергии покоя частиц играют существенную роль в балансе энергии для такой реакции.

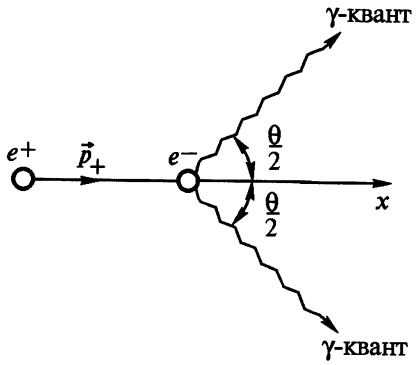


Рис. 7.17. Аннигиляция электрона и позитрона

Закон сохранения энергии для процесса аннигиляции запишем в виде

$$E_к + 2m_0c^2 = 2E_\gamma.$$

Здесь $E_к$ — кинетическая энергия позитрона; m_0c^2 — энергия покоя электрона или позитрона, а E_γ — энергия γ-кванта.

Из закона сохранения импульса в проекции на ось x следует, что

$$p_+ = 2p_\gamma \cos\frac{\theta}{2},$$

где p_+ — импульс движущегося позитрона, а p_γ — импульс γ-кванта. ▽

Так как связь между энергией и импульсом для позитрона и γ-кванта определяется релятивистскими соотношениями

$$p_+c = \sqrt{E_к\left(E_к + 2m_0c^2\right)} \text{ и } p_\gamma c = E_\gamma,$$

то из законов сохранения энергии и импульса получаем

$$\left(E_к + 2m_0c^2\right)^2 = \frac{p_+c}{\cos^2\frac{\theta}{2}} = \frac{E_к\left(E_к + 2m_0c^2\right)}{\cos^2\frac{\theta}{2}}.$$

Отсюда следует, что

$$E_к + 2m_0c^2 = \frac{E_к}{\cos^2\frac{\theta}{2}}.$$

Поэтому окончательно выражение для кинетической энергии позитрона запишем в виде

$$E_к = \frac{2m_0c^2}{\mathrm{tg}^2\frac{\theta}{2}}.$$

Так как энергия покоя электрона (и позитрона) равна 0,5 МэВ, то для угла разлета $\theta = 90^0$ получаем значение кинетической энергии позитрона $E_к = 1$ МэВ.

Заметим, что при $E_к \to 0$ угол разлета $\theta \to 180^\circ$, т. е. при достаточно малых кинетических энергиях электрона и позитрона образующиеся при аннигиляции γ-кванты разлетаются в строго противоположных направлениях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При изложении основных элементов квантовой физики — науки, которая коренным образом изменила представление человечества об окружающем его мире, мы хотели, чтобы читатель не только познакомился с основными идеями и законами квантовой физики, но и узнал, как эти законы применяются на практике. Наша цель заключалась в том, чтобы дать читателю физическое представление о мире, которое, по мнению Р. Фейнмана, "составляет сейчас главную часть истинной культуры нашей эпохи".

Естественно, что в рамках курса общей физики можно говорить лишь о весьма приближенной картине современного состояния квантовой физики. Это объясняется как большой широтой области применения квантовых эффектов, так и тем, что глубокое усвоение законов квантовой физики требует более полных знаний, в том числе и по математике. Авторы надеются, что первое знакомство с квантовой физикой для большинства читателей окажется полезным в их дальнейшей профессиональной деятельности и вызовет у них желание изучать квантовые явления на более глубоком уровне.

В этом пособии, предназначенном для студентов инженерных специальностей технических институтов и университетов, полезно привести высказывание одного из создателей квантовой механики, английского физика-теоретика П. Дирака, окончившего инженерный факультет Бристольского университета: "...Бóльшую часть своей жизни я прожил как физик-исследователь. Какую же роль сыграло в моей жизни то образование, которое я получил? Если бы не инженерное образование, я, наверное, никогда не добился бы успеха в своей последующей деятельности..."

