

Л. Л. Гольдин, Г. И. Новикова

# КВАНТОВАЯ ФИЗИКА. ВВОДНЫЙ КУРС



Москва

2002

УДК 530.145(075.8)

ББК 22.31

Г63

---

Интернет-магазин

**MAFFESTS**

<http://shop.rcd.ru>

- физика
  - математика
  - биология
  - техника
- 

**Гольдин Л. Л., Новикова Г. И.**

Квантовая физика. Вводный курс. — Москва: Институт компьютерных исследований, 2002, 496 стр.

Содержит материал лекций, читавшихся для студентов Московского физико-технического института. Излагаются физические основы квантовой теории, даются необходимые представления и формулы нерелятивистской квантовой механики, важнейшие сведения об атомах и атомных явлениях, о химической связи и строении молекул, основы квантовой статистики, теории теплового излучения и квантовой электроники, некоторые разделы физики твердого тела. Эти главы основаны на «Введении в квантовую физику» тех же авторов (М.: Наука, 1988). Дополнительные главы содержат сведения о свойствах атомных ядер, ядерных реакциях и о современном состоянии физики элементарных частиц. Предполагается знание механики, молекулярной физики, электромагнетизма и оптики в плане общей физики.

Для студентов и аспирантов физико-технического и инженерно-физического профиля, а также научно-технических работников, занятых в различных областях современной физики.

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

кафедра атомной физики и физики плазмы Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова;

доктор физико-математических наук *Я. А. Смородинский*

**ISBN 5-93972-080-3**

**ББК 22.31**

© Л. Л. Гольдин, Г. И. Новикова, 2002

© Институт компьютерных исследований, 2002

<http://rcd.ru>

# ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>Предисловие</b> . . . . .	4
<b>Введение</b> . . . . .	5
<b>ГЛАВА 1. Физические основы квантовой теории</b> . . . . .	7
§ 1. Корпускулярные свойства электромагнитного излучения . . . . .	7
§ 2. Волновые свойства частиц . . . . .	15
§ 3. Свойства волн де Бройля . . . . .	21
§ 4. Принцип неопределенности . . . . .	28
<b>ГЛАВА 2. Основы квантовой механики</b> . . . . .	38
§ 5. Средние значения . . . . .	38
§ 6. Операторы . . . . .	42
§ 7. Собственные состояния . . . . .	48
§ 8. Уравнение Шредингера . . . . .	51
<b>ГЛАВА 3. Частица в потенциальной яме. Квантование энергии. Туннельный эффект</b> . . . . .	53
§ 9. Прямоугольная потенциальная яма. Принцип соответствия . . . . .	53
§ 10. Потенциальный барьер. Туннельный эффект . . . . .	63
§ 11. Линейный гармонический осциллятор. Колебательные уровни молекул . . . . .	66
<b>ГЛАВА 4. Водородоподобные атомы</b> . . . . .	72
§ 12. Энергетические уровни водородоподобных атомов . . . . .	72
§ 13. Экспериментальные исследования энергетических уровней атома. Потенциалы возбуждения и ионизации . . . . .	78
§ 14. Спектры водородоподобных атомов . . . . .	81
§ 15. Распределение электронной плотности в атоме водорода . . . . .	86
§ 16. Мезоатомы . . . . .	89
§ 17. Ширина уровней . . . . .	90

<b>ГЛАВА 5. Угловой момент и магнитные характеристики электронов, атомов и молекул</b> . . . . .	94
§ 18. Угловой момент . . . . .	94
§ 19. Вращательные уровни молекул. Молекулярные спектры . . . . .	100
§ 20. Классификация состояний электронов. Главное квантовое число. Вырождение уровней . . . . .	107
§ 21. Правила сложения угловых моментов . . . . .	109
§ 22. Орбитальный магнитный момент электрона . . . . .	113
§ 23. Экспериментальное определение угловых и магнитных моментов . . . . .	116
§ 24. Спин электрона . . . . .	118
§ 25. Магнитомеханические явления . . . . .	122
§ 26. Полные угловой и магнитный моменты электрона . . . . .	123
§ 27. Тонкая структура уровней атома водорода и водородоподобных атомов . . . . .	126
§ 28. Строение атома по Бору . . . . .	129
<b>ГЛАВА 6. Структура и спектры сложных атомов</b> . . . . .	134
§ 29. Структура электронных уровней в сложных атомах . . . . .	135
§ 30. Типы связи электронов в атомах . . . . .	137
§ 31. Принцип Паули (принцип исключения) . . . . .	139
§ 32. Периодическая система элементов Д. И. Менделеева . . . . .	143
§ 33. Правила отбора при излучении атомов . . . . .	151
§ 34. Оптические спектры сложных атомов . . . . .	156
§ 35. Рентгеновское излучение . . . . .	163
§ 36. Классическая и квантовая физика . . . . .	177
<b>ГЛАВА 7. Атомы в магнитных полях</b> . . . . .	184
§ 37. Явление Зеемана . . . . .	184
§ 38. Магнитный резонанс . . . . .	194
<b>ГЛАВА 8. Основы квантовой статистики</b> . . . . .	201
§ 39. Число квантовых состояний. Статистический вес . . . . .	202
§ 40. Заполнение уровней. Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака . . . . .	207
<b>ГЛАВА 9. Тепловое излучение</b> . . . . .	215
§ 41. Равновесное излучение. Закон Кирхгофа . . . . .	215
§ 42. Формула Планка . . . . .	220
§ 43. Классические формулы для равновесного излучения . . . . .	222
§ 44. Формула Рэлея – Джинса . . . . .	228
§ 45. Давление излучения . . . . .	230

ГЛАВА 10. <b>Физические основы квантовой электроники</b> . . . . .	233
§ 46. Спонтанное и индуцированное излучение . . . . .	233
§ 47. Квантовые усилители и генераторы . . . . .	240
§ 48. Методы создания инверсной населенности уровней . . . . .	243
§ 49. Устройство оптических квантовых генераторов . . . . .	247
§ 50. Структура лазерного излучения . . . . .	255
ГЛАВА 11. <b>Молекулы и кристаллы</b> . . . . .	260
§ 51. Химическая связь. Образование молекул . . . . .	260
§ 52. Молекула водорода. Обменное взаимодействие . . . . .	264
§ 53. Связь атомов в твердых телах (кристаллах) . . . . .	271
§ 54. Симметрия кристаллов . . . . .	276
§ 55. Колебания кристаллических решеток. Звуковые волны. Тепловое расширение . . . . .	280
§ 56. Фононы . . . . .	288
§ 57. Теплоемкость кристаллических решеток . . . . .	291
§ 58. Решеточная теплопроводность . . . . .	297
ГЛАВА 12. <b>Электроны в кристаллах</b> . . . . .	299
§ 59. Связанные колебательные системы. Разрешенные и запрещенные зоны . . . . .	299
§ 60. Проводники и изоляторы . . . . .	303
§ 61. Волны Блоха . . . . .	306
§ 62. Динамика электронов в кристалле. Электропроводность кристаллов . . . . .	314
§ 63. Электроны в металлах . . . . .	320
ГЛАВА 13. <b>Полупроводники</b> . . . . .	325
§ 64. Чистые и примесные полупроводники . . . . .	325
§ 65. Электроны и дырки . . . . .	328
§ 66. Концентрация электронов и дырок. Энергия Ферми . . . . .	331
§ 67. Электропроводность полупроводников . . . . .	335
§ 68. $n - p$ -переход . . . . .	337
§ 69. Прохождение тока через $n - p$ -переход . . . . .	341
§ 70. Транзисторы . . . . .	344
§ 71. Квазичастицы . . . . .	345
ГЛАВА 14. <b>Атомное ядро, его характеристики и свойства</b> . . . . .	347
§ 72. Основные характеристики атомного ядра . . . . .	348
§ 73. Энергия связи ядер. Свойства ядерных сил . . . . .	355
§ 74. Модели атомного ядра . . . . .	360
§ 75. Спонтанные превращения атомных ядер . . . . .	369

<b>ГЛАВА 15. Ядерные реакции</b> . . . . .	385
§ 76. Основные характеристики ядерных реакций . . . . .	386
§ 77. Теория составного ядра. Ядерные реакции с участием нейтронов . . . . .	391
§ 78. Взаимодействие с ядрами $\gamma$ -лучей. Фотоядерные реакции. Эффект Мессбауэра . . . . .	402
§ 79. Цепная реакция деления. Проблемы ядерной энергетики . . . . .	405
<b>ГЛАВА 16. Элементарные частицы</b> . . . . .	418
§ 80. Нуклоны и лептоны. Терминология. Слабое взаимодействие . . . . .	419
§ 81. Сильное взаимодействие. Кварки. Цвет и аромат кварков. Фундаментальные частицы первого поколения . . . . .	423
§ 82. Некоторые результаты теории относительности . . . . .	428
§ 83. Старшие поколения фундаментальных частиц . . . . .	433
§ 84. Диаграммы Фейнмана. Виртуальные частицы. Поляризация вакуума. Асимптотическая свобода . . . . .	438
§ 85. Переносчики взаимодействий. Ядерные силы. Таблицы фундаментальных частиц и переносчиков взаимодействий . . . . .	442
§ 86. Симметрии в физике. Нарушение основных типов симметрии при слабом взаимодействии . . . . .	447
§ 87. Элементарные частицы и космос . . . . .	451
§ 88. Ускорители заряженных частиц . . . . .	458
<b>Заключение</b> . . . . .	471
<b>Приложения</b> . . . . .	474
I. Среднее значение проекции импульса . . . . .	474
II. Радиальная часть оператора Лапласа . . . . .	476
III. Уравнения движения связанных маятников . . . . .	477
IV. Основные физические константы . . . . .	479
V. Названия, символы и атомные массы химических элементов . . . . .	480
<b>Список обозначений</b> . . . . .	481
<b>Предметный указатель</b> . . . . .	482

# ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемая книга основана на лекциях, которые читались студентам Московского Физико-технического института (МФТИ) и Инженерной академии в курсах общей физики (после оптики). Первые главы следуют «Введению в квантовую физику», изданному издательством «Наука» в 1988 году, затем идут новые главы, посвященные ядерной физике и физике элементарных частиц.

