

## Введение.

Основой для данного курса послужили лекции по курсу атомной физики, прочитанные на физическом факультете Волгоградского Государственного Университета Куценко Светланой Анатольевной в период с февраля по июнь 2001 года. Автор выражает ей огромную признательность. Также, в качестве вспомогательной литературы, использовались книги Шпольского Э. В., Матвеева А. Н., М. Борна и других. Полный список использованной литературы приведён в конце.

*Посвящается моим друзьям  
и родителям.*

## Атомная Физика.

### **Глава I. Корпускулярно – волновой дуализм электромагнитных волн.**

Как известно, строение атома дискретно. Выявить дискретность атома позволяет дискретность излучения. Атомы исследуют двумя способами: радиофизическим и с помощью излучений.

Электромагнитная волна имеет двойственную природу. С одной стороны она является волной, а с другой – потоком фотонов. Волновые свойства хорошо проявляются при распространении света. Свидетельством тому такие явления, как дифракция и интерференция. Квантовая природа проявляется лучше в процессе испускания и поглощения излучения, а также при взаимодействии излучения с веществом. Наиболее ярко квантовые свойства проявляются при фотоэффекте.

#### **§ 1.1. Фотоэффект.**

Под фотоэффектом понимают изменение состояния электронов в веществе под действием света (электромагнитного излучения). Различают внутренний и на внешний фотоэффекты. Явление внутреннего фотоэффекта проявляется в полупроводниках, в некоторых металлах и кристаллических соединениях. При внутреннем фотоэффекте электроны с поверхности вещества не вырываются. Рассмотрим, в чём заключается его сущность. Электроны, лежащие в валентной зоне, обладают хорошей связью с ядром. Чтобы оторваться от ядра у них недостаточно энергии. Однако электроны из зоны проводимости обладают более высокой энергией, достаточной для того, чтобы оторваться от ядра. Поглотив квант энергии, электрон из валентной зоны может перейти в зону проводимости, то есть стать свободным электроном, способным участвовать в образовании электрического тока. Рассмотренное явление получило название внутреннего фотоэффекта.

Внешний фотоэффект состоит в вырывании электронов с поверхности вещества под действием электромагнитного излучения. Фотоэффект наблюдается лучше всего на атомах щелочных металлов, так как у них на внешнем энергетическом уровне находится только один электрон.

Исторически право открытия фотоэффекта принадлежит русскому учёному А. Столетову.

Рассмотрим сущность внешнего фотоэффекта. На установке, изображённой на рисунке, изучалось явление внешнего фотоэффекта. Сквозь кварцевую пластинку на катод подал свет. При этом, при отсутствии внешнего напряжения, амперметр показывал некоторый небольшой ток. При включении внешнего напряжения, ток в цепи возрастал почти линейно до некоторого значения. После этого дальнейшее увеличение напряжения к росту тока не приводило, то есть наступал эффект насыщения. В то же время, при нулевом напряжении, как уже было сказано, некоторый ток существовал. Прикладывая отрицательное напряжение, мы, при некотором его значении, получим нулевой ток. Оказалось, что величина фототока зависит как от длины



Рис. 1

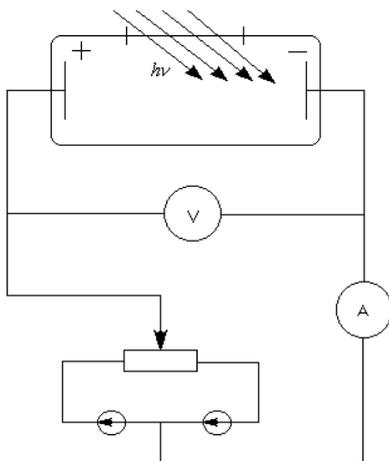
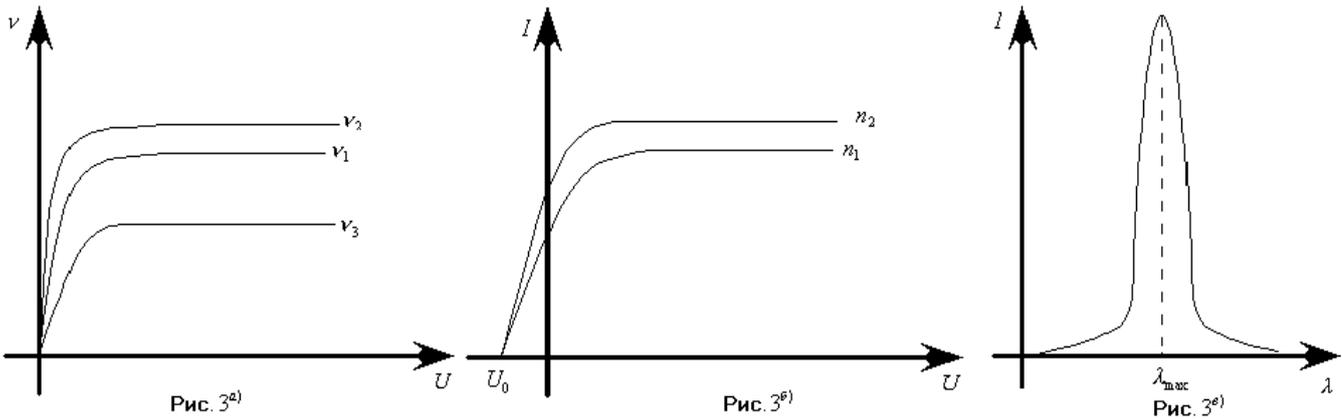


Рис. 2

падающей волны, так и от интенсивности излучения. Вообще говоря, интенсивностью излучения называют энергию, проходящую за единицу времени через поверхность единичной площади. Зависимость напряжения от различной частоты падающего излучения, показана на рисунке 3<sup>а)</sup>. Здесь  $\nu_3 < \nu_1 < \nu_2$ , то есть с увеличением частоты, режим насыщения наступает при большем токе до какого-то определённого уровня. Потом дальнейший рост частоты уже не приводит к росту тока, а, наоборот, к его уменьшению. Качественно это показано на рисунке 3<sup>б)</sup>. Зависимость фототока от интенсивности излучения приведена на рисунке 3<sup>в)</sup>.

При изучении фотоэффекта были открыты и описаны его законы. Рассмотрим их.



### Законы фотоэффекта.

1. Закон Столетова. Существует граничная частота  $\nu_{gp}$ , ниже которой для данного материала катода фотоэффект отсутствует независимо от плотности светового потока энергии и продолжительности облучения катода. Эта граничная частота называется красной границей фотоэффекта и составляет полосу шириной  $\approx 7000 \div 8000 \text{ \AA}$  ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$ ). Значение этой границы зависит только от рода атомов. Энергия, которую нужно затратить, чтобы вырвать электрон из вещества, называется работой выхода.  $A_{\text{вых}} = h\nu_{gp}$ .
2. Закон фотоэффекта. Максимальная энергия фотоэлектрона, покидающего катод, равна  $E_{\text{кин}} = \frac{mv_{\text{max}}^2}{2}$ ; не зависит от плотности энергии светового потока и линейно зависит от частоты.
3. Закон фотоэффекта. При фиксированной частоте излучения число электронов, выбиваемых из катода в единицу времени, прямо пропорционально плотности светового потока энергии.

Обобщая законы фотоэффекта, Эйнштейн записал уравнение фотоэффекта:  $h\nu = A_{\text{вых}} + \frac{mv_{\text{max}}^2}{2}$ , суть которого в том, что энергия фотона, попадающего на катод, идёт на преодоление работы выхода электрона из материала катода и на сообщение ему кинетической энергии.

В опыте Столетова измерялась сила тока. Она равна:  $I = \frac{Ne}{t}$ , где  $N$  – число электронов,  $e$  – заряд электрона, а  $t$  – время. В то же время  $N = nV = nSl$ , где  $n$  – концентрация. Тогда  $I = \frac{nSle}{t}$ . Здесь отношение  $\frac{l}{t} = v$  даёт скорость электрона. Таким образом, для некоторой концентрации фотонов  $n_\phi$ , падающих на катод, мы можем записать:  $n_\phi h\nu = n_s \left( A_{\text{вых}} + \frac{mv_{\text{max}}^2}{2} \right)$ . Здесь  $n_\phi \neq n_s$ , так как не обязательно одному поглощённому фотону будет соответствовать один излучённый электрон.

Если в схеме поменять полярность батареи, то ток в цепи, как уже говорилось, будет убывать, так как электрическое поле будет препятствовать дрейфу электронов от катода к аноду. В конце концов, при каком-то  $U_0$ , ток в цепи станет равным нулю, то есть ни один электрон не сможет достигнуть анода. Напряжение, при котором это произойдёт, называют задерживающей разностью потенциалов:

$A_{эл} = \frac{mv_{\max}^2}{2}$ ;  $eU_0 = \frac{mv_{\max}^2}{2}$ ;  $h\nu = A_{\text{вых}} + eU_0$ . Из последней формулы можно определить значение постоянной Планка:  $h = \frac{A_{\text{вых}} + eU_0}{\nu}$ . Опытное значение постоянной Планка было получено Милликеном и

составило  $h = 6,56 \cdot 10^{-34}$  Дж·с. По современным данным полагают  $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$  Дж·с.

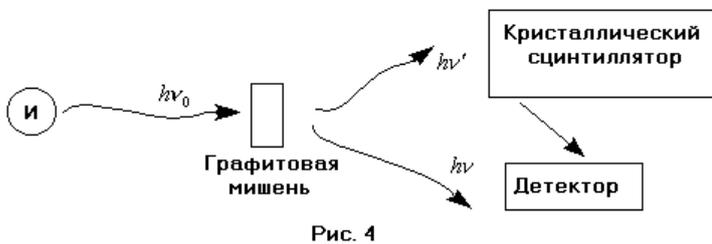
Возвращаясь к различным видам фотоэффекта, необходимо заметить, что существует так называемый ядерный фотоэффект. Так называют явление поглощения сильно коротковолнового излучения (рентгеновского или  $\gamma$  – излучения) ядрами атомов, в результате которого происходит вылет нуклонов (протонов и нейтронов) из ядер.

### Свойства фотонов.

1. Фотон – минимальная порция электромагнитного излучения. Энергия фотона есть  $E_\phi = h\nu$  или  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ,  $E_\phi = \hbar \cdot 2\pi\nu = \hbar\omega$ .
2. Фотон обладает импульсом; движется со скоростью равной скорости света. Импульс фотона примерно (грубо) определяют так:  $\vec{p} = \frac{\hbar\omega}{c} \vec{i}$ , где  $\vec{i}$  – единичный вектор направления. Фотон не имеет массы покоя. Масса же движения равна:  $mc^2 = h\nu$ . С другой стороны  $mc = \frac{h\nu}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}$ . Направление вектора  $\vec{p}$  совпадает с направлением вектора, описывающего направление распространения волны, – вектором  $\vec{k}$ .  $|k| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi\nu}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ ;  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ .
3. Фотон имеет поляризацию. Она совпадает с поляризацией волны, из которой он взят.
4. Фотон обладает собственным моментом количества движения – спином. Спин фотона  $S = 1$ .

### § 1.2. Эффект Комптона.

В 1922 – 23 гг. Комптоном был исследован характер взаимодействия фотона и электрона. В результате поставленных опытов был сделан вывод, что при определённых условиях они имеют характер механического столкновения. Рассмотрим схему опыта, натолкнувшего Комптона на такую мысль. В опыте, в качестве источника излучения, использовалась рентгеновская трубка с молибденовым анодом. Фотон попадал на графитовую мишень из источника рентгеновского излучения<sup>1</sup>. После рассеяния на мишени, исследовался спектр рассеянного излучения с помощью кристаллического сцинтиллятора. Вторичное излучение, полученное с помощью сцинтиллятора, попадало на фотодетектор.



<sup>1</sup> Механизм генерации рентгеновского излучения носит двойной характер. С одной стороны, при торможении быстрого электрона об анод, испускается квант электромагнитной энергии с длиной волны, соответствующей рентгеновскому излучению. С другой стороны, при попадании фотона в ядро, происходит явление внешнего фотоэффекта. Электрон из зоны валентности переходит в зону проводимости. В то же время, освободившееся место занимает электрон с более высокого энергетического уровня и при этом излучает энергию равную разности энергий энергетических состояний. Эта энергия и будет искомым рентгеновским излучением.

Исследуя спектр, Комптон заметил, что лучи, рассеянные на угол меньше  $90^\circ$ , обладают большей длиной волны, чем исходное излучение, так что частота  $\nu'$  вторичной волны оказывается вопреки классической теории меньше, чем частота  $\nu_0$  первоначального электромагнитного поля. Причём, энергия рассеянных фотонов (а значит и их частота) зависит от угла рассеяния  $\theta$ . С позиции волновой теории это явление необъяснимо. На основании опытных данных, исследуя зависимость мощности рассеянного

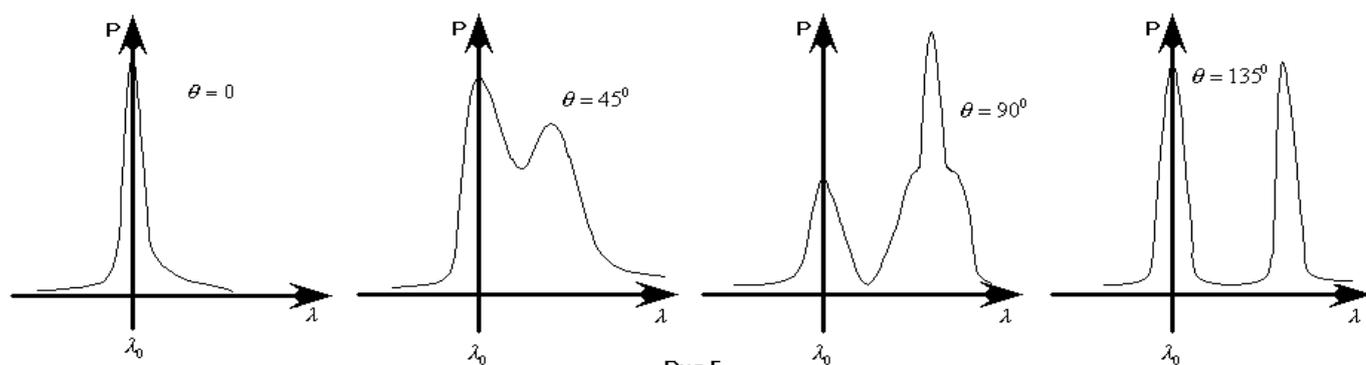


Рис.5

излучения от длины его волны при различных углах рассеяния, Комптон сделал вывод, что сдвиг длины волны  $\Delta\lambda$  линейно пропорционален  $\sin^2 \frac{\theta}{2}$ , где  $\theta$  – угол рассеяния. Таким образом, чтобы поставить

знак равенства, необходимо умножить  $\sin^2 \frac{\theta}{2}$  на некоторую константу. Мы можем записать:

$$\Delta\lambda = 2\lambda_c \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (1), \text{ где } \lambda_c = 2,4 \text{ нм} - \text{комптоновская постоянная (комптоновская длина волны).}$$

Рассмотрим теперь графики зависимости  $P(\theta)$  для различных  $\theta$ .

Из графиков (см. рис 5) видно, что функция  $P(\theta)$  при различных  $\theta$  имеет максимум не только при исходной длине волны, но и при некоторых других.

Для объяснения эффекта Комптона, Дебай рассмотрел упругое столкновение двух частиц: светового кванта и электрона. Надо сказать, что электрон, с которым происходит упругое столкновение, является свободным электроном, т. е. электроном проводимости.

Пусть до взаимодействия электрон неподвижен. Фотон с импульсом  $\hbar\vec{k}$  взаимодействует с электроном мишени, рассеивается на нём. Импульс фотона изменяется и становится равным  $\hbar\vec{k}'$ .

Электрон также рассеивается и при этом получает импульс  $m\vec{v}$ . Таким образом, мы можем записать законы сохранения импульса и энергии:

$$\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + m\vec{v} \quad (2)$$

$$\hbar\omega + m_e c^2 = \hbar\omega' + mc^2, mc^2 = \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (3).$$

В формуле (3) под  $m_e$  подразумевается масса покоя электрона.

Проведём некоторые преобразования. Сложим импульс по правилу параллелограмма. Для треугольника  $ABC$  применим теорему косинусов:

$$\hbar^2 k'^2 + \hbar^2 k^2 - 2\hbar^2 k k' \cos \theta = m^2 v^2. \text{ Так как } \hbar k = \hbar \frac{\omega}{c}, \text{ то}$$

$$\hbar^2 \frac{\omega'^2}{c^2} + \hbar^2 \frac{\omega^2}{c^2} - 2\hbar^2 \frac{\omega\omega'}{c^2} \cos \theta = m^2 v^2 \quad (4).$$

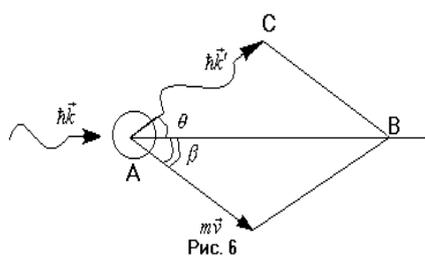


Рис. 6

Из равенства (3) следует, что  $m = \frac{m_e}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$  или  $m^2 = \frac{m_e^2}{1 - \frac{v^2}{c^2}}$ . Из последнего выражения найдём

$m^2 v^2$ :  $m^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = m_e^2$   $m^2 c^2 - m^2 v^2 = m_e^2 c^2$ ;  $m^2 v^2 = m^2 c^2 - m_e^2 c^2$ . Подставим последнее выражение в

формулу (4), и, учитывая закон сохранения энергии:  $m = \frac{\hbar}{c^2}(\omega - \omega') + m_e$  (получается из формулы (3)), запишем:

$$\hbar^2 \frac{\omega'^2}{c^2} + \hbar^2 \frac{\omega^2}{c^2} - 2\hbar^2 \frac{\omega'\omega}{c^2} \cos \theta = m^2 c^2 - m_e^2 c^2$$

$$\hbar^2 \omega'^2 + \hbar^2 \omega^2 - 2\hbar^2 \omega'\omega \cos \theta = m^2 c^4 - m_e^2 c^4.$$

$$\hbar^2 (\omega'^2 + \omega^2 - 2\omega\omega' \cos \theta) = c^4 \left( \frac{\hbar^2}{c^4} (\omega - \omega')^2 + m_e^2 + 2 \frac{\hbar}{c^2} (\omega - \omega') m_e^2 - m_e^2 \right)$$

$$\hbar^2 \omega'^2 + \hbar^2 \omega^2 - 2\hbar^2 \omega\omega' \cos \theta = \hbar^2 (\omega - \omega')^2 + 2\hbar c^2 (\omega - \omega') m_e$$

$$\cancel{\hbar^2 \omega'^2} + \cancel{\hbar^2 \omega^2} - 2\hbar^2 \omega\omega' \cos \theta = \cancel{\hbar^2 \omega'^2} - 2\hbar^2 \omega'\omega + \cancel{\hbar^2 \omega^2} + 2\hbar c^2 (\omega - \omega') m_e$$

$-\hbar\omega\omega' \cos \theta = -\hbar\omega\omega' + m_e c^2 (\omega - \omega')$ ;  $\hbar\omega\omega'(1 - \cos \theta) = m_e c^2 (\omega - \omega')$ . Разделим последнее выражение на

$\omega\omega'$ :  $\hbar(1 - \cos \theta) = m_e c^2 \left( \frac{\omega - \omega'}{\omega\omega'} \right)$ ;  $1 - \cos \theta = \frac{m_e c^2}{\hbar} \left( \frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} \right)$ . Так как  $\omega = 2\pi\nu = 2\pi \frac{c}{\lambda}$ , то

$1 - \cos \theta = \frac{m_e c^2}{\hbar} \left( \frac{\lambda'}{2\pi c} - \frac{\lambda}{2\pi c} \right)$ . Преобразуя последнее выражение, получим:  $1 - \cos \theta = \frac{m_e c}{\hbar} (\lambda' - \lambda)$ .

Обозначим  $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ . Тогда  $1 - \cos \theta = \frac{m_e c}{\hbar} \Delta\lambda$ . Отсюда  $\Delta\lambda = \frac{\hbar}{m_e c} (1 - \cos \theta)$  или  $\Delta\lambda = 2 \frac{\hbar}{m_e c} \sin^2 \frac{\theta}{2}$  (5). В

последней формуле выражение  $\frac{\hbar}{m_e c}$  является постоянной, так как из таковых состоит. Вычисления

показывают, что  $\frac{\hbar}{m_e c} = 2,4 \cdot 10^{-12} \text{ м.}$ , что в точности совпадает с комptonовской постоянной. Таким

образом, (5) можно переписать так  $\Delta\lambda = 2\lambda_c \sin^2 \frac{\theta}{2}$ , что в точности совпадает с опытной формулой (1). Из

полученного соотношения следует, что квантовая теория хорошо объясняет эффект Комптона, исходя из корпускулярных свойств излучения. То есть столкновение электрона с фотоном рассматривается как столкновение двух упругих шариков. Данная механическая модель очень хорошо аппроксимирует истинное положение дел и в рамках данного эффекта ею очень удобно пользоваться.

Как было сказано выше, Дебай построил свою теорию на рассеянных электронах. Тем не менее, существуют эффекты наподобие комptonовского, которые очень трудно зарегистрировать. Например,

рассеяние на протоне. Так как  $\lambda_c = \frac{\hbar}{m_e c}$ , то при увеличении массы частицы фотон будет приобретать всё

меньшее изменение импульса. Так для протона  $m_p \approx 2000m_e$ , поэтому и изменение длины волны фотона

при рассеянии на протоне будет в 2000 раз меньшим. Из вышесказанного следует, что наличие в комptonовском эффекте не смещённой длины волны есть следствие рассеяния фотонов на атомах – когерентное рассеяние. Очевидно, что масса атома гораздо больше массы электрона, поэтому  $\theta \rightarrow 0$ .

Другое подтверждение корпускулярной теории должно было дать следующее предположение. Если свет состоит из потока частиц, мы могли бы выделить частицу. В настоящее время существуют установки, позволяющие регистрировать до 5 – 6 фотонов. В начале же века, чтобы построить подобный опыт, соответствующей техники не было. Тем не менее, С. И. Вавилов поставил эксперимент по исследованию

флуктуаций интенсивности светового потока, а значит и числа фотонов. Дискретность светового потока имеет место быть не только во времени, но и в пространстве. В качестве приёмника Вавилов использовал свой глаз, так как человеческий глаз обладает высокой светочувствительностью. Его разрешающая способность составляет примерно 10 – 20 фотонов. Схема опыта, поставленного Вавиловым, такова. Брался источник белого света и пропускал луч через attenuator – диск с вырезанным сегментом, насаженный на ось и способный вращаться. Скорость вращения attenuatora выставлялась равной 1 об/с. Потом свет падал на зелёный светофильтр, а после него – на собирающую линзу и управляемый attenuator, изменяющий интенсивность света. После всего луч попадал в глаз к наблюдателю.

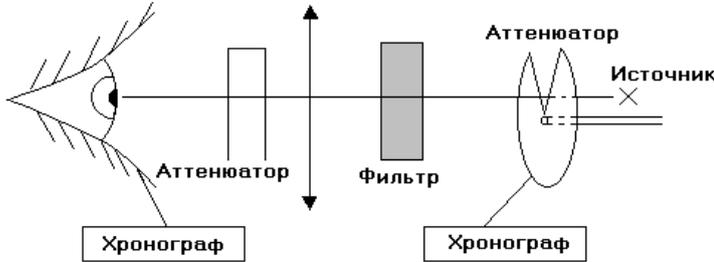


Рис. 7

Хронограф, соединённый с первым attenuatorом, ставил отметки каждый раз, когда через attenuator проходил луч. Второй хронограф приводился в действие самим наблюдателем. Опыт показал, что для большой интенсивности света отметки независимого хронографа и хронографа испытателя совпадали. При уменьшении интенсивности до некоторой величины, испытатель переставал регистрировать некоторые всплески. Статистическая обработка данных показала, что в данном случае имеет место статистические флуктуации числа фотонов в каждой отдельной вспышке светового потока. Точно таким же образом исследовались флуктуации когерентных лучей. Когерентные лучи получались методом Юнга. Опыт показал, что флуктуации фотонов в каждом из двух когерентных лучей независимы. Исследуя этим же методом флуктуации фотонов в двух поляризованных лучах<sup>1</sup>, полученных с помощью призмы Волластона<sup>2</sup>, получили, что они также независимы.

### § 1.3. Интерференция фотонов.

Из курса электричества известно, что к электромагнитной волне может быть применено скалярное волновое уравнение:  $\Delta\Phi(r,t) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2\Phi(r,t)}{\partial t^2} = 0$  (1), где  $v$  – скорость распространения волны, а  $\Phi$  – одно из следующих полей:  $B, H, E, D$ . Уравнению (1) удовлетворяют плоские электромагнитные волны, то есть волны, которые описываются следующим уравнением:  $\Phi = \Phi_0 e^{-i(\omega t + \varphi)} = \Phi_0 e^{-i(\omega t + k\vec{r})}$ , где  $\omega t$  – временная фаза, а  $\varphi$  – пространственная фаза. Если эту функцию подставить в (1), волновое уравнение примет вид:  $\Delta\Phi(r,t) + k^2\Phi(r) = 0$  (2). Уравнение (2) называют уравнением Гельмгольца. Оно описывает пространственные характеристики гармонической волны в однородной среде. На этом уравнении

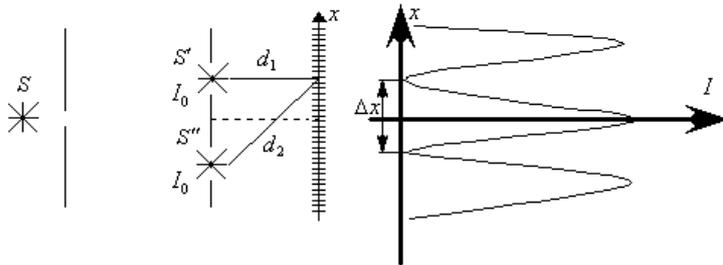


Рис. 8

базируется теория интерференции и дифракции. Рассмотрим классический опыт Юнга по интерференции от двух щелей. Сферическая волна из источника  $S$  падает на непрозрачный экран с одной щелью. Щель является источником вторичной сферической волны, интенсивность которой уже много меньше исходной. Полученная волна распространяется и падает, в свою очередь, на непрозрачный экран с двумя отверстиями, которые являются теперь источниками вторичных волн. Так как отверстия два, то и полученных волн тоже будет две. Данные волны обладают свойством когерентности, поэтому для них возможно явление интерференции. Основное противоречие здесь заключается в следующем: явление фотоэффекта и эффекта Комптона, казалось бы, довольно убедительно показали, что свет есть нечто иное, как поток корпускул. Тогда, так как интенсивность зависит от числа фотонов, то если освещать непрозрачный

<sup>1</sup>Здесь различная поляризация лучей значит, что векторы напряжённости электрического поля двух лучей перпендикулярны друг другу. Поляризованность же вообще означает, что вектор напряжённости электрического поля в каждый момент времени для каждой волны коллинеарен сам себе.

<sup>2</sup> Призма Волластона изготовлена из исландского шпата.

экран двумя лучами, по идее, интенсивность для каждой точки экрана должна быть выше, чем если бы его освещали только из одного источника. На деле же для некоторых участков экрана интенсивность, в соответствии с рис. 8, получается более низкой, а для других – более высокой, чем должна бы в соответствии с квантовой моделью. С точки зрения корпускулярной теории это явление объяснить нельзя. Однако, если ввести в рассмотрение волновую модель света, описанное явление получает замечательное объяснение с помощью явления интерференции. Таким образом, для света характерны корпускулярные и волновые свойства.

Опыт показывает, что картинка распределения интенсивности  $I$  результата интерференции в зависимости от координаты  $x$  имеет вид указанный на рис. 8 вид. Формально, характеризуя зависимость  $I(x)$ , мы можем записать:  $I(x) = 2I_0(1 + \cos \delta(x))$  (3). Здесь  $I_0$  – интенсивность источников  $S'$  и  $S''$ . Множитель 2 возникает вследствие того, что у нас два источника. В последней формуле  $\delta(x)$  является разностью фаз между интерферирующими лучами в точке наблюдения. Найдём её. Запишем уравнения плоской волны для источников  $S'$  и  $S''$ :  $E_1 = E_0 e^{-i(\omega t + kd_1)}$  и  $E_2 = E_0 e^{-i(\omega t + kd_2)}$ . Тогда  $\delta = k(d_1 - d_2) = \varphi_1 - \varphi_2$ . Отсюда для корпускулярной интерпретации опыта Юнга возникают чрезвычайно большие трудности. Если каким-то образом приписать отдельному фотону фазу, тогда необходимо считать, что  $\delta$  в (3) является разностью фаз двух фотонов, прошедших через различные щели. Но это противоречит закону сохранения энергии, поскольку два фотона при попадании в одну точку экрана выделяют энергию, не равную сумме их энергий. При некоторых условиях ( $\cos \delta = -1$ ) они могут взаимно уничтожить друг друга, при других ( $\cos \delta = 1$ ) – выделенная энергия в два раза больше, чем сумма энергий фотонов. Ясно, что такая интерпретация фазы неприемлема. Поэтому не представляется возможным приписать фотону характеристику, аналогичную фазе электромагнитной волны. Характеристика, аналогичная фазе волны, принадлежит не фотону, а состоянию, которое описывает его движение. Это значит, что интерференцию необходимо описать как явление, происходящее при наличии лишь одного фотона. Эксперименты с очень маленькими интенсивностями света, когда можно быть уверенным, что одновременно в образовании интерференционной картины участвует не более одного фотона, показали, что интерференционная картина образуется попаданием на экран отдельных фотонов. Это говорит о том, что движение отдельного фотона в интерференционных не зависит от наличия других. Фотон интерферирует сам собой. Вследствие этого говорят, что существует вероятность наблюдения фотона в тот или иной момент времени в той или иной точке пространства. Поэтому функция  $\Phi$  из уравнения (2), описывающего распространение отдельного фотона, будет иметь смысл не, например, напряжённости электрического поля  $E$  в данной точке пространства, а плотности вероятности нахождения фотона в данной точке пространства в данный момент времени  $t$ . Таким образом, корпускулярное описание не позволяет говорить о движении фотона по какой-то траектории. Не имеет также смысла говорить, что фотон прошёл при интерференции через ту или иную щель.

#### § 1.4. Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах.

Вообще говоря, дифракцией называют огибание волной препятствий, не связанное с явлениями отражения, преломления или рассеяния света. Строго говоря, дифракция является результатом интерференции вторичных волн. Основой для описания дифракции служит принцип Гюйгенса – Френеля, заключающийся в том, что все точки поверхности волнового фронта являются источниками вторичных волн, а результирующее волновое поле является суперпозицией волн, исходящих из вторичных источников. Таким образом, чтобы узнать, какова будет интенсивность в произвольной точке экрана, необходимо знать результат интерференции вторичных волн в этой точке. По идее, при дифракции на двух щелях (см. рис. 8) напротив непрозрачной части экрана должно наблюдаться тёмное пятно. Однако можно сделать так, чтобы в этой точке было пятно светлое. Это – следствие явления интерференции вторичных волн.

Дифракция волны на препятствии происходит всегда, независимо от размеров самого препятствия или длины волны. Другое дело, наблюдать дифракцию. Когда размеры препятствия гораздо больше длины волны, дифракцию можно обнаружить на значительном удалении от

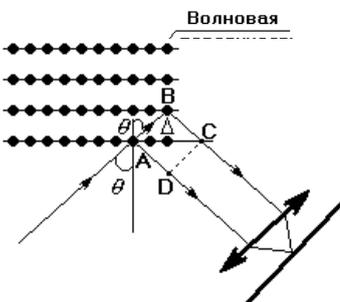


Рис. 11

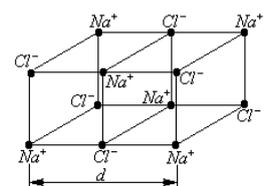


Рис. 10

препятствия. Если же длина волны соизмерима с размерами препятствия, то дифракцию можно наблюдать в непосредственной близости от препятствия. Длина волны рентгеновского излучения составляет  $1 - 0,001$  нм. Поэтому, для удобства изучения рассматривают дифракцию рентгеновского излучения на кристаллах. Кристаллами называется упорядоченная структура, в узлах которой находятся молекулы, атомы, ионы или электроны. Такая структура называется кристаллической решёткой. Наиболее простой вид имеет кубическая кристаллическая решётка. Решёткой такого вида обладают графит, поваренная соль и т. д. Рассмотрим её строение на примере кристаллов поваренной соли. В узлах данной решётки сосредоточены ионы хлора и натрия. Линиями показаны химические связи, существующие в кристалле. Параметр  $d$  определяет расстояние, начиная с которого строение решётки повторяется.  $d$  называют периодом кристаллической решётки. Существуют более сложные кристаллические решётки, например, кубическая гранецентрическая кристаллическая решётка, объёмочентрическая решётка и т. д. Как уже говорилось ранее, существует возможность использовать кристаллическую решётку в качестве дифракционной. Однако это будет трёхмерная дифракционная решётка. Рассмотрим процессы, происходящие при прохождении луча сквозь кристалл. Если волна падает на кристалл в определённом направлении, то мы можем рассматривать процесс прохождения волны через кристалл как последовательные отражения её от кристаллических плоскостей. В этом случае ион становится источником вторичных волн. При этом часть луча отражается от ионов первой кристаллической плоскости, а другая часть проходит дальше. Так как угол падения равен углу отражения, то те фотоны, угол падения которых был одинаков, после отражения будут двигаться параллельно друг другу. Чтобы собрать их вместе, поставим на пути отражённого луча собирающую линзу. Тогда на экране, расположенном за линзой мы сможем наблюдать дифракционную картину. Как известно, интерференционный максимум или минимум определяются тем, приходят ли волны в данную точку синфазно или же в противофазе. Разность фаз двух лучей будет зависеть от расстояния, пройденного этими лучами.

