

В этой главе мы, в основном, будем рассматривать те эксперименты, результаты которых привели к необходимости пересмотреть основы классической физики и создать новую науку – квантовую физику. Классическая физика вошла в нее как часть. Далее мы рассмотрим основные положения квантовой физики и довольно кратко изложим основные результаты ее применения к микромиру – атомную и ядерную физику.

VI.1. Внешний фотоэффект

В соответствие с идеей Планка при тепловом излучении обмен энергией между атомами и электромагнитным полем происходит порциями. Из этого еще не следует никаких выводов о дискретности энергии электромагнитного поля. Для такого вывода нужны эксперименты. Одним из таких экспериментов явился эксперимент по фотоэффекту. Открыто это явление было в 1887 году Герцем и исследовано Столетовым в 1887-1889 годах. Суть этого явления заключается в том, что при освещении ЭМВ катода вакуумного диода в диоде появлялся электрический ток.

Попробуем теоретически получить основные законы фотоэффекта на основе классической электродинамики. Согласно ей энергия электромагнитного поля $E_{ЭМП}$ в объеме V определяется так

$$I = \langle S \rangle = cu; u = \frac{dE_{ЭМП}}{dV}; E_{ЭМП} = \frac{I}{c} V = \frac{1}{2c} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} n E_m^2 = \frac{1}{2} \epsilon_0 n E_m^2,$$

где I – интенсивность светового потока. Она может быть сколь угодно мала, что подтверждается большим числом экспериментов. Теперь предложим классическое объяснение фотоэффекта: электроны в металле находятся в связанном состоянии (в «яме»), и, чтобы освободить электрон, нужна энергия, равная работе выхода $A_{ВЫХ}$. По закону сохранения энергии

$$\Delta E = A_{ВЫХ} + E_{КИН},$$

где $E_{КИН}$ – кинетическая энергия вылетевшего электрона, а ΔE – энергия, сообщенная электрону электромагнитной волной. Поэтому классическая электродинамика предсказывает: а) порог по ΔE , а следовательно по интенсивности I ($\Delta E < A_{ВЫХ}$);

б) $E_{КИН} \sim \Delta E$, то есть кинетическая энергия электрона должна быть пропорциональна интенсивности падающего излучения.

Однако тщательные эксперименты Столетова показали, что

а) наблюдается порог по частоте падающей волны (красная граница), но нет порога по интенсивности I ;

б) скорость вылетающих электронов не зависит от интенсивности I , а зависит от частоты падающей волны ω .

Ученым стало ясно, что интенсивность ЭМВ не всегда полностью определяет энергию ЭМВ и надо пересматривать классическую электродинамику для таких случаев. Выход из создавшегося положения был предложен Эйнштейном в 1905 году. Он предположил, что энергия электромагнитного поля дискретна и квант ее энергии определяется как $\hbar\omega$, то есть энергия электромагнитного поля определенной частоты равна $E_{ЭМП}(\omega) = N(\hbar\omega)$. Тогда, следуя Эйнштейну, при фотоэффекте электрону в металле передается один квант энергии $\Delta E = \hbar\omega$ и уравнение Эйнштейна для фотоэффекта приобретает вид

$$\hbar\omega = A_{ВЫХ} + E_{КИН}.$$

Этот результат отлично согласуется с экспериментом, и явился основой докторской диссертации Эйнштейна. Эйнштейн пошел дальше и разработал корпускулярную теорию света. Согласно ей, свет в некоторых явлениях, таких как фотоэффект, ведет себя как поток частиц – фотонов, которые имеют импульс и энергию в соответствии с формулами

$$E_{\phi} = \hbar\omega \quad \vec{p}_{\phi} = \frac{E_{\phi}}{c} \vec{n} = \frac{\hbar\omega}{c} \vec{n} \quad \vec{p}_{\text{эмп}}(\omega) = N \frac{\hbar\omega}{c} \vec{n} = N(\hbar\vec{k}).$$

В этих формулах \vec{n} - единичный вектор, N - число фотонов определенной частоты, а \vec{k} - волновой вектор, модуль которого равен $k = \omega/c = 2\pi/\lambda$. Чтобы определить массу покоя фотона, вспомним инвариант из СТО: $E^2 - p^2c^2 = m_0^2c^4$, откуда получаем $m_{0\phi} = 0$.

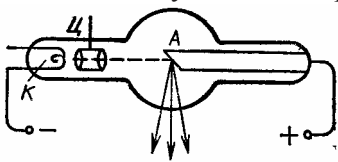
Итак, можно представлять электромагнитную волну как поток фотонов с нулевой массой покоя и скоростью движения равной скорости света. Для изучения фотоэффекта и, как покажет дальнейшее изучение явлений микромира, некоторых других явлений это важно. Но при обычных условиях дискретность ЭМП не проявляется, так как энергия одного фотона очень мала. Чтобы передать большую энергию фотонов должно быть огромное количество. Например, электрическая лампа накаливания мощностью 100 Вт испускает в

секунду $N = \frac{P}{\hbar\omega_{\text{ср}}} = 10^{20}$ фотонов. При таком их количестве дискретность не проявляется

никак.

VI.2. Тормозное рентгеновское излучение.

Рассмотрим еще один эксперимент, результаты которого классическая физика объяснить не могла. Суть явления в следующем: при облучении стекол и металлов быстрыми электронами возникает излучение, которое мы теперь называем рентгеновским. Обнаружил его впервые в

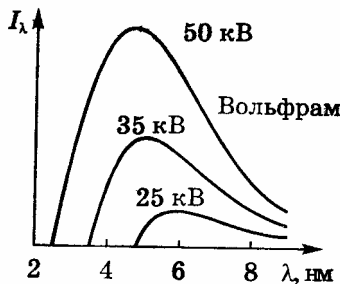


1895 году Рентген. Наблюдать это явление можно следующим образом. На анод специально сконструированного диода подается высокое напряжение. При этом из катода за счет термоэлектронной эмиссии вылетают электроны и под действием ускоряющего поля анода движутся к нему. При полете они

фокусируются устройством Ц. При подлете к аноду они тормозятся, и при торможении излучают энергию. За счет взаимодействия с электронами изменяется состояние заряженных частиц самого анода, и он тоже излучает, но это излучение можно отделить и не

рассматривать. Основная энергия излучающих электронов выделяется в виде тепла в аноде, которому из-за этого требуется охлаждение, и лишь 1-3 % энергии электронов излучается.

Самое интересное заключается в том, что спектр тормозного излучения имеет вид кривой с максимумом и резким краем со стороны коротких волн. Экспериментально установлено, что



$$\lambda_{\text{min}}^{(\text{нм})} = \frac{1239}{U(\text{В})}.$$

С точки зрения классической физики, при торможении электроны могут излучать энергию со всеми возможными длинами волн и никакого края излучения быть не может.

Объяснение этому явлению может быть найдено в рамках корпускулярной теории света.

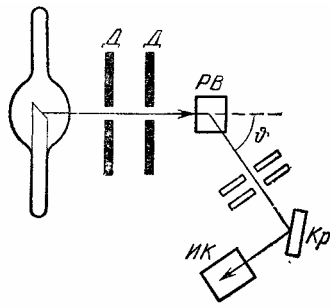
Электроны испускают энергию квантами по $\hbar\omega$ и максимальная энергия излученного кванта может быть в том случае, когда электрон излучил всю энергию, полученную им от ускоряющего поля анода. Записав соответствующие формулы, получаем

$$eU = \hbar\omega = \frac{2\pi c\hbar}{\lambda} \quad \text{и} \quad \lambda_{\text{min}} = \frac{2\pi c\hbar}{eU}.$$

Из сравнения теории и эксперимента было получено значение постоянной Планка, хорошо согласующееся с данными других экспериментов.

VI.3. Эффект Комптона.

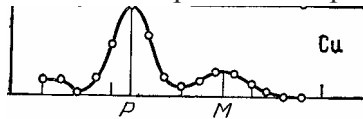
Завершаем серию экспериментов, связанных с квантованием энергии электромагнитного



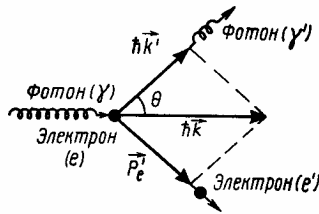
поля. 1923 год. Комптон, исследуя рассеяние рентгеновских лучей различными веществами, обнаружил, что в рассеянных лучах наряду с исходной волной (длина волны λ) присутствует излучение с другой длиной волны λ' . Наблюдение производилось с помощью установки, изображенной на рисунке. Рентгеновские лучи, пройдя через монохроматор (диафрагма на рисунке), попадают на рассеивающее вещество (PB) и затем принимаются с помощью рентгеновского спектрометра. Разность длин волн рассеянного и исходного излучений зависела от угла θ между

рассеянным и падающим пучками $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = f(\theta)$, но больше не зависела ни от чего: ни от вида PB, ни от длины волны падающего излучения. На рисунке показан вид спектра рассеянного излучения для меди. По вертикали отложена интенсивность рассеянного излучения, по горизонтали – длина волны. P отображает несмещенную линию излучения PB на длине волны λ , а M отображает смещенную линию излучения PB λ' . Согласно классической физике, падающая волна может вызвать в веществе вынужденные колебания частиц с той же частотой, что у вынуждающей силы. В результате вещество может излучать волны той же длины волны, что и падающая.