При изложении главное внимание уделяется основным представлениям квантовой физики и физической сущности явлений. Математический аппарат излагается лишь постольку, поскольку это необходимо для ясного понимания материала.

При написании книги мы уделяли главное внимание краткости и ясности изложения и старались отбросить все второстепенное. Мы считаем, что только такая книга, которая концентрирует внимание студента на понимании основных представлений и наиболее существенных явлений, оставляет у него время для размышлений и для решения задач. Отобранный материал излагается достаточно подробно, с расчетами, сопоставлениями и выводами.

Авторы искренне признательны профессору Э. И. Рашба, разрешившему нам воспользоваться конспектами его лекций по физике твердого тела и просмотревшему соответствующие главы рукописи, академику Л. Б. Окуню, просмотревшему первый вариант книги в рукописи и сделавшему ряд важных замечаний, и профессору М. Волошину, который указал нам на ряд погрешностей в изложении. Академик Л. Б. Окунь разрешил нам широко использовать материал и примеры, содержащиеся в его книгах.

# ВВЕДЕНИЕ

С начала XX века стали накапливаться опытные данные, объяснить которые классическая физика оказалась неспособной. Они охватывали широкий круг физических проблем: уменьшение теплоемкости тел при низких температурах, структуру оптических спектров газообразных веществ, распределение интенсивности в спектрах твердых тел, фотоэффект, изменение частоты рентгеновского излучения при рассеянии, дифракцию медленных электронов и т. д. Становилось все более ясно, что для объяснения этих и многих других явлений необходим пересмотр основных представлений физики.

Первые шаги в этом направлении сделали М. Планк и А. Эйнштейн. Затем последовала серия замечательных работ, полностью изменивших наши представления о мире. Новое понимание пришло в науку с работами Эйнштейна (теория относительности, представление о квантах света) и глубокими идеями Н. Бора и его школы (квантовая механика). Развитие новой физики с тех пор интенсивно продолжается и привело к появлению теории атома, теории твердых тел, теории ядра, а затем и элементарных частиц. Создание новой физики связано с именами ряда замечательных ученых, среди которых, кроме упомянутых выше, в первую очередь должны быть названы В. Гейзенберг, Э. Шредингер, В. Паули, П. Дирак, Э. Ферми, Ш. Глэшоу, К. Руббиа, А. Салам, Л. Ландау.

В наше время квантовая физика совершает революцию не только в научных представлениях, но и в технике. Мы пользуемся электричеством, которое вырабатывается на атомных электростанциях. Нас окружают телевизоры и др. приборы на полупроводниках, работа которых основана на квантовой теории твердых тел. В наш быт прочно вошли компьютеры с интегральными схемами. Квантовые источники излучения — лазеры — широко используются в медицине и в технике. Основанные на квантовых эффектах сверхпроводящие магниты производятся тысячами. Мы уже не говорим об экспериментальной физике, где значительная часть методов стала возможной только после развития новой техники. Наконец, квантовая физика изменила наши представления о ходе развития Вселенной. . .

Объем знаний, накопленных наукой после появления квантовой физики, во много раз превышает все, что было известно ранее. Все эти



знания не могут быть изложены ни в какой отдельно взятой книге. Важнейшим элементом образования является чтение научной литературы. Мы старались сделать возможным такое чтение, приобщая читателя к основным идеям, языку и терминологии, которые используются в статьях и книгах. Связанная с квантовыми представлениями перестройка науки, техники и быта еще только начинается. Новому поколению — читателям этой книги — предстоит продолжить эту работу.

# ГЛАВА 1

## ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

### § 1. Корпускулярные свойства электромагнитного излучения

**Фотоэффект.** Фотоэффектом называется вырывание электронов из вещества под действием электромагнитного излучения.

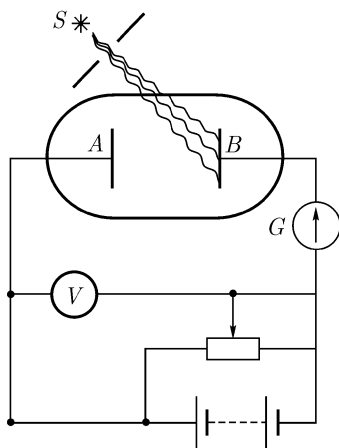


Рис. 1. Схема установки для исследования фотоэффекта.

На рис. 1 изображена схема экспериментальной установки, предназначенной для наблюдения фотоэффекта под действием света. Между двумя металлическими пластинами  $A$  и  $B$ , находящимися в колбе, из которой откачан воздух, создана разность потенциалов  $V$ . Так как пластины находятся в вакууме, то ток в цепи не идет. Если же осветить внутреннюю поверхность одной из пластин, то в цепи появляется ток, который может быть зафиксирован гальванометром  $G$ . Появление тока связано с тем, что световые лучи вырывают с поверхности пластины электроны и, таким образом, в пространстве между пластинами появляются носители заряда. Разумеется, на освещаемую пластину следует подавать отрицательный потенциал.

С помощью установки, изображенной на рис. 1, можно исследовать зависимость тока от интенсивности и от частоты света, падающего на пластину.

Наиболее простой является зависимость тока  $i$  в цепи от интенсивности света  $I$  при одной и той же частоте  $\omega$  (рис. 2). Число электронов, вырываемых светом с поверхности пластины, прямо пропорционально

интенсивности света. Такой характер графика вполне согласуется с представлениями классической физики о взаимодействии электромагнитных волн с электронами.

Однако при исследованиях обнаружилось и явления, резко противоречащие представлениям классической физики. Осветим пластину  $B$  монохроматическим светом с частотой  $\omega$  и интенсивностью  $I_1$  и исследуем зависимость силы тока от разности потенциалов между электродами. Оказывается, что ток течет при всех отрицательных значениях  $V = V_B - V_A$  и при положительных значениях  $V$ , вплоть до некоторого  $V_0$ , а при  $V > V_0$  прекращается. Эта зависимость тока от разности потенциалов изображена на рис. 3.

Разность потенциалов  $V_0$ , при которой электрический ток прекращается, называется запирающим потенциалом. Запирающий потенциал связан с максимальной кинетической энергией электронов, выбиваемых светом из пластины  $B$ , очевидным соотношением  $eV_0 = T$ , где  $e$  — заряд электрона, а  $T$  — максимальная кинетическая энергия электронов.

На рис. 3 изображена также кривая фототока при некоторой другой интенсивности света ( $I_2 > I_1$ ), но при той же частоте. Как и следовало ожидать, ток в этом случае оказывается большим, чем в первом случае. Неожиданным оказывается тот факт, что запирающий потенциал  $V_0$  при этом не изменяется. Таким образом, опыт показывает, что максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов не зависит от интенсивности света. Этот результат резко противоречит представлениям классической физики. Согласно классической теории интенсивность световой волны пропорциональна квадрату амплитуды электрического вектора, воздействующего на электроны в металле. Чем больше интенсивность света, тем большую энергию должны получать вырываемые из металла электроны.

Результаты опытов показывают, что запирающий потенциал  $V_0$  (а следовательно, и энергия фотоэлектронов) зависит не от интенсивности, а от частоты света. Эта зависимость изображена на рис. 4 и имеет вид прямой, не проходящей через начало координат. Наименьшая частота света  $\omega_0$ , при которой возникает фотоэффект, называется красной границей фотоэффекта и зависит от вещества, из которого сделана облучаемая пластина.

Зависимость, изображенная на рис. 4, противоречит обычным клас-

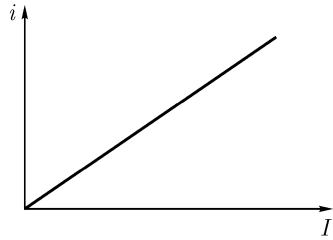


Рис. 2. Зависимость тока от интенсивности света.

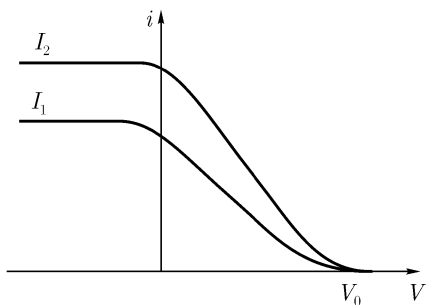


Рис. 3. Зависимость тока от разности потенциалов между электродами.