Такое мнение лауреата Нобелевской премии по физике, которой П. Дирак был удостоен в 1933 г. вместе с Э. Шредингером за создание квантовой механики, позволяет авторам пособия надеяться, что и в XXI в. талантливые выпускники технических университетов, имеющие фундаментальную физическую и математическую подготовку, будут также вносить весомый вклад в развитие физики.

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Астахов А.В., Широков Ю.М.* Курс физики: В 3 т. Т. 3: Квантовая физика. М.: Наука, 1983.

2. *Белонучкин В.Е., Заикин Д.А., Ципенюк Ю.М.* Основы физики. Курс общей физики: В 2 т. Т. 2. Квантовая и статическая физика. М.: Физматлит, 2001.

3. *Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики. М.: Наука, 1983.

4. *Борн М.* Атомная физика: Пер. с англ. О.И. Завьялова и В.П. Павлова; Под ред. Б.В. Медведева. М.: Мир, 1970.

5. *Гольдин Л.Л., Новикова Г.И.* Квантовая физика. Вводный курс. М.: Институт компьютерных исследований, 2002.

6. *Иродов И.Е.* Задачи по квантовой физике. М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2001.

7. *Иродов И.Е.* Квантовая физика. Основные законы. М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2001.

8. *Иродов И.Е.* Физика макросистем. Основные законы. М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2001.

9. *Капитонов И.М.* Введение в физику ядра и частиц. М.: Едиториал УРСС, 2002.

10. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Краткий курс теоретической физики: В 2 кн. Кн. 2: Квантовая механика. М.: Наука, 1972.

11. *Мартинсон Л.К., Малов Ю.И.* Дифференциальные уравнения математической физики. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2002. Вып. XII.

12. *Матвеев А.Н.* Атомная физика. М.: Высш. шк., 1989.

13. *Савельев И.В.* Курс общей физики: В 5 кн. Кн. 5. М.: Наука. Физматлит, 1998.

14. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. Атомная и ядерная физика. В 2 ч. Ч. 1. М.: Наука, 1986.

15. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. Атомная и ядерная физика. В 2 ч. Ч. 2. М.: Наука, 1988.

16. *Спроул Р.* Современная физика. Квантовая физика атомов, твердого тела и ядер / Пер. с англ. под ред. В.И. Когана. М.: Наука, 1974.

17. *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. Вып. 8, 9. Квантовая механика / Пер. с англ. Г.И. Копылова; Под ред. Я.А. Смородинского. М.: Мир, 1978.

18. *Физический* энциклопедический словарь. М.: Сов. энциклопедия, 1984.

19. *Широков Ю.М., Юдин Н.П.* Ядерная физика. М.: Наука, 1980.

20. *Шпольский Э.В.* Атомная физика: В 2 т. Т. 1: Введение в атомную физику. М.: Наука, 1984.

ИМЕННОЙ УКАЗАТЕЛЬ

Альварес Луис Уолтер (1911—1988) 428
Андерсон Карл Дэвид (1905—1991) 467
Архимед (287—212 до н.э.) 277

Бак Эрнст (1881—1959) 297
Бальмер Иоганн Якоб (1825—1898) 250, 251, 259, 263, 272
Бардин Джон (1908—1991) 371
Басов Николай Геннадиевич (1922—2001) 307, 308, 313, 314, 454
Беккерель Антуан Анри (1852—1908) 418
Бете Ханс Альбрехт (р.1906) 455
Биннинг Герхард (р.1947) 210
Блохинцев Дмитрий Иванович (1908—1979) 153
Бозе Шатьендранат (1894—1974) 323, 337, 338, 346—349, 358, 369
Больцман Людвиг (1844—1906) 14, 19, 31, 36, 38, 301, 306, 307, 337, 347, 348, 358, 369, 370
Бор Нильс Хендрик Давид (1885—1962) 59, 249, 254, 255, 256, 257, 259, 260, 261, 264, 265, 269, 272, 278—280, 285, 403, 442
Борн Макс (1882—1970) 115, 132, 164
Боте Вальтер (1891—1957) 35, 36
Бройль Луи де (1892—1987) 61—66, 68, 70, 78, 81, 85, 86, 87, 88, 92, 101, 105, 107, 108, 113, 117, 119, 125, 126, 131, 172, 194, 195, 200, 202, 203, 206, 227, 260, 261, 264
Брэгг Генри (1862—1942) 58
Брэгг Лоуренс (1890—1971) 51, 71—76, 84, 86, 87