Дадим теперь явлению дифракции на кристалле некоторую количественную оценку. Отражённые лучи, как видно из рис. 11, будут иметь разность хода равную  $\Delta$ . Пусть лучи падают на кристалл под определённым углом  $\theta$ . Потребуем выполнения в точке наблюдения условия максимума интенсивности:  $\delta = 2\pi m$  ( $1'$ ), где  $m$  – произвольное целое положительное число. Увеличим часть рис. 11 чтобы рассмотреть его геометрию. Очевидно, что разность хода  $\Delta$  будет определяться следующим соотношением:  $\Delta = |AB| + |BC| - |AD|$  (1). Так как треугольники  $ABG$  и  $BCG$  равны<sup>1</sup>, то

сторона  $|AC| = |AG| + |GC| = 2|AG|$ . Найдём её.  $\sin \theta = \frac{|AG|}{|AB|}$ ;  
 $|AG| = |AB| \sin \theta$ ;  $|AC| = 2|AB| \sin \theta$ . Нам известно, что  $|AE| = d$  – период кристаллической решётки. Тогда  $\cos \theta = \frac{|AE|}{|AB|}$ ;  $|AB| = \frac{|AE|}{\cos \theta}$  (2). Таким образом,

$|AC| = \frac{2|AE| \sin \theta}{\cos \theta} = 2|AE| \operatorname{tg} \theta$  (3). Рассмотрим теперь  $\triangle ADC$ . Угол  $\angle ACD = \theta$ . Этот

факт легко доказывается, если записать выражения для всех углов треугольника<sup>1</sup>. Поэтому  $\sin \theta = \frac{|AD|}{|AC|}$ ;

$|AD| = |AC| \sin \theta$ . Таким образом,  $|AD| = 2|AE| \operatorname{tg} \theta \sin \theta$  или  $|AD| = 2d \operatorname{tg} \theta \sin \theta$ . Так как  $\triangle ABG = \triangle BGC$ , то

<sup>1</sup>  $BG \perp AC$ , следовательно, угол  $\angle AGB = \angle BGC$ . Угол  $\angle ABG = \angle GBC$ , так как угол падения равен углу отражения. В свою очередь,  $\angle ABG = \angle EAB$  как внутренние, накрест лежащие. Так как углы  $\angle FAH$  и  $\angle EAB$  – смежные, то они равны. Поэтому  $\angle FAH = \angle ABG = \angle GBC = \theta$ . Сторона  $BG$  является для треугольников  $ABG$  и  $BCG$  общей, поэтому по признаку равенства треугольников (сторона и прилежающие к ней углы равны) имеем равенство искомого треугольников.

<sup>1</sup>  $\angle DAG = \angle HAC - \angle HAD = 90^\circ - \theta$ . Так как сумма всех углов треугольников равна  $180^\circ$ , то  $\angle ADC + \angle DCA + \angle CAD = 180^\circ$  или  $90^\circ + \angle DCA + 90^\circ - \theta = 180^\circ$ . Таким образом,  $90^\circ + \angle DCA + 90^\circ - \theta = 180^\circ$ . Следовательно,  $\angle DCA = \theta$ .  $|AD| = |AC| \sin \theta$

$$|AB| = |BC|; \quad |AB| + |BC| = 2 \frac{|AE|}{\cos \theta} = 2 \frac{d}{\cos \theta}.$$

Возвращаясь к выражению (1), с учётом последнего

выражения, а также уравнения (3), мы можем записать:  $\Delta = \frac{2d}{\cos \theta} - 2d \operatorname{tg} \theta \sin \theta$ . Преобразуем последнее

выражение:  $\Delta = \frac{2d}{\cos \theta} - \frac{2d \sin^2 \theta}{\cos \theta} = 2d \frac{1 - \sin^2 \theta}{\cos \theta}$ ;  $\Delta = 2d \frac{\cos^2 \theta}{\cos \theta}$ ,  $\Delta = 2d \cos \theta$  (4). С другой стороны,

разность фаз между волнами, отражёнными от соседних поверхностей, равна  $\delta = k\Delta$ . Так как мы требовали условие интерференционного максимума, то, в соответствии с формулой (1'), мы можем записать:  $k\Delta = 2\pi m$ . Учитывая выражение для  $\Delta$  (4), получим:  $2\pi m = 2kd \cos \theta$ . По определению  $k \equiv \frac{2\pi}{\lambda}$ .

Подставляя это выражение в последнюю формулу, получим:  $\pi m = d \frac{2\pi}{\lambda} \cos \theta$  или, окончательно,

$m\lambda = 2d \cos \theta$  (5). Формула (5) называется условием Вульфа – Брэгга. Она показывает, под каким углом на кристалл с заданным периодом кристаллической решётки должно падать излучение, чтобы было возможным наблюдение интерференционных максимумов. В тоже время, с помощью формулы (5) мы можем определить период кристаллической решётки исследуемого кристалла. Известно, что в случае

объёмной кристаллической решётке, особенно острым будет центральный максимум, т. е.  $m=1$  (см. рис. 13). Поэтому, посылая на кристалл лучи под различными углами, мы при каком-то конкретном угле сможем наблюдать максимум. Зная угол, легко определить и период кристаллической решётки. На формуле Вульфа – Брэгга основан метод рентгеноскопического анализа. Методы рентгеноскопического анализа делятся на две группы в зависимости от условий съёмки:

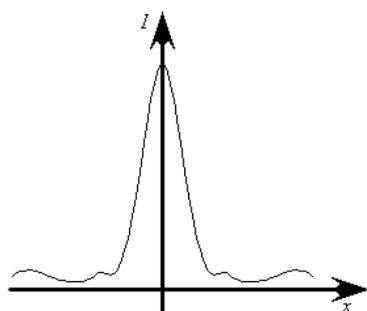


Рис. 13

кристалл.

1. Угол падения луча на кристалл постоянен, но изменяется длина падающей волны.
2. Длина волны постоянна, но изменяется угол падения её на

К первому типу относится метод Лауэ. Его суть заключается в том, что на кристалл ориентированный под определённым углом по отношению к лучу, падает пучок непрерывного излучения<sup>2</sup>. Для излучения с некоторой длиной волны выполнится условие Вульфа – Брэгга. По интерференционной картине и геометрии опыта легко вычислить длину этой волны, а значит и период кристаллической решётки.

Второй тип осуществляется двумя методами.

1. Метод вращения (метод Брэгга). Данный метод заключается в том, что монокристалл облучается монохроматическим рентгеновским излучением. При этом кристалл вращается вокруг оси кристаллографической зоны, ортогональной падающему пучку света так, что различные плоскости кристалла становятся последовательно в положение, соответствующее условию Вульфа – Брэгга. Для какого-то угла условие Вульфа – Брэгга будет выполнено. Зная угол, и результат интерференции, можно найти период кристаллической решётки. Так как излучение падает на различные кристаллические плоскости, то мы в случае сложного строения кристалла сможем полностью определить все расстояния между различными его плоскостями. Поэтому метод Брэгга используется, в основном, для анализа сложных кристаллических структур.
2. Метод Дебая – Шерера. В этом методе поликристалл или мелкий порошок из монокристаллических зёрен освещался монохроматическим излучением. Среди множества произвольно ориентированных монокристаллов всегда будут существовать такие, для которых будет выполнено условие Вульфа – Брэгга. Зная интерференционную картину, длину падающей волны и геометрию опыта, можно сделать заключение о строении кристалла.

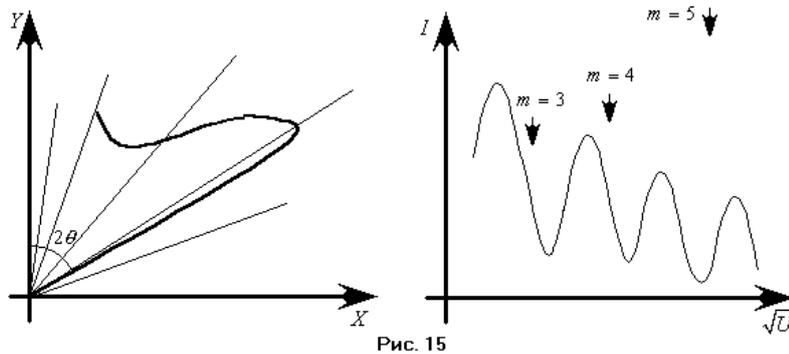
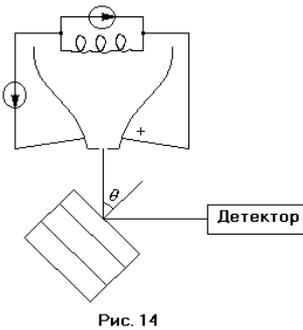
Таким образом, опыты по дифракции рентгеновского излучения на кристалле позволили убедительно доказать волновую природу данного излучения, а также найти длину его волны.

<sup>2</sup> То есть в таком излучении представлены все длины волн.

### § 1.5. Волновые свойства корпускул.

Исследование свойств электромагнитного излучения, в частности рентгеновского, наглядно показали, что его поведение невозможно характеризовать какими-то конкретными рамками, т. е. или волна, или частица. Явление фотоэффекта, эффект Комптона, как мы уже видели, наглядно показывают, что рентгеновское излучение должно являться потоком частиц. В то же время опыты по дифракции рентгеновского излучения на кристаллах говорят в пользу его волновой природы. Таким образом, рентгеновскому излучению присущи как волновые, так и корпускулярные свойства. Данное обстоятельство наталкивает на мысль, что все микрочастицы могут вести себя подобно волнам. Были поставлены опыты, результаты которых это предположение подтвердили.

Классическими опытами, в которых были обнаружены волновые свойства частиц, являются опыты Девисона и Джермера (1927 г.). В них наблюдалась дифракция электронов, рассеянных на грани кристалла. Рассмотрим схему данного опыта. Электроны испускались раскалённой нитью, которая служила катодом. Между нитью и анодом подавалась разность дополнительных потенциалов. В аноде делалось отверстие. Электроны пролетали в него и падали на кристаллическую пластинку. Рассеянное излучение регистрировалось детектором. В первом опыте изменялся угол  $\theta$  падения электронов на пластинку. Результат рассеяния отмечался на полярной диаграмме (см. рис. 15). Максимум интенсивности приходился на угол  $2\theta = 50^\circ$ . Причём, для каждого кристалла угол, на который приходился максимум интенсивности, был своим. Во втором опыте при фиксированном угле



падающего электронного пучка на кристалл измерялась интенсивность отражённого пучка электронов в зависимости от энергии (т. е. от изменяющейся разности потенциалов). Интенсивность пучка

отражённых электронов измерялась по силе тока между источником и детектором (см. рис. 15). Здесь стрелками показаны расчётные значения. Полученные зависимости соответствовали зависимостям, которые можно было бы получить, если бы исследовалась дифракция электромагнитной волны. Но, так как в эксперименте вместо волны использовались электроны, это дало возможность предположить, что дифракцию испытывают как раз они. Чуть позже были поставлены опыты Тартаковским и Томпсоном по исследованию дифракции электронов. Тартаковский использовал медленные электроны с энергией порядка 1,7 кэВ, а Томпсон — быстрые с энергиями 17,5 — 56,6 кэВ. Для наблюдения дифракции использовался метод Дебая — Шерера. В качестве кристалла они использовали металлическую поликристаллическую пластину. Рассеянные на ней электроны должны были дать интерференционную картину, то есть систему интерференционных колец, что было блестяще подтверждено в результате опыта. Существовало всё же некоторое опасение, что интерференционная картина вызвана вторичным рентгеновским излучением, которое получается при торможении электрона. Однако, если поместить мишень в магнитное поле, интерференционная картина, полученная с помощью рентгеновского излучения, не изменится, по сравнению со случаем отсутствия магнитного поля. В случае с электронами, картина должна получиться смазанной, что и имело место быть.

Несколько позже Штерном были поставлены опыты по дифракции атомов и молекул на кристалле. Зависимость распределения максимумов интенсивностей была схожа с представленной на рис. 15 для электронов.

Все эти опыты привели к возникновению мысли о том, что все микрочастицы обладают волновыми свойствами. Причём, в волновых свойствах фотонов и других микрочастиц нет различия. В 1927 г. Луи де Бройль высказал предположение, что каждой движущейся частицы, мы можем поставить в

соответствие некоторую длину волны. Подобную волну назвали в последствии волной де Бройля. Установим связь между параметрами волны и движущейся частицы.

1. Для волны де Бройля, как и для любой другой электромагнитной волны, мы можем записать:

$$E = \hbar\omega \quad (1). \text{ С другой стороны, для импульса: } p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}; p = \hbar k \quad (1'), \text{ где } k - \text{ волновой}$$

вектор. Но для волнового вектора мы можем записать:  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ , т. о.  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ ;  $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$ ,  $\lambda = \frac{h}{p}$ . Из

последней формулы следует выражение для волны де Бройля:  $\lambda_B = \frac{h}{mv}$  (2). Из этого выражения

следует интересный вывод, касающийся распределения интенсивностей в опытах с дифракцией электронов. Изменяя приложенную разгоняющую разность потенциалов, мы изменяем длину волны де Бройля. Когда выполняется условие Вульфа – Брэгга, возникает максимум.

2. Определим теперь фазовый вид волн де Бройля. Введём некоторые дополнительные определения. Фазовой скоростью называют скорость,  $v_\phi$  с которой перемещается в

пространстве фаза  $\varphi$  плоской монохроматической волны  $E = E_0 \cos(\omega_0 t - kz)$ , где

$$\varphi = \omega_0 t - kz = const \quad (3). \text{ Другими словами, фазовая скорость – это скорость распространения}$$

точки постоянной фазы волны. Найдём эту скорость. Рассмотрим для этого выражение (3). Это уравнение чисто геометрически описывает плоскость, перпендикулярную к оси  $Z$ , на которой постоянна фаза волны. Таким образом, эта плоскость является как бы траекторией движения точки постоянной фазы. Поэтому, чтобы найти её скорость, необходимо взять производную от

(3) по времени. Получим:  $\omega - k \frac{dz}{dt} = 0$ , так как производная от константы будет ноль. Отсюда

найдётся и фазовая скорость:  $\frac{dz}{dt} = \frac{\omega}{k}$ . Это соотношение определяет как раз фазовую скорость.

Найдём некоторые свойства фазовой скорости. Возвращаясь к уравнениям (1) и (1'), выразим из

них  $\omega$  и  $k$ :  $\omega = \frac{E}{\hbar}$  и  $k = \frac{p}{\hbar}$ . Основываясь на определении фазовой скорости и полученных

выражениях, найдём другую форму записи для неё:  $v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{E \hbar}{\hbar p} = \frac{\cancel{\hbar} c^2}{\cancel{\hbar} v} = \frac{c^2}{v}$ . Здесь  $v_{\text{фаз}}$  –

фазовая скорость волны, соответствующей частице;  $v$  – скорость самой частицы;  $c$  – скорость света. Таким образом, как видно из полученной формулы, фазовая скорость будет больше скорости света, однако никакого противоречия с теорией относительности это не вызывает. Очевидно, что фазовая скорость не измерима в эксперименте. Измерить можно лишь так называемую групповую скорость.

3. Групповой скоростью называют величину, приближённо характеризующую распространение негармонической волны (которая является суперпозицией группы гармонических волн). Если форма волны изменяется в результате дисперсии<sup>1</sup> волн в среде не очень быстро, то можно рассматривать распространение негармонической волны как целого с групповой скоростью, отличной от фазовых скоростей её гармонических составляющих. Групповая скорость характеризует скорость переноса энергии волной. По определению для групповой скорости мы

можем записать:  $v_{gp} = \frac{d\omega}{dk}$  (отсюда сразу становится понятным условие, ограничивающее

скорость изменения  $\omega$ ). Возвращаясь к соотношениям, полученным для фазовой скорости,

получим:  $v_{gp} = \frac{dE \hbar}{\hbar dp} = \frac{dE}{dp}$ . Таким образом,  $v_{gp} = \frac{dE}{dp}$ .

4. Если волны распространяются в недиспергирующей среде (фазовая скорость не зависит от частоты), то групповая скорость равна скорости движения частицы  $v_{gp} = v$ . Тогда, вспоминая

<sup>1</sup> Дисперсией волн называют зависимость фазовой скорости гармонических волн в среде от частоты их колебаний.

выражение для фазовой скорости

$$v_{\text{фаз}} = \frac{c^2}{v}, \text{ мы можем записать: } v_{\text{фаз}} = \frac{c^2}{v_{\text{гp}}}$$

Из последней формулы следует:  $v_{\text{фаз}} v_{\text{гp}} = c^2$ .

Итак, мы установили, как связаны свойства частиц и волн де Бройля. Оценим теперь длину волны де Бройля. В опытах Девисона – Джермера ускоряющая разность потенциалов была  $\approx 100$  В. Тогда для энергии электрона имеем выражение:  $E_e = eU$ . С другой стороны, кинетическая энергия электрона

$$E_{\text{кин}} = \frac{m_e v^2}{2}. \text{ На основании закона сохранения энергии необходимо положить } E_e = E_{\text{кин}} \text{ или } eU = \frac{m_e v^2}{2}.$$

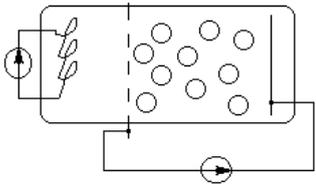


Рис. 16

Так как импульс электрона будет  $p = m_e v$ , то  $\frac{m_e v^2}{2} = \frac{p^2}{2m_e}$ , то есть  $eU = \frac{p^2}{2m_e}$ .

Отсюда  $p = \sqrt{2m_e eU}$ . Так как  $\lambda_B = \frac{h}{p}$ , то  $\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}}$ . Оценивая численное

значение  $\lambda_B$ , мы можем получить, что  $\lambda_B \approx 1 \text{ \AA}$ .

Рассмотрим теперь ещё один опыт. В 1921 г. немецкий физик Рамзауэр исследовал рассеяние электронов на атомах аргона при энергиях электрона от менее чем одного до нескольких десятков электрон-вольт. Обнаруженный им эффект назвали в последствии его именем. Он состоял в аномальной проницаемости некоторых газов (в частности аргона) для медленных электронов. Рассмотрим схему опыта (рис. 16).

Брался триод, в одной половине которого электроны не ускорялись, а в другой ускорялись. Трубку триода наполняли инертным газом (аргон). Электрон, попадая с раскалённой нити катода в пространство триода, движется по направлению к катоду и сталкивается с молекулой газа; при этом электрон рассеивается на ней. Поэтому, чем больше будет энергия электрона, тем больше шансов, что он пролетит без столкновения, то есть тем меньше вероятность рассеяния. Таким образом, с ростом ускоряющей разности потенциалов сила тока в цепи катод – анод должна возрастать. Графически зависимость между данными величинами можно представить так (см. рис. 17). Здесь зависимость  $P = P(E)$  есть зависимость вероятности рассеяния электрона от его энергии. Введём теперь в рассмотрение несколько новых величин, которые впоследствии помогут нам количественно описать эффект Рамзауэра. Будем рассматривать сечение рассеяния частиц. Понятие сечения рассеяния связано с вероятностью столкновения частицы с атомом или ядром. Будем считать частицу точечной. Пусть электрон падает на площадь  $s$  объёма, в котором расположены молекулы с концентрацией  $n_0$  (рис. 18). В слое толщиной  $dx$  в направлении движения электрона находится число молекул  $n_0 dV = n_0 s dx$ , а сумма их поперечных сечений, которая как бы закрывает собой часть площади  $s$ , равна  $ds = \sigma n_0 s dx$ , где  $\sigma$  - коэффициент пропорциональности. Отсюда

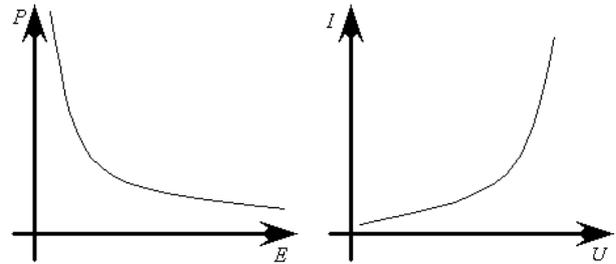
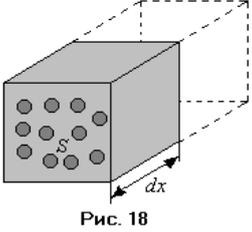


Рис. 17

следует, что вероятность попадания электрона в одну из молекул в слое  $dx$  будет равна:  $dP = \frac{ds}{s} = \sigma n_0 dx$ .

Как видно из полученной формулы, коэффициент  $\sigma$  имеет размерность площади:  $[\sigma] = [m^2]$ , отсюда и название сечения рассеяния. Рассмотрим, как же можно найти сечение рассеяния. Пусть у нас есть поток частиц, движущихся в газообразной среде. Тогда, вследствие рассеяния, плотность потока частиц убывает на величину  $dI = -IdP$ . Если частица прошла путь  $dx$ , то  $dI(x) = -I(x)n_0\sigma dx$ . Решаем обыкновенное дифференциальное уравнение с разделяющимися переменными.

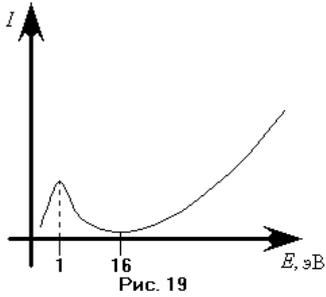


$$\frac{dI}{I} = -n_0 \sigma dx; \quad \int_0^l \frac{dI}{I} = -\int_0^x n_0 \sigma dx;$$

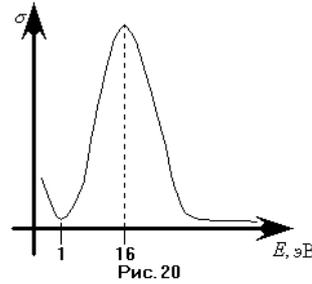
$$\ln I(x) - \ln I(0) = -n_0 \sigma x. \quad \sigma = \ln \frac{I(0)}{I(x)} \frac{1}{n_0 x}.$$

Последняя формула позволяет из опыта получить значение коэффициента рассеяния.

Введём теперь понятие длины свободного пробега. Так называют расстояние, пройденное частицей между двумя последовательными соударениями. Увеличение длины свободного пробега электрона напрямую связано с уменьшением вероятности столкновения его с молекулой; уменьшением сечения рассеяния. Следовательно, возрастает вероятность пролёта электрона между катодом и анодом без соударения с молекулой, то есть возрастает ток в цепи катод – анод. Длина свободного пробега



пропорциональна энергии электрона. Таким образом, зависимость  $\sigma = \sigma(E)$  будет иметь вид аналогичный указанному на первом из рисунков 17. Однако в действительности наблюдалась картина,



указанная на рисунках 19 и 20. То есть при уменьшении энергии электрона от нескольких десятков электрон-вольт, сечение его рассеяния на аргоне растёт, как это и предсказывается теорией. Затем при энергии около 16 эВ поперечное сечение достигает максимума и при дальнейшем уменьшении энергии электрона уменьшается. При энергии электрона примерно 1 эВ сечение близко к нулю и затем начинает увеличиваться (см. рис. 20).

Увеличение сечения с ростом энергии электрона и тем более почти полное исчезновение рассеяния вблизи энергии 1 эВ нельзя понять с точки зрения классических представлений, так как при этой энергии атомы аргона становятся как бы не существующими для электронов, и электроны пролетают сквозь них без столкновения. Объясняется это так. Электрону мы можем поставить в соответствие волну де Бройля  $\Psi = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kr)}$ . Тогда при некоторой длине волны де Бройля (она, как известно, зависит от энергии электрона), будет наблюдаться дифракционный максимум или минимум. Здесь молекула газа является препятствием, на котором рассеивается электронная волна. Условие, при котором происходит хорошо выраженная дифракция таково, что длина падающей волны должна быть порядка диаметра атома. Тогда, если рассматривать оптическую аналогию, за препятствием возникает светлое пятно, а не тень. То есть электрон проходит сквозь атом без отклонения и сечение его рассеяния на атоме близко к нулю.

## Глава II.

## Дискретность электронных и атомных состояний.

### § 2.1. Законы излучения абсолютно чёрного тела.

К концу XIX века было завершено построение термодинамики и создана теория электромагнитных явлений. Термодинамика удовлетворительно описывала широкий круг явлений, связанных с веществом, то есть с корпускулярной формой материи. Теория электромагнетизма удовлетворительно описывала явления, связанные с электромагнитным полем и, в частности, с электромагнитными волнами и светом, электромагнитная природа которого была теоретически открыта Максвеллом. В форме электромагнитных волн электромагнитное поле обрело своё самостоятельное существование, независимое от зарядов и токов, которыми оно порождается. В науку вошло представление о полевой форме материи в виде излучения. Возник вопрос о законах взаимопревращения материи в полевой и корпускулярной форме, или, другими словами, вопрос о взаимопревращении излучения и вещества. Представлялось естественным, что этот вопрос можно решить в рамках классической физики, поскольку каждая из форм материи хорошо описывалась соответствующей классической теорией. Первое указание на недостаточность классической физики для понимания взаимоотношения этих форм материи было получено при изучении излучения чёрного тела. Из опыта известно, что раскалённые до высоких температур тела начинают светиться, то есть излучать электромагнитные волны видимого диапазона. При более низких температурах тела самостоятельно не светятся, но излучают преимущественно

электромагнитные волны вне видимого диапазона. Поэтому, прежде всего, возник вопрос о законах этого излучения. Рассмотрим его. Для этого введём несколько вспомогательных понятий и определений.

Полной объёмной плотностью энергии излучения  $w$  называют энергию, приходящуюся на единицу объёма:  $w = \frac{W}{V}$ . В случае электромагнитной волны мы можем записать:  $w = \frac{1}{2} \varepsilon_0 E^2 + \frac{1}{2} \mu_0 B^2$ .

Объёмной спектральной плотностью излучения называют объёмную плотность энергии излучения, приходящейся на единичный интервал частот:  $w_\omega = \frac{dw}{d\omega}$ . Полная объёмная плотность энергии излучения связана с объёмной спектральной плотностью излучения так:  $w = \int_0^\omega w_\omega d\omega$ .

Поглощающей способностью  $A_\omega$  называют отношение энергии  $W$  поглощённой телом за одну секунду в интервале частот  $[\omega, \omega + d\omega]$  ко всей энергии, излучённой за одну секунду в том же интервале

$$\text{частот: } A_\omega = \frac{\frac{dW_{\text{пол}}}{d\omega}}{\frac{dW_{\text{изл}}}{d\omega}}.$$

Энергетической светимостью  $M$  называют энергию, излучённую участком поверхности тела за одну секунду:  $M = \frac{W_{\text{изл}}}{t}$ . Отсюда для спектральной плотности светимости мы можем записать:

$$M_\omega = \frac{dW_{\text{изл}}}{td\omega} \quad (1).$$

Интенсивностью излучения называют энергию, проходящую за единицу времени через поверхность единичной площади  $I = \frac{dW}{dSdt}$ . Соответственно, спектральной интенсивностью излучения называют энергию, проходящую за единицу времени через поверхность единичной площади в единичном интервале частот:  $I_\omega = \frac{dI}{d\omega}$ . Очевидно, что интенсивность и спектральная интенсивность излучения

связаны следующим соотношением:  $I = \int_0^\infty I_\omega d\omega$ .

Поток лучистой энергии, проходящей за время  $dt$  через малую площадку  $ds$  в пределах телесного угла  $d\Omega$ , ось которого перпендикулярна площадке  $ds$ , определяется следующим выражением:  $d\Phi = Ids d\Omega dt$ .

Рассмотрим некоторый объём с телами, ограниченный адиабатической оболочкой. Через некоторое время между телами в полости установится термодинамическое равновесие. В этом состоянии температура всех тел постоянная. Тела излучают энергию. Такое излучение называется равновесным. Говорят, что такое излучение имеет равновесную спектральную плотность. Неравновесное же излучение образуется у живых организмов, атомов и т.д. Для равновесного излучения существует ряд законов.

#### Законы теплового излучения.

1. Закон Кирхгофа. Равновесная спектральная объёмная плотность излучения  $w_\omega$  зависит только от температуры и не зависит от свойств тел в адиабатической оболочке и свойств самой оболочки:  $w_\omega = w_\omega(T)$ .
2. Закон Кирхгофа. В состоянии термодинамического равновесия поглощённая за одну секунду участком поверхности тела энергия излучения, должна быть равна энергии излучённой за одну

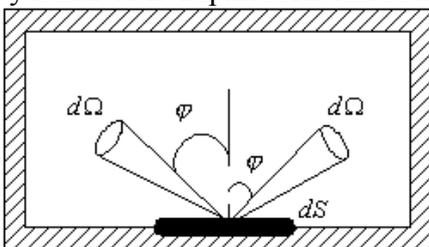


Рис. 21

секунду тем же участком поверхности:  $\frac{W_{\text{изл}}}{t} = \frac{W_{\text{пол}}}{t}$ .

Установим связь между излучательной и поглощающей способностью тела. Так как эти

величины характеризуют только поверхность самого тела и совершенно не зависят от окружающего излучения, то в рассуждениях относительно этого излучения можно вводить любые предположения. Предположим, что излучающее тело со всех сторон окружено равновесным излучением, температура которого равна температуре тела. Это, например, можно осуществить, если в качестве рассматриваемого участка поверхности тела взять часть внутренней поверхности замкнутой полости, температура стенок которой поддерживается постоянной. Выделим из всего излучения часть, составляющую интервал частот  $[\omega, \omega + d\omega]$ , и рассмотрим превращения ей при излучении и отражении от стенок полости. На площадку  $ds$  стенки за время  $dt$  в пределах телесного угла  $d\Omega$  падает поток лучистой энергии  $I_\omega ds \cos \varphi d\omega d\Omega dt$ . Часть его  $(1 - A_\omega) I_\omega ds \cos \varphi d\omega d\Omega dt$  отражается, остальная часть поглощается. Здесь добавляется множитель  $(1 - A_\omega)$ , так как по определению  $A_\omega$  есть поглощающая способность тел, а, соответственно,  $(1 - A_\omega)$  – отражающая. На отражённый поток накладывается поток  $M_\omega ds \cos \varphi d\omega d\Omega dt$  собственного излучения площадки. Таким образом, от площадки  $ds$  внутрь полости исходит лучистый поток  $[(1 - A_\omega) I_\omega + M_\omega] ds \cos \varphi d\omega d\Omega dt$ . Но в состоянии равновесия тот же поток может быть представлен выражением  $I_\omega ds \cos \varphi d\omega d\Omega dt$ . Приравнявая эти выражения, получим  $[(1 - A_\omega) I_\omega + M_\omega] ds \cos \varphi d\omega d\Omega dt = I_\omega ds \cos \varphi d\omega d\Omega dt$   $(1 - A_\omega) I_\omega$  ;  $I_\omega - A_\omega I_\omega + M_\omega = I_\omega$  ;  $M_\omega = A_\omega I_\omega$  ;  $\frac{M_\omega}{A_\omega} = I_\omega$ . Покажем, что  $I_\omega$  зависит только от температуры.

Вернёмся к определению  $I_\omega$ :  $I_\omega = \frac{dW}{dS dt d\omega}$ . Распишем некоторые сомножители

$$I_\omega = \frac{dW}{\frac{dV}{dl} dt d\omega} = \frac{dW}{dV} \frac{dl}{dt} \frac{1}{d\omega} = c \frac{w}{d\omega} = c w_\omega(T). \text{ Таким образом, } \frac{M_\omega}{A_\omega} = c w_\omega(T), \text{ то есть чёрное тело}$$

не поглощает всё падающее на него излучение.