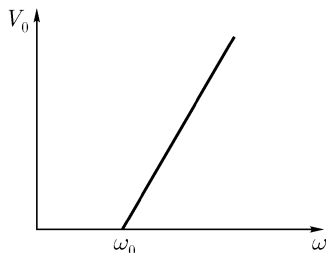


Рис. 4. Зависимость задерживающего потенциала от частоты света.

сическим представлениям не менее резко, чем обсуждавшееся выше отсутствие связи между кинетической энергией фотоэлектронов и интенсивностью света. Если считать электроны в металле свободными, то их кинетическая энергия (при данной интенсивности света) с увеличением частоты должна была бы не расти, а падать. В самом деле, уравнение движения свободного электрона под действием электрического поля световой волны  $E \cos \omega t$  записывается в виде

$$m\ddot{x} = eE \cos \omega t.$$

Интегрируя это уравнение, найдем

$$mv = \frac{eE}{\omega} \sin \omega t,$$

$$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2m} (mv)^2 = \frac{1}{2m} \left( \frac{eE}{\omega} \right)^2 \sin^2 \omega t.$$

Таким образом, по классической физике кинетическая энергия свободных электронов с увеличением частоты света должна не возрастать, а падать. Не является ли этот результат указанием на то, что ответственные за фотоэффект электроны на самом деле не являются свободными? Покажем, что взаимодействие световой волны со связанными в атомах электронами также не может объяснить хода кривой на рис. 4. При взаимодействии гармонически меняющегося со временем электрического поля с упругосвязанными электронами должна наблюдаться резонансная зависимость амплитуды колебаний от частоты света. Следует поэтому ожидать, что зависимость запирающего потенциала от частоты также

будет иметь резонансный характер, как это изображено на рис. 5. Таким образом, наблюдающаяся на опыте зависимость  $V_0$  от  $\omega$  (рис. 4) не имеет ничего общего с предсказаниями классической физики как для свободных, так и для связанных электронов.

Объяснение фотоэлектрического эффекта было найдено Альбертом Эйнштейном (1905 г.). Эйнштейн предложил рассматривать свет, взаимодействующий с электронами при фотоэффекте, не как волну, а как поток корпускул, или к в а н т о в. Энергия каждого, кванта определяется соотношением

$$E = \hbar\omega. \quad (1.1)$$

Здесь  $\omega$  — круговая частота света,  $\hbar$  — постоянная Планка ( $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-27}$  эрг · с). (Постоянная  $\hbar$  была впервые введена Планком в 1900 г. для объяснения спектров испускания нагретых тел.)

При освещении электрода светом происходит взаимодействие квантов света с электронами вещества; квант поглощается, и его энергия передается электрону, с которым произошло взаимодействие, Максимальная энергия электрона определяется формулой

$$T = \hbar\omega - A, \quad (1.2)$$

где  $A$  — работа выхода электронов из освещаемого электрода в вакуум.

Уравнение (1.2) носит название у р а в н е н и я Э й н ш т е й н а для фотоэффекта и представляет собой просто закон сохранения энергии при фотоэлектрическом поглощении света.

Вернемся к кривым, изображенным на рис. 2–4, и попробуем объяснить их исходя из представлений Эйнштейна и формулы (1.2). Зависимость, представленная на рис. 2, является вполне естественной не только с волновой, но и с квантовой точки зрения. В самом деле, увеличение интенсивности светового пучка означает увеличение числа квантов, числа их взаимодействий с электронами и, следовательно, фототока.

Не менее естественным образом объясняются кривые рис. 3. Фототок  $i$  прекращается при таких значениях потенциала  $V_0$ , при которых  $eV_0 = T$ , где  $T$  — кинетическая энергия фотоэлектронов. Используя уравнение (1.2), получаем

$$eV_0 = \hbar\omega_0 - A \quad (1.3)$$

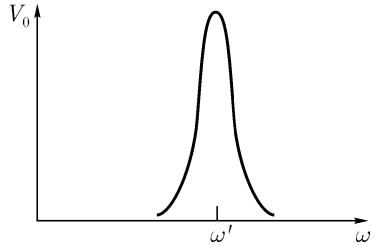


Рис. 5. Зависимость задерживающего потенциала от частоты света (классическая модель упруго связанных электронов).

Из полученного равенства видно, что для данного вещества и заданной частоты света  $\omega$  запирающий потенциал не зависит от интенсивности света (рис. 4). Постепенное уменьшение тока с увеличением  $V$  (рис. 3) связано с тем, что энергия фотона, вообще говоря, делится между выбиваемым электроном и другими электронами и атомами катода. Максимальная кинетическая энергия электрона соответствует случаю, когда вся энергия кванта целиком передается электрону.

Из уравнения (1.3) может быть получено значение минимальной для данного вещества частоты  $\omega_0$ , при которой становится возможным фотоэффект (рис. 4):

$$h\omega_0 = A, \quad \omega_0 = A/h. \quad (1.4)$$

Полученная из равенства (1.4) частота  $\omega_0$  и является «красной границей» фотоэффекта. Так как минимальное значение работы выхода в металлах составляет около 2 эВ =  $3,2 \cdot 10^{-12}$  эрг, фотоэффект на металлах становится возможным при частотах порядка

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \frac{3,2 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}}{1,05 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}} = 0,5 \cdot 10^{15} \text{ Гц.}$$

Этим частотам соответствует электромагнитное излучение в видимой части спектра ( $\lambda = c/\nu \approx 600$  нм). Кванты электромагнитного излучения принято называть **ф о т о н а м и**.

Квантовая (или фотонная) теория света, предложенная Эйнштейном, хорошо объясняет закономерности, наблюдающиеся при экспериментальном исследовании фотоэффекта. Свет, распространяющийся в пространстве как электромагнитная волна, при фотоэффекте неожиданно обнаруживает свойства частиц.

Не менее ярко, чем при фотоэффекте, корпускулярные (квантовые) свойства электромагнитного излучения обнаруживаются при комптоновском рассеянии рентгеновских лучей (эффект Комптона).

**Эффект Комптона.** Эффектом Комптона называют изменение длины волны электромагнитного излучения при рассеянии. Впервые этот эффект наблюдался Комптоном (1923 г.) при рассеянии рентгеновских лучей ( $\lambda \approx 0,1$  нм).

Схема экспериментальной установки для наблюдения эффекта Комптона изображена на рис. 6. Рентгеновские лучи генерируются в трубке  $T$  и проходят через фильтр  $\Phi^1$ , выделяющий излучение с некоторой длиной волны  $\lambda_0$ . Излучение рассеивается на образце  $O$  и регистрируется с помощью детектора, установленного под углом  $\varphi$  к падающему пучку. Для наблюдения эффекта Комптона детектор должен обладать

<sup>1</sup>Принцип действия фильтров селективного поглощения для рентгеновского излучения разобран в § 35.

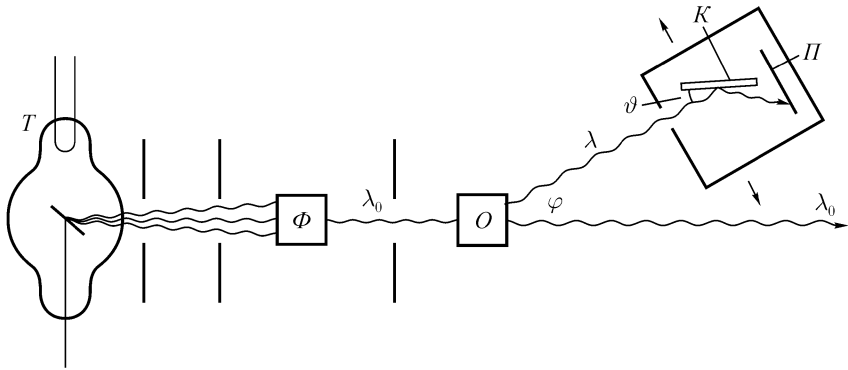


Рис. 6. Схема установки для исследования эффекта Комптона.

способностью измерять длину волны рассеянного излучения. На рис. 6 в качестве такого детектора изображен кристаллический дифракционный спектрометр рентгеновских лучей, основными частями которого являются качающийся во время опыта кристалл  $K$  и фотопластинка  $\Pi$ . При отражении от кристалла рентгеновские лучи интерферируют, образуя дифракционные максимумы в направлениях, определяемых формулой Брэгга – Вульфа:

$$2d \sin \vartheta = n\lambda, \quad (1.5)$$

где  $d$  — расстояние между атомными плоскостями в кристалле,  $\lambda$  — длина волны рентгеновских лучей,  $\vartheta$  — угол скольжения,  $n$  — порядок максимума отраженных лучей ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ).

Угол скольжения  $\vartheta$  определяется по положению линии почернения на пластинке  $\Pi$ , а длина волны рассеянных рентгеновских лучей находится по формуле (1.5).

Изучая рассеяние рентгеновских лучей, Комптон установил, что в рассеянном излучении, кроме лучей с начальной длиной волны  $\lambda_0$ , присутствует излучение с большей длиной волны, чем первичное, и что увеличение длины волны оказывается тем существеннее, чем больше угол рассеяния  $\varphi$ , и не зависит от вещества рассеивателя.