Вавилов Сергей Иванович (1891—1951) 36
Вайнберг Стивен (р.1933) 466
Вебер Джозеф (р.1919) 307
Вильсон Роберт Вудроу (р.1936) 41
Вильсон Чарлз Томсон Рис (1869—1959) 99
Вин Вильгельм (1864—1928) 16, 17, 19, 31, 32, 33, 41
Вуд Роберт Уильямс (1868—1955) 390
Вульф Георгий Викторович (1863—1925) 51, 71—76, 84, 86, 87

Гамильтон Уильям Роуан (1805—1865) 126, 136, 319
Гамов Георгий Антонович (1904—1968) 40, 424
Ган Отто (1879—1968) 445
Гаудсмит Сэмюэл Абрахам (1902—1979) 284, 285
Гейзенберг Вернер Карл (1901—1976) 61, 92, 94, 95, 96, 100, 113, 158, 160, 164,
167, 403
Гелл-Манн Мюррей (р.1929) 472
Гепперт-Майер Мария (1906—1972) 407
Герлах Вальтер (1889—1979) 48, 282—284
Герни Рональд Уилфрид (1899—1953) 424
Герц Генрих Рудольф (1857—1894) 44
Герц Густав Людвиг (1887—1975) 251, 253, 254
Глэшоу Шелдон Ли (р.1932) 466, 477

Джаван Али (р.1926) 312
Джермер Лестер Халберт (1896—1971) 71—74
Джинс Джеймс Хопвуд (1877—1946) 22, 26, 27, 59
Дирак Поль Адриен Морис (1902—1984) 126, 132, 164, 166, 249, 288, 305, 324, 352, 357—360, 362, 369, 377, 383, 396, 461, 482
Доллежаль Николай Антонович (1899—2000) 451
Доплер Христиан (1803—1853) 16, 42
Дэвиссон Клинтон Джозеф (1881—1958) 71—74

Завойский Евгений Константинович (1907—1976) 297
Зееман Питер (1865—1943) 293—296, 299
Зоммерфельд Арнольд Иоганн Вильгельм (1868—1951) 260

Иваненко Дмитрий Дмитриевич (1904—1994) 403
Иордан Паскуаль (1902—1980) 164

Йенсен Ханс (1907—1973) 407

Камерлинг-Оннес Хейке (1853—1926) 371
Капица Петр Леонидович (1894—1984) 325
Кирхгоф Густав Роберт (1824—1887) 11—14, 19
Комптон Артур Холли (1892—1962) 50—52, 54, 57, 59, 467
Кондон Эдвард (1902—1974) 424
Коуэн Клайд Лорен (1919—1974) 427, 467
Кронекер Леопольд (1823—1891) 143, 181, 239
Крохин Олег Николаевич (р.1932) 454
Купер Леон (р.1930) 371
Курлбаум Фердинанд (1857—1927) 12

Курчатов Игорь Васильевич (1903—1960) 451
Кюри Пьер (1859—1906) 418

Лагранж Жозеф Луи (1736—1813) 342—344, 348, 349, 355, 356
Лайман Теодор (1874—1954) 250
Ландау Лев Давидович (1908—1968) 5
Ланде Альфред (1888—1975) 292, 295, 299
Лаплас Пьер Симон (1749—1827) 124, 134, 135, 171, 191, 266
Латтес Чезаре Мансуэто Джулио (р.1924) 411
Ленард Филипп Эдуард Антон (1862—1947) 44
Ленгли Сэмюэл (1834—1906) 12
Ленгмюр Ирвинг (1881—1957) 382
Лоренц Хендрик Антон (1853—1928) 136, 413
Лоусон Джон Дэвид (р.1923) 453
Люммер Отто Ричард (1860—1925) 12