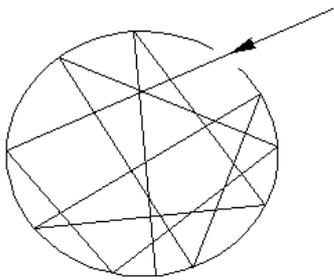


Рис. 22

Вообще говоря, любое тело характеризуется степенью черноты. Так называю отношение поглощающей способности данного тела к поглощающей способности чёрного тела  $\varepsilon = \frac{A_\omega}{A_\omega^{чм}}$ . Тела, которые хорошо поглощают

падающее на них излучение во всём интервале частот, называют серыми телами. Существуют абсолютно чёрные тела – тела, полностью поглощающие всё падающее на них излучение. Очевидно, что для них  $A_\omega = 1$ , а

второй закон Кирхгофа выглядит так:  $M_\omega = c w_\omega(T)$ . Моделью абсолютно чёрного тела является полость с маленьким отверстием с посеребрёнными (зачернёнными) стенками. Классическая физика не смогла объяснить экспериментальную зависимость  $w_\omega = w_\omega(T)$ . Вернее

смогла, но только в рамках каких-то предельных случаев: при  $T \rightarrow \infty$  и  $T \rightarrow 0$  (см. рис. 23). Исходя из соображений классической физики, попробуем получить выражение для объёмной спектральной плотности энергии излучения. Излучение в полости мы можем рассматривать как суперпозицию электромагнитных волн. Каждый тип волны будет характеризоваться своим пространственным распределением полей  $\vec{E}$  и  $\vec{B}$ . Каждый тип электромагнитных волн, обладающий определённым распределением полей  $\vec{E}$  и  $\vec{B}$ , называется модой. Для удобства будем рассматривать в качестве полости куб с ребром  $L$ . При определённых условиях в полости начнут распространяться стоячие волны, то есть волны, которые являются суперпозицией волн одинаковой частоты, распространяющихся в противоположных направлениях. В кубе (рис. 24) будет находиться группа стоячих волн. Условием

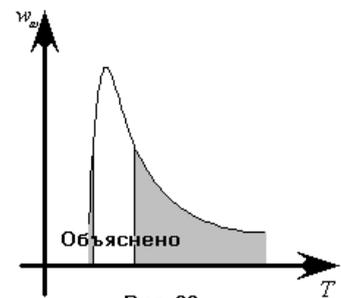


Рис. 23

образования стоячей волны в полости будет следующее: разность фаз волнами должна быть кратна  $2\pi$ :  $\Delta\varphi = 2\pi m$ . Не ограничивая общности, можно принять, что двукратное отражение от граней либо не вносит в фазу волны никаких измерений, либо изменяет фазу на  $2\pi$ . Поэтому условие образования стоячих волн в каждом из измерений куба  $k\Delta = 2\pi m$ , где  $\Delta$  – расстояние пройденное волной. Для нашего случая  $\Delta = 2L$  или  $2Lk = 2\pi m$ . Для трёх групп стоячих волн имеем систему:

$$\left\{ \begin{array}{l} k_x \cdot 2L = 2\pi m_x \\ k_y \cdot 2L = 2\pi m_y \\ k_z \cdot 2L = 2\pi m_z \end{array} \right\}, \text{ где } m_x, m_y, m_z - \text{целые числа. Число волн } dN,$$

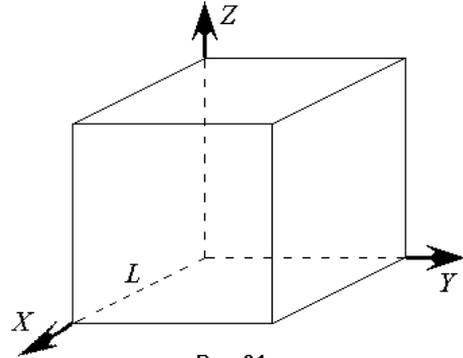


Рис. 24

волновые числа которых заключены между  $(k_x, k_x + dk_x)$ ,  $(k_y, k_y + dk_y)$ ,  $(k_z, k_z + dk_z)$ , равно числу целых чисел, заключённых в интервале  $(m_x, m_x + dm_x)$ ,  $(m_y, m_y + dm_y)$ ,  $(m_z, m_z + dm_z)$ , и поэтому

$$dN = dm_x dm_y dm_z \text{ или } \left\{ \begin{array}{l} dk_x L = dm_x \pi \\ dk_y L = dm_y \pi \\ dk_z L = dm_z \pi \end{array} \right\}. \text{ Тогда число волн, которые}$$

могут распространяться в полости с заданным интервалом частот, будет  $dN = dk_x \frac{L}{\pi} dk_y \frac{L}{\pi} dk_z \frac{L}{\pi}$ ;

$dN = \left(\frac{L}{\pi}\right)^3 dk_x dk_y dk_z$  (2). Пространство  $k$  есть пространство волновых векторов. Пусть у нас

распространяются волны со всеми волновыми векторами. Тогда произведение  $dk_x dk_y dk_z$  даёт объём шарового слоя  $dk_x dk_y dk_z = 4\pi k^2 dk$ . Так происходит потому, что каждая компонента произведения  $dk_x dk_y dk_z$  есть проекция вектора  $k$  на соответствующую ось, а если рассматривать вектор  $k$  в сферической системе координат, то произведению его компонент в декартовой системе координат будет соответствовать элементарный объём шарового слоя толщиной  $dk$ . Тогда мы можем переписать (2) в

виде:  $dN = \left(\frac{L}{\pi}\right)^3 4\pi k^2 dk$ . Учитывая, что независимых волн будет, на самом деле, в два раза меньше для каждой стороны куба, так как отражённую волну мы не учитываем, то тогда последнее выражение необходимо разделить на 8, так как  $\frac{1}{8} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}$ . Тогда получим:  $dN = \frac{1}{8} \left(\frac{L}{\pi}\right)^3 4\pi k^2 dk$ . Перейдём теперь от

$dk$  к  $d\omega$ :  $k = \frac{\omega}{c}$ ;  $dk = \frac{d\omega}{c}$ . Последнее выражение в этом случае запишется в виде:

$dN = \frac{1}{2} \left(\frac{L}{\pi}\right)^3 \pi \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \frac{d\omega}{c} = \frac{1}{2} \left(\frac{L}{c}\right)^3 \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^2 d\omega$ . Тогда концентрация стоячих волн будет

$\frac{dN}{V} = \frac{dN}{L^3} = \frac{1}{2} \frac{1}{c^3} \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^2 d\omega$ . Поскольку электромагнитная волна обладает двумя возможными

поляризациями, полная концентрация стоячих волн в два раза больше:  $\frac{dN_{\text{полн}}}{L^3} = \frac{1}{c^3} \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^2 d\omega$ . Мы

получили формулу, определяющую концентрацию мод в полости. Вообще говоря, каждая из стоячих волн называется модой колебания, а число мод равно числу степеней свободы колебаний, которыми представлено излучение в полости. Теперь, если на каждую степень свободы будет приходиться средняя

энергия  $\langle \varepsilon \rangle$ , то плотность энергии излучения в полости будет равна  $w = \langle \varepsilon \rangle \frac{dW}{L^3} = \langle \varepsilon \rangle \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega$ . Таким

образом, нахождение объёмной спектральной плотности энергии сводится к нахождению средней энергии, приходящейся на каждую стоячую волну в полости.

Рассмотрим теперь предельные случаи зависимости  $w_\omega = w_\omega(T)$ , которые были объяснены теоретически.

1.  $T \rightarrow 0$ . Рэлей и Джинс предположили, что если излучение тепловое, то на каждую степень свободы по классической теореме о равномерном распределении энергии по степеням свободы приходится энергия  $\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2} kT$ . У гармонического осциллятора средняя кинетическая энергия равна средней потенциальной, поэтому его средняя энергия равна  $kT$ . Поскольку в условиях термодинамического равновесия в полную статистическую систему входят излучение в полости и осцилляторы стенок полости, это означает, что средняя энергия, приходящаяся на одну моду колебаний в плоскости,  $\langle \varepsilon \rangle = kT$ . Тогда объёмная спектральная плотность энергии будет равна:

$$w = kT \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega, \text{ или } w_\omega = \frac{w}{d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT. \text{ Данная формула распределения плотности энергии}$$

теплового излучения по спектру даёт достаточно хорошее согласие с экспериментом на малых частотах. Однако простой анализ показывает, что при  $\omega \rightarrow \infty$ ,  $w_\omega \rightarrow \infty$ . Данное явление абсолютно не согласуется с опытом. Причём при больших  $\omega$  рассчитанная частота оказывается значительно больше опытной. Этот факт получил название ультрафиолетовой катастрофы. Основная ошибка здесь заключается в том, что при выводе формулы не учитывались квантовые свойства системы.

2.  $T \rightarrow \infty$ . В. Вин предположил, что каждая мода колебаний является носителем энергии  $E(\omega)$ , но не все моды данной частоты в полости возбуждены. Относительное число возбуждённых мод определяется распределением Больцмана:  $\frac{dN}{N} = e^{-\frac{E}{kT}}$ . Отсюда средняя энергия, приходящаяся на моды с частотой  $\omega$ ,  $\langle \varepsilon \rangle = E(\omega) \frac{dN}{N}$ ,  $\langle \varepsilon \rangle = E(\omega) e^{-\frac{E}{kT}}$ . При этом, энергия любого типа колебаний пропорциональна частоте:  $E \propto \omega$ . С введением постоянной Планка, стало возможным записать:  $E = \hbar \omega$ , а  $\langle \varepsilon \rangle = \hbar \omega e^{-\frac{E}{kT}}$ . Тогда для объёмной спектральной плотности энергии мы можем записать:  $w_\omega(T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \hbar \omega e^{-\frac{E}{kT}}$ . Полученное соотношение называют формулой Вина. Она описывает зависимость  $w_\omega = w_\omega(T)$  лишь при больших частотах.

В 1900 г. Максом Планком была получена формула, описывающая зависимость  $w_\omega = w_\omega(T)$  на всём диапазоне частот. Он исходил из предположения, что осциллятор не может обладать любой энергией, а лишь дискретным набором энергий, пропорциональных некоторой минимальной энергии  $E_1$ . Он поставил в соответствие каждой моде свой гармонический осциллятор:  $E_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$ , где  $n$  – номер энергетического уровня. Слагаемое  $\frac{1}{2}$  получается с учётом энергии вакуума. Число мод в полости

$N = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \propto 10^{12}$ . С другой стороны,  $N \propto n$ . Тогда  $E_n \propto \hbar \omega n$ . Обозначим через  $P_n$  вероятность того, что при температуре  $T$  осциллятор будет находиться на  $n$  – ом энергетическом уровне. Так как мы имеем дело с тепловым излучением, то вероятность  $P_n$  будет описываться распределением Больцмана:

$P_n = c e^{-\frac{E_n}{kT}}$ . Здесь  $E_n$  – энергия на  $n$  – ом энергетическом уровне. Тогда среднее значение на всех

энергетических уровнях будет определяться следующим выражением:  $\langle \varepsilon_\omega \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-\frac{E_n}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{kT}}}$ . Мы получили в

знаменателе сходящуюся геометрическую прогрессию с параметрами  $a=1$  и  $q=e^{-\frac{E_1}{kT}}$ . Как известно, сумма бесконечно убывающей геометрической прогрессии равна:  $S_n = \frac{1}{1-q}$ . Таким образом,

$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{kT}} = \frac{1}{1-e^{-\frac{E_1}{kT}}}$ . Возвращаясь к указанному выше выражению для энергии, можно записать:

$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega n}{kT}} = \frac{1}{1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}$ . Продифференцируем последнее выражение по  $\omega$ :

$\sum_{n=0}^{\infty} -\frac{\hbar n}{kT} e^{-\frac{\hbar\omega n}{kT}} = -\frac{\hbar}{kT} e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \frac{1}{\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right)^2}$ ,  $\sum_{n=0}^{\infty} \hbar\omega n e^{-\frac{\hbar\omega n}{kT}} = \frac{\hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right)^2}$ . Тогда средняя энергия, приходящаяся на

один осциллятор, с учётом последнего уравнения будет равна:  $\langle \varepsilon_{\omega} \rangle = \frac{\hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right)}{\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right)^2}$ . Домножим

полученное соотношение на  $\frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}$ . Получим:  $\langle \varepsilon_{\omega} \rangle = \frac{\hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}} = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$ . И окончательно,  $\langle \varepsilon_{\omega} \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$ .

Найдём теперь объёмную спектральную плотность энергии, с помощью выражения:  $w_{\omega} = \langle \varepsilon \rangle \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$ .

$w_{\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$  (3). Полученная формула называется формулой Планка и описывает излучение

абсолютно чёрного тела во всём диапазоне частот. В пределах при  $T \rightarrow \infty$  и  $T \rightarrow 0$ , данная формула сводится к формулам Вина и Рэлея – Джинса. Найдём полную объёмную плотность излучения. Для этого необходимо взять интеграл от (3) по всем частотам:  $w = \int_0^{\infty} w_{\omega}(\omega) d\omega$ . Подставляя в данный интеграл

полученное выше значение для объёмной спектральной плотности энергии, получим:

$$w = \int_0^{\infty} \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{kT}{\hbar} \int_0^{\infty} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) = \left[ \begin{array}{l} \frac{\hbar\omega}{kT} = \xi \\ \omega = \frac{kT\xi}{\hbar} \end{array} \right] =$$

$$= \frac{kT}{\pi^2 c^3} \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^3 \int_0^{\infty} \frac{\xi^3}{e^{\xi} - 1} d\xi = \frac{k^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{\xi^3}{e^{\xi} - 1} d\xi. \text{ Полученный интеграл затабулирован и имеет значение:}$$

$$\int_0^{\infty} \frac{\xi^3}{e^{\xi} - 1} d\xi = \frac{\pi^4}{15}. \text{ Таким образом, } w = \frac{k^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \frac{\pi^4}{15}. \text{ Введём обозначение } \alpha \equiv \frac{k^4}{c^3 \hbar^3} \frac{\pi^4}{15}. \text{ Данная величина}$$

является

константой, так как из констант составлена. Итак, для объёмной плотности излучения можно записать:  $w = \alpha T^4$ . Вспоминая второй закон Кирхгофа  $M = cw$ , получим:  $M = c\alpha T^4$ , где  $M$  – энергетическая светимость или  $M = \sigma T^4$ . Полученное уравнение определяет энергетическую светимость абсолютно чёрного тела: энергетическая светимость абсолютно чёрного тела пропорциональна четвёртой степени его температуры. Данный закон называется законом Стефана – Больцмана. Константа  $\sigma$  в этом

уравнении равна:  $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}^4}$ . Найдём теперь максимальную спектральную плотность энергии излучения в единицу длин волн. Для этого в выражении (3) перейдём от частоты  $\omega$  к длине волны  $\lambda$ :  $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$ ,  $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$  (4). По определению  $w_\lambda = \frac{dw}{d\lambda}$ , а  $w_\omega = \frac{dw}{d\omega}$  то есть  $dw = w_\lambda d\lambda = w_\omega d\omega$ ;

$w_\lambda d\lambda = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} d\omega$ . Подставляя в последнее соотношение (4), получим:

$$w_\lambda d\lambda = \frac{1}{\pi^2 c^3} \left( \frac{2\pi c}{\lambda} \right)^3 \frac{\hbar}{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}} - 1} d \left( \frac{2\pi c}{\lambda} \right) = - \frac{1}{\cancel{\pi^2} \cancel{c^3}} \frac{8\pi^{\cancel{3}} \cancel{c}^{\cancel{3}}}{\lambda^3} \frac{\hbar}{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}} - 1} \frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda = - \frac{16\pi^2 \hbar c}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}} - 1} d\lambda.$$

Сравнивая начало и конец данного выражения, получим:  $w_\lambda d\lambda = - \frac{16\pi^2 \hbar c}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}} - 1} d\lambda$ ,

$$w_\lambda = - \frac{16\pi^2 \hbar c}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}} - 1}. \text{ Так как энергия излучения не может быть отрицательной, мы должны взять}$$

модуль этого выражения. В итоге получим:  $w_\lambda = \frac{16\pi^2 \hbar c}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}} - 1}$ . Исследуем его на экстремум.

$$\frac{dw_\lambda}{d\lambda} = - \frac{5 \cdot 16\pi^2 \hbar c}{\lambda^6} \frac{1}{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}} - 1} + \frac{16\pi^2 \hbar c}{\lambda^5} \frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda^2} \frac{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}}}{\left( e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}} - 1 \right)^2} = 0. \quad \text{Сократим константы}$$

$$- \frac{5 \cdot 16\pi^2 \hbar c}{\lambda^6} \frac{1}{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}} - 1} + \frac{16\pi^2 \hbar c}{\lambda^5} \frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda^2} \frac{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}}}{\left( e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}} - 1 \right)^2} = 0, \quad \frac{2\pi \hbar c}{kT \lambda} \frac{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}}}{e^{\frac{\hbar 2\pi c}{kT \lambda}} - 1} = 5. \quad \text{Введём для удобства}$$

обозначение:  $\xi \equiv \frac{2\pi \hbar c}{kT \lambda}$ , тогда последнее выражение переписется в виде:  $\xi \frac{e^\xi}{e^\xi - 1} = 5$ ,  $\frac{e^\xi - 1}{e^\xi} = \frac{\xi}{5}$ ,

$1 - e^{-\xi} = \frac{\xi}{5}$ ,  $e^{-\xi} + \frac{\xi}{5} - 1 = 0$ . Мы получили итерационное уравнение относительно переменной  $\xi$ . Решая

его, найдём эту переменную, а потом из неё выразим и  $\lambda$ .  $\xi = 4,965$ . Тогда рассматривая выражение

для  $\xi$ :  $\xi \equiv \frac{2\pi \hbar c}{kT \lambda}$ , нетрудно заметить, что часть его есть некоторая константа:  $\frac{2\pi \hbar c}{k} = \text{const}$ . Поэтому мы

можем получить уравнение, связывающее  $\lambda$  и  $T$ :  $\frac{4,965k}{2\pi \hbar c} = \frac{1}{T \lambda}$  или, записывая это выражение в

общепринятой форме, имеем:  $T \lambda_{\max} = \frac{2\pi \hbar c}{4,965k}$ . Константа, стоящая в этом выражении справа равна:

$b \equiv \frac{2\pi \hbar c}{4,965k} = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$ . Итак, мы получили закон смещения Вина: произведение длины волны,

соответствующей максимуму спектральной плотности энергии излучения абсолютно чёрного тела на температуру излучения есть величина постоянная и независящая от рода излучающего тела:  $T \lambda_{\max} = b$ .

Данная формула имеет большое значение в астрофизике при определении температуры звёзд. Можно, например, посчитать, чему равна длина волны, соответствующая максимуму спектральной плотности энергии излучения для нашего Солнца. Известно, что температура его поверхности в среднем равна примерно 6000 К. Тогда по формуле смещения Вина получим, что  $\lambda_{\max} \approx 0,55 \mu\text{м}$ .

## § 2.2. Экспериментальное подтверждение дискретной природы энергетических уровней атомов и молекул.

Любое излучение электромагнитных волн осуществляется телами. Если излучение дискретно, то тело должно переходить с одного дискретного уровня на другой. Опыты Франка и Герца дали прямое доказательство дискретности атомных состояний. Если состояние атомных систем дискретно, а кинетическую энергию свободных электронов мы можем менять непрерывно, то при взаимодействии электронов с атомами, атомы могут поглощать энергию лишь строго определёнными порциями. В ходе опыта использовалась вакуумная лампа (см. рис. 29). В ней находились накаливающийся катод, анод и две сетки, которые соединялись между собой. На сетку подавался ускоряющий потенциал  $U_c$ . Изменением его можно было плавно изменять кинетическую энергию электронов. На другую сетку подавался задерживающий потенциал  $U_3 \approx 0,2 \div 0,5B$ . Электроны, ускоренные между сеткой и катодом, попадали в свободное от полей пространство. Наблюдалась ВАХ, представленная на рисунке 30. Если теперь наполнить трубку парами (например, ртути) при пониженном давлении, в пространстве между сетками будут происходить столкновения электронов с атомами ртути. Те, что не потеряли энергию в результате подобных столкновений, достигнут анода. Те же, что энергию потеряли, анода не достигают. Анодный ток убывает. ВАХ лампы в этом случае представлена на рисунке 31. Качественно её можно объяснить следующим образом. Когда энергия электрона меньше разности энергий между энергетическими уровнями ртути, то оно не отдаёт энергию атому при столкновении. С увеличением ускоряющей разности потенциалов энергия электронов также возрастает. Когда разность потенциалов достигает 4,9 эВ., электроны при неупругом столкновении с атомами ртути вблизи сетки отдадут им всю свою энергию и уже не смогут преодолеть запирающей разности потенциалов. Следовательно, на анод могут попасть лишь

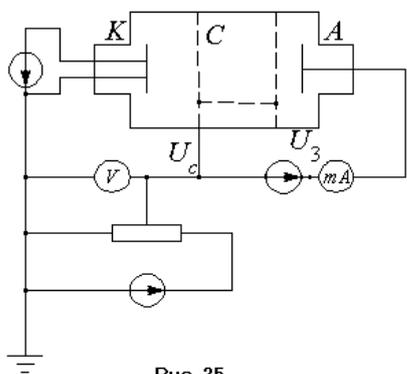


Рис. 25

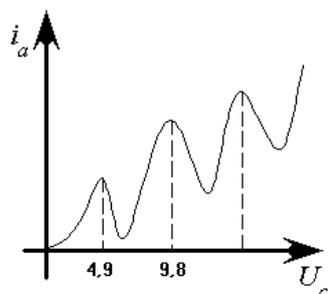


Рис. 27

электроны не испытавшие неупругого столкновения, и поэтому при разности потенциалов 4,9В. сила тока начинает уменьшаться. Когда разность потенциалов достигает такого значения, что достаточное число электронов после неупругого столкновения смогут приобрести энергию, необходимую для преодоления задерживающего потенциала, начинается новый рост силы тока. При достижении разности потенциалов 9,8 В., электрон после одного неупругого столкновения приходит к сетке с энергией  $\approx 4,9$  эВ., достаточной для второго неупругого столкновения. При втором неупругом столкновении электрон теряет всю свою энергию и не достигает анода. Поэтому сила тока начинает уменьшаться (второй максимум на ВАХ). Последующие максимумы объясняются аналогично. Из опыта следует, что разница в энергии основного состояния атома ртути и ближайшего возбуждённого состояния равна 4,9 эВ., что и доказывает дискретность состояний атомных систем.

Отношение энергии возбуждения атома к заряду электрона называется потенциалом ионизации:  $U_{\text{возб}} = \frac{E_{\text{возб}}}{e}$ . Первый потенциал возбуждения соответствует переходу атома с уровня с наименьшей энергией на последующий уровень.

Ионизацией называется процесс отрыва электрона от атома. Для определения потенциала ионизации также используют установку, изображённую на рисунке 29. Потенциал ионизации определяется по формуле  $U_i = \frac{E_i}{e}$ , где  $E_i$  – работа выхода электрона из атома. Для атома водорода ВАХ

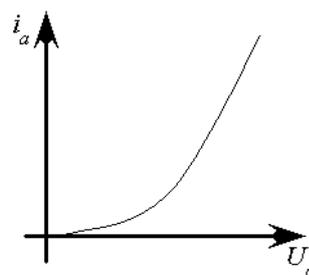


Рис. 26

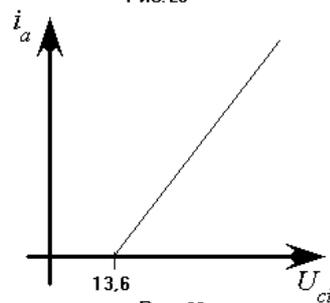


Рис. 28

этого процесса имеет вид, представленный на рисунке 32. Здесь измеряется ток, создаваемый положительными ионами. Величина 13,6 В. называется потенциалом насыщения.

### § 2.3. Спектры испускания и поглощения атомов.

Все спектры (испускания, поглощения) делятся на линейчатые, полосатые и сплошные. Чем проще структура вещества, тем разреженнее его спектр. С другой стороны, чем меньше электронов содержит вещество, тем проще его спектр. Линейчатые спектры характерны для атомов определённых веществ. Полосатые спектры дают молекулы газа в разряженном состоянии. Сплошным спектром обладает газ при высокой температуре или жидкость, а также твёрдые тела.

Во второй половине 19 века были проведены многочисленные и тщательные исследования спектров излучения. Исследователи обнаружили, что спектральные линии объединяются в серии. Серией называется группа спектральных линий, соответствующая переходу атома с одного и того же энергетического уровня на какой-либо другой (для спектра испускания) либо в одно и то же энергетическое состояние (для спектра поглощения). Первая спектральная серия для атома водорода была обнаружена Бальмером в 1885 г. и получила его имя. Изучая спектр атома водорода в видимой области, Бальмер получил формулу:  $\omega = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ , где  $m = 1, 2, 3, \dots$ . Впоследствии были открыты и остальные серии для атома водорода:

1. Серия Лаймана.  $\omega = R \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ . Ультрафиолетовая область.
2. Серия Пашена.  $\omega = R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ . Инфракрасная область.
3. Серия Брэкета.  $\omega = R \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ . Инфракрасная область.
4. Серия Пфунда.  $\omega = R \left( \frac{1}{5^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ . Инфракрасная область.

Расстояния между спектральными линиями с увеличением числа  $m$  становятся всё меньше и меньше. Это утверждение очевидно следует из приведённых выше формул. Обобщая, можно записать закон построения спектральных линий для атома водорода для всех серий:  $\omega = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ , где  $n, m = 1, 2, 3, \dots$ . Причём  $n$  определяет номер спектральной серии.  $m = n + 1$  для спектра испускания;  $m = n - 1$  для спектра поглощения.

Введём понятие спектрального термина:  $T = \frac{R}{n^2}$ . Таким образом, частота любой спектральной линии определяется линейной комбинацией термов  $\omega = \frac{R}{n^2} - \frac{R}{m^2}$  (1). Этот принцип называют комбинационным принципом Ритца: всё многообразие спектральных линий одноэлектронного атома является комбинацией спектральных термов. Как будет постулировано в дальнейшем, частота излучённой электромагнитной волны при переходе атома с одного энергетического уровня на другой определяется формулой:  $\omega = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{E_n}{\hbar} - \frac{E_m}{\hbar}$  (2), где  $E_n, E_m$  – энергии соответствующих энергетических уровней. Таким образом, сравнение формул (1) и (2) даёт, что физический смысл термина есть отношение энергии уровня к постоянной Планка. Следует отметить, что принцип Ритца справедлив только для определённого ряда атомов, у которых на внешней оболочке либо один электрон, либо одного нет. Это – так называемые водородоподобные атомы. К их числу принадлежат ионы, щелочные металлы и т. д. В данном случае справедлива формула:  $T = \frac{R}{(n + \sigma)^2}$ , где  $\sigma$  – некоторая константа, в каждом случае своя.

В спектре атома других линий быть не может, тем не менее, не все линии, определяемые комбинационным принципом Ритца, обязательно присутствуют в спектре, так как не нулевой вероятностью обладают лишь переходы, удовлетворяющие правилам отбора.

#### § 2.4. Ядерная модель атома.

Исторически существовало две признанных модели атома: модель Томпсона и модель Резерфорда.

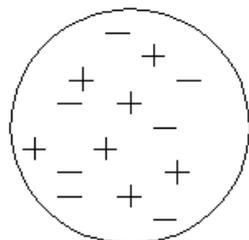


Рис. 29

По модели Томпсона (рис. 35) атом представлял собой непрерывно распределённый в пространстве положительный заряд, в который были вкраплены отдельные отрицательные заряды. Электроны взаимодействуют с элементами положительно заряженной среды атома по закону Кулона. При отклонении электрона от положения равновесия, возникают силы, которые стремятся вернуть его в положение равновесия.

Благодаря этому возникают колебания электрона. Колебания электронов обуславливают излучение атомов.

Вторая модель, модель Резерфорда (рис.36), приписывала атому строение, аналогичное строению Солнечной системы: в центре находится положительно заряженное ядро, вокруг которого, подобно планетам,

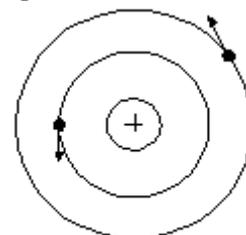


Рис. 30

двигаются электроны, удерживаемые у ядра силами кулоновского притяжения. Спор между двумя этими теориями разрешил эксперимент, поставленный Резерфордом.

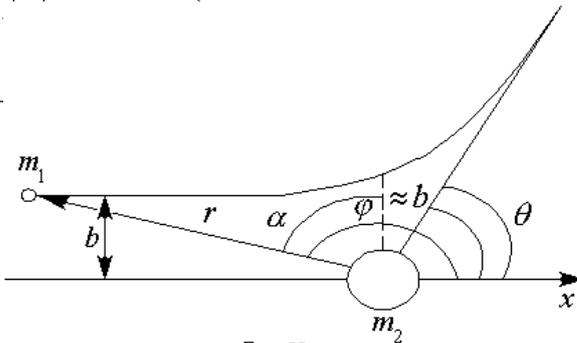


Рис. 32

Резерфорд изучал движение тяжёлых положительно заряженных частиц в поле, создаваемом атомом. Схема использовавшейся установки приведена на рисунке 31. Узкий пучок  $\alpha$  – частиц из источника излучения падала на тонкую золотую фольгу. За фольгой находилась поверхность, покрытая веществом, способным сцинтиллировать, например,  $NaI$ .  $\alpha$  – частицы пролетали сквозь фольгу и падали на сцинтиллятор. Сцинтиллятор на короткое время начинал светиться в точке падения  $\alpha$  – частиц. За этими вспышками как раз и наблюдали. Если бы

взаимодействия частиц с веществом не было, то вспышки наблюдались бы все в одном и том же месте. Тем не менее, большинство частиц отклонялись от направления своего первоначального движения на  $3^\circ - 5^\circ$ , и что ещё более интересно, приблизительно одна из 6000 – 8000 частиц отклонялась от первоначального направления движения на угол более  $90^\circ$ . В то же время не было частиц, которые притягивались бы. Это навело Резерфорда на мысль, что в атоме должен находиться мощный силовой центр, который заставляет отклоняться частицы на большие углы, причём, так как заряд  $\alpha$  – частицы считался положительным, этот силовой центр также должен быть положительным. Редкость отскакивания частицы на угол более  $90^\circ$  говорила о том, что центр должен быть точечным. Итак, по Резерфорду получалось, что в центре атома существует нечто, обладающее большой массой и имеющее малые размеры и положительный заряд. Изучая движение частиц сквозь фольгу, Резерфорд получил соотношение, связывающее угол рассеяния частицы с прицельным параметром  $b$ . Прицельным параметром  $b$  называется расстояние наименьшего сближения частиц, при отсутствии взаимодействия между ними (см. рис. 32). Получим это соотношение. Пусть на положительно заряженную частицу массой  $m_2$  и зарядом  $ez_2$  налетает положительно же заряженная частица массой  $m_1$ , движущаяся со скоростью  $v_1$  и имеющая заряд  $ez_1$ , причём  $m_2 \ll m_1$ . Тогда при движении частицы в поле центральных сил, должна сохраняться энергия системы и момент импульса частиц. Запишем эти законы:

$$\frac{m_1(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2)}{2} + \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = E = const \quad (1) \text{ – закон сохранения энергии}^1. \quad m_1 r^2 \dot{\varphi} = L = const = m_1 v_1 b \text{ – момент}$$

<sup>1</sup> См. Курс теоретической механики под редакцией Ерыкалина А. В.

импульса для первой частицы. Из последнего выражения можно записать:  $\dot{\varphi} = \frac{m_1 v_1 b}{m_1 r^2} = \frac{L}{m_1 r^2}$  (2);

$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \left| \begin{array}{l} \text{Домножим} \\ \text{и разделим на } d\varphi \end{array} \right| = \frac{dr}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dt}$ . Осуществим замену переменных:  $\frac{1}{r} = \rho$ . Тогда

$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{d\varphi} \left( \frac{1}{\rho} \right) \frac{L\rho^2}{m_1} = -\frac{1}{\rho^2} \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{L}{m_1} = -\frac{d\rho}{d\varphi} \frac{L}{m_1}$ . Подставляя полученное выражение в (1), переходя

к переменной  $\rho$ , получим:  $\frac{m_1}{2} \left[ \left( -\frac{d\rho}{d\varphi} \frac{L}{m_1} \right)^2 + \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right] + \frac{z_1 z_2 e^2 \rho}{4\pi\epsilon_0} = E$ . Раскроем скобки. Тогда

$\frac{m_1}{2} \frac{L^2}{m_1^2} \left( \frac{d\rho}{d\varphi} \right)^2 + \frac{m_1}{2\rho^2} \left( \frac{d\varphi}{dt} \right)^2 + \frac{z_1 z_2 e^2 \rho}{4\pi\epsilon_0} = E$ . Умножим слева и справа это выражение на 2 и перенесём

вправо слагаемое, характеризующее потенциальную энергию взаимодействия:

$\frac{L^2}{m_1} \left( -\frac{d\rho}{d\varphi} \right)^2 + \frac{m_1}{\rho^2} \left( \frac{d\varphi}{dt} \right)^2 = 2E - \frac{2z_1 z_2 e^2 r}{4\pi\epsilon_0}$ . Совершим некоторые очевидные преобразования:

$\left( \frac{d\rho}{d\varphi} \right)^2 = \frac{2Em_1}{L^2} - \frac{2z_1 z_2 e^2 \rho m_1}{4\pi\epsilon_0 L^2} - \frac{m_1^2}{L^2 \rho^2} \left( \frac{d\varphi}{dt} \right)^2$ . Возвращаясь к формуле (2), и подставляя ей в данное

выражение, получим:  $\left( \frac{d\rho}{d\varphi} \right)^2 = \frac{2Em_1}{L^2} - \frac{2z_1 z_2 e^2 \rho m_1}{4\pi\epsilon_0 L^2} - \frac{m_1^2}{L^2 \rho^2} \left( \frac{L\rho^2}{m_1} \right)^2$ , или  $\left( \frac{d\rho}{d\varphi} \right)^2 = \frac{2Em_1}{L^2} - \frac{2z_1 z_2 e^2 \rho m_1}{4\pi\epsilon_0 L^2} - \rho^2$ .

Продифференцируем теперь по  $\varphi$ :  $\frac{d}{d\varphi} \left( \frac{d\rho}{d\varphi} \right)^2 = 0 - \frac{2z_1 z_2 e^2 m_1}{4\pi\epsilon_0 L^2} \frac{d\rho}{d\varphi} - \frac{d}{d\varphi} (\rho^2)$ ;

$\cancel{2} \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{d^2\rho}{d\varphi^2} = -\frac{\cancel{2} z_1 z_2 e^2 m_1}{4\pi\epsilon_0 L^2} \frac{d\rho}{d\varphi} - \cancel{2} \rho \frac{d\rho}{d\varphi}$ ,  $\frac{d^2\rho}{d\varphi^2} + \frac{z_1 z_2 e^2 m_1}{4\pi\epsilon_0 L^2} + \rho = 0$ . Введём следующее обозначение:

$\frac{z_1 z_2 e^2 m_1}{4\pi\epsilon_0 L^2} \equiv -c$ . Тогда рабочее соотношение примет вид:  $\frac{d^2\rho}{d\varphi^2} + \rho = c$ . Решением данного уравнения, как

нетрудно убедиться, будет  $\rho = c + A \cos \varphi + B \sin \varphi$  (3). чтобы найти неизвестную константу  $c$ , прибегнем к следующему приёму. Рассмотрим случай, когда частицы находятся друг от друга бесконечно далеко. Тогда можно записать следующее соотношение: при  $r \rightarrow -\infty$ ,  $\varphi \rightarrow \pi$ . Тогда,

подставляя данное допущение в уравнение (3), получим:  $\lim_{r \rightarrow -\infty} \left( \frac{1}{r} = c + A \cos \varphi + B \sin \varphi \right) \Rightarrow 0 = c - A$ ;  $c = A$ .