Было установлено, что изменение длины волны  $\Delta\lambda$ , связано с углом рассеяния  $\varphi$  формулой<sup>1</sup>

$$\Delta\lambda = 2\pi\lambda_e(1 - \cos \varphi). \quad (1.6)$$

Входящая в формулу постоянная  $\lambda_e$  оказалась равной  $3,86 \cdot 10^{-11}$  см.

<sup>1</sup>Постоянную  $2\pi$  часто включают в  $\lambda_e$ . Тогда формула (1.6) приобретает вид  $\Delta\lambda = \lambda_e(1 - \cos \varphi)$ ,  $\lambda_e = 2\pi\lambda_e$ .

В формулу (1.6), как мы видим, не входят характеристики вещества, на котором происходит рассеяние рентгеновских лучей. Это свидетельствует о том, что рассеяние определяется взаимодействием со свободными (или почти свободными) электронами вещества.

Рассмотрим рассеяние электромагнитного излучения на электронах с точки зрения классической физики. Электромагнитное поле должно «раскачивать» электроны с той же частотой, которой обладает поле. Возбужденные таким образом электроны должны излучать электромагнитные волны той же самой частоты<sup>1</sup>. Таким образом, по законам классической физики рассеянное излучение независимо от угла рассеяния должно обладать одной и той же частотой — частотой первичного излучения. Опыт же указывает на то, что при рассеянии происходит увеличение длины волны и, следовательно, уменьшение частоты излучения.

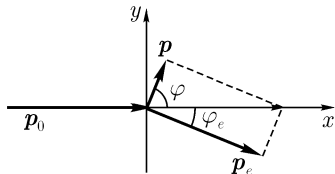


Рис. 7. Диаграмма импульсов при комптоновском рассеянии квантов.

Попробуем рассчитать эффект Комптона как рассеяние квантов рентгеновского излучения на электронах. Применим для расчета рассеяния законы сохранения энергии и импульса.

На рис. 7 изображена диаграмма импульсов для столкновения кванта со свободным электроном, который до столкновения покоился. Здесь  $\mathbf{p}_0$  — импульс первичного кванта;  $\mathbf{p}$  — импульс кванта, рассеянного под углом  $\varphi$ ;  $\varphi_e$  и  $\mathbf{p}_e$  — угол вылета и импульс электрона отдачи. При построении диаграммы импульсов был учтен закон сохранения импульса

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{p} + \mathbf{p}_e. \quad (1.7)$$

Воспользуемся этим законом и законом сохранения энергии для того, чтобы вывести зависимость (1.6), полученную из опыта.

Импульс, энергия и масса частиц связаны друг с другом известной релятивистской формулой

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4.$$

Так как масса покоя квантов равна нулю, то импульсы квантов до и после рассеяния равны соответственно

$$p_0 = \frac{E_0}{c} = \frac{\hbar\omega_0}{c}, \quad p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}. \quad (1.8)$$

<sup>1</sup>На самом деле небольшое изменение частоты, связанное с тем, что колеблющийся электрон взаимодействует с магнитным полем электромагнитной волны, а также с эффектом Доплера, возникает и в классической теории. Эти эффекты невелики и зависят от интенсивности волны, от которой комптон-эффект не зависит.



Перенесем в (1.7)  $\mathbf{p}_e$  в левую часть и возведем полученное равенство в квадрат:

$$p_e^2 = p_0^2 - 2\mathbf{p}_0\mathbf{p} + p^2.$$

Заменяя в этом равенстве  $p_0$ , и  $p$  с помощью (1.8) и умножая его на  $c^2$ , найдем

$$p_e^2 c^2 = (\hbar\omega_0)^2 - 2\hbar\omega_0\hbar\omega \cos\varphi + (\hbar\omega)^2. \quad (1.9)$$

Исключим из (1.9) член  $p_e^2 c^2$ . Для этого воспользуемся законом сохранения энергии, который в нашем случае имеет вид

$$\hbar\omega_0 + mc^2 = \hbar\omega + \sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (1.10)$$

В (1.10) перенесем  $\hbar\omega$  в левую часть и полученное равенство возведем в квадрат. Тогда

$$p_e^2 c^2 = (\hbar\omega_0 - \hbar\omega)^2 + 2(\hbar\omega_0 - \hbar\omega)mc^2. \quad (1.11)$$

Из (1.9) и (1.11) найдем

$$\hbar(\omega_0 - \omega)mc^2 = \hbar\omega_0\hbar\omega(1 - \cos\varphi). \quad (1.12)$$

Из этого выражения следует связь энергии кванта до и после рассеяния:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar\omega_0 mc^2}{mc^2 + \hbar\omega_0(1 - \cos\varphi)}. \quad (1.13)$$

Найдем теперь связь между длинами волн при рассеянии. Для этого в выражении (1.12) вместо частоты  $\omega$  введем длину волны  $\lambda = 2\pi c/\omega$ . Окончательно получим

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos\varphi).$$

Сравнивая выведенную нами формулу с экспериментальной формулой Комптона (1.6), приходим к выводу, что

$$\boxed{\lambda_e = \hbar/mc.} \quad (1.14)$$

Рассчитаем числовое значение этой константы:

$$\lambda_e = \frac{\hbar}{mc} = \frac{\hbar}{mc^2} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}) \cdot (3 \cdot 10^{10} \text{ см/с})}{(0,511 \cdot 10^6 \text{ эВ}) \cdot (1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг/эВ})} = 3,86 \cdot 10^{-11} \text{ см}.$$

(При расчете в формулу подставлена не масса электрона  $m$ , а его энергия покоя  $mc^2 = 0,511 \cdot 10^6$  эВ.) Мы убедились в том, что теоретическое значение  $\lambda_e$  совпадает с экспериментальным значением.  $\lambda_e$  называется комптоновской длиной волны электрона<sup>1</sup>.

Итак, с помощью квантовой теории излучения мы получили одну из основных закономерностей, характерных для эффекта Комптона. Квантовая теория эффекта Комптона позволяет полностью рассчитать связь между импульсами, энергиями и углами разлета электронов и квантов.

Из сказанного ясно, что электромагнитное излучение обладает как волновыми, так и корпускулярными свойствами. При исследовании законов распространения (интерференция, дифракция) проявляется главным образом волновая природа излучения, а в актах: взаимодействия — его корпускулярные свойства. Чем жестче излучение (т. е. при переходе от радиоволн и видимого света к рентгеновскому и  $\gamma$ -излучению), тем яснее проявляется его фотонный характер.

## § 2. Волновые свойства частиц

В предыдущем параграфе было показано, что свет и рентгеновские лучи (и вообще всякое электромагнитное излучение) в одних опытах ведут себя как волны, а в других — как частицы — фотоны. Оказывается, что и частицы в свою очередь обнаруживают волновые свойства.

**Опыты Девиссона и Джермера. Гипотеза де Бройля.** Классическими опытами, в которых отчетливо обнаружилось волновые свойства частиц, явились опыты Девиссона и Джермера (1927 г.). В этих опытах наблюдалась дифракция электронов при рассеянии от кристалла. Схема опытов Девиссона и Джермера изображена на рис. 8. Электроны, испускаемые раскаленной нитью  $A$ , ускорялись разностью потенциалов  $V$ , приложенной между нитью  $A$  и вытягивающим электродом  $B$ . Прошедшие через отверстие в электроде и ускоренные электроны попадали на кристалл  $C$  и рассеивались. При помощи детектора  $D$  измерялась интенсивность рассеянных электронов как функция угла  $\theta$  при различных значениях ускоряющего потенциала, т. е. при различных энергиях электронов.

На рис. 9 изображена полярная диаграмма распределения интенсивности электронов с энергией 60 эВ, рассеянных на кристалле никеля. Из рисунка видно, что интенсивность рассеянных электронов имеет максимум при угле  $\theta = 25^\circ$ . На рис. 10 приведены результаты опытов, в которых интенсивность измерялась при заданном угле  $\theta$ , но при различных

<sup>1</sup>В литературе комптоновской длиной волны иногда называют не  $\lambda_e$ , а  $\lambda_e = 2\pi\lambda_e = 2,426 \cdot 10^{-10}$  см.

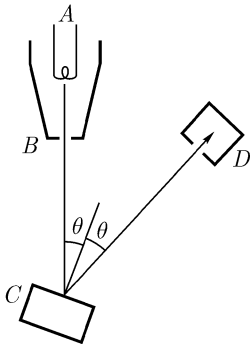


Рис. 8. Схема опытов Девиссона – Джермера.

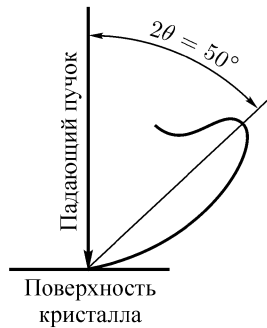


Рис. 9. Полярная диаграмма зависимости интенсивности отражения от угла рассеяния электронов на кристаллическом образце.