Выход был предложен в рамках квантовой физики. В этой науке свет рассматривается как



поток фотонов. Эти фотоны, налетая на свободные электроны вещества, взаимодействуют с ними по законам упругих шаров. Для такого столкновения фотона и электрона, которое изображено на рисунке, можно записать законы сохранения энергии и импульса. В силу малости частиц эти законы надо писать с учетом специальной теории относительности. В результате получаем следующие уравнения:



$$\hbar\omega + m_0c^2 = \hbar\omega' + \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} \quad \text{- закон сохранения энергии;}$$

$$\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \vec{p} \quad \text{- закон сохранения импульса.}$$

Рассматривается столкновение фотона со свободным электроном, так как для связанного электрона этот эффект наблюдаться не будет. Прделав несложные, но требующие внимания вычисления, получаем формулу для искомой разницы длин волн:

$$\lambda' = \lambda \left(1 + \frac{2\pi\hbar}{m_0c\lambda} (1 - \cos\theta) \right); \quad \Delta\lambda = \lambda_c (1 - \cos\theta); \quad \lambda_c = \frac{2\pi\hbar}{m_0c}.$$

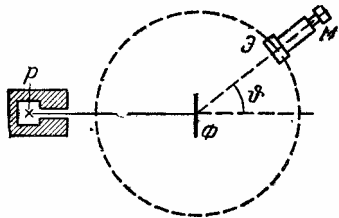
Величину λ_c называют комптоновской длиной волны. Существенной деталью этого результата является то, что разность длин волн зависит от постоянной Планка.

VI.4. Проблема стабильности атомов. Атом по Бору.

Ученых давно интересовало, как устроены атомы и молекулы. Но на основе классической физики невозможно даже правильно оценить размер атома. Покажем это. Из экспериментов было известно, что расстояние между атомами в твердом теле составляет величину порядка одного Ангстрема ($1\text{\AA} = 10^{-10}$ м). Теоретически эту величину можно оценить так: масса равная одному грамму вещества занимает объем порядка одного кубического сантиметра, число частиц в этом объеме по порядку величины равно числу Авогадро. Считая, что на одну частицу такого вещества приходится кубик размером а, получаем эту величину:

$$a = \sqrt[3]{\frac{1\text{cm}^3}{N_A}} \cong 1\text{\AA}.$$

Это оценка. А можно ли вывести эту величину с помощью представлений классической



физики? Оказывается, что нельзя. К началу 20 века, когда закладывались основы квантовой физики, уже были известны результаты опытов Гейгера и Мардсен по рассеянию α -частиц металлической фольгой. На рисунке изображена схема эксперимента. Оказалось, что практически все альфа-частицы пролетают сквозь фольгу не отклоняясь. Лишь небольшая их часть отлетает обратно. Резерфорд проанализировал эти результаты и предложил планетарную модель атома. Атом

представлялся как малое по размерам ядро, вокруг которого по круговым орбитам движутся электроны. Тогда размер атома определяется радиусом орбиты последнего электрона. Чтобы скомбинировать величину, имеющую размерность длины, из мировых констант в нашем распоряжении имеются следующие: N_A , m_p , m_e , e , k , c . Если считать, что электрон движется по орбите с малой скоростью, то использовать скорость света нельзя, а из оставшихся констант величина размерности длины получена быть не может. Если же считать движение электрона релятивистским ($v \sim c$), то можно составить следующую величину:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e c^2} \approx 3 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

Эта величина называется «классическим радиусом электрона». Однако она на четыре порядка меньше экспериментальных величин. Поэтому необходимо было использовать другие, новые представления для описания структуры атома. Было предположено, что и в этом случае необходимо использовать постоянную Планка \hbar . Она имеет размерность момента импульса. Нильс Бор догадался, что момент импульса электрона при его движении по орбите в атоме пропорционален \hbar . Эксперимент Гейгера и Марсден был проведен в 1910 году, а в 1913 году Бор предложил свою теорию атома водорода. На электрон в атоме водорода действует кулоновская сила со стороны заряженного ядра, поэтому можно записать II закон Ньютона в проекции на радиальную ось. Второе уравнение системы и есть условие квантования момента импульса электрона:

$$m \frac{v^2}{a_0} = \frac{ke^2}{a_0^2}; L = mva_0 = \hbar.$$

Отсюда можно получить радиус орбиты электрона в атоме водорода по Бору:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{kme^2} = 0.53 \cdot 10^{-8} \text{ см.}$$

Эта величина называется боровским радиусом и по величине совпадает с экспериментальной. С помощью этих уравнений можно вычислить радиусы возможных орбит электрона и спектр его возможных энергий (n – номер орбиты).

$$r_n = \frac{(n\hbar)^2}{kme^2}; E_n = -\frac{k^2 me^4}{2(n\hbar)^2}.$$

Таким образом, электрон в атоме находится на стационарной орбите и при движении по ней не излучает. Он излучает при переходе с одной орбиты на другую в соответствии с формулой

$$\hbar\omega_{nk} = \frac{k^2 me^4}{2(n\hbar)^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right).$$

Теория Бора позволила продвинуться достаточно далеко. Она объяснила строение атома водорода, его спектр, отсутствие излучения при движении по орбите. Но она оказалась неспособна объяснить строение многоэлектронных атомов. Это смогла сделать лишь последовательная квантовая теория.

VI.5. Гипотеза де Бройля. Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля.

Де Бройль проанализировал двойственную (волна-частица) природу световой волны и пришел к выводу (1923), что и у частиц может быть двойственность поведения. Формула $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ для импульса кванта ЭМВ навела его на мысль, что и у частиц должна быть длина волны. Он предложил для длины волны различных объектов следующую формулу ($h = 2\pi\hbar$)

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Эта формула называется формулой де Бройля и отражает тот факт, что каждой частице может быть приписан колебательный процесс, который распространяется в пространстве. Тогда

$$\lambda = \frac{h}{mv} \text{ в нерелятивистском случае и } \lambda = \frac{h\sqrt{1-\beta^2}}{m_0 v} \text{ в релятивистском случае. Он же}$$

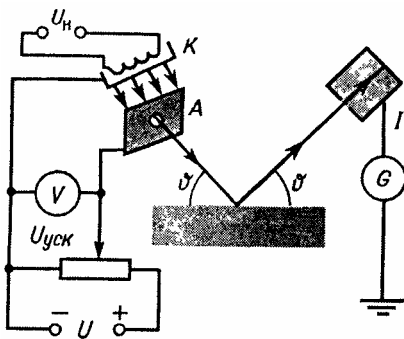
предложил приписывать каждой частице волновую функцию

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}$$

Долгое время смысл этой функции был неясен. Лишь в 1926 году правильную ее интерпретацию дал Борн. Определим порядок величин длин волн для частиц:

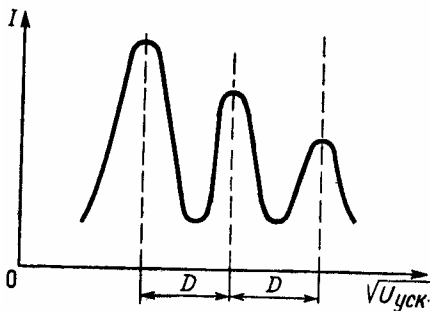
1) Для пылинки массой $1 \text{ мкг} = 10^{-6} \text{ кг}$, движущейся со скоростью 10^2 м/с длина волны оказывается равной $\lambda = h/(mv) = 10^{-26} \text{ м}$. Такую длину волны никаким прибором зафиксировать невозможно. Волновых свойств у такой частицы нет.

2) Для электрона с энергией $E = 150 \text{ эВ} = 240 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ скорость равна $7 \cdot 10^6 \text{ м/с}$. Длина волны такого электрона может быть вычислена по нерелятивистской формуле и $\lambda = h/(mv) = 10^{-10} \text{ м}$. Эта длина волны соответствует рентгеновским волнам (0.1 нм).



Для таких объектов возможно наблюдать дифракцию, как для рентгеновских волн. Дифракционной решеткой служит монокристалл (например, металла) с постоянной решетки $a \sim 0.3 - 0.5 \text{ нм}$. Такой эксперимент был поставлен Девиссоном и Джермером в 1927 году. У катода за счет термоэлектронной эмиссии появляются электроны, которые разгоняются полем анода. Далее они попадают на поверхность кристалла. Отраженные от поверхности металла электроны попадают на гальванометр. По силе тока гальванометра судят о числе электронов, летящих в определенном направлении. При неизменном угле падения

θ непрерывно изменялось ускоряющее напряжение. На эксперименте снималась зависимость тока гальванометра от величины ускоряющего напряжения. График зависимости приведен на рисунке. Зная ускоряющее напряжение, можно найти



длину волны $\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2meU_{\text{уск}}}}$, а затем с помощью

формулы Вульфа-Брегга для дифракции ЭМВ на кристалле ($2d \sin \theta = n\lambda; n = \pm 1, \pm 2, \dots$) получить следующее соотношение:

$$\sqrt{U_{\text{уск}}} = n \frac{h}{2\sqrt{2me} \cdot d \cdot \sin \theta} = nD$$

использовалось ускоряющее напряжение 54 В и угол падения электронного пучка на кристалл 50° . На основе этих данных по формуле было получено значение $d = 0.215 \text{ нм}$, что соответствовало межплоскостному расстоянию для никеля. Этот результат был грандиозным успехом идеи де Бройля.