Таким образом, мы получили всего две неизвестных константы и два граничных условия. Из рисунка 32 следует очевидное равенство:  $\varphi = \frac{\pi}{2} + \alpha$ ,  $\alpha = \varphi - \frac{\pi}{2}$ . Из рисунка 32 также следует, что  $b = r \cos \alpha$ , а с

учётом последнего выражения  $b = r \sin \varphi$ . Отсюда  $r = \frac{b}{\sin \varphi}$ . Тогда, с помощью этого выражения, а также

уравнения (3) мы получим при  $\varphi \rightarrow -\infty$ :  $\frac{\sin \varphi}{b} = A + A \cos(\varphi \rightarrow \pi) + B \sin \varphi$ . Так как  $\cos \pi = -1$ , то

$\frac{\sin \varphi}{b} \approx A - A + B \sin \varphi$  или  $\frac{\sin \varphi}{b} \approx B \sin \varphi$ ,  $\frac{1}{b} \approx B$ . Таким образом, возвращаясь к уравнению (3), получим:

$\frac{1}{r} = c + c \cos \varphi + \frac{1}{b} \sin \varphi$  Разделим полученное выражение на  $\sin \varphi$ :  $\frac{1}{r \sin \varphi} = c \frac{1 + \cos \varphi}{\sin \varphi} + \frac{1}{b}$ . Разложим

синусы и косинусы по формулам половинного аргумента и сократим подобные множители:

$$\frac{1}{r \sin \varphi} = \cancel{2}c \frac{\cos \frac{\varphi}{2}}{\cancel{2} \sin \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\varphi}{2}} + \frac{1}{b}; \quad \frac{1}{r \sin \varphi} = c \operatorname{ctg} \frac{\varphi}{2} + \frac{1}{b}. \quad \text{Рассмотрим}$$

теперь другое предельное значение угла  $\varphi$ :  $\begin{matrix} r \rightarrow \infty \\ \varphi \rightarrow \theta \end{matrix}$ . Тогда

$$-\frac{1}{b} = c \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \quad \text{и} \quad \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} = -\frac{1}{bc}. \quad \text{Подставляя сюда значение}$$

постоянной  $c$ , получим:  $\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} = -\frac{4\pi\varepsilon_0 L^2}{bz_1 z_2 e^2 m_1}$ . Возведём в квадрат

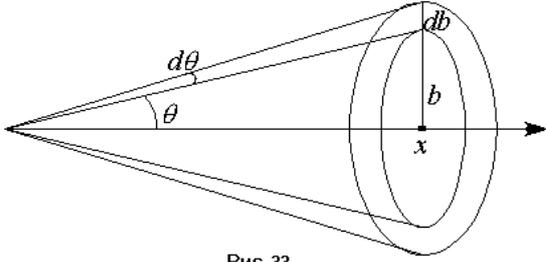


Рис. 33

закон сохранения импульса; полученный результат подставим в рабочую формулу:  $L^2 = m_1^2 v_1^2 b^2$ ,

$$\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} = -\frac{4\pi\varepsilon_0 m_1^2 v_1^2 b^2}{z_1 z_2 e^2 m_1}; \quad \boxed{\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} = -\frac{4\pi\varepsilon_0 m_1 v_1^2 b}{z_1 z_2 e^2}} \quad (4). \quad \text{Последняя формула была получена Резерфордом и}$$

связывает угол рассеяния частицы с прицельным параметром  $b$ . Оставалось только проверить эту формулу. В опыте Резерфорд имел дело не с одной частицей, а с большим их числом. Частицы двигались под некоторыми углами, то есть имел место некоторый разброс углов. Частицы рассеивались на различных атомах и после рассеяния приобретали некоторые импульсы, значения которых также претерпевали некоторый разброс. Для того чтобы описать данный процесс, немислимо пытаться рассчитывать траекторию движения каждой частицы. Полученная система уравнений будет слишком громоздка и практически неразрешима. В данном случае уместно прибегнуть к теории вероятностей. Введём понятие дифференциального поперечного сечения рассеяния  $d\sigma$  в угол между  $\theta$  и  $d\theta$ . Так будем называть отношение числа частиц  $dN_\theta$ , рассеянных в единицу времени в угол  $d\theta$  к полному

поток частиц  $N$ :  $d\sigma = \frac{dN_\theta}{N}$ . Здесь  $N = \frac{\tilde{N}}{dt dS}$ , где  $\tilde{N}$  – полное число частиц. Все частицы, для которых

$b \in [b, b + db]$ , будут рассеиваться в угол  $\theta \in [\theta, \theta + d\theta]$ . Число частиц, прицельный параметр которых

заключён в этом интервале, будет равно числу частиц, падающих на кольцо шириной  $db$  и радиусом внутренней окружности  $b$ :  $dN_\theta = N 2\pi b db$ . Тогда  $d\sigma = \frac{N 2\pi b db}{N}$ ,  $d\sigma = 2\pi b db$ . Нам не важен здесь знак

$db$ , поэтому в дальнейшем будем рассматривать лишь его модуль. Воспользуемся теперь полученной

нами формулой (4) для нахождения  $|db|$ :  $|db| = \left| d \left( \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_1 v_1^2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \right) \right| = \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_1 v_1^2} \frac{1}{2} \frac{d\theta}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}$ . Подставляя

полученное выражение в уравнение для  $d\sigma$ , получим  $d\sigma = 2\pi \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_1 v_1^2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_1 v_1^2} \frac{1}{2} \frac{d\theta}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}$ ,

$d\sigma = \pi \left( \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_1 v_1^2} \right)^2 \frac{\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} d\theta$ . Последняя формула называется формулой Резерфорда. Перейдём теперь

от плоского угла  $\theta$  к телесному  $\Omega$ . Известно, что они связаны соотношением  $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$  в сферической системе координат. Тогда если угол  $\varphi \in [0, 2\pi]$ ,  $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ . Из последней формулы

выразим  $d\theta$  и подставим его в формулу Резерфорда для плоского угла:  $d\theta = \frac{d\Omega}{2\pi \sin \theta}$ ,

$$d\sigma = \chi \left( \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 m_1 v_1^2} \right)^2 \frac{\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} \frac{d\Omega}{2\chi \sin \theta};$$

$$d\sigma = \chi \frac{\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}}{2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \frac{d\Omega}{2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}} = \chi \frac{\cos \frac{\theta}{2}}{2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}} \frac{d\Omega}{2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}} = \frac{\chi}{4} \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad \text{или} \quad d\sigma = \frac{\chi}{4} \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (5). \quad \text{Мы}$$

получили формулу Резерфорда для телесного угла. Данная формула подтверждается с хорошей точностью и при современных исследованиях. Использовались разные частицы, двигавшиеся с различными скоростями, и формула была в согласии с полученными результатами. Таким образом, косвенно подтвердилось уравнение (4), которое было выведено исходя из соображений планетарного строения атома, что и утвердило главенствующее положение этой теории. Если известно сечение рассеяния  $\sigma$ , то с помощью формул (4) и (5) можно вычислить зарядовое число  $z$ . Эксперименты Резерфорда показали, в частности, что элементы в таблице Менделеева изменяются по порядку зарядового числа.

При всём удобстве планетарной модели атом по Резерфорду, очевидна её неустойчивость. Действительно, электроны движутся по орбитам с центростремительным ускорением. Тогда в соответствии с электродинамикой Максвелла, они должны непрерывно излучать. Но тогда они теряли бы энергию и, в конце концов, упали бы на ядро. Расчёты показали, что такой процесс «схлопывания» атома произошёл бы очень быстро. Чтобы разрешить возникшее противоречие, Нильс Бор выдвинул следующие требования к атомной излучающей системе, которые впоследствии назвали постулатами Бора.

1. Атомы могут определённое время, в зависимости от их структурных особенностей, находиться в определённых, так называемых стационарных состояниях. Энергии этих состояний  $E_1, \dots, E_n$  образуют дискретный ряд. В стационарных состояниях атомы не излучают.

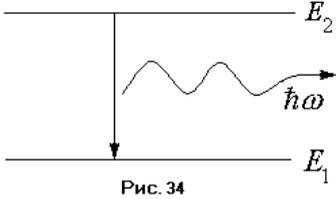


Рис. 34

2. При переходе атома из одного состояния с энергией  $E_2$  в другое с энергией  $E_1$ , происходит излучение, если  $E_2 > E_1$ , или поглощение, если  $E_2 < E_1$  кванта света с частотой пропорциональной разности энергий состояний:  $\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ .

Бор ввёл также правила, в соответствии с которыми определяются стационарные состояния атомных систем. Данные правила получили название правил квантования. Бор предположил, что стационарными являются лишь те состояния, в которых момент импульса электрона равен целому числу постоянных Планка:  $L = n\hbar$ . Коэффициент пропорциональности между моментом импульса электрона и постоянной Планка называют главным квантовым числом (так как оно определяет электронов, атома и его энергию). Рассмотрим правила квантования на примере атома водорода.

Электрон движется по круговой орбите с центростремительным ускорением, которое определяется силой кулоновского взаимодействия. Будем рассматривать уединённый атом. Тогда на электрон не будут действовать никакие другие силы, за исключением силы Кулона. По второму закону Ньютона мы можем записать:  $ma_y = F_k$ . Подставляя в это уравнение выражения для силы Кулона и центростремительного ускорения, получим  $\frac{mv_n^2}{r_n} = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2}$ , где  $n$  – главное квантовое число.

Запишем правило квантования:  $mv_n r_n = n\hbar$ . Выразим из него скорость и

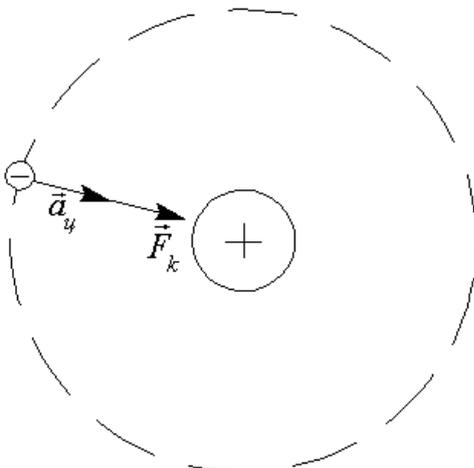


Рис. 35

подставим во второй закон Ньютона:  $v_n = \frac{n\hbar}{mr_n}$ ;  $\frac{m \frac{(n\hbar)^2}{(mr_n)^2}}{r_n} = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2}$ ;  $r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 (n\hbar)^2}{ze^2 m}$ . Мы нашли

радиусы орбит основных состояний атома. В частности, радиус первой боровской орбиты составляет  $r_1 \approx 5 \cdot 10^{-11} \text{ м}$ . Мы можем найти также энергию связи электрона в атоме – энергию, которую необходимо затратить, чтобы оторвать электрон от ядра. Полная энергия электрона в атоме равна сумме кинетической энергии его движения и потенциальной энергии его взаимодействия с ядром:

$E_{\text{пол}} = E_{\text{кин}} + E_{\text{пот}}$ . Подставляя значения этих энергий, получим:  $E_{\text{пол}} = \frac{mv_n^2}{2} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}$ . Подставим в эту

формулу значение квадрата скорости, выраженное из второго закона Ньютона:

$E_{\text{пол}} = \frac{m \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}}{2} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = \frac{ze^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{ze^2}{8\pi\epsilon_0 r_n}$ . Подставим сюда значение боровского радиуса:

$E_{\text{пол}} = -\frac{ze^2}{8\pi\epsilon_0 \frac{4\pi\epsilon_0 (n\hbar)^2}{ze^2 m}}$ , или  $E_{\text{пол}} = -\frac{m(ze^2)^2}{32(\pi\epsilon_0 n\hbar)^2}$ . Таким образом, энергия связи определяется однозначно

главным квантовым числом. Состояние атома с наименьшей энергией называется основным состоянием. Если атому каким-либо способом сообщается энергия, то атом переходит в другое энергетическое состояние. Состояние атома с энергией больше, чем энергия основного состояния называется возбуждённым. Так как основному состоянию атома соответствует главное квантовое число  $n=1$ , то первому возбуждённому состоянию –  $n=2$ .

#### Структура энергетических уровней атома водорода.

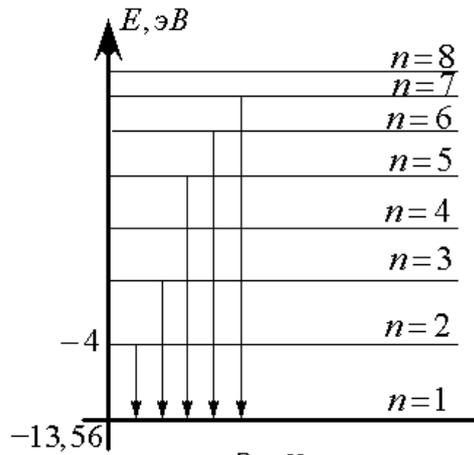


Рис. 36

Из предыдущего следует, что атом обладает дискретным набором значений энергий, соответствующих различным энергетическим уровням. Вычисляя эти энергии, можно заметить, что с ростом главного квантового числа разность энергий между двумя соседними энергетическими состояниями всё время уменьшается. В конце концов, она будет стремиться к нулю.

Энергия, которую необходимо затратить, чтобы перевести атом из основного состояния в состояние с  $n = \infty$ , называется энергией ионизации атома. Водорода потенциал ионизации составляет  $E = 13,56 \text{ эВ}$ . В опытах Франка – Герца, как мы помним, фигурировало именно это число. Основываясь на представлении Бора о процессе излучения атома, можно сделать вывод, что спектральные серии соответствуют переходу атома с одних энергетических уровней на какой-то другой. Так, например, серии Лаймана соответствует переход атома водорода на первый энергетический уровень, серии Бальмера – на второй; серии Пашена – на третий. Этот факт позволяет найти длины волн в каждой серии. В соответствии со вторым постулатом Бора, мы можем записать, что при переходе с  $l$  – го энергетического уровня на  $n$  – й, излучается волна частоты

$\omega_{l \rightarrow n} = \frac{E_l - E_n}{\hbar} = \frac{-\frac{m(ze^2)^2}{32(\pi\epsilon_0 l\hbar)^2} + \frac{m(ze^2)^2}{32(\pi\epsilon_0 n\hbar)^2}}{\hbar} = \frac{m(ze^2)^2}{32(\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{l^2} \right)$ . Как было сказано выше, Бальмер

получил формулу для частоты излучённой волны:  $\omega_{l \rightarrow n} = \tilde{R} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{l^2} \right)$ . Сравнивая её с предыдущей,

получим:  $\tilde{R} = \frac{z^2 e^4 m}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3}$ . Мы получили формулу для определения постоянной Ридберга. Так как для

атома водорода  $z = 1$ , то постоянная Ридберга для атома водорода будет иметь вид:  $R = \frac{e^4 m}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3}$ . Так

как  $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$ , то  $\frac{1}{\lambda} = \frac{\omega}{2\pi c} = \frac{R'}{2\pi c} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{l^2} \right)$ . Отсюда постоянная Ридберга для длины волны будет:

$$R' = 1,09 \cdot 10^{-5} \frac{1}{\text{см}}.$$

Различие между частотами, полученными по этой формуле, и при опыте всё равно присутствовало. Его объясняли так. При выводе формулы для радиусов боровских орбит, мы не учитывали тот факт, что электрон с ядром образуют систему двух тел, которая вращается вокруг общего центра масс. Данный факт можно учесть, если заменить в формуле для постоянной Ридберга массу электрона приведённой

массой системы электрон – ядро:  $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_{\text{яд}}}$ ,  $\mu = \frac{m_e m_{\text{яд}}}{m_e + m_{\text{яд}}}$ .  $R'' = \frac{z^2 e^4 m_e}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} \frac{m_{\text{яд}}}{m_e + m_{\text{яд}}}$ ,

$$R'' = \frac{z^2 e^4 m_e}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} \frac{1}{\frac{m_e + m_{\text{яд}}}{m_{\text{яд}}}}; \quad R'' = \frac{z^2 e^4 m_e}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} \frac{1}{\underbrace{1 + \frac{m_e}{m_{\text{яд}}}}_{\tilde{R}_\infty}}; \quad R'' = \tilde{R}_\infty \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_{\text{яд}}}}.$$

Найдём теперь спектральных линий между полученными экспериментально и теоретически:  $\Delta\omega = \tilde{R} \left( 1 - \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_{\text{яд}}}} \right)$ ,  $\Delta\omega = \tilde{R} \left( 1 - \frac{m_{\text{яд}}}{m_{\text{яд}} + m_e} \right)$ ,

$$\Delta\omega = \tilde{R} \left( \frac{m_{\text{яд}} + m_e - m_{\text{яд}}}{m_{\text{яд}} + m_e} \right), \quad \Delta\omega = \tilde{R} \left( \frac{m_e}{m_{\text{яд}} + m_e} \right) \approx \tilde{R} \frac{m_e}{m_{\text{яд}}}.$$

Оцененная разность составила:  $\Delta\omega \approx \frac{\omega}{4000}$ , что совпадало с опытными данными.

Как следует из уравнения для постоянной Ридберга, для элементов с одинаковыми зарядами, но разной массой ядра, спектральные линии излучения должны отличаться. Такие элементы называют изотопами. Так как заряд ядра определяется количеством протонов, то изотопы различаются количеством нейтронов в ядре, а разница в частоте спектральных линий – изотопическим сдвигом. Для водорода существуют 3 изотопа: протий, дейтерий и тритий. Можно определить массу присутствующего изотопа в чистом веществе по изотопическому сдвигу. Для этого лазером с определённой длиной волны возбуждают различные энергетические уровни, которые для атомов исследуемого вещества известны.

Рис. 37

Атомы излучают, а по интенсивности смещённых линий, относительно спектральных линий чистого вещества можно сделать вывод о концентрации изотопов.

В заключение необходимо сказать, что орбиты электронов нельзя считать сферическими, даже эллиптическими, как это делали Вильсон и Зоммерфельд. Они ввели обобщённые координаты и импульсы, угловой момент импульса и радиальный момент импульса и предположили, что каждый из этих моментов должен квантоваться по отдельности. Поэтому они ввели понятия углового и радиального квантовых чисел:  $n = n_r + n_\varphi$ . В действительности не имеет смысла даже говорить об орбите. Существует лишь вероятность обнаружить электрон в данный момент времени в данной точке пространства. Такая вероятность представляет собой некоторое размытое облако. Максимум же вероятности приходится как раз на боровские орбиты в основных состояниях.

## Глава III. Основные положения квантовой механики

### § 3.1. Основные сведения из теории операторов.

Из опытов по дифракции и интерференции электронов, а особенно по интерференции одиночных электронов (опыт Юнга), следует, что даже один электрон способен создать интерференционную картину, то есть интерферирует сам с собой. Таким образом, электрон может в одно и то же время находиться в двух различных точках пространства. Очевидно, что понятие траектории для микрочастицы не определено; можно лишь говорить о вероятности нахождения частицы в данный момент времени в данной точке пространства. Одна из основных задач квантовой механики состоит в определении вероятности получения того или иного значения динамических переменных, характеризующих частицу или квантовую систему. Причём в квантовой физике не только координаты и скорости, но и другие физические величины не могут иметь определённые значения. Поэтому говорят лишь о вероятности системы иметь то или иное значение величины её характеризующей: энергии, импульса, координаты и т. д. В связи с этим в квантовой физике физическая величина характеризуется её не численным значением, а оператором, который эта физическая величина представляет.

Оператором называют правило, по которому любой функции из некоторого пространства сопоставляется другая функция из этого же пространства, то есть  $\hat{A}u = v$ . Операторы, используемые в квантовой механике, всегда линейные. Оператор  $\hat{A}$  называется линейным, если для произвольных функций  $u$  и  $v$ , и произвольных постоянных  $\alpha$  и  $\beta$  выполнено равенство:  $\hat{A}(\alpha u + \beta v) = \alpha \hat{A}u + \beta \hat{A}v$ .

Операторы  $\hat{C}$ ,  $\hat{C}_1$ ,  $\hat{C}_2$  называют суммой, разностью и произведением операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  соответственно, если справедливы равенства:

$$\begin{aligned}\hat{C}u &= \hat{A}u + \hat{B}u, \\ \hat{C}_1u &= \hat{A}u - \hat{B}u, \\ \hat{C}_2u &= \hat{A}(\hat{B}u).\end{aligned}$$

При этом произведение операторов в общем случае не коммутативно. Это значит, что  $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ . Если же  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ , то такие операторы называются коммутирующими. Если  $\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A}$ , то такие операторы называются антикоммутирующими. Запись  $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]$  называется коммутатором операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ . Запись  $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]$  называется антикоммутатором операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ . Если результатом действия оператора  $\hat{A}$  на функцию  $u$  является функция  $u$ , умноженная на некоторое число  $\lambda$ , то это число называют собственным значением оператора  $\hat{A}$ , а функцию  $u$  – собственной функцией оператора, соответствующей этому собственному значению:  $\hat{A}u = \lambda u$ . Причём, собственные функции в квантовой механике должны удовлетворять свойствам конечности, непрерывности, однозначности и гладкости. Совокупность собственных значений оператора называется его спектром. Спектр оператора может быть как дискретным, так и непрерывным. Причём, возможны случаи, часть спектра дискретна, а часть непрерывна. Возможны также случаи, когда одному собственному значению соответствует несколько собственных функций. Такое собственное значение называют вырожденным.

Помимо линейности, на квантово-механические операторы накладывается требование самосопряжённости. Оператор  $\hat{A}$  называется самосопряжённым или эрмитовым, если для произвольных функций  $u$  и  $v$  справедливо равенство:  $\int_V u^* \hat{A}v dV = \int_V v \hat{A}^* u^* dV$ <sup>1</sup>. Это требование обусловлено тем, что собственными значениями самосопряжённых операторов являются действительные числа. Собственные значения, как-либо описывающие физическую величину, измеряются в эксперименте. Вообще говоря, физическую величину можно измерить, если её оператор эрмитовый.

**Теорема 1.** Собственные функции линейного эрмитового оператора, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны друг другу, то есть  $\int_V u_n^* u_m dV = 0$ , если  $\lambda_m \neq \lambda_n$  и  $m \neq n$ .

<sup>1</sup> Здесь и далее  $u^*$ , за исключением особо оговорённых случаев, означает комплексно сопряжённую функцию.

▷ Запишем по определению собственного значения:  $\hat{A}^* u_n^* = \lambda_n u_n^*$  и  $\hat{A} u_m = \lambda_m u_m$  (1). Из условия самосопряжённости мы можем записать:  $\int_V u_n^* \hat{A} u_m dV = \int_V u_m \hat{A}^* u_n^* dV$ . Теперь, подставляя сюда формулы (1), получим:  $\int_V u_n^* \lambda_m u_m dV = \int_V u_m \lambda_n u_n^* dV$ . Так как  $\lambda_m$  и  $\lambda_n$  – константы, то мы можем вынести их за знак интеграла. Переносим интеграл в левую часть, получим:  $\lambda_m \int_V u_n^* u_m dV - \lambda_n \int_V u_m u_n^* dV = 0$ ,  $(\lambda_m - \lambda_n) \int_V u_n^* u_m dV = 0$ . По условию  $\lambda_m \neq \lambda_n$ , поэтому,  $\int_V u_n^* u_m dV = 0$ .

◁ Так как собственная функция определяется лишь с точностью до произвольного множителя, то этот множитель можно выбрать так, чтобы функции были ортонормированными:  $\int_V u_n^* u_m dV = \delta_{nm}$ , где  $\delta_{nm}$  – символ Кронекера.

### § 3.2. Постулаты квантовой механики. Представление динамических переменных.

Как и любая область науки, квантовая механика базируется на нескольких основных положениях, принимаемых без доказательства. Эти основные положения сформулированы в виде постулатов.

**I постулат.** Состояние движения квантового объекта описывается волновой функцией  $\Psi$ .

Физический смысл волновой функции в том, что её квадрат есть плотность вероятности обнаружения частицы в данном квантовом состоянии. Плотность вероятности определяется так:  $\frac{dP}{dV} = \Psi\Psi^*$ , так как функция  $\Psi$  комплексна. Тогда вероятность обнаружения частицы в данном квантовом состоянии, описываемом волновой функцией, будет:  $P = \int_V \Psi\Psi^* dV$ .

**II постулат.** Волновая функция  $\Psi$  подчиняется волновому уравнению:  $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$ .

Здесь  $\hat{H}$  – оператор Гамильтона (полной энергии системы), а уравнение, сформулированное во втором постулате, называется уравнением Шредингера.

**III постулат.** Каждая динамическая переменная представляется определённым линейным эрмитовым оператором.

**IV постулат.** При изменении некоторой динамической переменной, описываемой оператором  $\hat{A}$ , с определённой вероятностью получается одно из собственных значений этого оператора. Вероятность измерения собственного значения  $\lambda_n$  равна  $|a_n|^2$ , где  $a_n$  есть коэффициент разложения волновой функции  $\Psi$  по собственным функциям оператора  $\hat{A}$ :  $\Psi = \sum_k a_k u_k$ . Среднее значение динамической переменной, описываемой оператором  $\hat{A}$  в состоянии, описываемом волновой функцией  $\Psi$ , определяется так:  $\langle \hat{A} \rangle = \int_V \Psi^* \hat{A} \Psi dV$ .

Согласно третьему постулату операторы, описывающие динамические переменные, должны быть линейными и эрмитовыми. Однако третий постулат не даёт конкретных значений этих операторов. Вид основных операторов определяется так, чтобы полученные с помощью них значения, совпадали с экспериментальными. Остальные операторы получаются путём формальной замены в функции, описывающей соответствующую величину в классической физике, всех переменных на соответствующие им операторы. Необходимо следить за тем, чтобы полученный оператор оставался линейным и эрмитовым.

1. Оператор координаты есть оператор умножения на эту координату:  $\hat{x} = x$ , например,  $\hat{x}u = xu$ .

2. Оператор проекции импульса на оси декартовой системы координат есть  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ , например,  $\hat{p}_x f = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} f$ . Так как импульс величина векторная, то в векторной форме  $\hat{P} = \vec{i}\hat{p}_x + \vec{j}\hat{p}_y + \vec{k}\hat{p}_z$ . Тогда, после соответствующих преобразований, получим  $\hat{P} = -i\hbar \nabla$ . Например,  $\hat{P}\varphi = -i\hbar \nabla \varphi$ .

3. Оператор полной энергии имеет вид:  $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ .

4. Получим теперь уравнение для оператора  $\hat{H}$ . В классической физике функция Гамильтона есть полная энергия системы. Функция Гамильтона выражается через обобщённые координаты так:

$H(r, p) = \frac{p^2}{2m} + U(r)$  – сумма кинетической и потенциальной энергий. Тогда, пользуясь общим

правилом, запишем оператор  $\hat{H}$ :  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r)$ , или  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r)$ .

5. Оператор момента импульса. В классической физике  $\vec{L} = [\vec{r}, \vec{p}] = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$ . Тогда,

расписывая по координатам вектор  $\vec{L}$ , получим:  $L_x = yp_z - zp_y$ ;  $L_y = zp_x - xp_z$  и  $L_z = xp_y - yp_x$ .

Теперь по общему правилу, производя формальную замену, мы можем записать:

$\hat{L}_x = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$ ,  $\hat{L}_y = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$ ,  $\hat{L}_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$ . Перейдём теперь к

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

сферической системе координат  $y = r \sin \theta \sin \varphi$  (1). Теперь, производя дифференцирование,

$$z = r \cos \theta$$

при переходе к новым переменным, получим:  $\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z}$ . Так как  $z \neq z(\varphi)$ , то

$\frac{\partial z}{\partial \varphi} = 0$ . Таким образом,  $\frac{\partial}{\partial \varphi} = -r \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x} + r \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial y}$ . Возвращаясь к формуле (1), мы

можем переписать последнее уравнение:  $\frac{\partial}{\partial \varphi} = -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}$ . Отсюда для  $\hat{L}_z$  имеем

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

### § 3.3. Соотношение неопределённостей Гейзенберга.

Из постулатов квантовой механики следует, что при измерении некоторой физической величины получается определённое значение лишь в том случае, когда волновая функция, описывающая систему, является собственной функцией оператора измеряемой величины. В общем случае различные операторы имеют различные собственные функции, то есть описываемые ими физические величины не могут одновременно иметь точно определённые значения, но в некоторых случаях это возможно. Необходимым и достаточным условием того, чтобы две физические величины имели одновременно определённые значения, является коммутативность операторов, описывающих эти величины. Докажем это утверждение.

▷ Необходимость. Пусть операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  имеют общую собственную функцию, а значит описываемые ими физические величины, одновременно имеют определённые значения  $\hat{A}u = \alpha u$ ,  $\hat{B}u = \beta u$ . Умножим эти выражения на  $\hat{B}$  и  $\hat{A}$  соответственно:  $\hat{A}\hat{B}u = \hat{A}\alpha u = \beta \hat{A}u = \beta \alpha u$ ,

$\hat{V}\hat{A}u = \hat{V}\alpha u = \alpha\hat{V}u = \alpha\beta u$ . Отнимем из первого второе выражение:  $\hat{A}\hat{V}u - \hat{V}\hat{A}u = \beta\alpha u - \alpha\beta u = 0$ . Так как по условию функция  $u$  не нулевая, то  $\hat{A}\hat{V} - \hat{V}\hat{A} = 0$ , то есть операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{V}$  коммутирующие.

**Достаточность.** Пусть  $u$  – собственная функция оператора  $\hat{V}$ :  $\hat{V}u = \beta u$ . Если операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{V}$  коммутирующие, то  $\hat{V}\hat{A}u = \hat{A}\hat{V}u = \beta\hat{A}u$ , то есть функция  $\hat{A}u$  является собственной функцией оператора  $\hat{V}$ , отвечающая собственному значению  $\beta$ . Но такой функцией является функция  $u$ . Следовательно, функция  $u \propto \hat{A}u$  совпадает с точностью до произвольного постоянного множителя с функцией  $\hat{A}u$ . Этим множителем может быть  $\alpha$ :  $\alpha u = \hat{A}u$ . Отсюда функция  $u$  является собственной функцией оператора  $\hat{A}$ , соответствующая собственному значению  $\alpha$ , а значит, операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{V}$  имеют общую собственную функцию  $u$ , и поэтому соответствующие им динамические переменные являются одновременно измеримыми с какой угодно степенью точности.  $\triangleleft$

Проверим, являются ли одновременно измеримыми проекция импульса на координату и сама эта координата:  $\hat{p}_x$  и  $\hat{x}$ . Найдём их коммутатор:  $[\hat{p}_x, \hat{x}] = \hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \cdot \hat{x} + \hat{x} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$ . Подействуем этим оператором на функцию  $f$ :  

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \cdot \hat{x}(f) + \hat{x} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) f = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \cdot (xf) - \hat{x} \left( i\hbar \frac{\partial f}{\partial x} \right) = -i\hbar f - i\hbar x \frac{\partial f}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial f}{\partial x} = -i\hbar f$$
 То есть оператор коммутатора не равен нулю. Значит операторы  $\hat{p}_x$  и  $\hat{x}$  не коммутирующие. Значит, координата и проекция импульса не могут одновременно иметь определённые значения.

Соотношение между дисперсией координаты и импульсом частицы было установлено Гейзенбергом (1927 г.) и получило в последствии название соотношения неопределённостей Гейзенберга. Найдём его. По определению дисперсии мы можем записать<sup>1</sup>  $\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ .

Аналогично для импульса:  $\langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ . Выберем такую систему координат, в которой  $\langle x \rangle = 0$  и  $\langle p \rangle = 0$ . В этой системе координат дисперсия координаты и импульса будет выглядеть так:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \int_x \Psi^*(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) dx \quad \text{и} \quad \langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle = \int_p \Psi^*(x) \hat{p}^2 \Psi(x) dx = -\hbar^2 \int_x \Psi^*(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) dx$$

Для нахождения связи между неопределённостью координаты и неопределённостью импульса, Гейзенберг предложил рассмотреть интеграл вида:

$$I(\xi) = \int_x \left| \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} + \xi x \Psi(x) \right|^2 dx = \int_x \left( \frac{\partial \Psi^*(x)}{\partial x} + \xi x^* \Psi^*(x) \right) \left( \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} + \xi x \Psi(x) \right) dx$$

Раскроем теперь скобки и приведём подобные члены. Причём, запишем полученное выражение как многочлен относительно степеней  $\xi$ :  $I(\xi) = A\xi^2 - B\xi + C$ . Так как подынтегральное выражение являлось квадратом модуля, то интегральная функция  $I(\xi)$  будет положительно определена:  $A\xi^2 - B\xi + C \geq 0$  (1). Запишем теперь выражения для коэффициентов многочлена (1):  $A = \int_x \Psi^*(x) x^2 \Psi(x) dx = \langle \hat{x}^2 \rangle$  (см. определение

дисперсии);  $B = -\int_x x \left( \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx = \int_x x \frac{d}{dx} (\Psi^* \Psi) dx$ . Беря полученный интеграл по частям, запишем:  $B = -x \Psi^* \Psi \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_x \Psi^* \Psi dx = 1$ . Первое слагаемое здесь равно нулю<sup>2</sup>, а второе 1 в силу условия

нормировки.  $C = \int_x \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \Big| \text{по частям} \Big| = -\int_x \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx = \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{\hbar^2}$ . Запишем теперь условие

нормировки.

$$C = \int_x \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \Big| \text{по частям} \Big| = -\int_x \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx = \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{\hbar^2}$$

<sup>1</sup> См. Курс теории вероятностей под редакцией Юшанова С. В.

<sup>2</sup> Так получается вследствие того, что на бесконечности  $\Psi$  стремится к нулю, а на минус бесконечности  $\Psi^*$  также стремится к нулю.

положительной определённости (1): дискриминант (1) должен быть меньше либо равен нулю:  $D \leq 0$ ,  $B^2 - 4AC \leq 0$ ,  $4AC \geq B^2$ . Подставляя в последнее выражение значения  $A, B$  и  $C$ , получим:  $4\langle x^2 \rangle \frac{\langle p^2 \rangle}{\hbar^2} \geq 1$ ;  $\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$ . Возвращаясь к определению дисперсии в выбранной нами системе координат, мы можем

записать:  $(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$ . Или, извлекая корень,  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ . Данное соотношение носит название

соотношения неопределённостей Гейзенберга. Оно показывает, что импульс и координаты частицы не могут быть одновременно определены (измерены) со сколь угодно большой точностью, хотя любая из этих величин по отдельности измерима с любой точностью. До измерения частица не имела определённых значений динамических переменных. Определённые значения динамические переменные квантовой системы принимают только в процессе измерения. Под процессом измерения в квантовой физике понимается процесс взаимодействия с любым классическим объектом (прибором). Наличие же наблюдателя вовсе не обязательно. Таким образом, измерения объективны.