значениях  $V$ . На графике, на котором по оси абсцисс отложен корень из ускоряющего напряжения, максимумы и минимумы интенсивности почти равноудалены друг от друга. Кривые на рис. 9 и 10 типичны для распределения интенсивности при рассеянии волн. Такие же дифракционные максимумы и минимумы возникают при рассеянии рентгеновских лучей на кристаллах.

Опыты Девиссона и Джермера произвели огромное впечатление на физиков. После этих опытов стало очевидно, что «классические» частицы обладают явно выраженными волновыми свойствами.

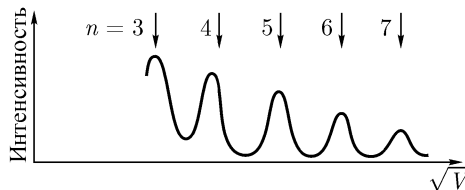


Рис. 10. Зависимость интенсивности от ускоряющего напряжения в опытах Девиссона – Джермера.

Наличие волновых свойств у частиц было предсказано де Бройлем (1924 г.), который высказал мысль о том, что каждой движущейся частице может быть сопоставлена некоторая волна. Установим связь между

параметрами этой волны — волны де Бройля — и движением соответствующих частиц. В предыдущем параграфе мы уже установили такую связь между энергией и импульсом фотона и частотой световой волны (см. (1.1) и (1.7)):

$$E = \hbar\omega, \quad p = E/c = \hbar\omega/c.$$

Введем волновое число  $k = \omega/c = 2\pi/\lambda$ . Тогда

$$\boxed{p = \hbar k.} \quad (1.15)$$

Зависимость (1.15) была распространена де Бройлем на все частицы. Согласно (1.15) длина волны частицы, движущейся с импульсом  $p$ , равна

$$\lambda = 2\pi/k = 2\pi\hbar/p. \quad (1.16)$$

Вернемся к опытам Девиссона и Джермера. Кинетическая энергия  $T$  электронов, ускоренных разностью потенциалов  $V$ , равна  $eV$ , а длина соответствующей волны де Бройля, согласно (1.16), равна

$$\lambda = 2\pi\hbar\sqrt{2meV} \quad (1.17)$$

Разность потенциалов  $V$  в опытах Девиссона и Джермера составляла несколько десятков вольт. Рассчитаем по формуле (1.17) длину волны де Бройля для электронов при  $V = 50$  В:

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{2\pi}{\hbar} = \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{2mc^2eV}} = \frac{2\pi \cdot (10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}) \cdot (3 \cdot 10^{10} \text{ см/с})}{\sqrt{2 \cdot (5 \cdot 10^5 \text{ эВ}) \cdot 50 \text{ эВ} \cdot (1,6 \cdot 10^{12} \text{ эрг/эВ})}} = \\ &= 1,6 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 0,16 \text{ нм}. \end{aligned}$$

Такую же длину волны (по порядку величины) имеют рентгеновские лучи. Неудивительно поэтому, что дифракционная картина для электронов при  $V = 50$  эВ оказывается очень похожей на дифракционную картину, наблюдавшуюся при рассеянии рентгеновских лучей на тех же кристаллах. Положение максимумов при отражении от кристалла, как известно, определяется формулой Брэгга – Вульфа<sup>1</sup>

$$2d \cos \theta = n\lambda. \quad (1.18)$$

<sup>1</sup>В формуле (1.18)  $\theta$  — угол отражения, тогда как в формулу (1.5) входит угол скольжения  $\vartheta$ .

Опыты с рентгеновскими лучами позволяют определить постоянную решетки  $d$  по формуле (1.5). Подставляя в (1.18) длину волны электронов из (1.17), найдем, что максимумы на рис. 10 должны наблюдаться при

$$\sqrt{V} = \frac{\pi \hbar n}{d \cos \theta \sqrt{2me}},$$

где  $n$  — любое целое число.

Одинаковые расстояния между пиками на рис. 10 (стрелки указывают расчетные положения максимумов 3-, 4-, 5-го и т. д. порядков) свидетельствуют о том, что волновая картина правильно описывает рассеяние электронов. Проверка (1.17) и лежащей в ее основе формулы (1.15), проведенная по положению пиков<sup>1</sup>, показала справедливость этих формул.

Через некоторое время после опытов Девиссона и Джермера были поставлены опыты, в которых дифракция наблюдалась при пропускании электронов через тонкие металлические пластинки (Томсон, Тартаковский). Дифракционная картина была получена также при отражении атомных и молекулярных пучков от кристаллов (Штерн). Дифракция нейтронов в настоящее время используется для исследования кристаллов не менее успешно, чем рентгеноструктурный анализ, и исследование дифракции электронов на белковых молекулах стало стандартным методом исследования. Таким образом, опыт показывает, что *все микрочастицы обладают волновыми свойствами, так что между ними и фотонами нет принципиального различия: и частицы, и фотоны являются микрообъектами, обладающими одновременно как свойствами частиц, так и волновыми свойствами.*

**Световые волны и волны материи (распространение фотонов и частиц).** Исследуем более подробно движение микрообъектов. Рассмотрим сначала движение фотонов (распространение света) через перегородку, содержащую две длинные щели (рис. 11). В качестве детектора света используем чувствительный фотоэлемент, способный регистрировать отдельные фотоны. Построив зависимость интенсивности света от координаты, получим обычную дифракционную картину. Остановим фотоэлемент в точке, соответствующей главному интерференционному максимуму, и попробуем ответить на вопрос, через которую из щелей проходят фотоны, регистрируемые фотоэлементом. Для этого сначала закроем одну из щелей, например первую. Интенсивность света (количе-

<sup>1</sup>На самом деле есть небольшое расхождение между экспериментальными значениями  $V$ , для которых наблюдаются максимумы интенсивности, и теоретическими значениями  $V$ , вычисленными по формуле (1.17). Это расхождение возникает из-за того, что в (1.17) не учтен показатель преломления волн де Бройля, который несколько отличается от единицы.

ство зарегистрированных фотонов) будет равна  $A^2$  ( $A$  — амплитуда световой волны, прошедшей в точку наблюдения через вторую щель). Откроем первую щель, а вторую закроем. Интенсивность останется прежней, т. е. снова будет равна  $A^2$ . Если мы теперь откроем обе щели, то, как хорошо известно из оптики, интенсивность станет равной  $(2A)^2 = 4A^2$ , т. е. возрастет не в два, а в четыре раза.

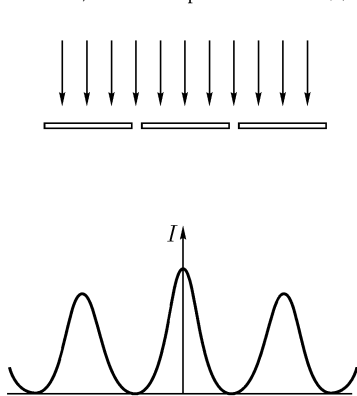


Рис. 11. Диаграмма распределения интенсивности света за экраном с двумя щелями.

Если бы фотоны летели через щели, как обычные частицы (одни через первую, а другие через вторую щель), то интенсивность возросла бы не в четыре, а в два раза. Следовательно, ответить на поставленный вопрос нельзя, и сам вопрос не имеет смысла. Полученный в опыте результат означает, что каждый фотон проходит через обе щели сразу.

Этот вывод становится еще более очевидным, если установить фотоэлемент в минимум дифракционной картины. В этом случае фотоэлемент не зарегистрирует ни одного фотона. Если же мы закроем одну из щелей, то минимума на прежнем месте не окажется. Фотоны начнут попадать в фотоэлемент. Значит, фотоны «знают», открыты ли обе щели сразу или одна из щелей закрыта. В этих условиях говорить о том, что фотон прошел через какую-то одну щель, конечно, не имеет никакого смысла.

Аналогичный опыт с дифракцией на двух щелях можно провести, «освещая» перегородку не светом, а частицами, например электронами. Для этого нужно только заменить источник света электронной пушкой, как это было в опытах Девиссона — Джермера, а фотоэлемент — детектором электронов<sup>1</sup>. Детектор регистрирует дифракционные максимумы и минимумы, положение которых может быть рассчитано по оптическим формулам, если каждому электрону сопоставить волну де Бройля. Закрывая и открывая любую из щелей, мы снова обнаружим учетверение интенсивности электронов в главном максимуме и появление электронов в минимуме дифракционной картины. Значит, электроны, так же как и фотоны, сразу проходят через все открытые в перегородке щели. Это означает также, что волны, прошедшие через обе щели, по-

<sup>1</sup>Таким детектором может быть и фотопластинка.

добно световым волнам, когерентны между собой. Когерентность волн, распространяющихся разными путями, еще более сближает волны де Бройля со световыми волнами.

**Волновые свойства микро- и макрочастиц.** Рассмотренные выше опыты убеждают нас в том, что все микрообъекты в равной мере обладают свойствами частиц и волн независимо от того, к какому из этих классов их относит классическая физика. Никакого принципиального различия между микро- и макрообъектами не существует. Почему же мы не замечаем волновых свойств у брошенного камня, у пылинки, оседающей под действием силы тяжести, и т. д.?