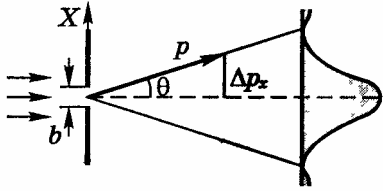
VI.6. Соотношения неопределенностей Гейзенберга.

В классической физике исчерпывающее описание состояния частицы определяется динамическими параметрами, такими как координаты, импульс, момент импульса, энергия и др. Однако реальное поведение микрочастиц показывает, что существует принципиальный предел точности, с которой подобные переменные могут быть указаны и измерены.

Соотношения неопределенностей. Глубокий анализ причин существования этого предела, который называют *принципом неопределенности*, провел В. Гейзенберг (1927).

Количественные соотношения, выражающие этот принцип в конкретных случаях, называют *соотношениями неопределенностей*.

Прежде чем сформулировать их, проведем мысленный эксперимент. Попытаемся определить



координату x свободно движущейся с импульсом p частицы, поставив на ее пути щель шириной b (изображено на рисунке). До прохождения частицы через щель ее проекция импульса p_x имеет точное значение: $p_x = 0$. Это значит, что $\Delta p_x = 0$, но координата x частицы является совершенно неопределенной. Если частица пройдет сквозь щель, то в

плоскости щели координата x будет зарегистрирована с неопределенностью $\Delta x \approx b$. При этом вследствие дифракции с наибольшей вероятностью частица будет двигаться в пределах угла 2θ , где θ - угол, соответствующий первому дифракционному минимуму. Он определяется условием, при котором разность хода волн от обоих краев щели будет равна λ :

$$b \cdot \sin\theta = \lambda.$$

В результате дифракции возникает неопределенность значения p_x - проекции импульса, величина которой

$$\Delta p_x = p \cdot \sin\theta.$$

Учитывая, что $b \approx \Delta x$ и $p = 2\pi\hbar/\lambda$, получим из двух предыдущих выражений:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx p\lambda = 2\pi\hbar.$$

Таким образом, попытка определить координату x частицы привела к появлению неопределенности Δp_x в импульсе частицы.

Наиболее важными являются два соотношения неопределенностей.

Первое из них ограничивает точности *одновременного* измерения координат и соответствующих проекций импульса частицы. Для проекции, например, на ось x оно выглядит так:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar.$$

Второе соотношение устанавливает неопределенность измерения энергии, ΔE , за данный промежуток времени Δt :

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar.$$

Поясним смысл этих двух соотношений. Первое из них утверждает, что если положение частицы, например, по оси x известно с неопределенностью Δx , то *в тот же момент* проекцию импульса частицы на эту же ось можно измерить только с неопределенностью $\Delta p_x \approx \hbar/\Delta x$. Заметим, что эти ограничения не касаются одновременного измерения координаты частицы по одной оси и проекции импульса по другой: величины x и p_y , y и p_x могут иметь одновременно точные значения.

Согласно второму соотношению для измерения энергии с погрешностью ΔE необходимо время, не меньшее, чем $\Delta t \approx \hbar/\Delta E$. Примером может служить «размытие» энергетических уровней водородоподобных систем (кроме основного состояния). Это связано с тем, что время жизни во всех возбужденных состояниях этих систем порядка 10^{-8} с. Размытие же уровней приводит к уширению спектральных линий (*естественное уширение*), которое действительно наблюдается. Сказанное относится и к любой нестабильной системе. Если время жизни ее до распада порядка τ , то из-за конечности этого времени энергия системы имеет неустранимую неопределенность, не меньшую, чем $\Delta E \approx \hbar/\tau$.

В итоге можно утверждать, что любое измерение изменяет состояние объекта и точное описание его состояния невозможно. Однако оценки показывают, что для классических объектов возможно описание их с помощью классической физики. Так для шарика массой 1 г и диаметром 0.1 мм неопределенность в определении скорости, связанная с соотношением неопределенности равна $\Delta v_x = \Delta p/m \approx \hbar/(m\Delta x) = 10^{-25}$ м/с. Такая величина не может быть измерена, а, следовательно, никак не сказывается на вычислениях по формулам классической физики.

Для электрона в атоме водорода оценки дают при размере атома порядка 10^{-10} м неопределенность в определении скорости равна 10^6 м/с. Эта величина сравнима со скоростью электрона при его движении по орбите. Поэтому понятие траектории для этого случая неприменимо. Необходима более строгая теория, чем теория Бора для атома водорода.

VI.7. Волновая функция в квантовой механике.

Вся совокупность экспериментов доказывает, что классическая физика не объясняет явления микромира. Опыт с дифракцией электронов показывает, что от понятия траектории надо отказаться (по крайней мере, в соответствующих случаях). А это значит, что полный набор классической физики (3N координат и 3N импульсов для системы из N частиц полностью определяют состояние такой системы) уже не работает и его надо заменить новым. Этот новый набор будет определять состояние системы менее точно, а точнее – вероятностно. В основе этой новой теории будет лежать принцип неопределенности: невозможно точно определить скорость и соответствующую координату частиц, следовательно, от понятия траектории необходимо отказаться.

Теперь определим основную задачу новой науки: квантовая физика должна уметь предсказать результат последующего измерения по результату предыдущего. Поэтому квантовая физика, по сути, наука вероятностная. С одной такой наукой – статистической физикой – мы уже встречались. Математическим аппаратом той науки была теория вероятностей. В квантовой физике теория вероятностей используется в полной мере.

Важную роль в этой новой науке играет понятие измерения. Так называется процесс взаимодействия объекта, живущего по законам квантовой физики с объектом, живущим по законам классической науки (измерительный прибор). Из этого определения следует, что для создания квантовой физики необходимы классические объекты.

Измерения могут давать два вида результатов: одинаковые и случайные. В первом случае можно говорить о том, что измеряемая физическая величина имеет определенное значение. Во втором случае так говорить о физической величине нельзя.

Полным набором физических величин в квантовой физике называется набор физических величин, характеризующих изучаемую систему, измерения которых дают определенный результат. Этот набор и приходит на смену классическому набору.

Это взгляд на систему с точки зрения эксперимента. А что дает теория? Как вычислить величины из полного набора? Для ответа на этот вопрос попробуем сначала перечислить все основные идеи, которые лежат в основе математического аппарата квантовой механики:

- 1) принцип неопределенности;
- 2) идея Планка о квантах;
- 3) идея де Бройля о волновой природе объектов;
- 4) принцип соответствия (Бор, 1923).

Принцип соответствия звучит так: любая новая теория, претендующая на более глубокое описание физической реальности, должна включать старую теорию как предельный случай. На этой базе Гейзенберг (1925) и Шредингер (1926) разработали математический аппарат квантовой механики. Именно Шредингер предложил описывать поведение квантового объекта одной единственной функцией $\Psi(x, y, z, t)$, в общем случае комплексной, квадрат модуля которой давал бы величину, пропорциональную вероятности местонахождения объекта. Эта функция называется **волновой функцией**. Волновая функция может быть комплексной, а вероятность должна быть не только действительной величиной, но и должна

быть больше нуля. Потому для описания вероятности нахождения объекта используется квадрат модуля волновой функции:

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi.$$

В этой формуле Ψ^* - комплексно сопряженная величина.

Пример. $a = 5 + 2i$. Комплексно сопряженная величина $a^* = 5 - 2i$. Произведения этих величин $a^* a = (5 - 2i)(5 + 2i) = 29$, $a a^* = (5 + 2i)^2 = 21 - 20i$.

Ясно, что можно говорить лишь о вероятности нахождения объекта в *физически* бесконечно малом объеме, поэтому

$$dP(x, y, z, t) = |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV,$$

а величина

$$\frac{dP(x, y, z, t)}{dV} = |\Psi(x, y, z, t)|^2$$

называется плотностью вероятности. По законам теории вероятности для этой величины есть условие нормировки

$$\int_V dP(x, y, z, t) = 1.$$

Сформулируем принцип суперпозиции для волновой функции. Допустим объект может иметь различные дискретные значения некоторой физической величины (например, энергии), волновая функция объекта в которых равна $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_i, \dots$. Тогда ясно, что при измерении этой величины объект с некоторой вероятностью может быть найден в каждом из этих состояний. Значит, его волновая функция будет суммой этих Ψ_i из этих состояний.

Если какая-либо система (объект) может находиться в физически различных состояниях волновой функции $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_i, \dots$, то она может быть обнаружена и в состоянии, описываемом волновой функцией Ψ , такой, что

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2 + \dots + C_i \Psi_i + \dots = \sum_i C_i \Psi_i,$$

где C_i – амплитуды частных состояний системы (объекта). Если измерения дают $C_n = 1$, а остальные $C_i = 0$, то система находится в определенном состоянии.

Для непрерывно распределенных величин принцип суперпозиции выглядит так:

$$\Psi = \int C(L) \Psi(L) dL,$$

где L – значение какой-либо физической величины.

И последнее утверждение: волновая функция дает полную (и исчерпывающую) информацию о системе в вероятностном смысле. Другими словами, волновая функция определяет поведение объекта или системы в данный и вообще в любой момент времени. Кроме нее не требуется ничего для описания системы.

VI.8. Операторы. Уравнение Шредингера.

Итак, в микромире в большинстве случаев от понятия траектории придется отказаться.