**§ 3.4.** *Соотношение неопределённостей произвольных физических величин. Принцип дополнителности.*

Соотношение неопределённостей аналогичное соотношению неопределённостей Гейзенберга можно получить для произвольной физической величины. Рассмотрим две произвольные физические величины, описываемые операторами  $\hat{L}$  и  $\hat{M}$ , коммутатор которых равен:  $[\hat{L}, \hat{M}] = i\hat{K}$ . Введём величину  $\Delta \hat{L}$ , которая есть отклонение оператора  $\hat{L}$  от его среднего значения:  $\Delta \hat{L} = \hat{L} - \langle \hat{L} \rangle$  и, соответственно,  $\Delta \hat{M} = \hat{M} - \langle \hat{M} \rangle$ . Аналогично Гейзенбергу рассмотрим интеграл вида:  $I(\xi) = \int_V |(\xi \Delta \hat{L} - i \Delta \hat{M}) \Psi|^2 dV$ . Так

как под интегралом стоит квадрат модуля, то он должен быть положительно определённым оператором функции  $\xi$ . Если операторы описывают физическую величину, то они должны быть линейными и эрмитовыми. Используя условие самосопряжённости операторов  $\hat{L}$  и  $\hat{M}$ , и определение среднего, мы получим:  $I(\xi) = \int_V (\xi \Delta \hat{L} - i \Delta \hat{M}) \Psi (\xi \Delta \hat{L} + i \Delta \hat{M}) \Psi^* dV$ . Вспоминая условие эрмитовости, мы можем

записать:

$$I(\xi) = \int_V \Psi^* (\xi \Delta \hat{L} + i \Delta \hat{M}) (\xi \Delta \hat{L} - i \Delta \hat{M}) \Psi dV ;$$

$$I(\xi) = \int_V \left\{ \Psi^* \left( \xi^2 (\Delta \hat{L})^2 - i \xi [\Delta \hat{L}, \Delta \hat{M}] + (\Delta \hat{M})^2 \right) \Psi \right\} dV = \xi^2 \langle (\Delta \hat{L})^2 \rangle - i \xi \langle [\Delta \hat{L}, \Delta \hat{M}] \rangle + \langle (\Delta \hat{M})^2 \rangle.$$

Полученное соотношение, после выполнения условия положительной определённости интеграла даст нам соотношение неопределённостей для произвольных физических величин, описываемых операторами  $\hat{L}$  и  $\hat{M}$ .

Для описания квантовой системы невозможно пользоваться всеми теми величинами. Которые используются в классической физике, то есть часть из этих величин всегда не будет определена достаточно точно. Это утверждение носит название принципа дополнителности.

**§ 3.5.** *Понятие представления в квантовой механике.*

Как уже было ранее сказано, мы можем разложить любую функцию по полному ортогональному набору других функций (например, в ряд Фурье), то есть:  $v = \sum_n a_n u_n$ , причём набор коэффициентов разложения  $\{a_n\}$  полностью определяет функцию  $v$ . Мы доказали, что собственные функции линейного эрмитового оператора образуют полный ортонормированный базис, то есть любую функцию можно разложить по собственным функциям этого оператора. Разложение функции по полной системе

собственных функций оператора  $\hat{A}$  является переводом её функционального представления в так называемое  $\hat{A}$  – представление. В квантовой механике говорят: «Переведём функцию в  $\hat{A}$  – представление». Не только функции, но и операторы могут быть записаны в различных представлениях.

Пусть функция  $u$  есть результат действия оператора  $\hat{B}$  на функцию  $v$ :  $\hat{B}v = u$  (1). Запишем разложение функций  $u$  и  $v$  по собственным функциям оператора  $\hat{A}$ , то есть переведём их в  $\hat{A}$  – представление:  $\hat{A}f = \lambda_n f_n$ .

$u = \sum_n a_n f_n$ ;  $v = \sum_n b_n f_n$ , где  $f_n$  – собственные функции оператора  $\hat{A}$ . Подставляя два последних равенства в (1), получим:  $\sum_n a_n f_n = \sum_n \hat{B}(b_n f_n)$ . Умножим на  $f_k^*$  последнее выражение:

$\sum_n a_n f_n = \sum_n \hat{B} b_n f_n \mid \times f_k^*$ ,  $f_k^* \sum_n a_n f_n = f_k^* \sum_n \hat{B} b_n f_n$ ;  $\sum_n f_k^* a_n f_n = \sum_n f_k^* \hat{B}(b_n f_n)$ . Так как  $b_n$  численный множитель, то мы можем поменять его местами с функцией  $f_n$ :  $\sum_n f_k^* a_n f_n = \sum_n f_k^* \hat{B}(f_n b_n)$ .

Проинтегрируем теперь обе части по всей области изменения  $f_n$ , то есть по объёму:  $\int_V \sum_n f_k^* a_n f_n dV = \int_V \sum_n f_k^* \hat{B}(f_n b_n) dV$ . Так как операции интегрирования и суммирования коммутативны, то

мы можем изменить порядок действий в последней формуле:  $\sum_n \int_V f_k^* a_n f_n dV = \sum_n \int_V f_k^* \hat{B}(f_n b_n) dV = \sum_n b_n \int_V f_k^* \hat{B} f_n dV$  (2). Введём некоторые обозначения:

$B_{kn} \equiv \int_V f_k^* \hat{B} f_n dV$ . Величину  $B_{kn}$  называют матричным элементом оператора  $\hat{B}$ . Матричный элемент

оператора  $\hat{B}$  связывает функции  $u$  и  $v$  в  $\hat{A}$  – представлении. Найдём матричные элементы оператора  $\hat{A}$  в его собственном представлении,

$A_{kn} = \int_V f_k^* \hat{A} f_n dV = \left| \hat{A} f_n = \lambda_n f_n \right| = \int_V f_k^* \lambda_n f_n dV = \lambda_n \int_V f_k^* f_n dV = \left| \begin{array}{l} \text{если базис} \\ \text{ортонормированный} \end{array} \right| = \lambda_n \delta_{kn}$ , где  $\delta_{kn}$  – символ

Кронекера. Таким образом, матричные элементы оператора  $\hat{A}$  в его собственном представлении образуют диагональную матрицу. Вернёмся к равенству (2). После суммирования по  $n$  получим слева некоторую функцию  $a_k$ , которая не зависит от  $n$ . Тогда мы можем записать:  $a_k = \sum_n B_{kn} b_n$ . Полученное

соотношение отражает связь между коэффициентами  $\hat{A}$  – представления функций  $u$  и  $v$ .

В квантовой механике используются различные виды представлений. Чаще всего используется координатное или  $\hat{x}$  – представление. В нём все функции раскладываются по собственным функциям оператора координат – оператора  $\hat{x}$ . Реже используется  $\hat{p}$  – представление, где функции раскладываются по собственным функциям оператора импульса. Существует также  $\hat{E}$  – представление. В этом случае все функции раскладываются по собственным функциям оператора Гамильтона.

## Глава IV. Простейшие случаи движения микрочастиц.

### § 4.1. Свободное движение частиц.

Рассмотрим свободное движение частицы, то есть такое движение, при котором на частицу не действуют внешние силы. Исходя из определения, ясно, что потенциальная энергия частицы равна нулю, так как потенциальная энергия есть энергия взаимодействия, а при его отсутствии она, очевидно, равна нулю. Тогда в операторе Гамильтона останется лишь слагаемое, описывающее её кинетическую энергию. В классической механике кинетическая энергия системы или частицы описывается следующим

выражением:  $E = \frac{p^2}{2m}$ . В квантовой же механике эту величину описывает оператор Гамильтона. Для

одномерного случая:  $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \frac{1}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$  (1). Уравнение частицы описывается

уравнением Шредингера:  $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$ . Подставляя в него (1), получим:  $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$  или

$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ . В большинстве случаев движущейся частице можно поставить в соответствие волну де Бройля, поэтому мы можем выбрать волновую функцию, описывающую плоскую волну:

$\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{-i\omega t}$ , где  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ . Таким образом,  $\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$ . Подставим этот вид волновой функции в

уравнение Шредингера:  $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \left( \Psi_0(x) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( \Psi_0(x) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \right)$ . Дифференцируя, вынося из-под

знака дифференциала константы, и сокращая одинаковые множители, получим:

$+\frac{\hbar}{i} \Psi_0(x) \left( +E \frac{i}{\hbar} \right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_0(x)$ . В итоге, получим:  $\Psi_0(x) E = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_0(x)$ . Приведём

полученное дифференциальное уравнение к стандартному виду:  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_0(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_0(x) = 0$ . Итак, мы

получили дифференциальное уравнение второго порядка, независящее от времени. Оно называется

стационарным уравнением Шредингера. Решая его, получим:  $\Psi_0(x) = A e^{i\frac{p_x x}{\hbar}} + B e^{-i\frac{p_x x}{\hbar}}$  (2). Мы

можем так записать, так как  $E = \frac{p_x^2}{2m}$  и, следовательно,  $p_x = \sqrt{2mE}$ . Первое слагаемое в выражении (2)

описывает движение частицы в направлении оси  $x$ , а второе – против направления этой координатной

оси. Итак, в общем случае:  $\Psi(x) = A e^{i\frac{p_x x}{\hbar}} e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = A e^{-i\frac{Et - p_x x}{\hbar}}$ . Таким образом, общее уравнение Шредингера

имеет однозначное и непрерывное решение, которое существует для любых значений  $E$ , что означает,

что энергия свободно движущейся частицы может принимать любые значения, то есть энергетический

спектр непрерывен. Более того, энергия частицы и её импульс являются величинами одновременно

измеримыми, то есть  $[\hat{H}, \hat{p}_x] = 0$ .

▷ Доказательство. Так как по определению  $[\hat{H}, \hat{p}_x] = \hat{H} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{H}$ , то вычислим входящие в эту формулу слагаемые по очереди.

1.  $\hat{H} \hat{p}_x = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)$ . Воздействуем этим оператором на некоторую функцию  $f$ :

$\hat{H}(\hat{p}_x f) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} f\right) = \frac{i\hbar^2}{2m} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}$ . Таким образом,  $\hat{H} \hat{p}_x = \frac{i\hbar^2}{2m} \frac{\partial^3}{\partial x^3}$ .

2.  $-\hat{p}_x \hat{H} = -\left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\right]$ . Аналогично предыдущему пункту:

$-\hat{p}_x(\hat{H} f) = -\left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)\right] = -i\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}$ . Итак,  $-\hat{p}_x \hat{H} = -i\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^3}{\partial x^3}$ .

Находя теперь сумму слагаемых, полученных в пунктах 1 и 2, получим:

$[\hat{H}, \hat{p}_x] = \hat{H} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{H} = i\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^3}{\partial x^3} - i\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^3}{\partial x^3} = 0$ , что и требовалось доказать.

Так как спектр собственных значений энергии непрерывен, то нормировка волновой функции оператора энергии на единицу невозможна. Действительно:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} A e^{i \frac{Et - p_x x}{\hbar}} A e^{-i \frac{Et - p_x x}{\hbar}} dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty.$$

Поэтому пользуются условием нормировки на длину периодичности. Этот способ состоит в следующем. Пусть само по себе движение частицы неограничено, но нас интересует движение частицы на участке  $L$ . В этом случае мы можем рассматривать не всё бесконечное пространство, а участок длиной  $L$ . Пусть вне этого участка значения волновой функции повторяются, то есть волновая функция периодична с периодом  $L$ . Условие периодичности мы можем записать в виде:  $\Psi_0(x+L) = \Psi_0(x)$ . Так как движение ограничено, то спектр энергии может быть дискретен. Найдём все возможные значения энергии:

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

Условие периодичности нам даёт следующее выражение:

$$e^{i \frac{p_x x}{\hbar}} = e^{i \frac{p_x (x+L)}{\hbar}} = e^{i \frac{p_x x}{\hbar}} e^{i \frac{p_x L}{\hbar}} \equiv \xi.$$

Очевидно, что данное равенство возможно, если  $\xi = 1$ . Распишем эту экспоненту:  $e^{i \frac{p_x L}{\hbar}} = \cos\left(\frac{p_x L}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{p_x L}{\hbar}\right) = 1$ . Отсюда  $\frac{p_x L}{\hbar} = 2\pi n_x$ ,  $p_x = \frac{2\pi n_x \hbar}{L}$ . Таким образом, импульс принимает какие-то строго определённые значения, значит, и энергия тоже принимает определённые дискретные значения:  $E_n = \frac{p_{x_n}^2}{2m} = p_x = \frac{4}{2m} \left(\frac{\pi n_x \hbar}{L}\right)^2$ .  $E_{\min} = E_1 = \frac{4}{2m} \left(\frac{\pi \hbar}{L}\right)^2$ . Величина  $E_{\min}$  называется

шагом дискретизации энергии. Найдём расстояние между энергетическими уровнями:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \left[ (n+1)^2 - n^2 \right] = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (2n+1).$$

Из последней формулы видно, что расстояния между энергетическими уровнями обратно пропорциональны  $L^2$ . Таким образом, чем конкретнее и меньше  $L$ , тем разреженней энергетические уровни. При  $L \rightarrow \infty$  спектр, очевидно, становится непрерывным. Обобщая предыдущие рассуждения, можно сказать: чем точнее локализовано положение частицы. Тем ярче выражена дискретность её спектра.

Воспользуемся для дискретного спектра условием ортонормированности волновой функции:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \Psi_{on'}^*(x) \Psi_{on}(x) dx = \delta_{nn'}.$$

Подставляя в него конкретные функции, получим:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} A e^{-i \frac{p_{x_n'} x}{\hbar}} A e^{i \frac{p_{x_n} x}{\hbar}} dx = A^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i \frac{x}{\hbar} (p_n - p_{n'})} dx = \begin{cases} \text{так как импульс} \\ \text{дискретен, то} \end{cases} = A^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i \frac{x}{\hbar L} (2\pi \hbar n - 2\pi \hbar n')} dx = A^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{i \frac{2\pi x}{L} (n-n')} dx =$$

$$= \frac{A^2 L}{2\pi i (n-n')} e^{i \frac{2\pi x}{L} (n-n')} \Big|_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} = \frac{A^2 L}{2\pi i (n-n')} \left( e^{i\pi(n-n')} - e^{-i\pi(n-n')} \right) = \frac{A^2 L}{\pi(n-n')} \sin[\pi(n-n')] = \begin{cases} A^2 L, & n = n' \\ 0, & n \neq n' \end{cases}.$$

Таким

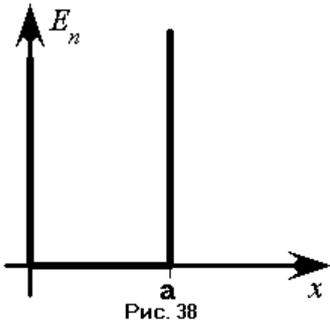
образом, чтобы выполнялось условие нормировки, необходимо положить  $A^2 L = 1$ ;  $A = \frac{1}{\sqrt{L}}$ . Тогда система

ортонормированных функций будет выглядеть так:  $\Psi_{on}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i \frac{p_{x_n} x}{\hbar}}$ , где  $p_{x_n} = \frac{2\pi \hbar n_x}{L}$ . Если перейти к

волновому вектору  $k$ , то получим: так как  $k_n = \frac{p_{x_n}}{\hbar}$ , то  $k_n = \frac{2\pi n}{L}$ . И в выражении для волновой функции

имеем:  $\Psi_{on}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x}$ . Таким образом, мы нашли возможные значения энергии и волновой функции в случае ограниченного движения частицы по длине периода.

## § 4.2. Частица в одномерной потенциальной яме.



Мы будем рассматривать связанное движение частиц. Движение частицы в потенциальной яме является примером такого движения. Потенциальной ямой называется область пространства, в которой потенциальная энергия меньше, чем в окружающем пространстве. В частности движение электрона в кулоновском потенциале ядра есть движение в потенциальной яме. Рассмотрим простейший случай одномерной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками. Её можно описать следующими уравнениями:  
 $E_n(x) = 0, x \in \{0, a\}; E_n(x) = \infty, x \leq 0, x \geq a$ . Так как энергия частицы внутри ямы нулевая, то существует только вероятность нахождения частицы внутри ямы, так как она не может преодолеть стенки ямы:  $p(x)|_{x \geq a} = 0$ . Так как

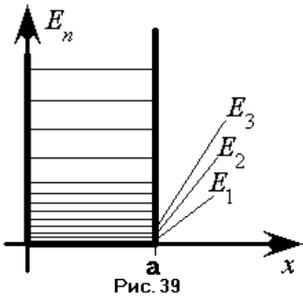
волновая функция имеет смысл плотности вероятности нахождения частицы в той или иной точке пространства, то и  $\Psi(x)|_{x \geq a} = 0$ . Таким образом имеет смысл искать волновую функцию только внутри

ямы. Стационарное уравнение Шредингера внутри ямы имеет вид:  $\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0$ . Здесь  $E$  – энергия

частицы. Запишем граничные условия:  $\begin{cases} \Psi(0) = 0 \\ \Psi(a) = 0 \end{cases}$  (1). Введём следующее обозначение:  $k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} E$ .

Тогда уравнение Шредингера примет вид:  $\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0$ . Решением данного уравнения является функция  $\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$ . Используем первое граничное условие:  $\Psi(0) = A \sin k0 + B \cos k0 = 0$ , следовательно,  $B \cos k0 = 0$ . Но  $\cos 0 = 1$ , поэтому  $B = 0$ . Применим теперь второе граничное условие:  $\Psi(a) = A \sin ka = 0$ . То есть  $ka = \pi n, n \in \mathbb{Z}$ . Получается, что  $k$  зависит от  $n$ . Тогда  $k_n = \frac{\pi n}{a}$ . Очевидно,

что  $k$  принимает дискретные значения. Вспоминая, что  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ , получим с учётом последнего



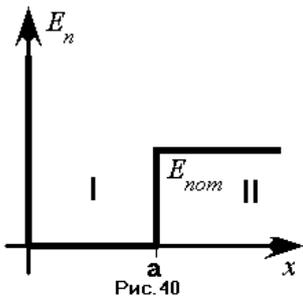
выражения:  $\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ . Отсюда  $E = \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi n \hbar}{a}\right)^2$ , причём минимальная

энергия равна:  $E_{\min} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi \hbar}{a}\right)^2$ . Таким образом, энергию движущейся частицы внутри потенциальной ямы мы можем представить в виде энергетических уровней. Волновая функция такой частицы имеет вид:  $\Psi_n = A \sin k_n x$ . Волновая

функция основного состояния  $\Psi_1 = A \sin \frac{\pi x}{a}$ . Эта функция внутри ямы

изменяется и с уменьшением размера ямы энергия возрастает. Найдём константу  $A$  из условия

нормировки: вероятность нахождения частицы внутри ямы равна 1:  $\int_0^a \Psi^* \Psi dx = 1$ .



$\int_0^a A^2 \sin^2 kx dx = A^2 \int_0^a \frac{1 - \cos 2kx}{2} dx = A^2 \left[ \frac{x}{2} - \frac{1}{4k} \sin \frac{2\pi n x}{a} \right]_0^a = \frac{A^2 a}{2} = 1$ . Отсюда  $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

и для волновой функции имеем:  $\Psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right)$ . В случае конечных

значений потенциальной энергии существует ненулевая вероятность прохождения частицы за пределы ямы. Мы докажем этот факт чуть позже.

Рассмотрим случай несимметричной ямы: один барьер бесконечный, а другой имеет конечные размеры. Рассмотрим движение в двух областях:  $0 < x < a$  и  $x > a$ .

1. В первой области уравнение Шредингера имеет вид  $\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi_1 = 0$ . Вводя

обозначение  $k_1^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}E$ , получим:  $\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k_1^2\Psi_1 = 0$ . Решение этого уравнения аналогично предыдущему пункту:  $\Psi_1(x) = A_1 \sin k_1 x + B_1 \cos k_1 x$ . Из граничных условий, которые соответствуют (1), получаем, что  $B_1 = 0$  и  $\Psi_1(x) = A_1 \sin k_1 x$ .

2. Во второй области уравнение Шредингера имеет вид:  $\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi_2 = \frac{2m}{\hbar^2}E_n\Psi_2$  или

$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - E_n)\Psi_2 = 0$ . Введём здесь обозначение:  $k_2^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(E - E_n)$ . С учётом обозначения

можно записать:  $\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + k_2^2\Psi_2 = 0$ . Решение данного уравнения зависит от  $k_2$ . Имеют место два случая:  $E > E_{nom}$  и  $E < E_{nom}$  в зависимости от знака  $k$ . Разберём каждый случай.

1. *Случай*  $E > E_{nom}$ . Общий вид решения исходного уравнения задаётся формулой:

$\Psi_2(x) = A_2 \sin\{k_2(x-a)\} + B_2 \cos\{k_2(x-a)\}$ . Волновая функция частоты должна быть

непрерывна. Этот факт математически выражается так:  $\Psi_1(a) = \Psi_2(a)$  и  $\frac{d\Psi_1(a)}{dx} = \frac{d\Psi_2(a)}{dx}$

(2). Подставляя значения функций, получим:  $A_1 \sin k_1 a = A_2 \sin\{k_2(a-a)\} + B_2 \cos\{k_2(a-a)\}$  или

$A_1 \sin k_1 a = B_2$ . Считая производные и удовлетворяя равенству (2), получим:

$A_1 k_1 \cos k_1 a = A_2 k_2 \cos\{k_2(a-a)\} - B_2 k_2 \sin\{k_2(a-a)\}$  или  $A_1 k_1 \cos k_1 a = A_2 k_2$ . Мы получили

систему уравнений:  $\left\{ \begin{array}{l} A_2 = A_1 \frac{k_1}{k_2} \cos(k_1 a) \\ B_2 = A_1 \sin(k_1 a) \end{array} \right\}$ . Эти условия всегда могут быть удовлетворены.

Поэтому в случае  $E > E_{nom}$  спектр энергии непрерывен, частица при своём движении не локализована в конечной области пространства, её движение инфинитно.

2. *Случай*  $E < E_{nom}$ . В этом случае  $\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} - k_2^2\Psi_2 = 0$ . Решением этого уравнения будет функция

следующего вида:  $\Psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}$ . Первое слагаемое в данном уравнении не имеет

физического смысла, иначе волновая функция неограниченно возрастает с увеличением  $x$ .

Поэтому мы обязаны положить  $A_2 = 0$ . Получится уравнение:  $\Psi_2(x) = B_2 e^{-k_2 x}$ . Эта функция

ограничена для любого значения энергии. Однако даже если энергия частицы меньше энергии потенциального барьера, то всё равно существует вероятность обнаружить частицу за барьером.

С ростом  $x$  волновая функция убывает.

Попробуем теперь найти возможные значения энергии, которые будут принимать частица в том случае, если её энергия будет меньше энергии потенциального барьера:  $E < E_{nom}$ . Рассмотрим уравнения

волновых функций в двух различных областях:  $\Psi_1 = A_1 \sin k_1 x$ ,  $\Psi_2(x) = B_2 e^{-k_2 x}$ . Из соображений

конечности волновой функции и её непрерывности мы можем записать:  $\Psi_1(a) = \Psi_2(a)$  и

$\frac{d\Psi_1(a)}{dx} = \frac{d\Psi_2(a)}{dx}$ . Подставляя конкретный вид соответствующей функции, получим:  $A_1 \sin k_1 a = B_2 e^{-k_2 a}$

и  $A_1 k_1 \cos k_1 a = -B_2 k_2 e^{-k_2 a}$ . Разделим второе уравнение на первое. В результате получим:  $k_1 \operatorname{ctg} k_1 a = -k_2$ ,

$\operatorname{ctg} k_1 a = -\frac{k_2}{k_1}$  (3). Найдём возможные значения  $k_1$  и  $k_2$ , чтобы найти возможные значения энергии.

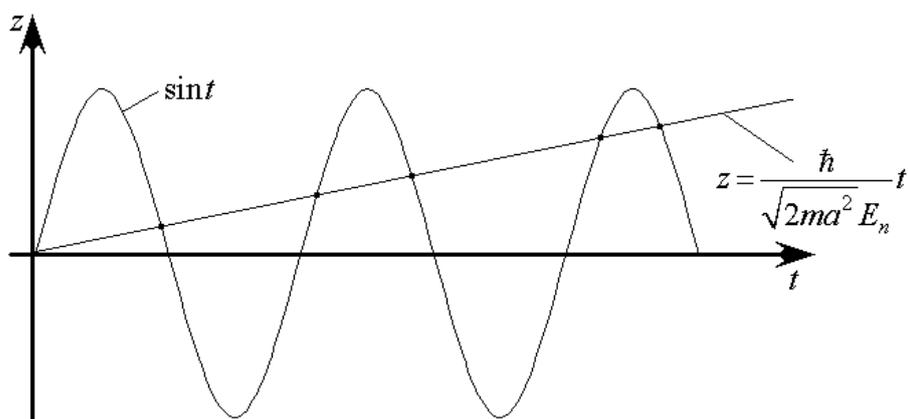


Рис. 41

Известно, что  $\frac{1}{\sin^2 y} = 1 + \text{ctg}^2 y$ , а

$\sin y = \sqrt{\frac{1}{1 + \text{ctg}^2 y}}$ . Возвращаясь к

выражениям (3) и используя только что приведённые, получим:

$$\sin k_1 a = \frac{1}{\sqrt{1 + \text{ctg}^2 k_1 a}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{k_2}{k_1}\right)^2}} = \left| \begin{array}{l} \text{подставляя значения} \\ \text{энергий} \end{array} \right| = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2m(E - E_n)\hbar^2}{\hbar^2 E 2m}}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{E - E_n}{E}}}. \quad \text{Подставляя}$$

выражение для  $k_1$  в предыдущую формулу, получим  $\sin k_1 a = \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a\right)$ ,  $\sin\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2mE}\right) = \frac{1}{\sqrt{2 - \frac{E_n}{E}}}$ , так

как  $\sqrt{E} = \frac{\hbar k_1}{\sqrt{2mE}}$ . Тогда  $\sin t = \frac{\hbar}{\sqrt{2ma^2}} t = z$ , где  $t = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mE}$ . Решаем последнее уравнение графически.

Точки пересечения дают значения энергии. Так как прямая неограниченно возрастает, а синус – функция ограниченная, то число точек пересечения будет конечно. Таким образом, и спектр энергии будет дискретным. Итак, мы получили различные выражения для различных видов ям и энергий частицы. Если яма имеет бесконечную глубину, то энергия будет принимать дискретные значения, причём набор этих значений будет бесконечен. Если яма имеет конечную глубину, то в зависимости от энергии частицы будет образовывать либо непрерывный спектр в случае  $E > E_{\text{ном}}$ , либо дискретный в случае  $E < E_{\text{ном}}$ .

### § 4.3. Прохождение частицы через потенциальный барьер.

Выше уже было показано, что даже если энергия частицы меньше энергии потенциального барьера, то всё равно существует не нулевая вероятность обнаружить частицу по другую его сторону. Рассмотрим этот случай немного более подробно.

Область пространства, в которой потенциальная энергия больше, чем в окружающем пространстве называется потенциальным барьером. В случае, представленном на рисунке, энергия потенциального барьера определяется таким образом:

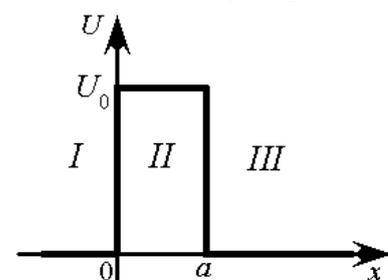


Рис. 42

$\left. \begin{array}{l} E_n = U_0, x \in (0, a) \\ E_n = 0, x \in (-\infty, 0) \cup (0, \infty) \end{array} \right\}$ . Будем рассматривать одномерный случай. В

случае многомерной потенциальной ямы уравнение Шредингера придётся записывать просто для каждой координаты. Таким образом, не ограничивая общности, мы можем рассматривать одномерный случай. Если частица, имеющая энергию  $E$ , движется в области I, в направлении оси  $OX$ , то в классической механике, если  $E < U_0$ , то частица не сможет преодолеть потенциальный барьер, отразится и изменит направление своего движения на противоположное. В квантовой механике вероятность прохода частицы существует. Явление прохода частицы во вторую и третью зоны называется туннельным эффектом. Туннельный эффект характеризуется коэффициентом пропускания барьера:

$T = \frac{I_{np}}{I_{nad}}$  и коэффициентом отражения  $R = \frac{I_{omp}}{I_{nad}}$ . Так как частицы не могут оседать на стенках ямы, то  $T + R = 1$ . Найдём эти коэффициенты. Рассмотрим уравнения Шредингера, описывающие состояние частицы в первой, второй и третьей областях.

1.  $\Psi_1'' + k_1^2 \Psi_1 = 0$ , где  $k_1^2 = \frac{2mE^2}{\hbar^2} \equiv k^2$ .
2.  $\Psi_2'' - k_2^2 \Psi_2 = 0$ , где  $k_2^2 = \frac{2m(U_0 - E)^2}{\hbar^2} > 0$ .
3.  $\Psi_3'' + k_3^2 \Psi_3 = 0$ , где  $k_3^2 = \frac{2mE^2}{\hbar^2} \equiv k^2$ .

Решения этих уравнений имеют соответственно вид<sup>1</sup>:

1. Так как существует вероятность того, что частица будет двигаться как по направлению оси  $OX$ , так и против, то решение будет содержать два слагаемых, описывающих движение частицы, происходящее сонаправлено с осью  $OX$  и в противоположную сторону:  $\Psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$ .
2.  $\Psi_2 = A_2 e^{-k_2 x} + B_2 e^{k_2 x}$ .
3. В данном случае движение начинается с точки  $a$  и происходит сонаправлено с осью  $OX$ . Поэтому решение уравнения примет вид:  $\Psi_3 = A_3 e^{ik(x-a)}$ .

Получим теперь квантово-механическое выражение для интенсивности. По определению интенсивности можно записать:  $I = \frac{dN}{dt dS}$ . Представим  $dS$  через объём и длину области:  $dS = \frac{dV}{dl}$ . Тогда

$I = \frac{dN dl}{dt dV} = \left| \frac{dl}{dt} \right| = v \left| \frac{dN}{dV} \right|$ . Здесь  $v$  – скорость движения частицы в данном направлении. Очевидно, что число частиц в данной области пространства пропорционально плотности вероятности нахождения частицы в данный момент времени в данной точке пространства:  $dN \propto |A|^2 \int_V \Psi \Psi^* dV$ . Данный интеграл

даёт значение близкое к единице. Поэтому,  $\frac{dN}{dV} \propto |A|^2$ . Подставляя последнее выражение в формулу для

импульса, получим:  $I = |A|^2 v$ . Распишем скорость частицы через её импульс:  $v = \frac{p}{m} = \frac{k\hbar}{m}$ , где  $k$  –

волновое число. Тогда  $I = |A|^2 \frac{k\hbar}{m}$ . В последних четырёх формулах под  $A$  подразумевается один из пяти

коэффициентов, стоящих перед экспонентами в решениях уравнения Шредингера. Тогда для интенсивности падающих частиц имеем:  $I_{nad} = |A_1|^2 \frac{k\hbar}{m}$ , для интенсивности прошедших –  $I_{np} = |A_3|^2 \frac{k\hbar}{m}$  и

для интенсивности отражённых –  $I_{omp} = |B_1|^2 \frac{k\hbar}{m}$ . Таким образом, используя данные выше определения

коэффициентов пропускания и отражения для барьера, можно записать:  $T = \frac{I_{np}}{I_{nad}} = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$  и  $R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2$ .

Получим теперь соотношения между коэффициентами в решении уравнения Шредингера:  $A_1, A_2, A_3, B_1, B_2$ . Будем исходить из того, что волновая функция – непрерывная и гладкая функция.

Поэтому выполнены следующие 4 условия: 
$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_1(0) = \Psi_2(0) \\ \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0) \\ \Psi_2(a) = \Psi_3(a) \\ \Psi_2'(a) = \Psi_3'(a) \end{array} \right.$$
 Подставляя значения функций и их

<sup>1</sup> Решения были получены выше.

первых производных в заданных точках, получим следующую систему:

$$\left. \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ A_2 e^{-k_2 a} + B_2 e^{k_2 a} = A_3 \\ ik(A_1 - B_1) = k_2(B_2 - A_2) \\ k_2(B_2 e^{k_2 a} - A_2 e^{-k_2 a}) = ikA_3 \end{cases} \right\}.$$

Решая её, получим:  $\left\{ \begin{matrix} A_2 = \frac{1}{2}(1-in)e^{k_2 a} A_3 \\ B_2 = \frac{1}{2}(1+in)e^{-k_2 a} A_3 \end{matrix} \right\}$ , где  $n = \frac{k}{k_2}$ . Сравнивая полученные выражения, можно

заметить, что так как  $|1-in| = |1+in|$ , то  $A_2 \approx B_2$ , поэтому мы можем положить  $B_2 \approx 0$ . Исходя из этого

допущения, остальные соотношения запишутся довольно легко:  $\left\{ \begin{matrix} A_1 = \frac{(1-in)(i+n)e^{k_2 a} A_3}{4n} \\ B_1 = \frac{(1-in)(n-i)e^{k_2 a} A_3}{4n} \end{matrix} \right\}$ . Таким

образом, для  $T$  имеем:  $T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{4ne^{-k_2 a}}{(1-in)(i-n)} \right|^2 = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-2k_2 a}$ . Подставляя в полученное ранее

соотношение для  $k$ , приведём это уравнение к следующему виду:  $T = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-2a\sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar}}}$ , или

$T = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-\frac{a}{\hbar}\sqrt{8m(U_0-E)}}$ .  $R$  же легко определить из соотношения  $T + R = 1$ :  $R = 1 - \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-\frac{a}{\hbar}\sqrt{8m(U_0-E)}}$ , или

$R = \frac{(1+n^2)^2 - 16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-\frac{a}{\hbar}\sqrt{8m(U_0-E)}}$ . Если коэффициент пропускания не слишком мал, то есть

$\frac{a}{\hbar}\sqrt{8m(U_0-E)} \leq 1$ , мы можем оценить ширину барьера, при которой сквозь него будут проникать

частицы:  $\sqrt{8m(U_0-E)} \leq \frac{\hbar}{a}$ ,  $a \leq \frac{\hbar}{\sqrt{8m(U_0-E)}}$ . Подставляя численные значения, получим  $a \approx 10^{-10}$  м.

Распространим теперь наши рассуждения на барьер произвольной формы. В этом случае барьер аппроксимируется малыми прямоугольными барьерами шириной  $a$ . Выражение для  $T$  в этом случае

будет иметь вид:  $T = T_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U_0(x) - E)} dx \right\}$ .