Максвелл Джеймс Клерк (1831—1879) 36, 337, 347, 348, 358, 369, 370
Мейман Теодор Гарольд (р.1927) 308
Мейтнер Лизе (1878—1968) 445
Менделеев Дмитрий Иванович (1834—1907) 330, 400
Мер Симон ван дер (р.1925) 468
Мессбауэр Рудольф Людвиг (р.1929) 433, 436—438, 440
Милликен Роберт Эндрус (1868—1953) 49, 392, 467

Неддермейер Сэт (р.1907) 467
Неель Луи Эжен Феликс (р.1904) 103
Ньютон Иссак (1643—1727) 34, 58, 162

Оккиалини Джузеппе Станиславо (р.1907) 411

Паули Вольфганг (1900—1958) 324, 327, 329, 330, 338, 352, 354, 357, 358, 361, 395, 399, 400, 426
Паунд Роберт Вивиан (р.1919) 438, 440
Пауэлл Сесиль Фрэнк (1903—1969) 411, 467
Пашен Фридрих (1865—1947) 250, 297
Пензиас Арно Аллан (р.1933) 41
Планк Макс Карл Эрнст Людвиг (1858—1947) 7, 27, 28, 30—32, 34, 42, 44, 49, 124, 251, 255, 304, 350
Пойнтинг Джон Генри (1852—1914) 315
Прингсгейм Эрнст (1859—1917) 12
Прохоров Александр Михайлович (1916—2002) 307, 308, 314
Пуассон Симеон Дени (1781—1840) 79, 80, 155, 276, 397

Райнес Фредерик (1918—1998) 427, 467
Рамзауэр Карл (1879—1955) 79—81, 230
Резерфорд Эрнест (1871—1937) 102, 111, 254, 402, 418, 441, 456, 467, 478
Рёрер Хайнрих (р.1933) 210
Ридберг Иоганнес Роберт (1854—1919) 250, 259, 262
Ричардсон Оуэн Вильямс (1879—1959) 386, 387
Руббиа Карло (р.1934) 468
Рэлей Джон Уильям (1842—1919) 22, 26, 27

Салам Абдус (р.1926) 466
Сахаров Андрей Дмитриевич (1921—1989) 454
Сегре Эмилио (1905—1989) 467
Склодовская-Кюри Мария (1867—1934) 418
Снеллиус Виллеброрд (1580—1626) 87
Стефан Йозеф (1835—1893) 14, 19, 31, 38
Стирлинг Джеймс (1692—1770) 342, 355
Столетов Александр Григорьевич (1839—1896) 45

Тамм Игорь Евгеньевич (1895—1971) 408, 454
Тартаковский Петр Саввич (1895—1940) 71, 75, 77
Таунс Чарлз Хард (р.1915) 307, 308, 314
Томас Левелин Хиллет (р.1903) 395, 396, 398, 399
Томсон Джозеф Джон (1856—1940) 44, 51, 467
Томсон Джордж Паджет (1892—1975) 71, 75, 77

Уленбек Джордж Юджин (1900—1988) 284, 285

Фабрикант Валентин Александрович (1907—1991) 78, 305
Фейнман Ричард Филлипс (1918—1988) 482
Ферми Энрико (1901—1954) 324, 352, 357—360, 362, 364, 365, 367, 369—375, 377, 379, 383, 392, 395, 396, 398, 399, 405, 427, 451, 468
Флеров Георгий Николаевич (1913—1990) 429, 430
Фок Владимир Александрович (1898—1974) 160, 394, 395, 399
Франк Джеймс (1882—1964) 251, 253, 254
Френель Огюстен Жан (1788—1827) 79
Френкель Яков Ильич (1894—1952) 407
Фридман Александр Александрович (1888—1925) 41
Фриш Отто Роберт (1904—1979) 445

Халбан Ханс (1908—1964) 82
Хартри Дуглас Рейнер (1897—1958) 394, 395, 399
Хофштадтер Роберт (1915—1990) 108, 109, 111