Придется пользоваться волновой функцией и только ей. Утверждается, что знание волновой функции достаточно для полного описания поведения любого объекта. Описание системы с помощью волновой функции вероятностное (то есть статистическое), поэтому главную роль в таком описании играют средние значения физических величин и их среднеквадратичные отклонения. Необходимо уметь их вычислять с помощью волновой функции. Для начала найдем среднее значение координаты x объекта

$$\langle x \rangle = \int x dP(x, t) = \int x |\Psi(x, y, z, t)|^2 dx = \int \Psi^*(x, y, z, t) x \Psi(x, y, z, t) dx.$$

Понятно, что для любой функции *только координат* формула для вычисления среднего значения будет выглядеть аналогично

$$\langle f(x, y, z) \rangle = \int \Psi^*(x, y, z, t) f(x, y, z) \Psi(x, y, z, t) dx.$$

Но волновая функция объекта зависит напрямую только от координат и времени. Как же вычислять средние значения таких физических величин, как энергия, импульс, момент импульса и других? Чтобы вычислять средние значения перечисленных выше величин по формулам, аналогичным написанным, необходимо использовать математические объекты, называемые **операторами**:

$$\langle \hat{L} \rangle = \int \Psi^*(x, y, z, t) \hat{L} \Psi(x, y, z, t) dx.$$

В этой формуле величина \hat{L} называется оператором физической величины в классической механике L , среднее значение которой необходимо вычислить. По принципу соответствия этот оператор должен переходить в соответствующую величину L при $\hbar \rightarrow 0$. Вид операторов будет приведен в конце параграфа.

Под оператором \hat{L} понимают символ, показывающий каким способом одной функции $\varphi(q)$ сопоставляется другая функция $f(q)$. Под q понимается полный набор всех переменных, описывающих изучаемый объект или систему $(x, y, z, p_x, p_y, p_z, t)$.

$$f(q) = \hat{L} \varphi(q).$$

Рассмотрим основные свойства операторов.

В квантовой механике используется узкий класс операторов – линейные операторы.

Линейными операторами называются операторы, которые удовлетворяют условию:

$$\hat{L}(C_1 \varphi_1 + C_2 \varphi_2) = \hat{L} C_1 \varphi_1 + \hat{L} C_2 \varphi_2 = C_1 \hat{L} \varphi_1 + C_2 \hat{L} \varphi_2 = C_1 f_1 + C_2 f_2.$$

В этой формуле C_1 и C_2 – произвольные числа, а f_1 и f_2 – функции.

В таблице приведены значения операторов основных физических величин классической физики.

Динамические переменные в классической физике	Оператор соответствующей физической величины в квантовой механике	
Координаты	\vec{r}, x, y, z	\vec{r}, x, y, z
Импульс	\vec{p} $p_x \cdot p_y \cdot p_z$	$\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial}{\partial z} \vec{e}_z \right) = \frac{\hbar}{i} \nabla$ $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$
Момент импульса	$\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}]$ $L_x = y p_z - z p_y$ $L_y = z p_x - x p_z$ $L_z = x p_y - y p_x$	$\hat{L} = \left[\vec{r}, \hat{p} \right] = \left[\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla \right]$ $\hat{L}_x = y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$ $\hat{L}_y = z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ $\hat{L}_z = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
Энергия	$E = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(\vec{r}, t)$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t)$

Раз есть волновая функция, то должно быть уравнение, которому она удовлетворяет. Получим это уравнение, как это сделал Шредингер в 1926 году.

Так как волновая функция полностью описывает поведение объекта как до, так и после данного момента времени, то

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} \sim \Psi.$$

Поскольку эти функции из разных множеств, то связь их осуществляется через оператор.

Шредингер нашел его вид и получилось так называемое *временное уравнение Шредингера*:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad \text{или} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(\vec{r}, t) \Psi.$$

Оператор \hat{H} , входящий в это уравнение, называется оператором Гамильтона. Его вид приведен в таблице. Если потенциальная энергия системы (объекта) $U(\vec{r}, t)$ не зависит явно от времени, то волновая функция может быть представлена в виде

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}.$$

Тогда уравнение Шредингера принимает вид

$$\hat{H} \Psi = E \Psi.$$

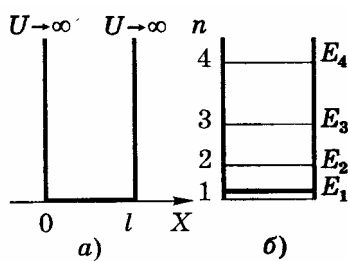
Такое уравнение называется стационарным уравнением Шредингера, а его решения называются собственными энергиями и собственными функциями системы (объекта).

Используя вид оператора Гамильтона, запишем стационарное уравнение Шредингера в явном виде. Это основное уравнение нерелятивистской квантовой механики:

$$\Delta \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0.$$

VI.9. Частица в однородной потенциальной яме; потенциальный барьер.

Уравнение Шредингера $\hat{H} \Psi = E \Psi$ позволяет найти волновые функции и энергетический спектр любой квантовой системы. Причем эти волновые функции называются собственными функциями системы, а энергии - собственными энергиями. В зависимости от системы, энергетический спектр может быть непрерывным или дискретным. В качестве простой задачи на использование стационарного уравнения Шредингера рассмотрим задачу о нахождении состояний частицы массы m в одномерной яме ширины L с бесконечно высокими стенками.



Стенки ямы считаются непроницаемыми и находятся на оси x в точках $x = 0$ и $x = L$. Движение частицы в яме одномерное.

Уравнение Шредингера для этого случая будет иметь вид:

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0.$$

За пределы ямы частица выйти не может, поэтому вероятность ее там обнаружить равна нулю. Из условия непрерывности

волновой функции следует, что она должна быть равна нулю и на границах ямы. Таким образом, к дифференциальному уравнению второго порядка, каким является уравнение Шредингера, имеются два граничных условия:

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0.$$

Для области пространства $0 \leq x \leq L$ уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi = 0.$$

Введем обозначения $k^2 = 2mE / \hbar^2$, тогда получаем

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0.$$

Это уравнение нам давно известно и его решение будем искать в виде

$$\Psi(x) = A \sin(kx + \alpha).$$

Необходимо теперь определить A, k и α . Из граничных условий следует, что

$\Psi(0) = A \sin \alpha = 0$, поэтому $\alpha = 0$. Кроме того, $\Psi(L) = A \sin(kL) = 0$. Это означает, что

$kL = \pm n\pi$, где $n = 1, 2, 3, \dots$. Тогда для энергетического спектра частицы получаем дискретный спектр с энергиями

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2; n = 1, 2, 3, \dots$$

Расстояние по энергии между соседними уровнями зависит от их номеров и увеличивается с увеличением номера

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (2n - 1).$$

Для классического объекта (с большой массой и размерами) дискретность уровней энергии мала до неуловимости.

Для нахождения A , то есть нормировки волновой функции, воспользуемся условием нормировки вероятности:

$$\int dP = \int \Psi^* \Psi dV = 1 \text{ или}$$

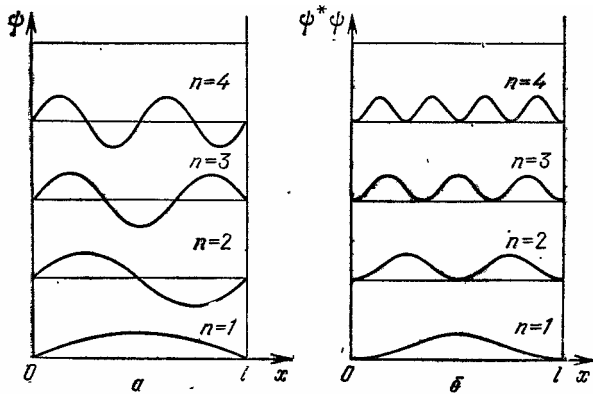
$$A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1. \text{ В результате}$$

получаем $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$. Таким образом

собственные функции частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками будут определяться по формуле

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}.$$

Плотность вероятности для частицы в яме

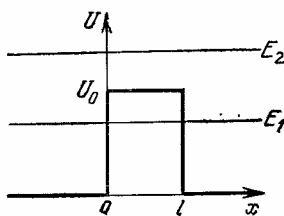


дается формулой

$$\frac{dP_n}{dx} = \Psi_n^* \Psi_n = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{n\pi x}{L}.$$

На рисунках приведены волновые функции и плотности вероятностей различных состояний частицы.

Прохождение частицы через потенциальный барьер. В классической физике, если на пути



частицы встречается барьер (гравитационный, электрический или какой-либо другой), то частица от него отражается, пройти барьер насквозь она не может. Квантовая физика приводит к принципиально новому выводу о возможности прохождения частиц сквозь потенциальный барьер. Это явление называется туннельным эффектом. Для описания туннельного эффекта вводится понятие прозрачности D потенциального барьера. Если,

по аналогии с оптикой, подсчитать интенсивность $I_{пад}$ падающей волны и интенсивность $I_{прош}$ прошедшей волны, то, по определению, прозрачность $D = I_{прош} / I_{пад}$. Это по сути вероятность

прохождения волны де Бройля сквозь барьер. Для прямоугольного барьера высотой U_0 прозрачность определяется формулой

$$D \sim e^{-\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

В этой формуле L – ширина барьера, а E – энергия налетающей частицы массы m ($E < U_0$). Туннельный эффект играет заметную роль в случаях, когда размер барьера сравним с атомными размерами. Например, если $U_0 - E = 10$ эВ, то для электрона, налетающего на барьер шириной 10^{-10} м, получаем прозрачность $D \sim e^{-3.4}$. Если же ширина барьера 0.01 м, то прозрачность $D \sim e^{-100000000}$.