Возможность прохождения частицы через потенциальный барьер объясняет холодную эмиссию электронов из металла. Для удаления электронов из металла необходимо затратить некоторую определённую работу. Потенциальная энергия электронов вне металла больше, чем потенциальная энергия внутри металла, причём на границе раздела металл – вакуум потенциальная энергия резко возрастает. Внутри металла в устойчивом состоянии электроны занимают уровни с минимальной энергией. Если вблизи металла имеется электростатическое поле, которое стремится вырвать электроны из металла, то электроны будут стремиться покинуть металл. Это явление называется холодной эмиссией электронов. В рамках классической механики объяснить его невозможно, так как поле в металл не проникает, то изменение потенциальной энергии возможно лишь вне металла, а чтобы покинуть металл электроны должны

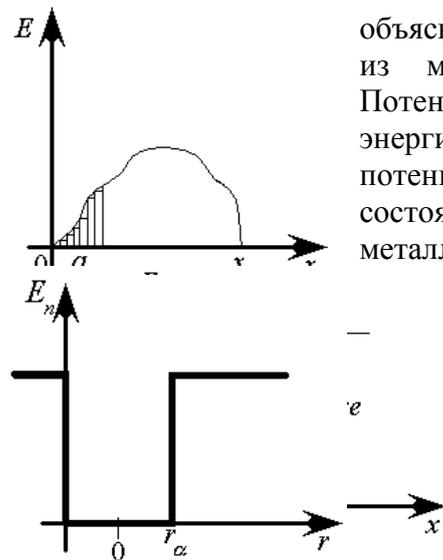


Рис. 45

преодолеть потенциальный барьер, но их энергия меньше высоты барьера, поэтому частицы за него проникнуть не могут. Считалось, что электрическое поле понизит высоту потенциального барьера и электроны смогут выходить из металла. Но тогда тока эмиссионных электронов будет достаточно большой, а экспериментально это не наблюдалось. Таким образом, это явление объясняется туннельным эффектом. Тогда коэффициент пропускания такого барьера будет пропорционален

$$T \propto \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_2} \sqrt{2m(U_0(x) - E)} dx\right\}, \quad \text{где } U(x) = U_0 - eEx. \quad \text{Здесь } \varepsilon \text{ — напряжённость внешнего}$$

электрического поля. Очевидно, что плотность тока должна быть пропорциональна коэффициенту пропускания барьера:  $j \propto T$ . Таким образом, плотность определяется по экспоненциальному закону:

$$j \propto T \propto \exp\left\{(c\varepsilon)^{\frac{3}{2}}\right\}. \quad \text{Когда мерили зависимость } j(\varepsilon), \text{ получилось хорошее согласие с теорией.}$$

Ещё одно явление, механизм которого стал понятен благодаря туннельному эффекту — это  $\alpha$  — распад. Так называется самопроизвольное (с точки зрения наблюдателя) вырывание  $\alpha$  — частиц из ядра. Существует уравнение  $\alpha$  — распада:  $dN = -\lambda N dt$ , где  $\lambda$  — некоторый коэффициент, а  $N$  — полное число частиц. Коэффициент  $\lambda$  принимает для различных веществ довольно широкий круг значений. Рассмотрим расстановку сил внутри атома. Известно из опыта, что при  $\alpha$  — распаде энергия вылетевших  $\alpha$  — частиц довольно мала. В то же время, внутри атома между протонами должна действовать колоссальная сила Кулона, которая стремится разорвать атом. Тем не менее, атом сохраняет свою целостность благодаря силам, которые получили название ядерных. Эти силы весьма короткодействующие, но на межнуклонном расстоянии их оказывается достаточно, чтобы «побороть» силы Кулона. Поэтому потенциальная энергия взаимодействия частиц в ядре будет отрицательной. В то же время, при незначительном удалении от центра атома, в ход вступает сила Кулона. Её действие на таких расстояниях полностью нейтрализует действие ядерных сил. Поэтому потенциальная энергия взаимодействия  $\alpha$  — частиц будет положительной. Таким образом, имеет место быть некоторая потенциальная яма (см. рис. 45). Здесь даны следующие приближения: стенки потенциальной ямы имеют строго вертикальный вид. На самом же деле края ямы несколько более пологи, но в нашем рассмотрении это не играет никакой роли. В классическом рассмотрении  $\alpha$  — частица не может преодолеть потенциальный барьер, так как обладает небольшой энергией. Если же считать, что основную роль в  $\alpha$  — распаде играют силы Кулона, то энергия вылетевших  $\alpha$  — частиц должна быть довольно высокой. На опыте же такой факт не имел места. Квантовая же механика определяет вероятность прохождения частицей потенциального барьера как не нулевую. То есть, частица преодолет потенциальный барьер, даже обладая небольшой энергией. На опыте как раз и наблюдались  $\alpha$  — частицы с небольшими энергиями.

#### § 4.4. Линейный гармонический осциллятор.

Частица, совершающая гармонические колебания, называется гармоническим осциллятором. В принципе, если амплитуда колебаний мала, их можно рассматривать как гармонические. Гармонические колебания, рассматриваемые в атомной физике — это колебания атомов в узлах кристаллической решётки, колебания атомов в молекуле и т. д. Как же зависит энергия линейного гармонического осциллятора от энергетического состояния атома, то есть от его главного квантового числа? Для того, чтобы ответить на этот вопрос, необходимо найти собственные значения оператора Гамильтона. Для линейного гармонического осциллятора он имеет вид:  $\hat{H} = \hat{E}_{кин} + \hat{E}_{пот}$ . Распишем теперь каждое слагаемое:

$$\hat{E}_{кин} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{E}_{пот} = \frac{k\hat{x}^2}{2}, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}; \quad k = \omega^2 m. \quad \text{Тогда оператор Гамильтона примет вид: } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\omega^2 m \hat{x}^2}{2}.$$

Чтобы найти собственные значения оператора Гамильтона, подставим ей в уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \left(E - \frac{\omega^2 m \hat{x}^2}{2}\right) \Psi = 0. \quad \text{Осуществим замену переменных: } \xi \equiv x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \Rightarrow x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad dx = d\xi \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},$$

$d^2x = d^2\xi \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ . После подстановки новых переменных, получим:

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} \frac{m\omega}{\hbar} + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \left(E - \frac{\hbar\omega}{2m\omega} \hbar \xi^2\right) \Psi = 0; \quad \frac{d^2\Psi}{d\xi^2} \frac{m\omega}{\hbar} + \left(\frac{2m}{\hbar^2} E - \frac{\hbar\omega}{\hbar} \xi^2\right) \Psi = 0.$$

$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} \frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m\omega}{\hbar} \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2\right) \Psi = 0$ . Введём обозначение:  $\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}$ . Тогда уравнение Шредингера примет

вид:  $\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2) \Psi = 0$  (1). Решим это уравнение. Получим выражение для  $\Psi$  при  $x \rightarrow \infty$ . В данном

случае можно пренебречь во втором слагаемом первым слагаемым. В итоге получится уравнение:

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + \xi^2 \Psi = 0. \text{ Решение данного уравнения таково: } \Psi_\infty = e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \text{ Волновую функцию } \Psi \text{ на всей}$$

области определения  $x$  будем искать в виде:  $\Psi = v\Psi_\infty = ve^{-\frac{\xi^2}{2}}$ , где  $v$  – некоторая функция. Чтобы  $\Psi$

было конечным,  $v$  не должно расти быстрее, чем  $e^{\frac{\xi^2}{2}}$ . Подставляя данный вид решения в уравнение (1),

получим:  $v'' - 2\xi v' + (\lambda - 1)v = 0$ . Будем искать функцию  $v$  в виде полинома:

$$v(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots + a_k\xi^k + \dots \quad \text{Подставляем полином в уравнение для } v:$$

$$v' = a_1 + 2a_2\xi + \dots + a_k k \xi^{k-1} + \dots = \sum_{k=1}^{\infty} k a_k \xi^{k-1}, \quad v'' = a_2 + \dots + a_k k(k-1) \xi^{k-2} + \dots = \sum_{k=2}^{\infty} k a_k \xi^{k-2}.$$

$$\sum_{k=2}^{\infty} k a_k \xi^{k-2} - 2\xi \sum_{k=1}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = 0. \text{ Данный многочлен будет равен нулю только в том случае,}$$

если коэффициенты при одинаковых степенях  $\xi$  равны нулю:  $(\lambda - 1)a_k + 2ka_k + a_{k+2}(k+2)(k+1) = 0$ . Из

$$\text{этой формулы получается рекуррентное соотношение для коэффициентов } a_k: a_{k+2} = \frac{(2k - \lambda + 1)}{(k+2)(k+1)} a_k \quad (2).$$

Рассмотрим, к чему стремиться отношение  $\frac{a_{k+2}}{a_k}$  при  $k \rightarrow \infty$ :

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = \frac{(2k - \lambda + 1)}{(k+2)(k+1)} = \frac{2k}{k^2 + 3k + 2} \approx \frac{2}{k + 3 + \frac{2}{k}} \approx \frac{2}{k}. \text{ Это значит, что при } k \rightarrow \infty \quad v \propto e^{\xi^2}. \text{ Действительно,}$$

разложим экспоненту в ряд Тейлора и посмотрим на поведение коэффициентов ряда при больших  $k$ .

$$e^{\xi^2} = 1 + \xi^2 + \frac{\xi^4}{2!} + \frac{\xi^6}{3!} + \dots + \frac{\xi^k}{\left(\frac{k}{2}\right)!} + \frac{\xi^{k+2}}{\left(\frac{k}{2} + 1\right)!} + \dots = 1 + \xi^2 + \dots + b_k \xi^k + b_{k+2} \xi^{k+2} + \dots; \quad \text{таким образом,}$$

$$\frac{b_{k+2}}{b_k} = \frac{\left(\frac{k}{2}\right)!}{\left(\frac{k}{2} + 1\right)!} = \frac{\left(\frac{k}{2}\right)!}{\left(\frac{k}{2} + 1\right) \left(\frac{k}{2}\right)!} = \frac{2}{k+2} \approx \frac{2}{k}. \text{ Итак, } v \propto e^{\xi^2}. \text{ Оборвём теперь ряд на члене с номером } k \text{ и}$$

переобозначим  $k$  в  $n$ . Мы можем сделать так, если  $a_n \neq 0$ , а  $a_{n+2} = 0$ . Это достигается в том случае, когда  $2n - \lambda + 1 = 0$  (следует из рекуррентного соотношения),  $\lambda_n = 2n + 1$ . Возвращаясь к значению  $\lambda_n$ ,

получим:  $\lambda_n = \frac{2E_n}{\hbar\omega} = 2n + 1$ . Отсюда  $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ . Минимальная энергия, которой может обладать

квантовая частица, как следует из этого соотношения, будет  $E_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2}$ . Эта энергия называется энергией

вакуума. Таким образом, квантовомеханическая частица не может находиться в состоянии покоя. Иначе это противоречило бы соотношению неопределённостей. Наличие этой минимальной энергии доказывалось экспериментально. Доказательство существования минимальной энергии было проведено в экспериментах по рассеянию света кристаллами. Если с уменьшением температуры амплитуда колебания атома уменьшается и стремится к нулю, то в соответствии с законами классической механики, начиная с некоторой температуры, рассеяние света должно вообще прекращаться. В квантовой механике амплитуда колебаний атома должна стремиться не к нулю, а к некоторому предельному значению, обусловленному наличием нулевой энергии. Поэтому при понижении температуры, интенсивность рассеяния будет стремиться к некоторому пределу, что и наблюдалось в опыте.

Найдём теперь собственные функции. Из выражения (2) следует, что чётность функции  $v(x)$  совпадает с  $k$ . Таким образом,  $v_n(x) = a_n \xi^n + a_{n-2} \xi^{n-2} + \dots + \begin{cases} a_1 \xi, & n - \text{нечётное} \\ a_0, & n - \text{чётное} \end{cases}$ ,  $\lambda_n = 2n + 1$ . Положим, что

$a_n = 2^n$ . Тогда остальные коэффициенты определим через рекуррентное соотношение:  $a_k = \frac{(k+2)(k+1)}{(2k-\lambda+1)} a_{k+2} = \frac{(k+2)(k+1)}{2k-2n}$ , с учётом выражения  $k = n-2$ , получим:

$$a_{n-2} = a_n \frac{n(n-1)}{-4} = -\frac{2^{n-2} n(n-1)}{1!}. \quad \text{Аналогично,} \quad a_{n-4} = a_{n-2} \frac{(n-2)(n-3)}{-2 \cdot 4} = -\frac{2^{n-4} n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}.$$

Полином, в котором  $a_n = 2^n$ , а  $\lambda_n = 2n + 1$ , называется полиномом Эрмита:

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n - \frac{(2\xi)^{n-2} n(n-1)}{1!} + \frac{(2\xi)^{n-4} n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} - \dots$$

Из свойств полинома Эрмита следует, что  $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$ . Тогда волновая функция  $\Psi_n$ , принадлежащая собственному значению  $E_n$

может быть представлена в виде:  $\Psi_n = c_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$ , где  $\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ . Коэффициент  $c_n$  находится из

условия нормировки:  $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(x) dx = c_n \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n^2(\xi) d\xi = 1$ . Отсюда  $c_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} (2^n n! \sqrt{\pi})^{\frac{1}{2}}$ . Тогда

волновая функция окончательно примет вид:  $\Psi_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} (2^n n! \sqrt{\pi})^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$ . Итак, мы получили

выражения для собственных функций оператора Гамильтона.

#### § 4.5. Движение в поле центральных сил.

Рассмотрим движение электрона в центрально-симметричном кулоновском поле ядра. Уравнение Шредингера для частицы в центрально-симметричном поле имеет вид:  $\nabla^2 \Psi + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) [E - E_n(r)] \Psi = 0$ .

Будем рассматривать для удобства движение частицы в сферической системе координат. Лапласиан в такой системе координат имеет вид:  $\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\nabla_{\theta,\varphi}^2}{r^2}$  (1), где

$$\nabla_{\theta,\varphi}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (1).$$

Решение уравнения Шредингера будем искать в виде:

$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi)$ . Подставляя решение в уравнение Шредингера, получим:

$$\frac{Y}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_n(r)) R Y = -\frac{1}{r^2} \nabla_{\theta,\varphi}^2 Y.$$

Разделяя переменные, можно записать:

$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_n(r)) R = -\frac{1}{Y} \frac{\nabla_{\theta, \varphi}^2 Y}{r^2}$ . Так как обе части этого уравнения входят независимые

переменные и эти части равны, то мы должны положить

$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_n(r)) R = -\frac{1}{Y} \frac{\nabla_{\theta, \varphi}^2 Y}{r^2} = \lambda = const$ . Таким образом, это уравнение распадается на

два:  $\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_n(r)) R = \lambda$  (2) и  $-\frac{1}{Y} \frac{\nabla_{\theta, \varphi}^2 Y}{r^2} = \lambda$  (3). Решение уравнения (2) зависит от

самого поля. Эта зависимость обуславливается наличием в уравнении  $E_n(r)$ . Рассмотрим поэтому сначала решение уравнения (3). Распишем лапласиан, связанный с поворотом тела в пространстве:

$-\frac{1}{Y} \nabla_{\theta, \varphi}^2 Y = -\frac{1}{Y r^2} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right) = \lambda$ . Производя некоторые простейшие

преобразования, получим:  $\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \lambda Y r^2 = 0$ . Так как  $\lambda r^2$  не зависит ни от  $\theta$ , ни

от  $\varphi$ , то мы можем ввести некоторое переобозначение и рассматривать в дальнейшем это произведение

как константу:  $\lambda' \equiv \lambda r^2$ . Тогда  $\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \lambda' Y = 0$ . Это уравнение допускает

разделение переменных. Будем искать его решение в виде:  $Y(\theta, \varphi) = P(\theta) \Phi(\varphi)$ . Подставляя его в

последнее уравнение, получим:  $\frac{P(\theta)}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{\Phi(\varphi)}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial P(\theta)}{\partial \theta} \right) + \lambda' P(\theta) \Phi(\varphi) = 0$ . Разделим на

$\frac{P(\theta) \Phi(\varphi)}{\sin^2 \theta}$ :  $\frac{\sin \theta}{P(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial P(\theta)}{\partial \theta} \right) + \lambda' \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} = \mu^2$ , где  $\mu^2$  – константа разделения.

Разобьём это уравнение на две части:  $\frac{\sin \theta}{P(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial P(\theta)}{\partial \theta} \right) + \lambda' \sin^2 \theta - \mu^2 = 0$  и  $-\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} - \mu^2 = 0$ ,

$\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \mu^2 = 0$ . Запишем систему  $\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \mu^2 = 0 \quad (4) \\ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial P(\theta)}{\partial \theta} \right) + \left( \lambda' - \frac{\mu^2}{\sin^2 \theta} \right) P(\theta) = 0 \quad (5) \end{array} \right.$ . Решение

первого уравнения данной системы имеет вид:  $\Phi(\varphi) = A e^{i\mu\varphi} + B e^{-i\mu\varphi}$ . Из требования однозначности

решения следует, что  $\mu$  должно быть любым положительным или отрицательным числом. Поэтому все

собственные функции дифференциального уравнения (4) могут быть представлены формулой:

$\Phi(\varphi) = C e^{im\varphi}$ , где  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Постоянная  $C$  находится из условия нормировки и равна  $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ .

Таким образом,  $\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$ . Решая уравнение (5), перейдём к новым координатам:  $\xi = \cos \theta$ . Тогда

$d\xi = -\sin \theta d\theta$  и  $\sin \theta = \sqrt{1 - \cos^2 \theta} = \sqrt{1 - \xi^2}$ ;  $d\theta = -\frac{d\xi}{\sqrt{1 - \xi^2}}$ . С учётом последних преобразований

перепишем уравнение (5):  $\frac{d}{d\theta} \left[ (1 - \xi^2) \frac{dP}{d\xi} \right] + \left( \lambda' - \frac{\mu^2}{\sqrt{1 - \xi^2}} \right) P = 0$ . Чтобы привести данное уравнение к

стандартному виду введём обозначение:  $\lambda' = l(l+1)$ , где  $l$  – неотрицательное целое число. Тогда

решением данного уравнения будет присоединённый полином Лежандра:

$P_l^m = \frac{1}{2^l l!} (1 - \xi^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}} (\xi^2 - 1)^l$ . Причём, при заданном  $l$ ,  $m$  может принимать только  $2l+1$

значение:  $m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, 2, \dots, l-1, l$ . Волновая функция должна удовлетворять условию

нормировки:  $\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} Y^* Y d\varphi = 1$ ;  $\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} P_m^l(\xi) P_m^{l*}(\xi) \frac{1}{2\pi} e^{im\varphi} e^{-im^*\varphi} d\varphi = 1$ . Так как  $\xi$  и  $\theta$  связаны

однозначно, то мы можем переписать последний интеграл в виде:

$\int_0^\pi P_l^m(\cos \theta) P_l^n(\cos \theta) \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} e^{im\varphi} e^{-im^*\varphi} d\varphi = 1$ . Выражение, стоящее под внутренним интегралом, не

зависит от  $\theta$ , поэтому мы можем вычислять каждый интеграл по отдельности и полученные значения

перемножить. Известно, что  $\int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} e^{i\varphi(m-m^*)} d\varphi = \delta_{mm^*}$ , где  $\delta_{mm^*}$  – символ Кронекера. Второй интеграл даёт

значение  $\int_0^\pi P_l^m(\cos \theta) P_l^n(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}$ . Собственная функция уравнения (5) запишется в

виде:  $Y_l^m(\theta, \varphi) = C_l^m P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$ . Тогда с помощью условия нормировки, мы можем записать:

$C_l^m = \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}}$ . Подставляя данное значение в последнюю формулу, получим:

$Y_l^m(\theta, \varphi) = \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$ . Мы получили угловую функцию, описывающую движение

частиц в центрально – симметричном поле.

Для получения энергий стационарных состояний необходимо знать момент импульса системы. Это есть прямое следствие правил квантования. Рассмотрим моменты импульса частицы при движении в

поле центральных сил:  $\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$ ;  $\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$ ;  $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$ . Имеют место

следующие правила коммутации:  $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$ ,  $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x$ ,  $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$ . Таким образом,

нельзя одновременно указать два различных значения момента импульса. Однако можно показать, что

$[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = [\hat{L}_y, \hat{L}^2] = [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$ . Это значит, что любая из проекций момента импульса и квадрат момента

импульса могут иметь одновременно определённые значения. Так как рассматриваемое поле сферически

симметрично, перейдём к сферической системе координат:  $\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases}$ . Тогда,

$\hat{L}_x = -\frac{\hbar}{i} \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \text{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$ ;  $\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \text{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$ ;  $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ , а  $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2$ . Найдём

собственные значения операторов  $\hat{L}_z$  и  $\hat{L}^2$ . Для этого подействуем ими на функции  $\Phi(\varphi)$  и  $Y_{\theta, \varphi}$

соответственно:  $\hat{L}^2 Y_{\theta, \varphi} = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2 (Y_{\theta, \varphi})$  или, с помощью уравнения (3),  $\hat{L}^2 Y_{\theta, \varphi} = -\hbar^2 (-\lambda' Y_{\theta, \varphi})$ . Собственной

функцией оператора  $\hat{L}^2$  является функция  $Y_{\theta, \varphi}$ , то есть угловая часть волновой функции, а его

собственным значением –  $\lambda' \hbar^2$ . Вспоминая наше обозначение для  $\lambda'$ :  $\lambda' = l(l+1)$ . Тогда,

$\hat{L}^2 = \hbar^2 \lambda' = l(l+1) \hbar^2$ . Таким образом, мы нашли собственное значение для оператора  $\hat{L}^2$ . Посчитаем

теперь собственное значение для оператора  $\hat{L}_z$ :  $\hat{L}_z \Phi(\varphi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi}$ . Подставляя значение функции

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi},$$

получим:

$$\hat{L}_z \Phi(\varphi) = \frac{\hbar}{i\sqrt{2\pi}} \frac{\partial}{\partial \varphi} e^{im\varphi} = \frac{\hbar \cancel{i} m}{\cancel{i} \sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} = \frac{\hbar m}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} = \hbar m \Phi(\varphi). \text{ Таким образом, } \hat{L}_z = \hbar m. \text{ Так как оператор } \hat{L}_z$$

имеет строго определённое значение, то операторы  $\hat{L}_x$  и  $\hat{L}_y$  конкретных значений не имеют и иметь не будут. Отметим также, что так как исходные функции, для которых искались собственные значения не зависят от вида центрально – симметричного поля, то и собственные значения и функции для всех таких полей будут одинаковы.

В атомной физике часто говорят, что момент импульса частицы равен  $\lambda$ , так как все функции нормируются на  $\hbar$  или на  $\hbar^2$ . Значение  $l$  называют орбитальным квантовым числом, то есть числом, которое характеризует момент импульса электрона. В зависимости от того, какое значение принимает орбитальное квантовое число, состояние движения частицы с различными моментами импульса имеет разные названия.

$l$	0	1	2	3	4	5
Состояние	S	P	D	F	G	H

Число  $m$  называют магнитным квантовым числом. Им определяется поведение частицы в магнитном поле.

## Глава V. Теория атома водорода и водородоподобных атомов.

### § 5.1. Стационарные состояния.

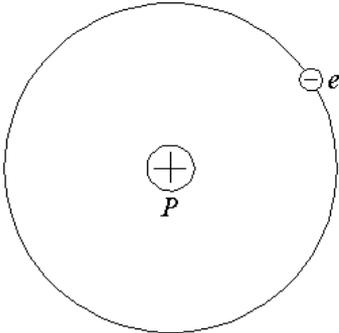


Рис. 46

Стационарными называют состояния, энергия системы в которых не зависит от времени. Таким образом, чтобы найти энергии в этих состояниях, необходимо решить стационарное уравнение Шредингера. Рассмотрим потенциальную энергию частицы:  $E_n = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ . Решим уравнение

Шредингера для потенциальной составляющей:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0. \text{ Введём следующие}$$

обозначения:  $A = -\frac{2m}{\hbar^2}$ ;  $2B = \frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ . Осуществим замену переменных:  $\rho = 2r\sqrt{A}$ ,  $r = \frac{\rho}{2\sqrt{A}}$ ;  $dr = \frac{d\rho}{2\sqrt{A}}$ .

Тогда, после подстановки новых переменных наше уравнение примет вид:

$$\left( \frac{4A}{\rho^2} \right) \left( 2\sqrt{A} \frac{d}{d\rho} \right) \left[ \left( \frac{\rho^2}{4A} \right) \left( 2\sqrt{A} \frac{dR}{d\rho} \right) \right] + \left[ -AE + \frac{2B2\sqrt{A}}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0. \text{ Упростим данное выражение:}$$

$$\left( \frac{4A}{\rho^2} \right) \left( \cancel{2\sqrt{A}} \frac{d}{d\rho} \right) \left[ \left( \frac{\rho^2}{\cancel{4A}} \right) \left( \cancel{2\sqrt{A}} \frac{dR}{d\rho} \right) \right] + 4A \left[ -\frac{E}{4} + \frac{B}{\rho\sqrt{A}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0. \text{ Произведём дифференцирование:}$$

$$\left( \frac{4A}{\rho^2} \right) \left[ 2\rho \frac{dR}{d\rho} + \rho^2 \frac{d^2 R}{d\rho^2} \right] + 4A \left[ -\frac{E}{4} + \frac{B}{\rho\sqrt{A}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0. \text{ Раскроем скобки и запишем в виде}$$

обыкновенного дифференциального уравнения:

$$\cancel{4A} \cancel{\rho^2} 2\rho \frac{dR}{d\rho} + \cancel{4A} \cancel{\rho^2} \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \cancel{4A} \left[ -\frac{E}{4} + \frac{B}{\rho\sqrt{A}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0, \quad R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left[ -\frac{E}{4} + \frac{B}{\rho\sqrt{A}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0$$

(1). Решение данного уравнения будем искать по тому же алгоритму, что и для гармонического осциллятора.

1. Рассмотрим сначала асимптотическое решение при  $\rho \rightarrow \infty$ . Тогда уравнение (1) преобразуется к виду:  $R'' - \frac{E}{4}R = 0$ . Решением его, очевидно, будет функция

$R|_{\rho \rightarrow \infty} = Ce^{-\frac{\rho}{2}} + C_1 e^{\frac{\rho}{2}}$ . Чтобы решение было ограничено на бесконечности, необходимо положить  $C_1 = 0$ . Таким образом,  $R|_{\rho \rightarrow \infty} = Ce^{-\frac{\rho}{2}}$ .

2. Теперь рассмотрим асимптотику при  $R \rightarrow 0$ . Пренебрегая членами со степенями  $-1$ , получим из уравнения Шредингера:  $R'' + \frac{2}{\rho}R' - \frac{l(l+1)}{\rho^2}R = 0$ . Решение данного уравнения будем искать в

виде:  $R \propto \rho^\gamma$ . Подставляем предполагаемое решение в преобразованное уравнение Шредингера.

Получим:  $\gamma(\gamma-1)\rho^{\gamma-2} + \frac{2}{\rho}\gamma\rho^{\gamma-1} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\rho^\gamma = 0$ ,  $\gamma(\gamma-1)\rho^{\gamma-2} + 2\gamma\rho^{\gamma-2} - l(l+1)\rho^{\gamma-2} = 0$ ,

$\gamma(\gamma-1)\rho^{\gamma-2} + 2\gamma\rho^{\gamma-2} - l(l+1)\rho^{\gamma-2} = 0$ ;  $\gamma(\gamma-1) + 2\gamma - l(l+1) = 0$ . Мы получили уравнение

относительно  $\gamma$ . Раскроем скобки, приведём его к стандартному виду и найдём решение.  $\gamma^2 - \gamma + 2\gamma - l(l+1) = 0$ ,  $\gamma^2 + \gamma - l(l+1) = 0$ . Решением этого алгебраического уравнения будет

$\gamma_{1,2} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + l^2 + l}$ . Или, так как  $\frac{1}{4} + l^2 + l = \left(l + \frac{1}{2}\right)^2$ ,  $\gamma_{1,2} = -\frac{1}{2} \pm \left(l + \frac{1}{2}\right) = \left\{ \begin{array}{l} l \\ -l-1 \end{array} \right\}$ . Если

$\gamma = -(l+1)$ , то  $R = \rho^{-(l+1)} = \frac{1}{\rho^{l+1}}$ . При  $\rho \rightarrow 0$ ,  $R \rightarrow \infty$ . Поэтому данное значение  $\gamma$  придётся

отбросить. Таким образом, остаётся решение такого вида:  $R|_{\rho \rightarrow 0} = C\rho^l$ .

Итак, у нас есть решения при асимптотическом стремлении  $\rho$  к нулю и к бесконечности. Тогда решение для радиальной составляющей волновой функции мы будем искать в виде произведения:

$R = ce^{-\frac{\rho}{2}}\rho^l v(\rho)$ . Здесь  $v(\rho)$  – некоторая функция, которая определяет поведение  $R$  в промежутке от нуля до бесконечности. Подставляем данный вид решения в уравнение (1). После взятия производных и упрощения, получим:

$$\rho v'' + [2(l+1) - \rho]v' + \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1\right)v = 0 \quad (2). \text{ Введём}$$

ограничения на функцию  $v(\rho)$ : она не должна на бесконечности расти быстрее, чем  $e^{\frac{\rho}{2}}$ , а в нуле должна либо обращаться в ноль, либо быть константой. Эти обстоятельства наводит на мысль, что функцию

$v(\rho)$  следует искать в виде полинома:  $v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$ . Подставим этот предполагаемый вид решения в

уравнение (2). Вычислим первую и вторую производные:  $v'(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^{k-1}$ ,  $v''(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-2}$ .

Тогда:

$$\begin{aligned} & \rho \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-2} + [2(l+1) - \rho] \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^{k-1} + \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1\right) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k = 0 \\ & \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-1} + 2(l+1) \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^{k-1} - \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^k + \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1\right) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k = 0 \\ & \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 - k\right) a_k \rho^k + \sum_{k=0}^{\infty} \rho^{k-1} a_k [k(k-1) + 2(l+1)k] = 0. \end{aligned}$$

Данный многочлен будет равен нулю только в том случае, когда коэффициенты при каждой степени  $\rho$  будут равны нулю. Запишем это условие:  $\left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 - k\right) a_k + a_{k+1} (k+1) [k + 2(l+1)] = 0$ .

Данное соотношение даёт рекуррентную формулу для коэффициентов  $a_k$ :

$$a_{k+1} = \frac{\left(l+1+k - \frac{B}{\sqrt{A}}\right)}{(k+1)[k+2(l+1)]} a_k. \quad \text{Оценим коэффициенты } a_k \text{ при } k \rightarrow \infty: \quad a_{k+1} = \frac{k}{k^2 + [2(l+1)+1]k} a_k,$$

$$a_{k+1} = \frac{1}{k + [2(l+1)+1]} a_k; \quad a_{k+1} = \frac{1}{k} a_k. \quad \text{Таким образом, } a_{k+1} \rightarrow 0 \text{ и } a_k > a_{k+1}. \text{ Тогда при каком-нибудь малом}$$

значении  $a_{k+1}$  многочлен можно оборвать:  $a_k \neq 0$ , а  $a_{k+1} = 0$ . Данное условие будет выполнено, если

$$\text{коэффициент при } a_k \text{ будет равен нулю: } l+1+k - \frac{B}{\sqrt{A}} = 0, \quad \frac{B}{\sqrt{A}} = l+1+k; \quad \frac{B^2}{A} = (l+1+k)^2. \text{ Вернёмся к}$$

$$\text{обозначениям } A \text{ и } B: \quad A = -\frac{2m}{\hbar^2}, \quad B = \frac{mze^2}{4\pi\epsilon_0}. \quad -\frac{m^2 z^2 e^4 \hbar^2}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^4 2mE} = (l+1+k)^2. \quad \text{Сократим:}$$

$$-\frac{m^2 z^2 e^4 \hbar^2}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^4 2mE} = (l+1+k)^2, \quad -\frac{mz^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 E} = (l+1+k)^2. \text{ Из этой формулы следует, что энергия зависит от}$$

$$l \text{ и } k. \text{ Введём следующее обозначение: } l+1+k = n. \text{ Тогда } E_n = -\frac{mz^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}, \text{ где } n = 1, 2, 3, \dots. \text{ Таким}$$

образом, решая уравнение Шредингера, мы нашли энергии водородоподобного атома, то есть нашли собственные значения оператора Гамильтона. То же самое значение для энергий мы получили, исходя только из постулатов Бора и правила квантования. Схема энергетических уровней будет совпадать со схемой энергетических уровней по Бору. Теория Бора не объясняет, почему главное квантовое число имеет своим первым значением 1. Квантовая же теория показывает, что при  $l=0$  и  $k=0$  минимально возможное значение главного квантового числа будет 1. Напомним, как называются числа  $l$ ,  $k$  и  $n$ .  $l$  – орбитальное квантовое число,  $k$  – радиальное квантовое число и  $n$  – главное квантовое число.

Теория Бора исходила из тех принципов, что электроны движутся в атоме по круговым орбитам по законам классической механики, но в противоречие классической электродинамике ускоренно движущиеся электроны не излучают. В квантовой теории интерпретация движения электронов иная. Вообще нельзя говорить о движении электронов по какой-либо траектории, то есть нельзя представить координаты электрона как функцию времени. Поэтому используется представление о состоянии движения электрона, описываемом той или иной волновой функцией. Причём состояние движения электрона не всегда имеет классический аналог. Например, рассмотрим состояние электрона, при котором  $l=0$ . Это значит, в силу правила квантования:  $mvr = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ , что так как скорость движения электрона отлична от нуля,  $r=0$ , то есть плечо не имеет длины. Это возможно в том случае, если электрон движется вдоль радиуса, то есть проходит на пути своего движения сквозь ядро.

## § 5.2. Атомы щелочных металлов.

Для атома водорода нахождение уровней энергий является несложной аналитической задачей. Если в атоме существуют несколько электронов, то решение уравнения Шредингера существенно усложняется. В настоящее время ни точного аналитического, ни точного численного решения ещё не получено. Существуют лишь приближённые решения.

Щелочные металлы в таблице Менделеева следуют за благородными газами, то есть их атомы содержат на один электрон больше, чем атомы инертных газов. Поэтому эти металлы легко ионизировать. Энергетическое строение атомов щелочных металлов близко к строению атома водорода. Если атом щелочного металла имеет  $z$  электронов, то  $z-1$  электрон образуют структуру, схожую с атомом инертного газа, называемую атомным остовом. Связь последнего электрона с остовом слабая, поэтому можно считать, что валентный электрон движется в эффективном поле атомного остова. Однако валентный электрон деформирует оболочку и искажает потенциальное поле кулоновских сил, в котором сам же и двигается. Поэтому потенциальная энергия валентного электрона может быть представлена в

виде:  $E_n(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r} + \frac{C_1}{r^2} + \frac{C_2}{r^3} + \dots \right)$ . Здесь слагаемые со степенью  $-2$  и выше образуют

поправку на влияние на искажение поля электроном. Ограничимся поправкой пропорциональной  $\frac{1}{r^2}$ .