Цвейг Джордж (р.1937) 472

Чебышев Пафнутий Львович (1821—1894) 238
Чедвик Джеймс (1891—1974) 403, 467

Шавлов Артур Леонард (р.1921) 308
Шкловский Иосиф Самуилович (1916—1985) 41
Шоттки Вальтер (1886—1976) 379, 387, 389
Шредингер Эрвин (1887—1961) 112, 118, 120, 124—128, 136, 137, 148, 154, 164, 168, 169, 171, 176, 183, 184, 186, 190, 191, 193, 194, 199, 203, 215, 218, 220—222, 224, 227, 235, 247, 249, 265—267, 271, 277, 288, 319—321, 326, 327, 331, 394, 395, 482
Шриффер Джон Роберт (р.1931) 371
Штерн Отто (1888—1969) 282—284
Штрассман Фриц (1902—1980) 445

Эдисон Томас Алва (1847—1931) 381
Эйнштейн Альберт (1879—1955) 7, 34, 44, 47—49, 58, 153, 300—305, 323, 337, 338, 346—349, 358, 369, 466
Эренфест Пауль (1880—1933) 27
Эрмит Шарль (1822—1901) 238

Юкава Хидэки (1907—1981) 409—412
Юнг Томас (1773—1829) 89

Якоби Карл Густав Якоб (1804—1851) 126

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Адроны 463
Альфа-распад радиоактивных ядер 207, 422

Барионы 471
Барьер потенциальный 202
Бета-распад позитронный 427
– – электронный 425
Бозе-газ разреженный 347
Бозе-конденсация 347
Бозе-частицы (бозоны) 323

Вес статистический 340
Взаимодействие гравитационное 465
– сильное 462
– слабое 464
– спин-орбитальное 287
– электромагнитное 463
– электрослабое 465
Видение ночное 17
Волна де Бройля 63

Газ вырожденный 347
– – электронный 369
Гамильтониан 136
Гамма–излучение ядер 432
Гипотеза де Бройля 62
– о спине электрона 284
– Планка о квантах 27
Глюоны 475

Границы применимости классической механики 96

Дейтрон 221
Декогеренция 91
Деление ядер 445
Деление ядер спонтанное 429
Дискретность спектра энергетического 178
Дифракция нейтронов на кристаллах 82
– электронов на поликристаллах 75
– – на совершенном кристалле 71
– – одиночных 78
Дуализм корпускулярно-волновой материи 61
– – – света 59

Задачи квантовой механики стационарные 170
Закон Кирхгофа 12
– радиоактивного распада 418
– сложного радиоактивного распада 421
– смещения Вина 16
– Стефана — Больцмана 14
Законы сохранения в мире элементарных частиц 478
Заселенность энергетических уровней 300
– – – инверсная 305
Захват электронный 428

Излучение вынужденное 303
– реликтовое 41
– спонтанное 301
– тепловое 7
– – Вселенной 40
Изобары 407
Изотоны 407
Изотопы 405
Импульс Ферми 360

Катастрофа ультрафиолетовая 27
Квант 27
Квантование энергии атома 256
Колебания нулевые 236
Конверсия электронов внутренняя 432
Кратность вырождения энергетического уровня 185,188
Критерий Лоусона 453

Лазер 308
Лептоны 469

Магнетон Бора 280
Мазер 308
Масса критическая 447
Мезоны 409, 471
Метод Томаса — Ферми 395
– Хартри — Фока 394
Микроскоп туннельный сканирующий 210
Микроскопия электронная 105
Мода оптического резонатора 311
Модель адронов кварковая 472
– свободных электронов 360
Момент орбитальный магнитный 279
– электрона собственный магнитный 285
– – – механический 285

Накачка оптическая 309
Нейтрон 403
Нейтронография 102
– магнитная 103
Нейтроны медленные 84, 449
– тепловые 82, 448
– холодные 85

Оператор импульса 133
– координаты 132
– линейный самосопряженный (эрмитов) 137
– момента импульса 134
Операторы коммутирующие 157
– энергий 135
Опыт Боте 35
– Дэвиссона и Джермера 72
– Франка — Герца 251
– Штерна — Герлаха 282
Опыты по дифракции нейтронов и пучков частиц 81
Осциллятор квантовый ангармонический 242
– – гармонический 234
Отношение гиромагнитное 279
Отражение надбарьерное 201