VI.10. Атом водорода; главное, азимутальное и магнитное квантовые числа.

Рассмотрим самую простую атомную систему – электрон, движущийся в поле неподвижного протона. Потенциальная энергия взаимодействия в этом случае равна

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Уравнение Шредингера для такой задачи

$$\Delta\Psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0.$$

Оказалось, что формулы для уровней энергии и радиусов орбит для электрона в атоме водорода по Бору оказались точными решениями этого уравнения:

$$r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{(n\hbar)^2}{me^2}; E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{me^4}{2(n\hbar)^2}.$$

Наибольший интерес представляет нахождения волновых функций электрона – собственных функций уравнения Шредингера. Наиболее удобным является использование сферической системы координат с переменными r , θ и φ . Поэтому волновая функция выражается через эти переменные. Для электрона в атоме водорода одновременно измеримыми оказались три

величины: энергия электрона E , квадрат модуля момента импульса электрона L^2 и проекция момента импульса электрона на ось z L_z . Таким образом, волновая функция определяется тремя параметрами – тремя квантовыми числами $\Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)$. Параметр n , называемый главным квантовым числом, совпадает с номером уровня энергии. Параметры ℓ и m представляют собой азимутальное и магнитное квантовые числа, определяющие модуль момента

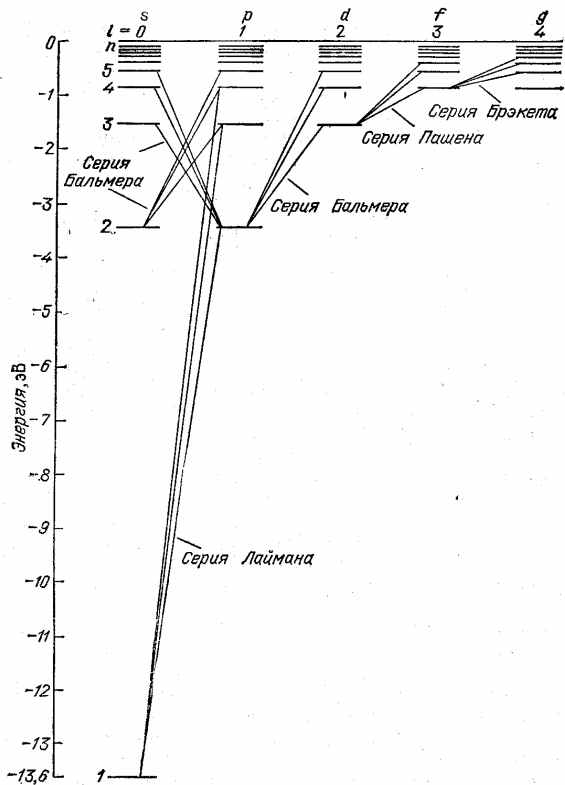
Уровень энергии E_n	Волновая функция $\Psi_{n\ell m}$	Значение			Уровень энергии E_n	Волновая функция $\Psi_{n\ell m}$	Значение			
		n	ℓ	m			n	ℓ	m	
E_1	Ψ_{100}	1	0	0	E_2	Ψ_{200}	2	0	0	
E_2	Ψ_{21-1}	2	1	-1		Ψ_{210}	2	1	0	
	Ψ_{210}	2	1	0		Ψ_{21+1}	2	1	+1	
	Ψ_{21+1}	2	1	+1		E_3	Ψ_{300}	3	0	0
	E_3	Ψ_{31-1}	3	1			-1	Ψ_{310}	3	1
Ψ_{310}		3	1	0			Ψ_{31+1}	3	1	+1
Ψ_{32-2}		3	2	-2			Ψ_{32-1}	3	2	-1
Ψ_{32-1}		3	2	-1	Ψ_{320}		3	2	0	
Ψ_{320}		3	2	0	Ψ_{32+1}	3	2	+1		
					Ψ_{32+1}	3	2	+1		
					Ψ_{32+2}	3	2	+2		

импульса и проекцию момента импульса электрона на некое направление. Решение уравнения Шредингера, удовлетворяющее стандартным условиям для волновой функции (однозначность, непрерывность и конечность), получаются для значений ℓ , не превышающих $n-1$. Следовательно, при данном значении n квантовое число ℓ может принимать n различных значений: $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$. При данном ℓ квантовое число m может принимать $2\ell+1$ различных значений: $m = -\ell, -\ell+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell-1, \ell$.

Энергия электрона в атоме водорода зависит только от одного квантового числа – n . Следовательно, каждому собственному значению энергии E_n (кроме E_1) соответствует

несколько собственных функций $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ (то есть разных состояний), отличающихся значениями l и m . Таблица дает все возможные состояния для значения главного квантового числа $n = 1, 2, 3$. Состояния с одинаковой энергией называются вырожденными, а число различных состояний с каким-либо значением энергии называется кратностью вырождения соответствующего уровня. В данном случае каждому из n значений квантового числа l соответствует $2l + 1$ значений квантового числа m . Следовательно, кратность вырождения энергетического уровня в атоме водорода равна

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2.$$



Состояния с различными значениями азимутального квантового числа l отличаются моментом импульса электрона. В атомной физике применяются условные обозначения, заимствованные из спектроскопии. Электрон, находящийся в состоянии с $l = 0$ называют s – электроном, с $l = 1$ называют p – электроном, с $l = 2$ – d – электроном, с $l = 3$ – f – электроном. Значение главного квантового числа указывается цифрой перед буквой, например, $3p, 4f$. Для различных атомов (не только для атома водорода) возможны следующие состояния электрона:

- 1s,
- 2s, 2p,
- 3s, 3p, 3d,
- 4s, 4p, 4d, 4f и так далее.

Схема уровней энергии для электрона в атоме водорода изображена на рисунке. Столбцы соответствуют различным значениям азимутального квантового числа.

Испускание и поглощение света происходит при переходах электрона с одного уровня на другой. В квантовой механике доказывается, что для азимутального числа l имеется правило отбора $\Delta l = \pm 1$. Это означает, что возможны только такие переходы, при которых значение l изменяется на единицу. Примером таких переходов является серия переходов Бальмера, соответствующая переходам $ns \rightarrow 2p; nd \rightarrow 2p$ ($n = 2, 3, \dots$).

VI.11. Механический и магнитный моменты электрона. Спин.

Детально рассмотрим движение электрона в атоме водорода. В классической механике электрон движется по окружности и имеет механический момент импульса. Электрон имеет заряд, поэтому с механическим моментом связан магнитный момент

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}.$$

В квантовой механике понятие орбиты в данном случае нет, однако и в квантовой механике эти моменты называют *орбитальными*. Самое интересное, что формула для связи моментов справедлива и в квантовой механике.

Для нахождения собственных значений операторов момента импульса и его проекции необходимо решить два операторных уравнения

$$\hat{L}^2 \Psi = L^2 \Psi \quad \text{и} \quad \hat{L}_z \Psi = L_z \Psi.$$

Первое уравнение решается методами, далеко выходящими за рамки общей физики. Приведем здесь лишь его решение для собственных значений момента импульса:

$$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell + 1)}, \text{ где } \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Второе уравнение решается значительно проще. Оператор, соответствующий проекции момента на ось z в классической механике, определяется по формуле

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Уравнение на собственные значения запишется так: $-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} = L_z \Psi$. Ищем решения в виде

$\Psi = e^{i\alpha\varphi}$. Используя условия периодичности волновой функции по углу φ , для L_z получаем решение $L_z = m\hbar$, где $m = 0, \pm 1, \dots$. Поскольку проекция вектора не может быть больше модуля, то $m\hbar \leq \hbar\sqrt{\ell(\ell + 1)}$ и $|m|_{\max} = \ell$. Это общие решения, пригодные для любого момента в квантовой механике.

Далее для удобства записи вместо буквы **L** для обозначения моментов в квантовой механике использовать букву **M**. Тогда связь орбитальных моментов запишем в виде:

$$\mu_\ell = -\frac{e}{2m_e} M_\ell.$$

Применительно к орбитальным моментам, механическому и магнитному получаем следующие формулы:

$$M_\ell = \hbar\sqrt{\ell(\ell + 1)}; \quad \mu_\ell = -\frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{\ell(\ell + 1)} = -\mu_B \sqrt{\ell(\ell + 1)};$$

$$M_{\ell z} = m_\ell \hbar, \quad \mu_{\ell z} = -\mu_B m_\ell, \quad m_\ell = -\ell, \dots, 0, \dots, \ell.$$

В этих формулах используется величина μ_B , называемая магнетоном Бора.

Исследование спектров (поглощения и излучения) щелочных металлов (Na, K) при помощи приборов с большой разрешающей способностью показало, что каждая линия этих спектров является двойной. Потом это явление было обнаружено и у других элементов. Структура спектра, отражающая расщепление линий на компоненты, называется тонкой структурой. Сложные линии, состоящие из нескольких компонент, получили название мультиплетов. Для объяснения расщепления уровней Гаудсмит и Уленбек выдвинули гипотезу (1925) о том, что электроны обладают собственным моментом импульса M_s , не связанным с движением электрона в пространстве. Такой момент был назван **спином**. Предположение о спине электрона было в дальнейшем подтверждено большим количеством опытных фактов. Спин присущ практически всем частицам.