Из оптики известно, что волновая природа света наиболее ярко проявляется при огибании препятствий, размеры которых сравнимы с длиной световой волны (или в случаях, когда разность хода лучей, проходящих с двух сторон препятствия, имеет тот же порядок величины, что и длина световой волны). В тех же случаях, когда длина волны много меньше характерных размеров, определяющих явление, волновые свойства света становятся малосущественными и их можно не учитывать. Так, геометрическая оптика, с помощью которой до сих пор рассчитывается большинство оптических приборов, обходится без волновых представлений.

Между механикой и оптикой существует глубокая аналогия. Классическая механика Ньютона соответствует геометрической оптике и получается как предельный случай из более общей квантовой механики<sup>1</sup>, учитывающей волновые свойства рассматриваемых объектов. Применение квантовой механики не обязательно в тех же случаях, в которых волновая оптика может быть заменена геометрической оптикой: при распространении волн — в случаях, когда длина волны становится исчезающе малой по сравнению с характерными размерами системы ( $\lambda \ll L$ ).

Обратимся еще раз к опытам Девиссона и Джермера. Как было показано, дебройлевская длина волны электронов в этих опытах была равна по порядку величины 0,1 нм. При отражении электронов от кристалла происходит их рассеяние на атомах, находящихся в узлах кристаллической решетки; расстояния между узлами решетки по порядку величины также равны 0,1 нм; именно поэтому в опытах Девиссона и Джермера наблюдалась отчетливая дифракционная картина.

При увеличении энергии частиц длина волны уменьшается. Дебройлевская длина волны электронов, ускоренных до энергии 1 ГэВ, равна всего  $10^{-13}$  см. Волновые свойства таких электронов не проявляются при

---

<sup>1</sup>Термин «квантовая механика» используется чаще, чем эквивалентный ему термин «волновая механика».

рассеянии от кристаллов, так как  $d \gg \lambda$ , но при рассеянии от объектов с  $L \approx 10^{-13}$  см эти свойства снова оказываются существенными.

Рассчитаем теперь длину дебройлевской волны у какого-нибудь макроскопического объекта, например у пылинки, считая, что ее масса  $m = 1$  мг, а скорость  $v = 1$  мкм/с:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{6,6 \cdot 10^{-27}}{10^{-3} \cdot 10^{-4}} = 6,6 \cdot 10^{-20} \text{ см.}$$

Даже у такого небольшого макроскопического объекта, как пылинка, длина волны де Бройля оказывается неизмеримо меньше размеров самого объекта. Никакие волновые свойства в таких условиях, конечно, проявиться не могут. Применение волновой механики вместо классической приводит в этом случае только к запутыванию задачи, так же как применение волновой оптики для расчета даже самого простого объектива, ничего не изменяя в результате, делает расчет почти безнадежным.

### § 3. Свойства волн де Бройля

**Волновая функция.** В предыдущем параграфе было установлено, что распространение микрочастиц происходит так, как если бы их движение описывалось волнами. Известно, что распространение фотонов, т. е. распространение света с круговой частотой  $\omega$  и волновым вектором  $\mathbf{k}$ <sup>1</sup> описывается плоской волной

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{-i(\omega t - \mathbf{kr})}. \quad (1.19)$$

В выражении (1.19) заменим  $\omega$  и  $\mathbf{k}$ , используя формулы (1.1), и (1.15):

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{pr})\right]. \quad (1.20)$$

Волновой функцией (1.20) фотона является плоская световая волна<sup>2</sup>; для частиц волновая функция (1.20) является плоской волной де Бройля. В квантовой механике волновую функцию часто называют пси-функцией. Волна де Бройля (1.20) является волновой

<sup>1</sup>Направление вектора  $\mathbf{k}$  совпадает с направлением распространения волны, а его числовое значение равно волновому числу  $k = 2\pi/\lambda$ .

<sup>2</sup>В оптике вместо комплексной  $\psi$ -функции (1.20) часто используют действительную часть выражения (1.20). При комплексной записи показатель экспоненты в оптике обычно записывают без знака минус.



функцией ( $\psi$ -функцией) частицы, имеющей определенную энергию и импульс (и, следовательно, распространяющейся в свободном от сил пространстве). *Волновые функции распространяются, интерферируют и дифрагируют по обычным оптическим законам.*

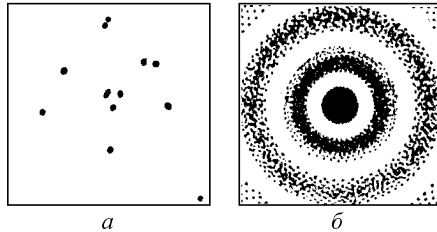


Рис. 12. Распределение электронов по фотопластинке: *а* — при небольшом числе электронов, *б* — при большом их числе.

**Вероятностный характер волновых функций.** Может возникнуть мысль, что волновые свойства проявляются только у большого количества частиц, когда одновременно летит много фотонов или электронов. Но это не так. Были проделаны опыты (Биберман, Сушкин, Фабрикант), в которых электроны проходили через рассеиватель (тонкую металлическую пластинку) по одному и каждый рассеянный электрон регистрировался фотопластинкой. Отдельные электроны попадали при этом в различные точки, на первый взгляд беспорядочно разбросанные по всей фотопластинке (рис. 12 *а*). Однако после рассеяния большого количества электронов обнаружилось, что точки попадания электронов на пластинку распределены не случайно, а образуют максимумы и минимумы интенсивности (рис. 12 *б*), положение которых может быть рассчитано по дифракционным формулам. Так как электроны при этом рассеивались и регистрировались поодиночке, следует признать, что движение каждого отдельного электрона определяется полной дифракционной картиной; если бы это было не так, электроны попадали бы, например, в минимумы распределения, чего не происходит.

Как же нужно понимать связь между волновой функцией и частицей, между световой волной и фотоном? Борн предложил рассматривать амплитуду  $A$  световой волны или волновой функции (1.20) как амплитуду вероятности<sup>1</sup> нахождения фотона или частицы в некотором месте пространства; выражение «амплитуда вероятности» нужно понимать в том смысле, что вероятность нахождения фотона или ча-

<sup>1</sup>Более точное определение амплитуды вероятности дано в § 5.

стицы равна не  $A$ , а  $|A|^2$ . В оптике принято говорить об интенсивности света, а не о вероятности нахождения фотона в заданной точке пространства. Если рассматривать пучок, содержащий большое количество фотонов, то интенсивность света в каждом данном месте пропорциональна вероятности нахождения фотонов, так что при большом числе фотонов или частиц эти два понятия отличаются коэффициентом пропорциональности. Световая волна определяет не только фазу и относительную интенсивность, но и абсолютную интенсивность света. В отличие от этого  $\psi$ -функция сведений об абсолютной интенсивности не содержит. Она определяет распределение одного (т. е. каждого) фотона.

Вероятностный характер волновой функции отчетливо проявляется в опытах по дифракции электронов при очень малой интенсивности пучка (рис. 12). Как уже указывалось, поведение каждого электрона определяется всей дифракционной картиной, но описывается вероятностным образом. Невозможно предсказать заранее место попадания на фотопластинку отдельного электрона. Но при увеличении числа рассеянных электронов их распределение все меньше и меньше отличается от закона распределения вероятности, т. е. от  $|A|^2$ .

Вероятностный смысл  $\psi$ -функции нередко понимается неправильно. Нельзя считать, что микрочастица, в согласии с классической физикой, всегда находится в одном месте, но это место нам неизвестно, и волновая функция указывает вероятность найти эту частицу в разных точках пространства. Так обстоит дело в классической кинетической теории газов, где предполагается, что у всех частиц во всякий данный момент времени есть свое место, но частиц много, уследить за всеми невозможно, и единственный реальный путь заключается в том, чтобы вычислить вероятность распределения частиц. Такая точка зрения противоречит явлению интерференции. Не имеет никакого смысла рассматривать по принципу Гюйгенса наложение волны, идущей от той точки, где частица действительно присутствует, и волны от точки, где частицы нет. Интерференционный расчет предполагает полное равноправие всех точек, в частности равноправие обеих щелей в опыте с двумя щелями. Дело обстоит так, как если бы электрон был «размазан» по пространству в соответствии с  $\psi$ -функцией.

Представление о размазанном электроне очень часто оказывается полезным, но полностью квантовомеханическим представлениям не отвечает. В этом отношении оно разделяет судьбу всех других классических аналогий. Так, картина размазанного электрона позволяет правильно рассчитывать распространение электронных волн, вероятность их взаимодействия с электронами и атомами, распределение электрической плотности в атоме и множество других явлений. В то же время оно не позволяет понять, каким образом происходит, например, взаимодей-

ствии электрона с фотопластинкой, при котором, как уже говорилось, на ней остается точечный, а не размазанный след. Если продолжить нашу аналогию, то следует себе представить, что в момент взаимодействия с фотопластинкой, как и при всех других актах взаимодействия, «размазанный» электрон «собирается» в точку. После взаимодействия электрон, конечно, перестает описываться прежней  $\psi$ -функцией. Его распределение оказывается теперь очень узким и отлично от нуля только в области почернения фотопластинки.