Тогда уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции примет вид:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left( \frac{2m}{\hbar^2} E + \frac{2me^2}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{1}{r^2} \left[ l(l+1) - \frac{C_1 me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right] \right) R = 0.$$

Данное уравнение будет полностью совпадать с уравнением Шредингера, которое мы уже решили, если положить  $l(l+1) - \frac{C_1 me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = l'(l'+1)$ .

Раскрыв скобки и решив полученное квадратное уравнение относительно  $l'$ , получим:

$$l'^2 + l' - \left[ l(l+1) - \frac{C_1 me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right] = 0; \quad l' = -\frac{1}{2} \pm \left[ \frac{1}{4} + l^2 + l - \frac{C_1 me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Здесь  $l'$  должно быть больше нуля, иначе угловая часть волновой функции будет бесконечна. Тогда  $l' = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}(2l+1) \left[ 1 - \frac{2C_1 me^2}{(2l+1)^2 \pi\epsilon_0 \hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}}$ . Так как

электрон не очень сильно искажает кулоновское поле, то в подкоренном выражении можно разложить в ряд второе слагаемое, так как оно гораздо меньше единицы. Ограничимся только первым слагаемым:

$$\left[ 1 - \frac{2C_1 me^2}{(2l+1)^2 \pi\epsilon_0 \hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} = 1 - \frac{C_1 me^2}{(2l+1)^2 \pi\epsilon_0 \hbar^2}. \quad \text{Тогда} \quad l' = l \left[ 1 - \frac{C_1 me^2}{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right].$$

Размерность  $C_1$  – метр.  $\frac{C_1 me^2}{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$ , но  $\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = a_0$  – радиус первой боровской орбиты. Тогда  $\frac{C_1}{a_0 \left( l + \frac{1}{2} \right)^2} \ll 1$ . Здесь

$a_0 \left( l + \frac{1}{2} \right)^2$  – среднее расстояние от ядра до ближайшего электрона имеет порядок  $\ll 10^{-11}$  м. Таким

образом, поправка действительно мала. Тогда для атома щелочного металла главное квантовое число

будет:  $n' = l' + k + 1 = k + 1 + l - \frac{lC_1 me^2}{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$ . Введём обозначение:  $\sigma(l) = -\frac{lC_1 me^2}{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$ .

Следовательно,  $n' = n + \sigma(l)$ . Тогда выражение для уровней энергии щелочного металла примет вид:

$$E_{l,n} = -\frac{mz_{\text{эф}}^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 (n + \sigma(l))^2}, \quad \text{где } z_{\text{эф}} = z - 1, \text{ а } z - \text{ заряд ядра.}$$

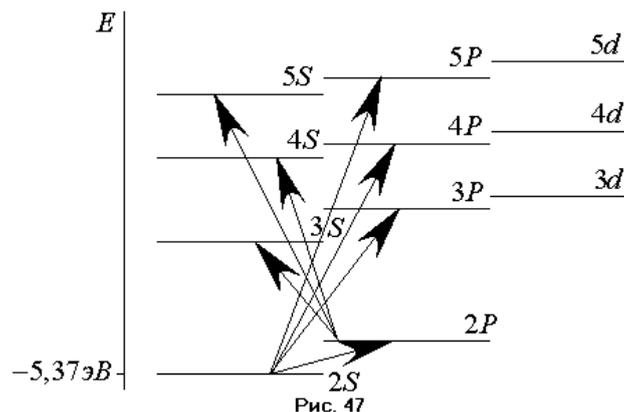


Рис. 47

Рассмотрим энергетическую структуру  $Li$ . Литий – щелочной металл. В таблице Менделеева он идёт сразу за инертным газом гелием, поэтому имеет соответственно на один электрон больше, чем  $He$ . Литий обладает тремя электронами, два из которых образуют вместе с ядром устойчивую структуру, – атомный остов, а на внешнем энергетическом уровне расположен лишь один валентный электрон. Главное квантовое число лития в основном состоянии равно двум:  $n=2$ ; основное состояние –  $2S$ . Рассмотрим главное квантовое число:  $n = k + l + 1$ . Тогда, если  $k=0$ , то  $l = n - 1, n - 2, \dots, 0$ . Тогда  $l$  в состоянии  $2S$

равно 0, но из последней формулы следует, что  $l$  может быть также равно 1. Это даёт состояние  $2p$ .

Энергия в этом состоянии больше, чем для случая  $l=0$ , так как  $E \propto \frac{1}{(n+\sigma_l)^2}$ ,  $\sigma_l$  здесь меньше нуля.

Очевидно, что для  $n=2$   $l \neq 2$ , поэтому состояние  $2d$  невозможно. Невозможны также состояния  $2f$  и  $3f$ . Переходы между различными состояниями осуществляются по правилам отбора: в атоме возможны только те оптические переходы, в которых дипольный момент перехода не равен нулю. Под дипольным моментом  $D$  понимают переход между квантовыми уровнями с числами  $m$  и  $n$ :  $D_{mn} = e \int \Psi^* |r_m - r_n| \Psi dV$ , где  $r_m, r_n$  –

Правило отбора:  $\Delta n$  принимает любое значение, а  $\Delta l$  – только  $\pm 1$ . В соответствии с данным правилом, для лития существует переход из  $2S$  в  $p$  состояния. Такой переход называют главным, а спектральные линии, полученные при таком переходе – главной серией:  $nS \rightarrow mp$ . Для лития:  $n=2, m=n, n+1, \dots$ . Не запрещённые правилами отбора переходы  $np \rightarrow mS$ ,  $n = const$  дают группу спектральных линий, соответствующую этим переходам, которую называют резкой серией. Не запрещены также переходы  $np \rightarrow md$ ,  $m = n+1, n+2, \dots$ . Для лития  $n=2$ ; для натрия  $n=3$ . Данные переходы образуют диффузную серию.

Спектральным разрешением спектрального прибора называют величину  $R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$ , где  $\lambda$  – средняя наблюдаемая длина волны, а  $\Delta\lambda$  – интервал наблюдаемых волн. Исторически первыми появились приборы с низким  $R$ . Поэтому спектр щелочных металлов представлялся набором синглетов. С усовершенствованием спектральной техники, было обнаружено, что каждая «синглетная» линия расщепляется, в свою очередь, на дублет. Причём это расщепление имело следующие закономерности: у линий главной серии расстояние между линиями дублета не являются постоянными, а изменяются от дублета к дублету. У линий диффузной серии расстояние между «расщеплёнными» линиями оставалось одинаковым для всех дублетов; все линии наблюдались нечётко. У линий резкой серии расщепление оставалось постоянным, и линии были видны чётко. Данные факты были объяснены следующим образом.

Было выдвинуто предположение, что энергия состояния должна зависеть ещё от какого-либо квантового числа и это изменение энергии уровней должно быть маленьким. Поэтому предположили, что электрон в атоме имеет ещё одну дополнительную степень свободы, и если обозначить квантовое число, соответствующее этой дополнительной степени свободы  $m_s$ , то энергия уровня должна зависеть от квантовых чисел  $n, l, m_s$ . Таким образом, приписывают электрону внутреннюю степень свободы. Она является собственным механическим моментом импульса; называется спином. Этот момент импульса должен квантоваться. Так как  $L_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ , то, по аналогии,  $L_s = \hbar \sqrt{S(S+1)}$ , где  $S$  – спиновое

квантовое число. Оно может принимать значения:  $S = \frac{1}{2}$ . Запишем проекцию момента импульса на различные направления:  $L_{l_z} = m_l \hbar$ . Тогда по аналогии  $L_{s_z} = m_s \hbar$ , где  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ . Для объяснения

экспериментальных фактов наряду со спином допускается наличие у электрона магнитного момента, который связывают со спином соотношением:  $\mu_s = \frac{q}{m} L_s$ , где  $\mu_s$  – магнитный момент электрона.

Относительно некоторого произвольного направления магнитный момент может быть ориентирован двумя способами:  $\mu_{s_z} = \left(\frac{q}{m}\right) m_s \hbar = \frac{q\hbar}{m} \pm \frac{1}{2}$ , то есть существуют только два значения магнитного момента.

Это как раз и объясняет дублетный характер спектров щелочных металлов, так как наличие магнита приводит к дополнительному взаимодействию в атоме, называемому спин-орбитальным взаимодействием. Оно обусловлено взаимодействием магнитных моментов во внешнем магнитном поле:

$E_{nom} = -\mu_s B_{ext}$ . Существует три различных объяснения процесса данного взаимодействия:

1. Электрон при движении вокруг ядра создаёт круговой ток. Этот ток порождает магнитное поле, которое взаимодействует с магнитным же полем электрона. Данное объяснение обладает внутри себя некоторой неувязкой. Дело в том, что нельзя определить магнитное поле внутри электрона.
2. Движущийся магнитный момент обладает дипольным моментом:  $\vec{d}_l = -\vec{v} \frac{\vec{\mu}}{c^2}$ . Энергия взаимодействия этого дипольного момента с кулоновским полем ядра равна  $E_{ном} = -\vec{d}_l \vec{\epsilon}_{кул} - \left[ \vec{v} \times \frac{\vec{\mu}}{c^2} \right] \vec{\epsilon}_{кул}$ .
3. Перейдём в систему координат, связанную с электроном, движущимся вокруг ядра. В этой системе координат электрон покоится, а ядро движется вокруг электрона. При своём движении положительно заряженное ядро создаёт в точке нахождения электрона магнитное поле, которое приводит к дополнительному энергетическому взаимодействию:  $E_{ном} = -\vec{\mu} \vec{B}_{эфф}$ .

Эта энергия называется энергией спин-орбитального взаимодействия и зависит от проекций  $\vec{B}$  и  $\vec{\mu}$ .

Пусть орт  $\vec{e}_z \parallel \vec{B}$ . Тогда потенциальная энергия может принимать два значения:  $E_{ном} = \left( \pm \frac{1}{2} \frac{qh}{m} \right) \vec{B}_{эфф}$ .

Таким образом,  $E_{ном}$  можно либо прибавить, либо отнять, то есть получается два уровня энергии.

Расщепление уровня энергии, вызванное спин-орбитальным взаимодействием называется тонким

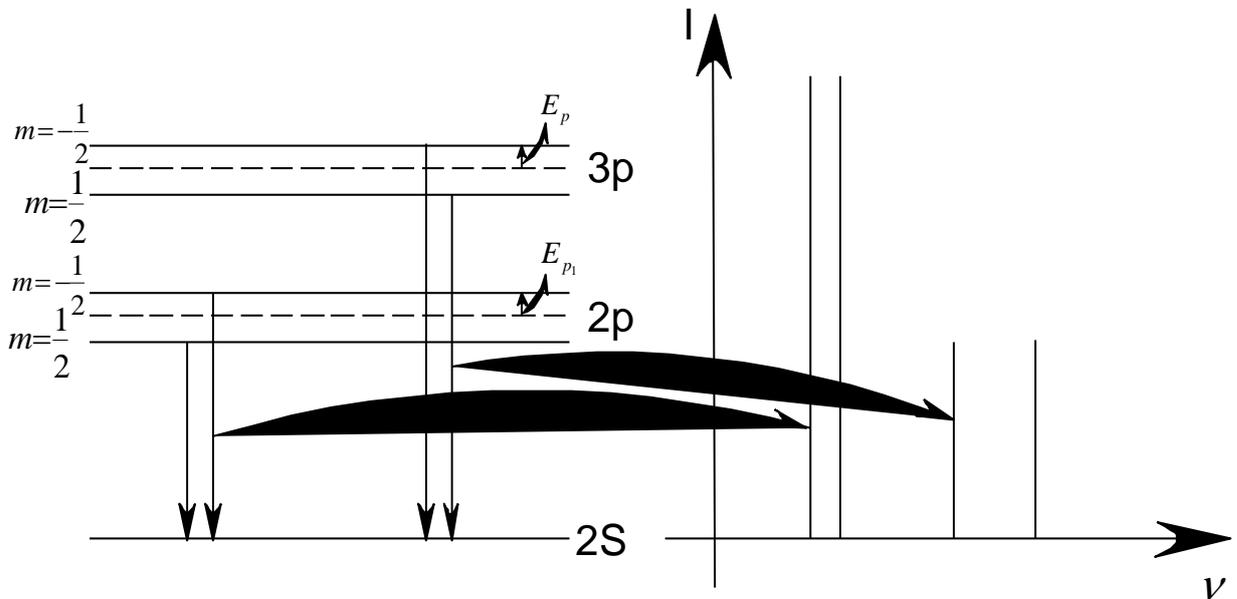


Рис. 48

расщеплением, а структура спектральных линий, соответствующая переходам между расщеплёнными уровнями, называется тонкой структурой. Но не все энергетические уровни имеют тонкую структуру. Например, энергетические уровни  $S$  не имеют тонкой структуры. Их называют синглетными. Тонкая структура полностью объясняет спектр щелочного металла: все уровни, исключая  $S$ , дублетны, а  $S$  — синглетны.

Энергия спин-орбитального взаимодействия очень мала, поэтому при оптических переходах ориентировка спина не меняется. В связи с этим применяется правило отбора:  $\Delta m_s = 0$ .

Рассмотрим теперь в связи с выше полученными данными структуру энергетических уровней атома лития.

1. Главная серия:  $nS \rightarrow mp$ .

Здесь  $E_p \neq E_{p1}$ , так как зависят они от главного квантового числа. Поэтому для различных главных квантовых чисел расстояние между дублетными линиями будет различно. Распределение интенсивности излучения в зависимости от частоты носит характер, представленный на рисунке 48.

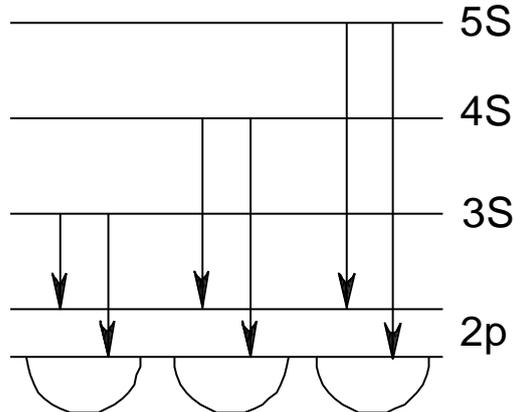


Рис. 49

5S Интенсивность зависит от числа перехода переходов с данного энергетического уровня. Очевидно, что наибольшее число переходов осуществляется между близлежащими уровнями.

4S 2. Резкая серия.  $np \rightarrow mS, n = const$ .

Расстояние между компонентам дублета постоянно, так как для каждой линии оно обусловлено расщеплением только одного уровня  $2p$ .

3S 3. Диффузная серия.  $np \rightarrow md, n = const$ .

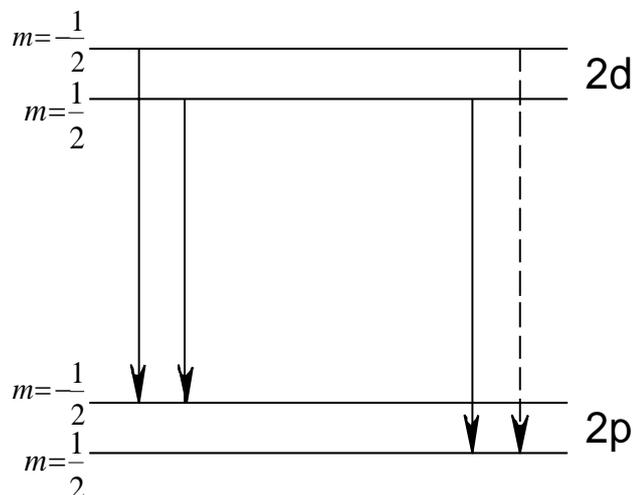


Рис. 50

Расщепление уровней  $d$  много меньше, чем расщепление уровня  $2p$ . Фактически при переходах с уровней  $d$  на уровень  $2p$  получаются три линии, поскольку изображённый штриховой линией (см. рис. 50) переход запрещён правилами отбора. Однако две линии, получающиеся при переходе с двух расщеплённых уровней  $d$  на один и тот же уровень  $p$ , расположены весьма близко друг к другу и практически сливаются. Благодаря этому они воспринимаются как размытая линия. Расщепление же между парой линий и одиночной линией весьма значительно. Поэтому в целом все эти три линии воспринимаются как дублет из размытых линий. Расщепление дублета у всех линий серии одно и то же, поскольку оно определяется расщеплением одного и того же уровня  $2p$ .

### § 5.3. Магнитный и механический момент электрона.

Движение электрона вокруг ядра эквивалентно круговому току. Магнитный момент тока определяется по известной формуле:  $p_m = is$ , где  $i$  – ток, протекающий по контуру, а  $s$  – площадь контура. В случае электрона  $i = \frac{e}{T}$ , где  $e$  – заряд электрона, а  $T$  – период его обращения вокруг ядра.

Таким образом,  $p_m = \frac{e}{T}s$ , здесь  $s$  – площадь, охватываемая орбитой электрона. Как уже было сказано выше, электрон движется в поле центральных сил. В поле центральных сил момент импульса является интегралом движения<sup>1</sup>. Поэтому в полярной системе координат:  $\frac{mr^2 d\varphi}{dt} = L = const$ . Пусть начало

координат совпадает с ядром. Площадь орбиты электрона есть:  $S = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} r^2 d\varphi$ . Из предыдущей формулы

найдем  $d\varphi$ :  $\frac{Ldt}{mr^2} = d\varphi$ . Тогда:  $S = \frac{1}{2} \int_0^T r^2 \frac{Ldt}{mr^2}$ ;  $S = \frac{L}{2m} \int_0^T dt = \frac{L}{2m} t \Big|_0^T = \frac{LT}{2m}$ . Тогда магнитный момент

<sup>1</sup> См. лекции по теоретической механике под редакцией Ерыкалина А. В.

электрона:  $p_m = \frac{e}{\mathcal{I}} \frac{L\mathcal{I}}{2m}$ ,  $p_m = \frac{eL}{2m}$ . Для положительно заряженной частицы вектора  $\vec{L}$  и  $\vec{p}_m$  коллинеарны. В общем же случае:  $\vec{p}_m = \frac{q}{2m} \vec{L}$ . Применительно же к электрону,  $q = -e$ ,  $\vec{p}_m = -\frac{e}{2m} \vec{L}$ . Таким образом, мы получили связь между магнитным и механическим моментом электрона. Совершим некоторые преобразования. Умножим последнюю формулу на дробь  $\frac{\hbar}{\hbar}$ . Получим:  $\vec{p}_m = -\frac{e}{2m} \frac{\hbar}{\hbar} \vec{L}$ . Введём следующее обозначение:  $\frac{e\hbar}{2m} = \mu_B$ . Величину  $\mu_B$  называют магнетоном Бора. Тогда последняя формула переписется так:  $\vec{p}_m = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}$ . В системе СИ  $\mu_B = 9,27 \cdot 10^{-24} [A \cdot m^2]$ . По аналогии квантово-механический магнитный момент связан с квантово-механическим орбитальным моментом таким же соотношением:  $\mu_l = \frac{e}{2m} L_l = \frac{e}{2m} \hbar \sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$ . Найдём выражение для проекции магнитного

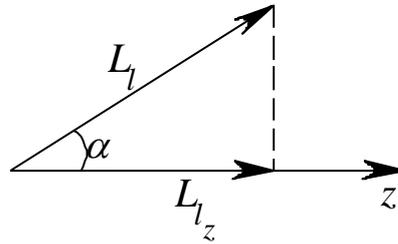


Рис. 51

момента на какую-либо ось, например, на ось  $z$ :  $\mu_{l_z} = \frac{e}{2m} L_{l_z} = \frac{e}{2m} \hbar m_{l_z} = \mu_B m_{l_z}$ , где  $m_{l_z}$  – проекция орбитального момента на заданное направление. Так как  $m_{l_z}$  может принимать только  $2l+1$  значение:  $m_{l_z} = \{-2l, -2l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, 2l-1, 2l\}$ , то существует  $2l+1$  способа ориентации магнитного момента. Так как в сферически симметричной системе координат в качестве оси  $z$  можно выбрать любую, то и полученное соотношение будет справедливо для проекции магнитного момента на любую ось.

Рассмотрим углы, которые образует орбитальный момент с осью  $z$ .  $\cos \alpha = \cos(\vec{L}_l, \vec{L}_{l_z}) = \frac{L_{l_z}}{L_l} = \frac{m_{l_z} \hbar}{\hbar \sqrt{l(l+1)}} = \frac{m_{l_z}}{\sqrt{l(l+1)}}$ . Максимальное значение, которое может принимать

орбитальное квантовое число –  $l$ , поэтому  $\max(\cos \alpha) = \frac{l}{\sqrt{l(l+1)}} = \sqrt{\frac{l}{l+1}} = \sqrt{\frac{l+1-1}{l+1}} = \sqrt{1 - \frac{1}{l+1}} < 1$ , так

как  $\frac{1}{l+1}$  – величина положительная. Таким образом, квантово-механический орбитальный момент никогда не может быть сонаправленным с осью, относительно которой он рассматривается. Вообще говоря, он не может быть ориентирован строго по какой-либо определённой оси. Причём  $\cos \alpha$  может принимать только различные дискретные значения, в зависимости от  $l$ . Эта дискретность в ориентации момента импульса называется пространственным квантованием.

Отношение  $\frac{\mu}{L}$  модуля магнитного момента к модулю механического момента, выраженное в единицах  $\frac{e}{2m}$ , называется гиромангнитным отношением:  $\frac{\mu}{L} = \frac{e}{2m} \equiv g$ . Очевидно, что для орбитального и магнитного и механического моментов электрона гиромангнитное соотношение равно единице, т. е.  $g_l = 1$ .

Для собственного магнитного момента электрона, обусловленного наличием спина:  $\mu_s = \frac{e}{m} L_s$ . Тогда гиромангнитное отношение для спинового магнитного момента и механического момента  $g_s = 2$ .

Итак, электрон обладает в атоме четырьмя моментами:

1. Механическим (орбитальным и спиновым);
2. Магнитным (орбитальным и спиновым).

Полный механический момент импульса электрона является векторной суммой орбитального механического момента и спинового механического момента:  $\vec{L}_j = \vec{L}_l + \vec{L}_s$ . Так как модули каждого момента всегда квантуются:  $L_l = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ ,  $L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)}$  то и их сумма должна квантоваться:  $L_j = \hbar\sqrt{j(j+1)}$ , где  $j$  – квантовое число полного механического момента электрона. Найдём его. Рассмотрим значения проекций на ось  $z$ :  $L_{l_z} = \hbar m_l$  ( $m_l = -l, \dots, 0, \dots, l$ ) –  $2l+1$  значение;  $L_{s_z} = \hbar m_s$  ( $m_s = \pm \frac{1}{2}$ ). Тогда  $L_{j_z} = L_{l_z} + L_{s_z}$ ;  $L_{j_z} = \hbar m_{j_z}$ , где  $m_{j_z} = -j, \dots, 0, \dots, j$  –  $2j+1$  значение. Так как  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ ,

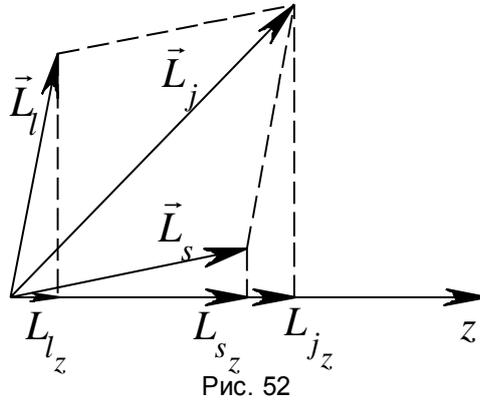


Рис. 52

то тогда  $j = l \pm \frac{1}{2}$ . Определим угол между орбитальным и спиновым моментами электрона. Так как

$\vec{L}_j = \vec{L}_l + \vec{L}_s$ , то, возводя это выражение в квадрат, получим:

$$\vec{L}_j^2 = \vec{L}_l^2 + \vec{L}_s^2 = \vec{L}_l^2 + \vec{L}_s^2 + 2(\vec{L}_l, \vec{L}_s) = L_l^2 + L_s^2 + 2L_l L_s \cos(\vec{L}_l, \vec{L}_s). \quad \text{Отсюда} \quad \cos(\vec{L}_l, \vec{L}_s) = \frac{L_j^2 - L_l^2 - L_s^2}{2L_l L_s}, \quad \text{или}$$

$$\cos(\vec{L}_l, \vec{L}_s) = \frac{\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 s(s+1)}{2\hbar^2 \sqrt{l(l+1)s(s+1)}}. \quad \text{Так как возможно лишь } j = l \pm \frac{1}{2} \text{ – 2 состояния, то}$$

существует 2 возможных угла между орбитальным и спиновым моментами. Так как направление момента относительно любой оси не определено, то возникает вопрос, что же понимать под углом между этими моментами? Смысл данного угла в том, что в отсутствии внешних сил полный момент импульса сохраняется, орбитальный и спиновой моменты прецессируют вокруг полного момента, а их проекции на направление полного момента имеют вполне определённые значения (рис. 53).

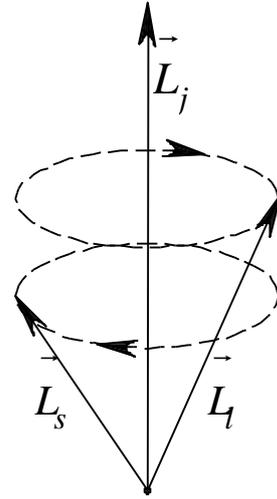


Рис. 53

Полный магнитный момент электрона равен сумме векторов орбитального магнитного момента и спинового магнитного момента:  $\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s$ . Так как  $\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m} \vec{L}_l = -\frac{\mu_B}{\hbar} L_l \vec{\mu}_s = -\frac{e}{m} \vec{L}_s = \frac{2\mu_B}{\hbar} \vec{L}_s$ . Таким образом, гиромагнитное отношения для механических и магнитных моментов различны. Поэтому полный механический и полный магнитный момент не коллинеарны.

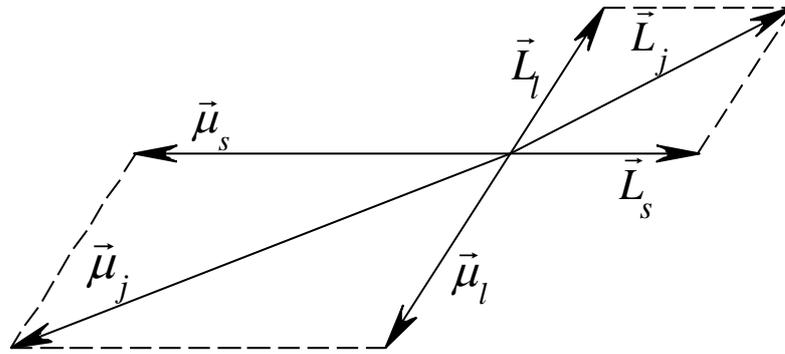


Рис. 54

#### § 5.4. Векторная модель атома. Правила сложения моментов.

Полный магнитный и механический моменты атома складываются из механических орбитальных и спиновых моментов, и магнитных орбитальных и спиновых моментов всех электронов, образующих оболочку атома. Поведение вектора полного момента атома зависит от способа и последовательности сложения отдельных моментов. Рассмотрим общий метод сложения моментов с учётом пространственного квантования на примере для двух электронов.

Пусть на внешней оболочке атома находятся два электрона. Орбитальный и механический моменты этих электронов будут  $L_{l_1}$  и  $L_{l_2}$ , где  $L_{l_1} = \hbar\sqrt{l_1(l_1+1)}$  и  $L_{l_2} = \hbar\sqrt{l_2(l_2+1)}$ . Суммарный момент для атома равен векторной сумме  $L_{l_1}$  и  $L_{l_2}$ :  $\vec{L}_L = \vec{L}_{l_1} + \vec{L}_{l_2}$ . Очевидно, что он тоже квантуется, так как квантуются моменты его составляющие:  $\vec{L}_L = \hbar\sqrt{L(L+1)}$ , причём  $L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 2, \dots, |l_1 - l_2|$ . Число способов, по которым могут складываться два момента равно числу возможных значений квантового числа  $L$ . Найдём их. Пусть сначала  $l_1 > l_2$ . Тогда  $L = l_1 + l_2, \dots, l_1 - l_2$ . В этой последовательности чисел до нуля не хватает  $l_1 - l_2 - 1$  элемента. Тогда количество элементов данной последовательности будет равно:  $l_1 + l_2 - (l_1 - l_2 - 1) = \lambda_{l_1} + l_2 - \lambda_{l_1} + l_2 + 1 = 2l_2 + 1$ . Аналогично, если  $l_1 < l_2$ . В этом случае количество элементов данной последовательности будет равно:  $l_1 + l_2 - (l_2 - l_1 - 1) = \lambda_{l_2} + l_1 - \lambda_{l_2} + l_1 + 1 = 2l_1 + 1$ . Таким образом, в общем случае число способов, которыми механические моменты с квантовыми числами  $l_1$  и  $l_2$

складываются друг с другом, с учётом пространственного квантования, будет  $N_{l_1, l_2} = 2 \min(l_1, l_2) + 1$ . Проекция полного момента на избранное направление, например ось  $z$ , должно быть равно:  $L_{L_z} = \hbar m_L$ , ( $m_L = -L, \dots, L$ ). Таким образом, возможен  $2L + 1$  способ ориентации моментов в атоме.

Если в атоме больше двух электронов, то нахождение полного момента осуществляется последовательного применения правил сложения двух моментов. Правило сложения спиновых моментов аналогичны. Каждый из  $N$  электронов обладает вектором спинового момента  $\vec{L}_{s_i}$ . Тогда общий спиновой момент атома  $\vec{L}_S = \sum_{i=1}^N \vec{L}_{s_i}$ , где  $L_S = \hbar \sqrt{S(S+1)}$ . Квантовое число  $S$  полного спина может принимать значения

$$S = \begin{cases} \frac{1}{2}N; \frac{1}{2}N-1; \dots; 0, & N - \text{чёт} \\ \frac{1}{2}N; \frac{1}{2}N-1; \dots; \frac{1}{2}, & N - \text{нечёт} \end{cases}$$

Возможные значения полного момента спина на ось  $z$ :  $L_{S_z} = \hbar m_S$ , где ( $m_S = -S, -S+1, \dots, 0, \dots, S-1, S$ ). Таким образом, возможны  $2S + 1$  возможности ориентировки спина.

### § 5.5. Типы связи электронов в атоме.

Свойства атома зависят от того, как происходит образование полного механического момента атома. Возможны два способа. Они зависят от того, какие взаимодействия между электронами в атоме преобладают.

1.  $L-S$  связь. Реализуется в том случае, если электростатическое взаимодействие между электронами в атоме сильнее, чем спин-орбитальное взаимодействие для каждого электрона. Поэтому сначала находятся полный орбитальный и полный спиновой моменты для каждого электрона, которые потом складываются:

$$\begin{cases} \vec{L}_L = \sum_{i=1}^N \vec{L}_i, \\ \vec{L}_S = \sum_{i=1}^N \vec{L}_{s_i}, \\ \vec{L}_J = \vec{L}_L + \vec{L}_S. \end{cases}$$

Полный момент, очевидно<sup>1</sup>, квантуется:  $\vec{L}_J = \hbar \sqrt{J(J+1)}$ , где  $J = L + S, \dots, |L - S|$ . Как было показано выше, число способов, которыми складываются моменты, равно числу слагаемых:  $N_{L,S} = 2 \min(L, S) + 1$ , то есть возможно  $N_{L,S}$  состояний атома. Обычно бывает  $S < L$ . Тогда  $N_{L,S} = 2S + 1$ .  $N_{L,S}$  определяет спин-орбитальное расщепление энергетических уровней в атоме и называется мультиплетностью.

2.  $J-J$  связь. Этот тип связи реализуется, когда спин-орбитальное взаимодействие в атоме сильнее, чем электростатическое взаимодействие различных электронов друг с другом. Поэтому мы находим сначала полный механический момент всех электронов, а потом – полный момент всего атома как векторную сумму всех полных моментов каждого электрона:  $\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$ ,  $J = \sum_{i=1}^N \vec{j}_i$ . Этот тип связи реализуется для многоэлектронных атомов (окончание таблицы Менделеева).

<sup>1</sup> См. выше.

3.  $J-L$  связь. Моменты части электронов складываются по правилу  $J-J$  связи, а части – по правилу  $L-S$  связи. Результирующий момент есть результат векторного сложения этих двух моментов:  $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ . Эта связь хорошо работает для инертных газов.

### § 5.6. Полный магнитный момент атома.

Полный магнитный момент атома складывается из полных спинового и орбитального моментов атома:  $\vec{\mu}_{полн} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S$ . Для каждого из них мы можем записать:  $\vec{\mu}_L = \frac{1}{2} \frac{q}{m} \vec{L}_L$  и  $\vec{\mu}_S = \frac{q}{m} \vec{L}_S$ . Таким образом, полный магнитный момент не будет лежать на одной оси с полным механическим моментом.