Модуль собственного момента импульса электрона определяется по общим законам квантовой механики. Собственный момент импульса электрона – еще одна измеряемая величина. Поэтому появляется еще одно квантовое число – спиновое квантовое число s . Для электрона оно равно $1/2$: $s = 1/2$:

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

$$M_s = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar; \quad \mu_s = -\mu_B \sqrt{3}$$

Проекция спина на заданное направление может быть получена по формуле

$$M_{sz} = m_s \hbar; \quad m_s = \pm s = \pm 1/2; \quad \mu_{sz} = -\frac{e}{m_e} M_{sz} = -\frac{e}{m_e} \hbar m_s = -\frac{e\hbar}{m_e} \left(\pm \frac{1}{2} \right) = \mp \mu_B.$$

Итак, проекция собственного момента импульса электрона может принимать значения $\frac{1}{2}\hbar$, а проекция собственного магнитного момента может принимать значения $\pm \mu_B$.

В общем случае механический момент электрона складывается из двух моментов: орбитального M_ℓ , обусловленного движением электрона в атоме, и спинового M_s , не связанного с движением электрона в пространстве. Результирующая этих моментов дает полный момент импульса электрона. Его модуль, как и модуль всякого момента импульса вообще, определяется выражением

$$M_j = \hbar \sqrt{j(j+1)},$$

где j - квантовое число полного момента импульса, которое может иметь значения

$$j = \ell + s, |\ell - s|$$

(ℓ и s - соответственно азимутальное и спиновое квантовые числа). При $\ell = 0$ квантовое число j имеет только одно значение: $\ell = s = 1/2$. При ℓ , отличном от нуля, возможны два значения: $\ell = \ell + 1/2$ и $\ell = \ell - 1/2$, которые соответствуют двум возможным взаимным ориентациям моментов M_ℓ и M_s - «параллельной» и «антипараллельной». Поскольку ℓ - целое число либо ноль, квантовое число ℓ электрона в атоме водорода может иметь лишь полуцелые значения: $1/2, 3/2, 5/2, \dots$

Как и ранее, проекция полного механического момента на направление z определяется формулой

$$M_{jz} = m_j \hbar, \quad (m_j = -j, -j+1, \dots, 0, \dots, j-1, j).$$

Формула для полного магнитного момента оказывается сложнее, чем полученные ранее формулы:

$$\mu_j = -\mu_B g \sqrt{j(j+1)} \quad ; \quad g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)}.$$

Выражение называется множителем Ланде или g - фактором.

Рассмотрим, как существование спина объясняет расщепление энергетических уровней (и соответственно расщепление спектральных линий). Орбитальный и спиновый магнитные моменты взаимодействуют друг с другом подобно тому, как взаимодействуют две магнитные стрелки. Это взаимодействие называется *спин-орбитальным*. Энергия взаимодействия зависит от взаимной ориентации моментов μ_ℓ и μ_s . Отсюда заключаем, что состояния с различными j должны обладать различной энергией.

VI.12. Механический и магнитный моменты многоэлектронного атома.

Итак, состояние электрона в атоме определяется четырьмя числами: n, ℓ, m_ℓ, m_s . Но можно использовать и другую четверку чисел: n, ℓ, j, m_j . Все физические величины, соответствующие обеим четверкам чисел, одновременно измеримы.

В многоэлектронных атомах состояние каждого электрона описывается той же четверкой чисел. Отличие лишь в том, что электроны взаимодействуют между собой и энергия каждого электрона зависит в этом случае не только от n , но и от числа ℓ . Говорят, что в этом случае с энергии уровней E_n снимается вырождение по ℓ : $E_{n\ell}$.

Механический и магнитный моменты атома складываются из орбитальных и спиновых моментов электронов. Магнетизм ядра из-за его малости можно не учитывать. При сложении моментов в полный момент атома возможны два случая:

1) Орбитальные моменты электронов M_ℓ взаимодействуют между собой сильнее, чем со спиновыми моментами M_s . В свою очередь спиновые моменты электронов связаны между собой сильнее, чем с орбитальными моментами. В этом случае сначала складываются отдельно орбитальные моменты электронов M_ℓ в полный орбитальный момент атома M_L и спиновые моменты электронов M_s в полный спиновый момент атома M_S , а затем

получившиеся моменты складываются в полный момент атома M_J . Такой случай сложения моментов называется LS – связью. Такая связь наблюдается у большинства атомов.

2) Связь между орбитальным M_ℓ и спиновым M_s моментом электрона сильнее, чем взаимодействие его с другими электронами. В этом случае сначала складываются спиновой M_s и орбитальный M_ℓ моменты для каждого электрона в полный момент электрона M_j , а затем уже эти электронные моменты складываются в полный момент атома M_J . Такая связь называется jj – связью. jj – связь наблюдается в основном у тяжелых атомов.

Рассмотрим подробнее случай LS – связи. В этом случае сначала формируется полный орбитальный момент атома M_L . Его величина определяется формулой

$$M_L = \hbar\sqrt{L(L+1)}.$$

Рассмотрим, как получаются возможные значения L для атома с двумя электронами. В этом случае орбитальное квантовое число L может иметь значения

$$L = \ell_1 + \ell_2; \ell_1 + \ell_2 - 1; \dots, |\ell_1 - \ell_2|,$$

где ℓ_1 и ℓ_2 – орбитальные числа, соответствующие орбитальному движению каждого электрона. Всего в этом случае получается $2\ell_{\min}+1$ значение L (ℓ_{\min} – меньшее из чисел ℓ_1 и ℓ_2). В случае атома, имеющего более чем два электрона, максимальное значение L равно сумме чисел ℓ всех электронов. Чтобы найти минимальное значение L , нужно сложить сначала числа ℓ любых двух электронов. Затем каждый из полученных результатов складывается с ℓ третьего электрона и т. д. Наименьшее из получившихся при этом чисел будет представлять собой минимальное возможное значение квантового числа L . Пусть, например, $\ell_1 = \ell_2 = 1$ и $\ell_3 = 3$. Возможные значения суммарного момента первого и второго электронов определяются числами 0, 1 и 2. Сложение первого из этих чисел с $\ell_3 = 3$ дает $L = 3$, второго числа - $L = 2, 3, 4$, третьего числа - $L = 1, 2, 3, 4, 5$. Следовательно, квантовое число, определяющее результирующий момент в рассматриваемом случае, может иметь значения $L = 1, 2, 3, 4, 5$. Минимальное значение L оказалось равным 1, максимальное, как и следовало ожидать, равно 5 ($1 + 1 + 3$).

Значения орбитального момента импульса всегда целые или ноль.

Проекция результирующего орбитального момента на ось z определяется по стандартной формуле:

$$M_{Lz} = m_L \hbar, \quad m_L = -L, \dots, 0, \dots, L.$$

Все вычисления необходимо повторить для получения аналогичных формул для спинового механического момента электронов:

$$M_S = \hbar\sqrt{S(S+1)}$$

$$M_{Sz} = m_S \hbar, \quad m_S = -S, \dots, 0, \dots, S.$$

Значения квантового числа спинового механического момента получаются так же, как и значения L .

Результирующий орбитальный и спиновой механические моменты атома образуют в сумме полный момент импульса атома

$$M_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}.$$

При данных значениях M_L и M_S квантовое число J имеет следующие значения

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|.$$

Следовательно, J – целое, если значение S – целое (четное число электронов), и J – полуцелое, если значения S – полуцелые (нечетное число электронов).

Проекция полного механического момента атома на направление z

$$M_{Jz} = m_J \hbar, \quad m_J = -J, \dots, 0, \dots, J.$$

Ясно, что состояние атома определяется квантовыми числами L , S и J . Для упрощения записи удобно пользоваться символической формой вида

$${}^{2S+1}L_J.$$

Под буквой L понимают величину, обозначающую значение полного орбитального момента импульса. Для электронов с L = 0 это S, L = 1 это P, L = 2 это D, L = 3 это F и так далее. Нижний индекс дает значение квантового числа полного момента импульса атома. Значение верхнего индекса равно мультиплетности энергетического уровня.

Примеры

$${}^1S_0 \Rightarrow L = 0, S = 0, J = 0. \quad {}^2P_{\frac{3}{2}} \Rightarrow L = 1, S = \frac{1}{2}, J = \frac{3}{2}.$$

Модуль магнитного момента атома определяется по формуле

$$\mu_J = -\mu_B g \sqrt{J(J+1)}.$$

В этой формуле величина μ_B называется магнетоном Бора, а величина g – множитель Ланде. Вычисляется он по формуле

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

Проекция магнитного момента атома на ось z вычисляется следующим образом:

$$\mu_{Jz} = -\mu_B g m_J; \quad m_J = -J, -J+1, \dots, J-1, J.$$

VI.13. Модель атомного ядра и ядерные силы.