Остается понять, почему такая «размазанность» не наблюдается в поведении больших, классических объектов. Почему электрон проходит через две щели, а футбольный мяч никогда не оказывается в двух воротах сразу? Ответ на этот вопрос, собственно, уже был дан: длина волны, описывающей движение мяча, так мала по сравнению с ним самим, что его волновые свойства не проявляются и никаких дифракционных явлений заметить невозможно. Точно так же не дают интерференции пучки света, прошедшие через широкие, далеко друг от друга расположенные щели. При прохождении света через такие щели образуются два отдельных пучка, ограниченные с обеих сторон четкими тенями. В этом случае, не вступая в противоречие с опытом, можно утверждать, что фотоны, летящие в левом пучке, прошли через левую щель, а фотоны правого пучка — через правую щель. Фотонам обоих пучков можно приписать определенную траекторию, совпадающую с направлением каждого из двух световых лучей.

Наличие траекторий вообще является одним из основных свойств частиц в классической механике. Находясь в одном месте, частицы обязательно отсутствуют в других местах. В классической волновой оптике волна, наоборот, находится одновременно во многих местах пространства. Согласно представлениям квантовой теории *все микрообъекты подобно волне находятся сразу во многих точках пространства*. Поэтому электронам, протонам, фотонам и другим микрочастицам, вообще говоря, нельзя приписывать траекторий<sup>1</sup>. От свойств классических частиц у них осталось другое — определенный заряд, определенная масса, определенная энергия, расходуемая так, как если бы она была сосредоточена в одной точке.

**Влияние опыта на состояние микрочастиц.** Вернемся к опыту с дифракцией электронов (рис. 11). Каждый из электронов после прохождения через щели регистрируется фотопластинкой и вызывает почернение какого-либо кристаллика бромистого серебра. Любой из этих электронов до взаимодействия с серебром был размазан по пространству

---

<sup>1</sup>При больших импульсах микрочастиц длина волны соответствующих волн, как следует из (1.16), становится очень малой и может оказаться много меньше атомных или даже ядерных размеров. В этих случаях понятие траектории снова приобретает смысл.

в согласии с дифракционной картиной. После взаимодействия он уже не размазан, а находится во вполне определенной точке пластинки. Значит,  $\psi$ -функция электрона в результате взаимодействия кардинальным образом изменилась. Эксперимент всегда меняет состояние микробъектов, и мы, таким образом, определяем состояние, которое частица имеет после, а не до опыта. Обнаружив почернение серебра, мы узнаем место, в котором оказался электрон после взаимодействия с пластинкой. О том, что до взаимодействия он описывался сложной дифракционной картиной, мы из этого опыта узнать не можем. Установить этот факт можно только после наблюдения за распределением большого числа «одинаковых» электронов, пропущенных через те же две щели<sup>1</sup>.

Влияние аппаратуры на измеряемые объекты можно проследить на следующем варианте опыта с двумя щелями. Попробуем «перехитрить природу» и постараемся узнать, через какую из двух щелей прошел электрон. Закроем левую щель тонкой, прозрачной для электронов пластинкой. Проходя через пластинку, электроны испытывают соударения с электронами вещества пластинки. Будем регистрировать «электроны отдачи», которые получили небольшую энергию в касательных соударениях. Включим детектор электронов, стоящий за щелями, «на совпадения» с детектором электронов отдачи. Если детекторы сработали одновременно (произошло «совпадение»), мы будем знать, что электрон прошел через левую щель, если электрона отдачи не возникло, значит, он прошел через правую щель.

Изучив распределение электронов, которое мы получим при совпадении отсчетов в обоих счетчиках, мы убедимся в том, что это распределение не будет иметь ничего общего с получавшейся раньше дифракционной картиной от двух щелей. Оно будет соответствовать дифракционной картине от одной, левой, щели. Распределение электронов, не вызвавших совпадений, даст дифракционную картину от правой щели.

Почему же картина распределения электронов так резко изменилась? В том случае, если не ставить вещества на пути электронов через левую щель, волны, прошедшие через обе щели, интерферируют и дают общую дифракционную картину — распределение от двух щелей. Электроны, испытавшие соударение и вызвавшие «отдачу», изменяют направление движения, а их волновые функции меняют фазу случайным образом, так что волны, описывающие электроны, испытавшие рассеяние, не

---

<sup>1</sup>Дальнейшее обдумывание этого вопроса показывает, что дело обстоит еще сложнее. Измерив распределение даже очень большого числа электронов на пластинке, мы определяем только  $|A|^2$ , т. е. квадрат модуля  $\psi$ -функции, и ничего не узнаем о ее фазе. А ведь свойства волны определяются не только распределением интенсивности, но и разностями фаз. Для восстановления фазы нужно ставить дополнительные опыты, например измерять дифракционную картину на разных расстояниях от щелей.

создают с волной, прошедшей через правую щель, общей дифракционной картины. В результате опыта мы действительно узнаем, через какую щель прошли наши электроны, но эти сведения относятся не к электронам, дифрагировавшим через две щели, а к другому опыту, к другому распределению электронов, к такому распределению, которое совместимо с вопросом о том, через какую щель прошел электрон. Мы еще раз убеждаемся в том, что в *физике микрочастиц всякий опыт, всякая попытка узнать о частицах что-нибудь новое, обязательно меняет их состояние, их волновую функцию.*

Мы выяснили на двух примерах, что любой опыт, проведенный с микрочастицами, изменяет состояние частиц из-за влияния измеряющей аппаратуры на измеряемый объект. В макромире влияние аппаратуры на объект при разумной постановке опыта может быть сделано очень малым. Хотя такое влияние в принципе обязательно существует, в опытах с телами макроскопических размеров оно столь ничтожно, что классическая физика им с полным правом пренебрегает вообще. В микромире это влияние оказывается большим и часто играет определяющую роль.

**Скорость распространения плоских волн.** Найдем скорость распространения плоской волны для фотона. Из оптики известно, что фазовая скорость волны  $v_\phi = \omega/k$ . Для фотонов  $E = pc$ , так как масса фотона равна нулю. Воспользовавшись этим равенством, а также равенствами (1.1) и (1.15), получаем

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{pc}{\hbar} = kc, \quad v_\phi = \frac{\omega}{k} = c. \quad (1.21)$$

Таким образом, фазовая скорость плоской волны для фотонов совпадает со скоростью распространения электромагнитных волн.

Вычислим теперь фазовую скорость плоской волны для нерелятивистской частицы. Для нерелятивистских частиц кинетическая энергия равна  $p^2/2m$ . Учитывая равенства (1.1) и (1.15), находим

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \left(\frac{p^2}{2m\hbar}\right) \left(\frac{p}{\hbar}\right)^{-1} = \frac{p}{2m} = \frac{mv}{2m} = \frac{v}{2}, \quad (1.22)$$

т. е. фазовая скорость волны равна половине скорости частицы, Этот результат на первый взгляд кажется неожиданным, но ни к каким трудностям не приводит.

Как известно из курса оптики, скорость передачи сигналов определяется не фазовой, а групповой скоростью волны.

Фазовая скорость совпадает с групповой лишь в том случае, если среда (в нашем случае — вакуум) не обладает дисперсией, т. е. если фазовая скорость распространения не зависит от частоты. Именно так обстоит дело для фотонов. Электромагнитные волны, как следует из (1.21),

всегда распространяются в вакууме со скоростью  $c$ . Формула (1.22) показывает, что у нерелятивистских частиц фазовая скорость зависит от скорости (а значит, и от энергии) частицы и, следовательно, от частоты  $\omega$ . Волны де Бройля обладают дисперсией даже при распространении в вакууме.

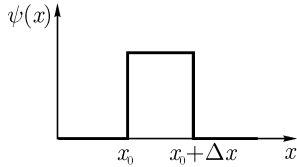


Рис. 13. Волновой пакет.

Выясним теперь, какие волны следует сопоставлять частицам, наблюдаемым в обычных, классически поставленных опытах. Классические опыты всегда начинаются с того, что мы определяем положение частицы в некоторый момент времени  $t_0$ . Пусть измерение координаты проделано с точностью  $\Delta x$ , т.е. мы определили, что частица находится между  $x_0$  и  $x_0 + \Delta x$ . С точки зрения волновой (квантовой) теории это означает, что волновая функция частицы равна нулю во всем пространстве, кроме участка, заключенного между  $x_0$  и  $x_0 + \Delta x$  (рис. 13). Ясно, что такая функция не является одной монохроматической волной типа (1.19). Однако она может быть представлена в виде совокупности таких волн.

Поскольку мы исследуем сейчас волновую функцию частиц в момент времени  $t_0$ , зависимость волн от времени является пока несущественной. Запишем отдельную волну в виде

$$\psi(x) = B e^{ikx}, \quad (1.23)$$

где

$$B = A e^{-i\omega t}. \quad (1.24)$$

Изображенная на рис. 13  $\psi$ -функция, описывающая распределение частицы по координате, как и всякая другая функция, по теореме Фурье может быть представлена в виде интеграла:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} B(k) e^{ikx} dk. \quad (1.25)$$

Состояние частицы в начальный момент времени определяется, таким образом, наложением большого числа монохроматических волн, каждая из которых движется со своей скоростью. Такое наложение волн, имеющее один резко выраженный максимум, называется обычно **волновым пакетом**. Во всякий другой момент времени положение частицы описывается, грубо говоря, местоположением максимума  $\psi$ -функции.