"**П**арадокс кошки" Шредингера 120
Плотность квантовых состояний 336
– потока вероятности 129
– энергетической светимости спектральная 9
– энергии интегральная объемная 20
– – спектральная 21
Показатель преломления электронной волны 67, 87
Поля силовые стационарные 170
Полупроводники вырожденные 370
Порог потенциальный 193
– – высокий 194
– – низкий 199
Постоянная распада 419

Постоянная тонкой структуры 288
Постулаты Бора 254
– квантовой механики 114, 132, 148, 153
Правила отбора 238, 280, 296
Преломление электронных волн в металле 67
Принцип бесцветности адронов 474
– Паули 329
– соответствия 180
– суперпозиции квантовых состояний 118
– тождественности одинаковых частиц 321
Пространство фазовое 334
Протон 403

Работа выхода 45, 67, 378
Радиоактивность 416
– кластерная 424
– протонная 430
Распределение Бозе — Эйнштейна 346
– Больцмана 337
– Максвелла 337
– Ферми — Дирака 357
– электронов по импульсам 368
– – по скоростям 368
Реактор гетерогенный 449
– гомогенный 449
– на быстрых нейтронах 450
– ядерный 448
Реакция деления цепная 446
– термоядерная 452
– ядерная экзотермическая 443
– – эндотермическая 443
Резонанс ферромагнитный 298
– электронный парамагнитный 297
– ядерный магнитный 298
Резонатор оптический 311
Ряды радиоактивные 430

Светимость энергетическая 9
Свойства волн де Бройля 63
– волновой функции 116
– многоэлектронных атомов 399
– света волновые 59
– – корпускулярные 59
– собственных функций 140
– частиц волновые 61
Свойство асимптотической свободы 475
Связь Рассел — Саундерса 290
Серии спектральных линий 250
Сечение ядерной реакции эффективное 443
Силы ядерные 407
Синтез термоядерный управляемый 453
Скорость Ферми 360
Следствия из соотношения неопределенностей 98
Смысл волновой функции вероятностный 114
Соотношение неопределенностей Гейзенберга 92
Состояние возбужденное 178
– основное 178
Состояния системы антисимметричные 323
– – симметричные 323
Спектр электрона в атоме водорода энергетический 257
Спектры атомов линейчатые 250
– собственных значений квантово-механических операторов 144
Способность испускательная интегральная 9
– – спектральная 9
– поглощательная интегральная 14
– – спектральная 10

Структура оптического спектра
сверхтонкая 289
– – – тонкая 288

Тело абсолютно черное 11
– серое 11
Температура вырождения 369
– Ферми 365
Теория излучения фотонная 34
– равновесного излучения
квантовая 300
–термоэлектронной эмиссии 383
Термы спектральные 251

Удержание кварков
(конфайнмент) 476
Уравнение Дирака 288
– состояния фотонного газа 36
– Шредингера временное 124
– – для стационарных
состояний 171
– Эйнштейна для внешнего
фотоэффекта 48
Уровни энергетические
эквидистантные 236
Уровень вырожденный
энергетический 185
– метастабильный 309
– (энергия) Ферми 358
Условие нормировки волновой
функции 117
Условия регулярности волновой
функции 117

Фактор Ланде 292
Ферми-газ разреженный 358
Ферми-частицы (фермионы) 323
Фильтрация пучка нейтронов 83
Формула Бальмера
обобщенная 250
– квантования момента
импульса 278
Формула Планка 27
– пространственного
квантования 281
– Ричардсона — Дэшмана 386
– Рэлея — Джинса 22
Формулировка квантовой
механики матричная 164
Фотон 34
Фотоэффект внешний 44
Функции частицы
в одномерной потенциальной
яме волновые 180
Функция волновая 114
– – системы невзаимодействую-
щих частиц 325
– Планка 30
– распределения свободных
электронов по энергиям 363