Ко времени открытия атомного ядра (Резерфорд, 1911) были известны только две элементарные частицы – протон и электрон. В соответствии с этим считалось вероятным, что атомное ядро из них и состоит. Однако при использовании этой модели появились трудности, известные как **азотная катастрофа**. По протонно-электронной модели, ядро азота должно было содержать 14 протонов и 7 электронов. Спин всех этих частиц равен $\frac{1}{2}$, поэтому спин всего атома должен быть полуцелым. Однако эксперимент давал значение спина атома азота равным 1. Проблема была решена после открытия Чедвиком (1932) нейтрона со спином $\frac{1}{2}$. Идея о том, что ядро атомов состоит из протонов и нейтронов, впервые была высказана Иваненко и, независимо от него, Гейзенбергом в 1932 году. В современной ядерной физике протон и нейтрон объединяются общим названием нуклон. Суммарное число нуклонов в ядре называется массовым числом и обозначается буквой A. Буквой Z обозначают заряд ядра, число нейтронов обозначается буквой N. Для обозначения ядра используется символ (X – химический символ элемента)



Ядра с одинаковыми Z, но разными A, называются изотопами. Размер ядра порядка 10^{-15} м. Для таких малых величин введено обозначение 1 Ферми = 1 Ф = 10^{-15} м.

Приведем в виде таблицы характеристики протона и нейтрона.

Протон $m_p = 938.28$ МэВ $\mu_p = 2.79 \mu_B$ ($m_e = 0.511$ МэВ)	Нейтрон $m_n = 939.57$ МэВ $\mu_n = -1.91 \mu_B$ $m_n - m_p = 1.3$ МэВ = $2.5 m_e$
--	--

$$1 \text{ МэВ} = 1.6 \cdot 10^{-13} \text{ Дж} = 1.78 \cdot 10^{-30} \text{ кг} (m_p c^2)$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5.05 \cdot 10^{-27} \text{ Дж/Тл} - \text{магнетон Бора.}$$

Нейтрон в свободном состоянии нестабилен. Он распадается на протон, электрон и антинейтрино. Период полураспада 12 минут.

Взаимодействие между нуклонами в ядре получило название сильного взаимодействия.

Отличительными особенностями ядерных сил являются следующие:

- 1) Ядерные силы короткодействующие. Радиус их действия ограничивается областью расстояний между нуклонами порядка 10^{-15} м. На меньших расстояниях притяжение сменяется отталкиванием.
- 2) Ядерные силы не зависят от заряда нуклона.
- 3) Ядерные силы зависят от взаимной ориентации спинов нуклонов.
- 4) Ядерные силы не являются центральными.
- 5) Ядерные силы обладают свойством насыщения. Каждый нуклон в ядре взаимодействует с определенным числом нуклонов.

По современным представлениям любое фундаментальное взаимодействие обусловлено тем, что при взаимодействии объектов происходит обмен частицами, которые получили название переносчиков взаимодействия. Для сильного взаимодействия такими частицами являются π -мезоны. Другими словами, взаимодействие нуклонов в ядре происходит посредством обмена π -мезонами.

Дальнейшие исследования строения нуклонов потребовали появления новой экспериментальной техники. В последнее время используются ускорители заряженных частиц, которые носят название коллайдеры. В таких ускорителях сталкиваются пучки частиц, ускоренных до огромных энергий. Эксперименты по столкновению электронов и протонов подтвердили гипотезу Гелл-Мана и Цвейга о существовании кварков.

Эксперименты показали, что нуклоны не являются точечными объектами, а состоят из кварков. В настоящее время установлено существование шести разновидностей кварков u, d, s, c, b, t и соответствующих им антикварков. Их названия происходят от английских слов *up, down, strange, charm, beauty, truth*. Кварки имеют дробный электрический заряд равный $2/3$ заряда электрона (u -, c -, t - кварки) и $-1/3$ заряда электрона (d -, s -, b - кварки). Антикварки имеют противоположные знаки зарядов. Нуклоны состоят из трех кварков: протон состоит из кварков u, u и d ; нейтрон состоит из u, d и d кварков. Чтобы избежать противоречия с принципом Паули (*в одной квантовой системе не может быть частиц, обладающих одинаковой совокупностью квантовых чисел*), была введена новая характеристика для кварков – квантовое число «цвет». Взаимодействие между кварками осуществляется путем обмена глюонами.

VI.14. Энергия связи и дефект массы ядра.

Масса ядра $m_{\text{я}}$ меньше суммы масс входящих в нее частиц. Дефектом масс называется разность между массами отдельных нуклонов и массой покоя ядра:

$$\Delta m = [Zm_p + (A - Z)m_n] - m_{\text{я}}.$$

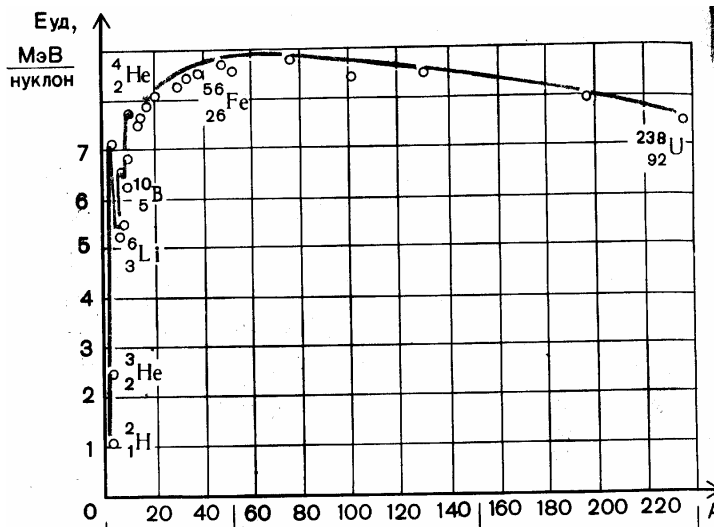
Это связано с тем, что при объединении нуклонов в ядро выделяется энергия связи нуклонов друг с другом. Вспомним, что энергия покоя любого объекта равна $E_0 = m_0c^2$.

Следовательно, энергия покоящегося ядра меньше суммы энергий покоящихся невзаимодействующих нуклонов на величину

$$E_{\text{св}} = \{ [Zm_p + (A - Z)m_n] - m_{\text{я}} \} c^2.$$

Это и есть энергия связи.

Энергия связи равна той работе, которую нужно совершить, чтобы разделить образующие ядро нуклоны и удалить их друг от друга на такие расстояния, при которых они не взаимодействуют друг с другом.



Удельной энергией связи называется энергия связи, приходящаяся на один нуклон атома. На рисунке показана зависимость удельной энергии связи от массового числа. Если сравнивать удельную энергию связи для различных атомов, то окажется, что она имеет максимум порядка 8.7 МэВ/нуклон для средней части (железо) таблицы Менделеева. Это значит, что такие ядра наиболее устойчивы. Для тяжелых ядер энергия связи меньше. Такая зависимость приводит к двум возможным энергетическим процессам:

- 1) Деление тяжелых ядер на несколько более легких ядер. Этот процесс энергетически выгоден, так как идет с выделением энергии. Например, деление ядра с $A_1 = 240$ (удельная энергия связи 7.5 МэВ/нуклон) на два с массовым числом $A_2 = 120$ (удельная энергия связи 8.8 МэВ/нуклон) привело бы к высвобождению энергии равной $(8.5-7.5)240 = 240$ МэВ.
- 2) Слияние (синтез) легких ядер. Например, слияние двух атомов тяжелого водорода ${}^2_1\text{H}$ в атом гелия ${}^4_2\text{He}$ привело бы к выделению энергии, равной 24 МэВ. Для этого процесса необходимо, чтобы части подошли очень близко друг к другу (на расстояние действия ядерных сил). Для этого их надо разогнать до огромных скоростей, что соответствует температурам $T \approx 10^8 \text{ K}$ ($v_{\text{cp}} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$). Поэтому такие реакции называются термоядерными.

VI.15. Радиоактивность.

Радиоактивностью называется процесс самопроизвольного превращения одних атомных ядер в другие, сопровождающийся испусканием элементарных частиц. Различают естественную и искусственную радиоактивность. Естественной радиоактивностью называется радиоактивность, наблюдающаяся у ядер, существующих в естественных условиях. Радиоактивность, получаемая в ходе ядерных реакций, называется искусственной.

К числу радиоактивных процессов относятся:

- 1) α - распад,
- 2) β - распад,
- 3) γ - излучение ядер,
- 4) спонтанное деление тяжелых ядер,
- 5) протонная активность.