Рассмотри случай изолированного атома. В изолированном атоме  $\vec{L}_J = const$ . Если вектор  $\vec{L}_J$  сохраняет своё направление в пространстве, вектора  $\vec{L}_S$  и  $\vec{L}_L$  должны прецессировать вокруг  $\vec{L}_J$ . Следовательно, прецессируют и полные механический и магнитный моменты. Из рисунка 55 видно,  $\vec{\mu}_{полн} \nparallel \vec{L}_J$  и прецессирует вокруг оси  $\vec{L}_J$ .  $\mu_J$  – проекция  $\vec{\mu}_{полн}$  на  $\vec{L}_J$  и  $\vec{\mu}_\perp$ . Для достаточно большого промежутка времени среднее значение  $\langle \vec{\mu}_\perp \rangle = 0$ , поэтому

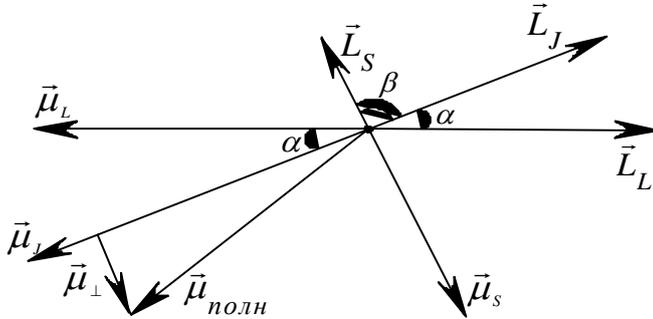


Рис. 55

$\langle \mu_{полн} \rangle = \mu_J$ . Таким образом, если на языке моментов описывать магнитоэлектрические (оптические) эффекты, можно пользоваться  $\vec{\mu}_J$ . Найдём связь между  $\mu_J$  и  $L_J$ . Из рисунка 55 видно, что

$$\mu_J = \mu_L \cos(\vec{L}_L, \vec{L}_J) + \mu_S \cos(\vec{L}_S, \vec{L}_J) \quad (1). \quad \vec{L}_L = \vec{L}_J - \vec{L}_S \quad (2), \quad L_L^2 = L_J^2 + L_S^2 - 2L_J L_S \cos \beta. \quad \text{Следовательно,}$$

$$\cos \beta = \frac{L_J^2 + L_S^2 - L_L^2}{2L_J L_S}. \quad \text{Найдём } \cos \alpha. \quad \text{Из уравнения (2) следует, что } \vec{L}_S = \vec{L}_J - \vec{L}_L,$$

$$L_S^2 = L_J^2 + L_L^2 - 2L_J L_S \cos \beta; \quad \cos \alpha = \frac{L_J^2 + L_L^2 - L_S^2}{2L_J L_L}. \quad \text{Запишем уравнения для проекции магнитного момента}$$

на направление вектора  $\vec{L}_L$ :

$$\mu_L = \frac{\mu_B}{\hbar} L_L = \mu_B \sqrt{L(L+1)}$$

$$\mu_S \frac{2\mu_B}{\hbar} L_S = 2\mu_B \sqrt{S(S+1)}.$$

Подставим последние два выражения в (1) с учётом полученных выше выражений для косинусов:

$$\mu_J = \mu_B \sqrt{L(L+1)} \frac{L_J^2 + L_L^2 - L_S^2}{2L_J L_L} + 2\mu_B \sqrt{S(S+1)} \frac{L_J^2 + L_S^2 - L_L^2}{2L_J L_S}$$

Подставим значения для каждого момента, выраженное через квантовые числа:

$$\begin{aligned}
\mu_J &= \mu_B \sqrt{\cancel{L(L+1)}} \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1) \cancel{L(L+1)}}} + \\
&+ 2\mu_B \sqrt{\cancel{S(S+1)}} \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2\sqrt{J(J+1) \cancel{S(S+1)}}} = \\
&= \mu_B \sqrt{J(J+1)} \frac{2J(J+1) + J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} = \\
&= \mu_B \sqrt{J(J+1)} \left( 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \right)
\end{aligned}$$

Выражение, помещённое в круглых скобках, называется фактором Ланде:  $g^L$ . Таким образом,  $\mu_J = \mu_B g^L \sqrt{J(J+1)}$  (3). Выражение (3) аналогично тому, которое связывает спиновой орбитальный момент с орбитальным механическим. Из этой аналогии следует смысл фактора Ланде – это гиромагнитное отношение для полного магнитного момента. В частности, получается, что если спиновое квантовое число равно нулю, то  $J = L$ , тогда  $g^L = 1$ . Если же магнитный момент обусловлен спиновым движением, то есть  $L = 0$ , то  $J = S$ , а  $g^L = 2$ .

### § 5.7. Магнитомеханические эффекты.

В предыдущем параграфе мы показали, что существует связь между полным магнитным и механическим моментами. Если ориентация магнитного момента в пространстве, изменяется, то, чтобы выполнялось соотношение (3) предыдущего параграфа:  $\mu_J = \mu_B g^L \sqrt{J(J+1)}$ , должна изменяться ориентация механического момента. Явления, обусловленные связью механического и магнитного моментов, называют магнитомеханическими эффектами.

Пусть некоторый магнетик намагничён. Это значит, что все магнитные моменты атомов ориентированы в направлении намагничивания. Это приводит к тому, что и все механические моменты атомов будут стремиться ориентироваться определённым образом:  $\mu_J = g^L \underbrace{\left[ \frac{q}{2m_e} \right]}_g L_J$ ,  $\vec{\mu}_J = \gamma \vec{L}_J$ , где

$\mu_J = \sum_{k=1}^N \mu_{J_k}$ ,  $\vec{L}_J = \sum_{k=1}^N \vec{L}_{J_k}$ . Итак, при изменении магнитного момента образца, изменяется его механический момент так, чтобы их сумма всегда оставалась постоянной. Это значит, что при намагничивании образца он приобретёт дополнительный момент импульса. Для обнаружения магнитомеханических эффектов Эйнштейном и де Гаазом на тонкой упругой нити подвешивался цилиндр. Его помещали в

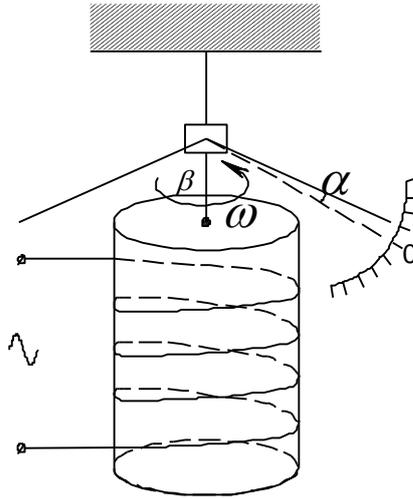


Рис. 56

продольное магнитное поле, которое создавалось соленоидом, охватывающим образец. Магнитный и механический моменты связаны соотношением:  $\Delta\mu_J = \gamma\Delta L_J$ .  $L_{\text{общ}}$  – полный механический момент образца. Так как образец изолирован, то закон сохранения момента импульса должен выполняться. Полный момент импульса будет складываться из механического момента образца полного собственного механического момента всех электронов:  $\vec{L}_{\text{об}} + \vec{L}_J = \text{const}$ . Тогда,  $d\vec{L}_{\text{об}} + d\vec{L}_J = 0$ ,  $d\vec{L}_{\text{об}} = -d\vec{L}_J$ . Переходя к конечным приращениям, получим  $\Delta\vec{L}_{\text{об}} = -\Delta\vec{L}_J$ . Но  $\Delta L_J = \frac{\Delta\mu_J}{\gamma}$ . Поэтому  $\Delta L_{\text{об}} = -\frac{\Delta\mu_J}{\gamma}$ . Момент импульса

образца равен  $\Delta L = I\Delta\omega$ , где  $I$  – момент инерции. Кинетическая энергия вращательного движения твёрдого тела, как известно из механики, равна:  $E_{\text{кин}} = \frac{I\omega^2}{2}$ , а её изменение –  $\Delta E_{\text{кин}} = \frac{I\Delta\omega^2}{2}$ .

Обозначим  $D$  модуль упругости нити. Тогда при её закручивании на угол  $\theta$  потенциальная энергия нити будет  $E_{\text{нити}} = \frac{1}{2}D\theta^2$ . По закону сохранения энергии  $\Delta E_{\text{кин}} = E_{\text{нити}}$ ,  $\frac{I\Delta\omega^2}{2} = \frac{1}{2}D\theta^2$ ,  $\Delta\omega^2 = \frac{D\theta^2}{I}$ . Если  $\omega_0$  – собственная частота колебания образца, то она связана с модуле упругости кручения нити и моментом инерции следующим соотношением:  $D = I\omega_0^2$ . Следовательно,  $I = \frac{D}{\omega_0^2}$ . Тогда,

$$\Delta L_J = \frac{\Delta\mu_J}{\gamma} = -\Delta L_{\text{об}} = -I\Delta\omega = -\frac{D}{\omega_0^2} \sqrt{\frac{D}{I}} \theta = -\frac{D}{\omega_0^2} \frac{\omega_0 \sqrt{D}}{\sqrt{D}} \theta = -\frac{D\theta}{\omega_0}, \text{ т. о.}$$

Зная модуль упругости нити, собственную частоту колебаний образца и угол закручивания нити можно определить  $\Delta L_{\text{об}}$ , а значит и  $\mu$ . Эйнштейн и де Гааз получили, что ферромагнитных цилиндров  $g^L = 2$ . Это значит<sup>1</sup>, что магнетизм обусловлен спиновым движением электронов.

Эффектом обратным эффекту Эйнштейна – де Гааза является эффект Барнета. Рассмотрим поведение атома в магнитном поле. На магнитный момент  $\mu$  атома в этом поле действует момент сил:  $\vec{M} = \vec{\mu} \times \vec{B}$ . Но атом обладает механическим моментом и поэтом ведёт себя как гироскоп. Под влиянием этого момента силы, будет задаваться  $\dot{\vec{\mu}}$ . Чтобы соотношение

<sup>1</sup> См. выше.

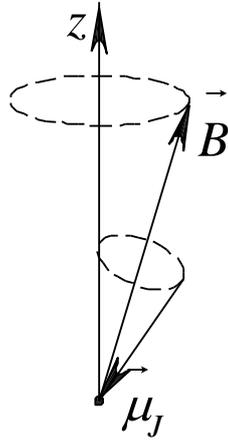


Рис. 57

Между ними сохраняется, будет происходить прецессия механического момента атома вокруг заданного направления (не вокруг  $\vec{\mu}$  !!!). Это направление будет направлением вектора  $\vec{B}$ . По

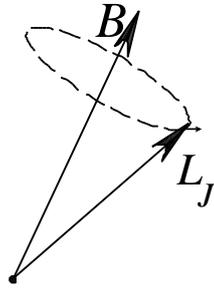


Рис. 58

второму закону Ньютона для проекций векторов мы можем записать:  $M = F \cdot r = m \frac{dv}{dt} r = \frac{d(mvr)}{dt}$  так

как  $r = const$   $\left| = \frac{dL}{dt} \right.$ . В векторной форме  $\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B}$ . Но  $\vec{\mu} = g^L \frac{q}{2m} \vec{L}_J$ . Тогда

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = g^L \frac{q}{2m} \vec{L} \times \vec{B} = |q = -e| = -g^L \frac{e}{2m} \vec{B} \times \vec{L}_J = \underbrace{\vec{\omega}_J}_{\vec{\omega}_J} \times \vec{L}_J, \text{ где } \vec{\omega}_J \text{ — частота прецессии механического момента}$$

вокруг направления магнитного поля. Если фактор Ланде для атома равен  $g^L = g_L = 1$ , то есть магнетизм атома обеспечивает орбитальный магнитный момент электронов (спин равен нулю), то

$$\vec{\omega}_J = -g^L \frac{e}{2m} \vec{B} = \vec{\omega}_L, \text{ то есть частота прецессии равна прецессии орбитального момента: } \omega_J = \frac{e}{2m} B = \omega_L -$$

ларморовой частоте прецессии. Благодаря прецессии всех атомов в магнитном поле в одном и том же направлении возникает дополнительный магнитный момент, что приводит к намагничиванию образца. В этом состоит суть эффекта Барнета.

### § 5.8. Экспериментальные методы определения магнитного момента.

#### 1. Опыт Штерна – Гербаха.

В 1921 году Штерн предложил опыт по измерению магнитного момента атома, который и реализовал с Гербахом в 1922 году. Суть опыта заключалась в следующем. Пучки нейтральных

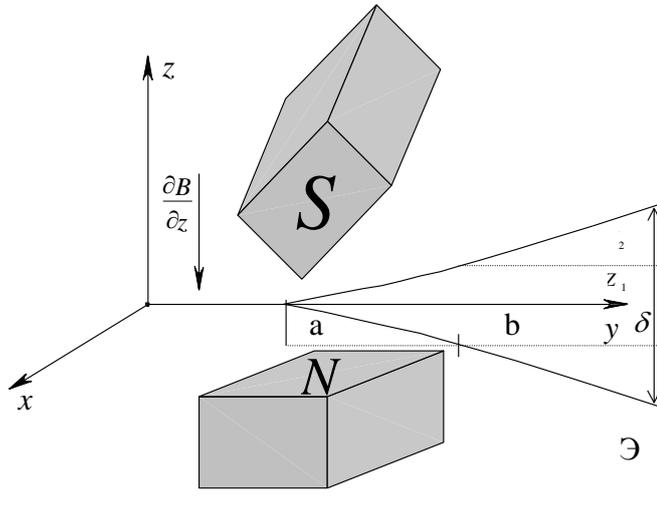


Рис. 59

атомов пропускались через область в которой создавалось неоднородное магнитное поле. В нём двигались атомы. На экране Э наблюдалось расщепление пучка на две части. Первые опыты проводились с атомами серебра. Для одного внешнего электрона имеем:  $L=0$ ,  $S=\frac{1}{2}$  и  $m_s=\pm\frac{1}{2}$ . Тогда

$\mu_z = \mu_B m_s = \pm\frac{1}{2}\mu_B$ . Введём вектор  $\vec{E}_{\mu B} = -\mu\vec{B}$ . Тогда на магнитный момент будет действовать сила

$\vec{F} = -\text{grad } E_{\mu B}$ , сила, действующая вдоль оси  $z$ :  $F_z = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$ . Вычислим смещение атома под действием

силы  $\vec{F}$  вдоль оси  $z$ . По законам кинематики имеем:  $z_1 = \frac{a_z t^2}{2}$ , где  $a_z = \frac{F}{m}$ . С учётом того, что  $a = v_0 t$

выражение для  $z_1$  принимает вид:  $z_1 = \frac{a_z a^2}{2v_0^2} = \frac{F_z a^2}{2mv_0^2} = \frac{\mu_z a^2}{2mv_0^2} \frac{\partial B}{\partial z}$ . Из рисунка 59 видно, что  $\frac{\delta}{2} = z_1 + z_2$  (1).

Найдём  $z_2$ .  $z_2 = v_z t_2$ ,  $v_z = a_z t_2$ ,  $t_2 = \frac{b}{V_2}$ . Подставим в (1) выражения для  $z_1$  и  $z_2$ :

$$\delta = 2(z_1 + z_2) = \frac{m_z}{mv_0^2} \frac{\partial B_z}{\partial z} 2 \left( \frac{a^2}{2} + ab \right). \text{ Найдём из этой формулы } m_z: m_z = \frac{\delta m v_0^2}{\frac{\partial B_z}{\partial z} (a^2 + 2ab)}$$

зависит от значения проекции магнитного момента. Так как значение проекции магнитного момента может принимать как положительные, так и отрицательные значения, то и сила будет действовать то вверх, то вниз. Число компонент, на которые расщепится пучок, зависит от проекции магнитного момента. Зная величину расщепления и значение  $\frac{\partial B}{\partial z}$ , Штерн и Гербах определили значение магнитного

момента:  $\mu_z = g^L \mu_B m_z$ . Или, с учётом последней формулы,  $\mu_z = g^L \mu_B \frac{\delta m v_0^2}{\frac{\partial B_z}{\partial z} (a^2 + 2ab)}$ . Впоследствии, когда

ставили опыты с атомами водорода, оказалось, что пучок нейтральных частиц расщепляется также надвое. Так как у атома водорода орбитальный момент равен нулю, то его магнитный момент обусловлен лишь спиновым движением электрона, то есть  $\mu = \mu_S = g_S L_S = \mu_B \sqrt{S(S+1)}$ ,  $\mu_{S_z} = \mu_B m_{S_z} = \pm\frac{1}{2}\mu_B$ . Отсюда

можно найти спин.

2. Метод магнитного резонанса.

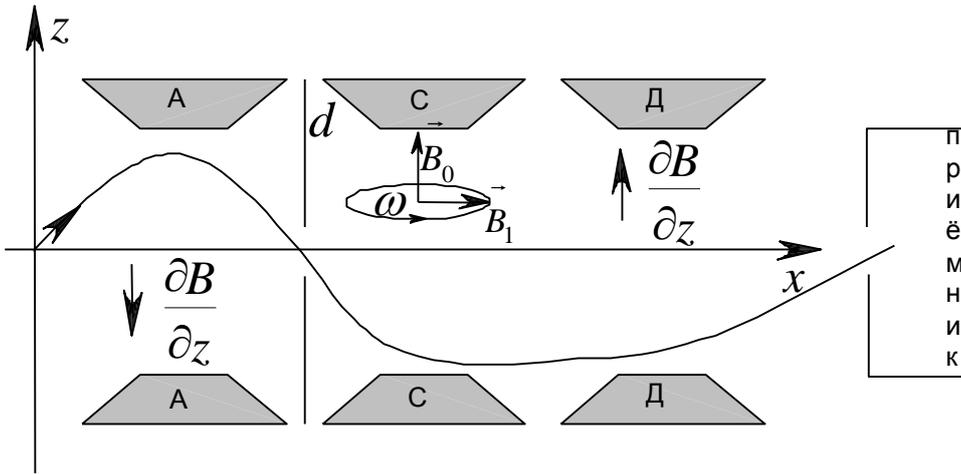


Рис. 60

В данном методе пучок атомов проходит через систему магнитов, причём магнит А создаёт неоднородное магнитное поле, магнит С – однородное, а магнит Д – снова неоднородное. Между магнитами А и С устанавливали диафрагму  $d$ , которая вырезала некоторый тонкий луч атомов. Источник находился на одной прямой с диафрагмой. Через диафрагму проходили атомы, двигавшиеся в начальный момент времени под углом к оси  $x$ . Однородное магнитное поле, создаваемое магнитами С, не отклоняет нейтральную частицу. Неоднородное магнитное поле, создаваемое магнитами Д, отклонит частицу и она попадёт в приёмник. В однородном магнитном поле  $\vec{B}_0$  магнитные моменты атомов будут прецессировать с частотами  $\omega_J = g^L \omega_L$ , где  $\omega_L = \frac{eB_0}{2m_e}$ . Однако при этой прецессии угол между

магнитным моментом и индукцией магнитного поля не изменяется. Если в области однородного магнитного поля С создать дополнительное магнитное поле, частота изменения которого совпадает с частотой прецессии  $\omega_J$  атома ( $\omega = \omega_J$ ), и вращение происходит в том же направлении, что и прецессия (ортогональном  $\vec{B}_0$ ), то, вследствие взаимодействия полного магнитного момента атома  $\vec{\mu}_J$  и вектора магнитной индукции этого поля  $\vec{B}_1$ , возникает дополнительный момент сил:  $\vec{M} = \vec{\mu}_J \times \vec{B}_1$ , который будет стремиться изменить угол между  $\vec{\mu}_J$  и  $\vec{B}_0$ . Так как частота изменения  $\vec{B}_1$  совпадает с частотой прецессии  $\omega_J$  атома ( $\omega = \omega_J$ ), и вращение происходит в том же направлении, что и прецессия, взаимное расположение  $\vec{\mu}_J$  и  $\vec{B}_1$  не меняется, и, следовательно, момент сил, стремящийся изменить угол между  $\vec{\mu}_J$  и  $\vec{B}_0$  будет действовать всегда в одном и том же направлении. Если же вращение дополнительного магнитного поля и прецессия происходят в противоположных направлениях, то момент сил половину времени стремиться увеличить угол между  $\vec{\mu}_J$  и  $\vec{B}_0$ , а половину времени – стремиться уменьшить его. В среднем никакого эффекта наблюдаться не будет. То же самое будет происходить, если направления вращений совпадают, а частоты не совпадают.

Если при прохождении однородного магнитного поля  $\vec{B}_0$  угол между магнитным моментом атомов и направлением магнитного поля изменяется, то траектория атомов в неоднородном поле тоже изменяется. Следовательно не все атомы попадут в приёмник. Тогда, если снимать зависимость числа атомов, которые попали в приёмник от частоты вращения  $\omega$ , мы получим следующую зависимость (см. рис. 61). То есть при некоторой частоте вращения

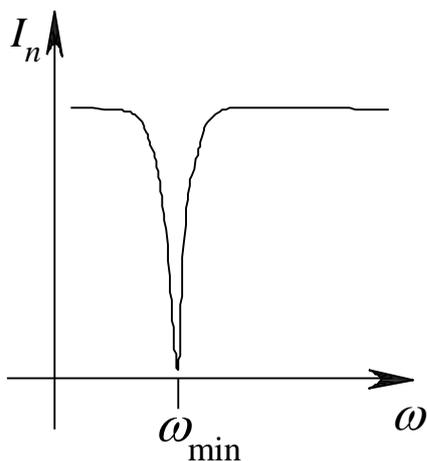


Рис.61

число атомов будет минимальным. Это явление наступает если  $\omega = \omega_j$ , тогда  $\omega_{\min} = g^L \omega_L$ . Вместо вращающегося магнитного поля, можно пользоваться линейно осциллирующим магнитным полем. Его можно представить как суперпозицию двух полей, вращающихся в противоположных направлениях (см. рис. 62).

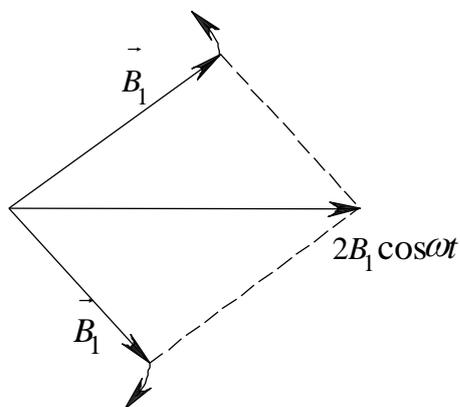


Рис. 62

Рассмотрим данное магнитное поле с квантовой точки зрения. Переменное электромагнитное поле эквивалентно наличию квантов электромагнитного излучения с частотой  $\hbar\omega$ . Эти кванты могут быть поглощены атомом, и тогда в магнитном поле его энергия изменится на  $\hbar\omega$ . При изменении энергии атома происходит его переориентация в пространстве, то есть  $\Delta E = \hbar\omega = -\vec{\mu}_J \vec{B}$ . Эта потенциальная энергия равна:  $-B_0 \Delta \mu_{J_z}$ , то есть изменение проекции магнитного момента на заданное направление, или  $\Delta E = -B_0 g^L \mu_B \Delta m_J$ . Но так как существуют правила отбора:  $\Delta m_J = \pm 1, 0$ , то

$$\Delta E = \begin{cases} g^L \omega_L \hbar \\ 0 \\ -g^L \omega_L \hbar \end{cases} .$$

Очевидно, что поглощение и испускание атомами квантов происходит наиболее интенсивно в тех случаях, когда энергия квантов  $\hbar\omega$  дополнительного поля равна энергии возможной переориентировки атомов, то есть  $\Delta E = \hbar\omega_{\min}$ .

В рамках данной главы мы рассмотрим эффекты Зеемана, Пашена – Бака, Штарка. При помещении атома в магнитное поле, полная энергия атома будет складываться из энергии изолированного атома  $E^0$  и энергии взаимодействия атома с полем:  $E_{пол} = E^0 + E_{вз}$ . Если магнитное поле невелико, то величина взаимодействия полного магнитного момента атома с магнитным полем будет меньше, чем спин-орбитальное взаимодействие внутри атома. Поэтому слабое магнитное поле спин-орбитального взаимодействия не разрывает и с магнитным полем взаимодействует полный момент атома, который прецессирует вокруг направления магнитного поля. Если внешнее магнитное поле велико настолько, что взаимодействие орбитального магнитного момента с ним и спинового момента в отдельности больше, чем спин-орбитальное взаимодействие в атоме, то спин-орбитальное взаимодействие разрывается. Этот эффект называется эффектом Пашена – Бака.

### § 6.1. Эффект Зеемана.

Как известно, полный механический момент атома  $L_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}$ . Тогда проекция  $L_J$  на какое-либо направление, в силу пространственного квантования, будет принимать  $2J+1$  значение. Так как проекция магнитного момента связана с проекцией механического момента через магнетон Бора, то и проекция магнитного момента тоже может принимать  $2J+1$  значение. Каждой ориентации магнитного момента  $\mu_z$  будет соответствовать своя энергия взаимодействия атома с магнитным полем:  $E_{вз} = -\mu_z B$ . В этом случае  $\vec{e}_z \perp \vec{B}$ . Значит, возможны  $2J+1$  энергии взаимодействия. Таким образом, и полная энергия атома принимает  $2J+1$  значение, то есть уровень энергии расщепляется на  $2J+1$  компоненту, а величина расщепления определяется значениями проекции магнитного момента или механического момента. Так как уровни энергии расщепляются, то спектры атомов существенно усложняются. Для нахождения возможных линий излучения необходимо учесть следующие правила отбора для излучательных переходов:

$$\begin{array}{llll} \Delta L = \pm 1 & \Delta J = 0, \pm 1; & \Delta m_s = 0; \pm 1 & \Delta S = 0 \\ & \text{(~~}(J_1 = 0 \rightarrow J_2 = 0\text{)}) & m_J = 0 \rightarrow m_{J_k} = 0 & \\ & & \text{для } \Delta J = 0 & \end{array}~~$$

Каждый из возможных переходов приводит к излучению отдельной линии. Явление расщепления спектральных линий при помещении атома в слабое внешнее магнитное поле называют аномальным (сложным) эффектом Зеемана. Получим выражение для расщепления линий вследствие эффекта Зеемана.

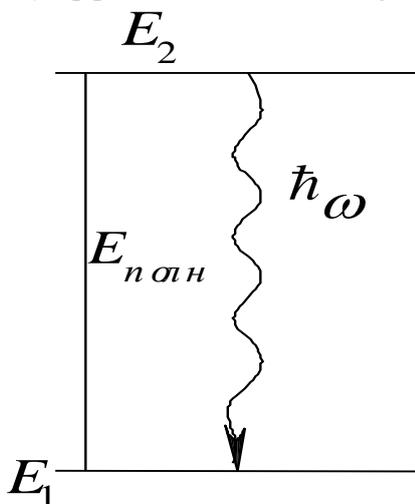


Рис. 63

Полная энергия равна, как было записано выше:

$$E_{пол} = E^0 - \vec{\mu}_J \vec{B} = E^0 - \mu_{J_z} B.$$

Энергия излучения, при переходе с одного уровня на другой, равна:

$$\hbar\omega_{21} = E_2 - E_1 - (\mu_{J_{z_2}} - \mu_{J_{z_1}})B = \hbar\omega_0 - (\mu_{J_{z_2}} - \mu_{J_{z_1}})B.$$

Таким образом, изменение частоты  $\Delta\omega$  будет равно:

$$\Delta\omega = \omega_L g_2^L m_{J_2} - \omega_L g_1^L m_{J_1} = \omega_L (g_2^L m_{J_2} - g_1^L m_{J_1}),$$

$$\Delta\omega = \omega_L (g_2^L m_{J_2} - g_1^L m_{J_1}).$$

$\Delta\omega$  называют величину зеемановского расщепления. Так как взаимодействие магнитного момента с внешним магнитным полем меньше, чем спин-орбитальное взаимодействие, то и величина зеемановского расщепления мала. Частота излучения в случае слабого магнитного поля определяется по формуле:

$$\omega_{12} = \omega - \omega_L (g_2^L m_{J_2} - g_1^L m_{J_1}).$$

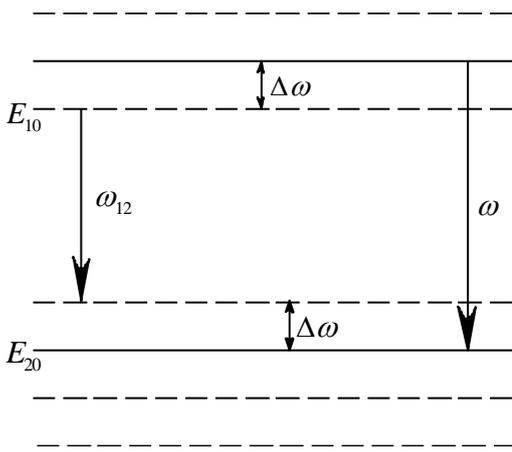


Рис. 64

Определим величину смещения частоты при эффекте Зеемана  $\Delta\omega_3$ :  $\Delta\omega_3 = \omega - \omega_{12} = \omega_L (g_2^L m_{J_2} - g_1^L m_{J_1})$ .

Если величина зеемановского расщепления равна частоте ланморовой прецессии,  $\Delta\omega_3 = \omega_L$ , то такое расщепление называют нормальным зеемановским расщеплением. Этот эффект имеет место в том случае, когда  $(g_2^L m_{J_2} - g_1^L m_{J_1}) = 1$ . Для первого уровня  $g^L = const$ , а  $\Delta m_J = 1$ . Таким образом, так как  $g^L = 1$ , а  $S = 0$ , то  $J = L$ <sup>1</sup>. Следовательно, для синглетных уровней. В слабом магнитном поле наблюдается нормальное зеемановское расщепление:

$$\Delta\omega_3 = \omega_L \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Такой эффект называют простым (нормальным) эффектом Зеемана. Так как поле слабое, расщепление Зеемана будет меньше естественного (мультиплетного) расщепления, вызванного спин-орбитальным взаимодействием.

### § 6.2. Эффект Пашена – Бака.

Рассмотрим теперь случай, когда индукция магнитного поля велика. В данной ситуации энергия взаимодействия магнитного момента атома с полем становится больше спин-орбитального взаимодействия и связь между спиновыми и орбитальными моментами разрушается. Каждый в отдельности начинает взаимодействовать с полем. Это явление разрыва спин-орбитальной связи в магнитном поле называется эффектом Пашена – Бака. Энергия уровня, в данном случае, равна:  $E = E_0 - \vec{\mu}_L \vec{B} - \vec{\mu}_S \vec{B}$ , где  $E_0$  – начальная энергия уровня до помещения его в магнитное поле.  $E = E_0 - \mu_B g_L m_L B - \mu_B g_S m_S B$  – запись через проекции  $\vec{\mu}_i$  на  $\vec{B}$ . Тогда  $\hbar\omega_{12} = E_{02} - E_{01} - \mu_B B (g_{2L} m_{2L} - g_{1L} m_{1L}) - \mu_B B (g_{2S} m_{2S} - g_{1S} m_{1S})$ . Казалось бы, спектр должен быть очень богатым, ведь возможны  $2L+1$  проекция  $m_L$  и ещё две проекции  $m_S$ . Найдём его.

$\Delta\omega = \omega - \omega_{12} = \frac{\mu_B B}{\hbar} [(g_{2L} m_{2L} - g_{1L} m_{1L}) + (g_{2S} m_{2S} - g_{1S} m_{1S})]$ . Для одного уровня  $g_{iL} = const$ ,  $g_{iS} = const$ :  $g_S = 2$ ,  $g_L = 1$ .  $\Delta m_L = 0, \pm 1$ ;  $\Delta m_S = 0$ . Тогда, если  $g_{2S} = g_{1S}$  и  $\Delta m_S = 0$ ,  $g_{2S} m_{2S} - g_{1S} m_{1S} = 0$ . Следовательно,  $\Delta\omega = \frac{\mu_B B}{\hbar} g_L \Delta m_L$ . Таким образом, может расщепляться на три компоненты:

$$\Delta\omega = \frac{\mu_B B}{\hbar} g_L \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix},$$

$\Delta\omega = \frac{\mu_B B}{\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$ . В эффекте Зеемана расщепление может быть только для синглетных термов. В

эффекте Пашена – Бака любой терм расщепляется на три.

<sup>1</sup> Так получается из формулы  $g^L = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$ .

### § 6.3. Эффект Штарка.

Явление Штарка состоит в том, что при наложении электрического поля энергетические уровни атомов, молекул и кристаллов расщепляются на подуровни и смещаются. Экспериментально это наблюдается в расщеплении и смещении спектральных линий в спектрах испускания и поглощения. Штарк подробно исследовал это явление на линиях серии Бальмера атома водорода. Позднее оно было обнаружено на молекулах и кристаллах.

Классическая теория не в состоянии объяснить эффект Штарка. Теория явления Штарка, основанная на полуклассической теории Бора, была построена Шварцшильдом и Эпштейном в 1916 г. Их основные результаты были подтверждены в квантово-механической теории Шредингера в 1926 г. В обеих теориях использовались методы теории возмущений, суть которой состоит в том, что при взаимодействии двух частиц учитывается основная энергия, то есть та энергия, которая максимальна. Далее решается уравнение Гамильтона. Потом учитываются малые поправки – малые энергии – возмущения.

Рассмотрим эффект Штарка в атоме. Внешнее электрическое поле будем считать однородным. Явление Штарка проявляется по-разному в зависимости от того, имеется ли у атома в отсутствие внешнего электрического поля собственный дипольный момент, или нет. Если дипольный момент имеется, то при наложении электрического поля атом получает дополнительную энергию:  $W = -(\vec{d}, \vec{E})$ ,

где  $\vec{d}$  – дипольный момент. Тогда смещение энергетических уровней и расщепление будут пропорциональны первой степени напряжённости поля. Этот эффект и был обнаружен Штарком. Если же у атома нет собственного дипольного момента, то при помещении атома во внешнее электрическое поле, возбуждается индуцированный дипольный момент. Этот дипольный момент есть  $\vec{d}' = \beta \vec{E}$ , где  $\beta$  есть поляризуемость атома. При увеличении электрического поля от 0 до  $E$ , дипольный момент атома будет увеличиваться от 0 до  $d'$ , при этом над атомом будет совершаться работа:  $A = \frac{d'E}{2} = \frac{\beta E^2}{2}$ . Эта работа

идёт на приращение энергии атома в электрическом поле, а значит на расщепление и смещение спектральных линий (энергетических уровней). То есть эффект Штарка в этом случае пропорционален  $E^2$  и называется квадратичным эффектом Штарка. При прочих равных условиях квадратичный эффект Штарка гораздо меньше линейного эффекта Штарка.

Если у атома был дипольный момент, то возникает добавочный. Его можно считать пропорциональным полю. Тогда происходит наложение квадратичного и линейного эффектов Штарка. Картина расщепления становится несимметричной, всё больше смещаясь в сторону низких энергий, и тем сильнее, чем выше они расположены. Спектральные линии смещаются в сторону меньших частот. Это смещение не велико. Для серии Бальмера  $\Delta\omega \approx 1 \text{ см}^{-1}$ . Расстояние между крайними:  $\Delta\omega_{\text{полн}} \approx 200 \text{ см}^{-1}$ .

Если напряжённость поля меньше  $10^5 \text{ В/см}$ , квадратичный эффект Штарка практически не сказывается. Его необходимо учитывать при напряжённостях порядка  $5 \cdot 10^5 \text{ В/см}$ .