Характеристики фотонного газа
термодинамические 39
Хромодинамика квантовая 474

Частицы виртуальные 409
Число квантовое 178
– – спиновое 285

Ширина линии естественная 98

Электронография 102
Эмиссия термоэлектронная 380
– электронов из металла
холодная 207, 390
Энергия связи ядра 412
– электрона полная 278
Эффект Зеемана 293
– – простой (нормальный) 294
– – сложный (аномальный) 295
– Комптона 50
– Мессбауэра 433

Эффект Пашена — Бака 297
– Рамзауэра 79, 230
– туннельный 207
– Шоттки 387

Яма потенциальная двумерная 182
– – одномерная 176
Яма потенциальная одномерная с одной бесконечно высокой стенкой 217
– – параболическая 234
– – прямоугольная конечной глубины 223
– – трехмерная 185

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие 5
1. Квантовые свойства излучения 7
1.1. Законы теплового излучения 7
1.2. Квантовая теория излучения 20
1.3. Фотонный газ и его свойства 34
1.4. Квантовая оптика 44
1.5. Корпускулярно-волновой дуализм света 57
2. Волновые свойства частиц 61
2.1. Гипотеза де Бройля 61
2.2. Экспериментальные подтверждения гипотезы де Бройля 70
2.3. Соотношения неопределенностей 88
2.4. Применение микрочастиц для исследования структуры вещества 102
3. Основные постулаты квантовой механики 112
3.1. Волновая функция 113
3.2. Уравнение Шредингера 124
3.3. Вектор плотности потока вероятности 127
3.4. Представление физических величин операторами 132
3.5. Собственные функции и собственные значения операторов 140
3.6. Измерения физических величин в квантовых системах 148
3.7. Одновременное измерение разных физических величин 155
3.8. Матричная формулировка квантовой механики 164
4. Стационарные задачи квантовой механики 169
4.1. Уравнение Шредингера для стационарных состояний 169
4.2. Частица в потенциальной яме с непроницаемыми стенками 175
4.3. Движение частицы в областях потенциального порога и потенциального барьера 192
4.4. Потенциальная яма конечной глубины 217
4.5. Квантовый гармонический осциллятор 234
5. Квантовая теория атома 249
5.1. Квантовые свойства атомов 250
5.2. Теория Бора атома водорода 254

5.3. Квантово-механическое описание водородоподобных атомов ... 264
5.4. Квантовые числа и их физический смысл ... 277
5.5. Опыт Штерна — Герлаха. Гипотеза о спине электрона ... 282
5.6. Атом в магнитном поле ... 290
5.7. Вынужденное излучение атомов ... 300
6. Квантовые статистические распределения ... 317
6.1. Квантово-механическое описание системы многих частиц ... 317
6.2. Плотность квантовых состояний ... 332
6.3. Распределение Бозе — Эйнштейна ... 337
6.4. Распределение Ферми — Дирака ... 352
6.5. Электронный газ в металлах ... 360
6.6. Эмиссия электронов из металла ... 377
6.7. Многоэлектронные атомы ... 394
7. Физика ядра и элементарных частиц ... 402
7.1. Атомное ядро ... 402
7.2. Радиоактивный распад ядер ... 416
7.3. Ядерные реакции ... 441
7.4. Элементарные частицы ... 455
Заключение ... 482
Список рекомендуемой литературы ... 483
Именной указатель ... 484
Предметный указатель ... 489

Учебное издание

ФИЗИКА В ТЕХНИЧЕСКОМ УНИВЕРСИТЕТЕ

Мартинсон Леонид Карлович
Смирнов Евгений Васильевич

Квантовая физика

Редактор *Н.Г. Ковалевская*
Корректор *Е.В. Авалова*
Художник *С.С. Водчиц*
Компьютерная верстка *О.В. Беляевой*

Подписано в печать 11.05.2004. Формат 60×90/16. Печать офсетная.
Бумага офсетная. Печ. л. 31. Уч.-изд. л. 29,5.
Тираж 3000 экз. Заказ № 10329

Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана.
105005, Москва, 2-я Бауманская, 5.

Отпечатано с оригинал-макета
в ГУП ППП «Типография «Наука».
121099, Москва, Шубинский пер., 6.

ISBN 5-7038-2438-9