Закон радиоактивного распада. Процесс распада атомов носит случайный характер. Поэтому можно считать, что число ядер dN , распадающихся за малый промежуток dt , пропорционально как числу имеющихся ядер N , так и величине промежутка времени dt

$$dN = -\lambda \cdot N \cdot dt.$$

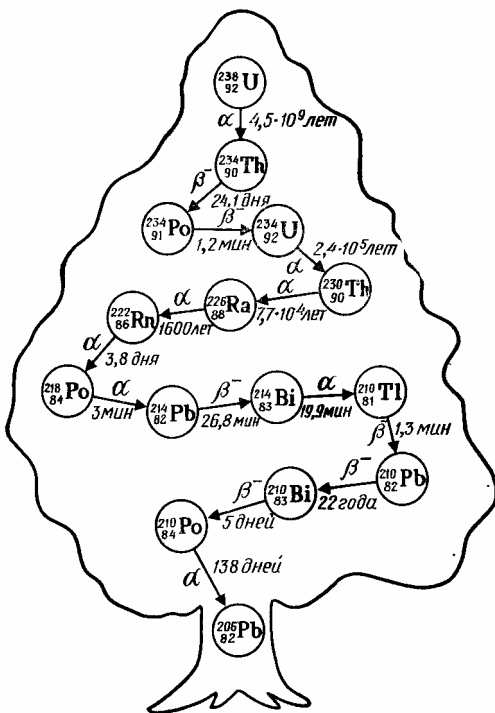
Постоянная λ называется постоянной распада. Знак минус в уравнении означает, что число атомов в ходе радиоактивного распада уменьшается. Проведя вычисления, получаем формулу радиоактивного распада

$$N = N_0 e^{-\lambda t}.$$

В этой формуле N_0 – число радиоактивных атомов в начальный момент времени, а N – число нераспавшихся атомов в момент времени t . Время, за которое число атомов уменьшается в два раза, называется периодом полураспада и обозначается буквой T . T и λ связаны соотношением

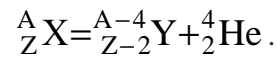
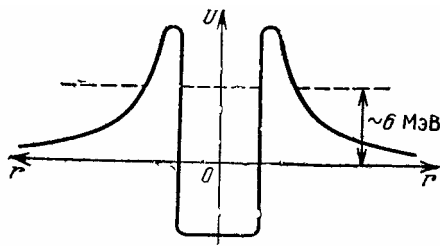
$$T = \frac{\ln 2}{\lambda}.$$

Некоторые радиоактивные ядра распадаются на части, которые и сами радиоактивны. Возникает ряд радиоактивных превращений, называемых семейством. Приведем на рисунке одно из таких семейств – ряд урана ${}^{238}_{92}\text{U}$.



Теперь рассмотрим основные виды радиоактивного распада подробнее.

1) α - распад. Уравнение этого распада выглядит так:



В этой формуле индексом X обозначено материнское ядро, индексом Y обозначено дочернее ядро. Последнее слагаемое в формуле это альфа-частица, то есть ядро атома гелия. Эта частица возникает в момент распада. Покидая ядро, ей приходится преодолевать потенциальный барьер за счет туннельного эффекта.

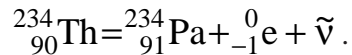
Внешняя часть барьера образована кулоновскими силами отталкивания альфа-частицы и дочернего ядра. Внутренняя часть барьера обусловлена ядерными силами.

2) β - распад. Существует три вида β - распада.

а) β^- - распад. При β^- - распаде ядро превращается в другое ядро, и при этом вылетают из ядра электрон и антинейтрино. Процесс распределения энергии между электроном и антинейтрино является случайным. Это важная особенность β^- - распада. Общая формула такова:

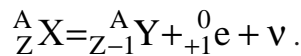


Примером этого распада является процесс превращения тория в протоактиний:

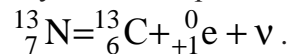


Получается так, что как бы один протон превращается в нейтрон.

б) β^+ - распад. При этом распаде схема такова:



В результате реакции появляется новое ядро, позитрон и нейтрино. Нейтрино («маленький нейтрон») имеет массу покоя равную нулю и спин равный $\frac{1}{2}$. Пример такого распада:



в) Электронный захват. В этом случае ядро поглощает один из своих электронов, в результате чего один из протонов превращается в нейтрон, испуская при этом нейтрино.

Единицей радиоактивности является беккерель (Бк): один распад в секунду. Допускается использование внесистемной единицы кюри (Ки): происходит $3.700 \cdot 10^{10}$ актов распада в секунду.

VI.16. Элементарные частицы.

Элементарными частицами называются мельчайшие известные в настоящее время частицы материи. Термин «элементарные частицы» в значительной мере условен, так как не существует четкого критерия элементарности частицы. Характерной особенностью элементарных частиц является их способность к взаимным превращениям.

Всего вместе с античастицами открыто около 350 элементарных частиц, и число их продолжает расти. Большинство элементарных частиц нестабильно: они спонтанно превращаются в другие частицы. Стабильными являются фотон, электрон, все виды нейтрино, протон и их античастицы. Для того чтобы объяснить свойства и поведение элементарных частиц, их приходится наделять кроме массы, электрического заряда и спина рядом характерных дополнительных для них величин (квантовых чисел), о которых будет сказано ниже.

Известны четыре вида взаимодействий между элементарными частицами: сильное, электромагнитное, слабое и гравитационное (мы перечислили их в порядке убывания интенсивности).

Интенсивность взаимодействия принято характеризовать с помощью, так называемой константы взаимодействия, которая представляет собой безразмерный параметр, определяющий вероятность процессов, обусловленных данным видом взаимодействия. Отношение значений констант дает относительную интенсивность соответствующих взаимодействий.

Сильное взаимодействие. Этот вид взаимодействия обеспечивает связь нуклонов в ядре. Константа сильного взаимодействия имеет значение порядка 10. Наибольшее расстояние, на котором проявляется сильное взаимодействие (радиус действия r), составляет примерно 10^{-13} м.

Электромагнитное взаимодействие. Константа взаимодействия равна $1/137 \approx 10^{-2}$. Радиус действия неограничен ($r = \infty$).

Слабое взаимодействие. Это взаимодействие ответственно за все виды β -распада ядер (включая e^- -захват), за многие распады элементарных частиц, а также за все процессы взаимодействия нейтрино с веществом. Константа взаимодействия равна по порядку величины 10^{-14} . Слабое взаимодействие, как и сильное, является короткодействующим.

Гравитационное взаимодействие. Константа взаимодействия имеет значение порядка 10^{-39} . Радиус действия не ограничен ($r = \infty$). Гравитационное взаимодействие является универсальным, ему подвержены все без исключения элементарные частицы. Однако в процессах микромира гравитационное взаимодействие ощутимой роли не играет.

В таблице сопоставлены значения (по порядку величины) константы разных видов

Вид взаимодействия	Константа взаимодействия	Время жизни, с
Сильное	10	10^{-23}
Электромагнитное	10^{-2}	10^{-16}
Слабое	10^{-14}	10^{-8}
Гравитационное	10^{-39}	---

взаимодействия. В последнем столбце таблицы приведено среднее время жизни частиц, распадающихся за счет данного вида взаимодействия. Это время называют также временем распада.

Элементарные частицы обычно

подразделяют на четыре класса. К одному из них относится только одна частица - **фотон**. Второй класс образуют **лептоны**, третий - **мезоны** и, наконец, четвертый класс - **барионы**. Мезоны и барионы часто объединяют в один класс сильно взаимодействующих частиц, называемых адронами (греческое «адрос» означает крупный, массивный).

Приведем краткую характеристику перечисленных классов частиц.

1. Фотоны γ (кванты электромагнитного поля) участвуют в электромагнитных взаимодействиях, но не обладают сильным и слабым взаимодействиями.
2. Лептоны получили свое название от греческого слова «лептос», которое означает «легкий». К их числу относятся частицы, не обладающие сильным взаимодействием: электроны (e^-, e^+), мюоны (μ^-, μ^+), тяжелый тау-лептон (τ^-, τ^+), а также электронные нейтрино ($\nu_e, \bar{\nu}_e$), мюонные нейтрино ($\nu_\mu, \bar{\nu}_\mu$) и тау-нейтрино ($\nu_\tau, \bar{\nu}_\tau$). Все лептоны имеют спин, равный $1/2$, и, следовательно, являются фермионами. Все лептоны обладают слабым взаимодействием. Те из них, которые имеют электрический заряд (т. е. электроны и мюоны), обладают также электромагнитным взаимодействием.
3. Мезоны - сильно взаимодействующие нестабильные частицы, не несущие так называемого барионного заряда. К их числу принадлежат π -мезоны, или пионы (π^+, π^-, π^0), K-мезоны, или каоны (K^+, K^-, K^0, \bar{K}^0), и эта-мезон (η).

Заряд π -мезонов равен элементарному заряду e (кроме нейтрального). Масса π -мезонов равна $273m_e$ для заряженных и $264m_e$ для нейтрального мезона. Спин мезонов равен нулю. Масса K-мезонов составляет примерно $970m_e$ (494 МэВ для заряженных и 498 МэВ для нейтральных K-мезонов). Время жизни K-мезонов имеет значение порядка 10^{-6} с. Они распадаются с образованием π -мезонов и лептонов или только лептонов. Масса эта-мезона равна 549 МэВ ($1074m_e$), время жизни порядка 10^{-19} с. Эта-мезоны распадаются с образованием π -мезонов и γ фотонов.

В отличие от лептонов, мезоны обладают не только слабым (и, если они заряжены, электромагнитным), но также и сильным взаимодействием, проявляющимся при взаимодействии их между собой, а также при взаимодействии между мезонами и барионами. Спин всех мезонов равен нулю, так что они являются бозонами.

4. Класс барионов объединяет в себе нуклоны (p,n) и нестабильные частицы с массой, большей массы нуклонов, получившие название гиперонов (Λ , Σ^+ , Σ^0 , Σ^- , Ξ^0 , Ξ^- , Ω^-). Все барионы обладают сильным взаимодействием. Спин всех барионов равен 1/2, так что барионы являются фермионами. За исключением протона, все барионы нестабильны. При распаде бариона, наряду с другими частицами, обязательно образуется барион. Эта закономерность является проявлением закона сохранения барионного заряда. Кроме перечисленных выше частиц, обнаружено большое число сильно взаимодействующих короткоживущих частиц, которые получили название резонансов. Эти частицы представляют собой резонансные состояния, образованные двумя или большим числом элементарных частиц. Время жизни резонансов составляет всего лишь примерно 10^{-23} — 10^{-22} с.