Из оптики известно, что скорость движения волнового пакета равна групповой скорости волны и вычисляется по формуле

$$v_{\text{гр}} = d\omega/dk \quad (1.26)$$

С помощью (1.1) и (1.15) для волнового пакета получим

$$v_{\text{гр}} = d\omega/dk = dE/dp. \quad (1.27)$$

Вычислим с помощью (1.27) групповую скорость фотонов и нерелятивистских частиц. Для фотонов имеем

$$v_{\text{гр}} = \frac{dE}{dp} = \frac{d(pc)}{dp} = c, \quad (1.28)$$

чего и следовало ожидать. Для нерелятивистских частиц найдем

$$v_{\text{гр}} = \frac{dE}{dp} = \frac{d(p^2/2m)}{dp} = \frac{p}{m} = \frac{mv}{m} = v. \quad (1.29)$$

Таким образом, групповая скорость плоской волны действительно равна скорости частицы. Если скорости частиц велики, то групповую скорость проще всего найти, дифференцируя соотношение  $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$ :

$$2E dE = 2pc^2 dp, \quad v_{\text{гр}} = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E} = v.$$

Вычисление фазовой скорости плоской волны по релятивистским формулам приводит к результату, сильно отличающемуся от (1.22). Фазовая скорость волны оказывается больше  $c$ , и при уменьшении скорости частиц она не уменьшается, а увеличивается, поскольку, как оказывается,

$$v_{\text{гр}}v_{\text{ф}} = c^2.$$

При медленно движущихся (нерелятивистских) частицах это отличие, однако, не приводит ни к каким новым физическим результатам.

## § 4. Принцип неопределенности

Мы уже убедились в том, что классические представления во многих случаях оказываются неприменимыми к микрообъектам. В частности, движущимся микрочастицам нельзя приписать определенных траекторий, т. е. определенных значений координат в следующие один за другим моменты времени.

Посмотрим, к чему приводит попытка точного определения координат у электронов.

Рассмотрим электроны, проходящие через щель в экране  $\mathcal{E}$  и падающие затем на фотопластинку  $\Phi$  (рис. 14). Мы уже знаем, что на фотопластинке будет наблюдаться дифракционная картина. Пусть до прохождения через щель электроны обладают вполне определенным импульсом  $\mathbf{p}_0$  ( $p_x = 0$ ,  $p_y = p_0$ ,  $p_z = 0$ ). Такие электроны описываются плоской волной с  $\mathbf{k}_0 = \mathbf{p}_0/\hbar$ . Так как плоская волна распределена по всему пространству, то и каждый электрон так же размазан.

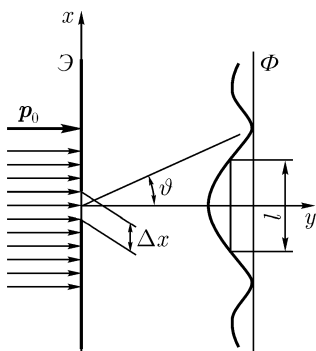


Рис. 14. Распределение интенсивности электронов после прохождения пучка через щель.

Электроны, прошедшие через щель, уже не описываются плоской волной. Соответствующая волна является расходящейся, причем интенсивность волны сложным образом зависит от направления. Как видно из рисунка, распространение расходящейся волны происходит в разных направлениях, так что волна не имеет определенного волнового вектора  $\mathbf{k}$  и, следовательно, электроны, прошедшие через щель, больше не обладают импульсом  $\mathbf{p}_0$ . При прохождении через щель у электронов наиболее заметно меняется проекция импульса  $p_x$  на ось, параллельную ширине щели.

Оценим по порядку величины разброс в величине  $p_x$ . Обозначим через  $\Delta x$  ширину щели. Рассмотрим какой-либо электрон, прошедший через щель. Указать заранее, в какое место фотопластинки попадет электрон, невозможно. Однако вероятность его попадания в разные места фотопластинки определяется дифракционной картиной, изображенной на рисунке. Приблизительно в половине случаев электрон попадает в центральную область главного максимума, размер которой можно положить равным ширине этого максимума, измеренной на уровне половины высоты (размер  $l$  на рис. 14). Этот размер может быть заменен расстоянием от максимума до первого минимума дифракционной картины. Угловое расстояние от максимума до первого минимума примем за меру расходимости волны, описывающей движение электрона, прошедшего через щель.

Направление на первый минимум определяется из условия

$$\Delta x \sin \vartheta = \lambda. \quad (1.30)$$



Отсюда 
$$\lambda/\Delta x = \sin \vartheta \approx \operatorname{tg} \vartheta. \quad (1.31)$$

Но  $\operatorname{tg} \vartheta = p_x/p_y$ , причем вместо  $p_x$  следует писать  $\Delta p_x$ , так как эта величина определяет разброс в импульсе:

$$\operatorname{tg} \vartheta = \Delta p_x/p_y. \quad (1.32)$$

Из (1.31) и (1.32) имеем

$$\Delta p_x \Delta x \approx \lambda p_y.$$

Учитывая, что  $\lambda = 2\pi/k \approx 2\pi\hbar/p_y$ , получим окончательно

$$\boxed{\Delta p_x \Delta x \approx 2\pi\hbar.} \quad (1.33)$$

Соотношение (1.33), выведенное нами для случая дифракции на щели, имеет всеобщую применимость и носит название соотношения неопределенностей Гейзенберга. Чем точнее мы определяем координату электрона (уменьшаем ширину щели  $\Delta x$ ), тем более неопределенным становится соответствующая проекция импульса электрона.

Неопределенности в координате и в импульсе, которые входят в формулу (1.33), происходят не от несовершенства наших знаний, а от того, что волновая функция электрона действительно «размазана» по соответствующей области  $\Delta p_x$  и  $\Delta x$ . Распределение по координате в рассмотренном случае определяется шириной щели. Распределение по импульсам можно измерить не только по виду дифракционной картины, но и непосредственно. Для этого вместо фотопластинки нужно установить прибор, измеряющий импульс частиц (например, по отражению от кристалла).

Рассмотрим еще один мысленный опыт. Определим положение электрона с помощью микроскопа, как это показано на рис. 15. Здесь 1 — объектив микроскопа, 2 — пучок света, направленный вдоль оси микроскопа и освещающий электрон, 3 — электрон и 4 — его изображение. Точность измерения координаты зависит от разрешающей силы микроскопа. В оптике показывается, что разрешение  $\Delta x$  микроскопа определяется в основном свойствами объектива и равно

$$\Delta x = \lambda/\sin \vartheta, \quad (1.34)$$

где  $\lambda$  — длина волны света, а  $\sin \vartheta$  — апертура линзы. Из (1.34) видно, что определить положение электрона с хорошей точностью можно лишь в том случае, если апертура объектива достаточно велика.

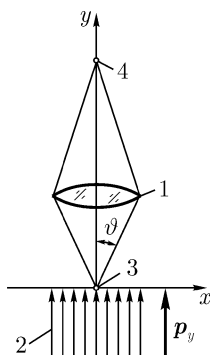


Рис. 15. Измерение координаты электрона с помощью света.

Чтобы «увидеть» электрон, нужно, чтобы на нем испытал рассеяние хотя бы один фотон. Рассеянный фотон проходит через точку, являющуюся изображением электрона. Координата этой точки может быть определена. После этого с точностью (1.34) определяется положение электрона. Испытав соударение с электроном, фотон изменяет направление движения, а электрон получает отдачу. Микроскоп не дает возможности определить, в какую сторону отклонился рассеянный фотон, известно лишь, что после рассеяния он проходит через объектив. Импульс отдачи электрона поэтому тоже остается неизвестным.

Обозначим начальный импульс фотона через  $p_y$ . У всякого фотона, проходящего сквозь объектив,  $|p_x| < p_y \operatorname{tg} \vartheta$ . Так как знак  $p_x$  при рассеянии может быть любым, а величина лежит в указанных пределах, это неравенство определяет на самом деле неопределенность проекции импульса фотона на ось  $x$ . Импульс отдачи, полученный электроном, равен изменению импульса фотона. Пренебрегая различием между синусом и тангенсом, найдем, что неопределенность в импульсе электрона равна

$$\Delta p_x = p_y \operatorname{tg} \vartheta \approx p_y \sin \vartheta = p_y \frac{\lambda}{\Delta x} \approx \hbar k \frac{\lambda}{\Delta x} = \frac{2\pi\hbar}{\Delta x}.$$

(При вычислениях  $\sin \vartheta$  был заменен на  $\lambda/\Delta x$  с помощью (1.34).) Умножая равенство на  $\Delta x$ , получаем

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\pi\hbar,$$

что находится в согласии с принципом неопределенностей Гейзенберга.

Отметим, что принцип Гейзенберга связывает неопределенность в координате с неопределенностью проекции импульса на эту координату:

$$\Delta x \Delta p_x \approx 2\pi\hbar, \quad \Delta y \Delta p_y \approx 2\pi\hbar, \quad \Delta z \Delta p_z \approx 2\pi\hbar. \quad (1.33')$$

В то же время принцип Гейзенберга не накладывает никаких ограничений на точность измерения координаты  $x$  и проекции импульса на ось  $y$  или  $z$  и т. д.

Говоря о принципе неопределенности, следует иметь в виду, что он определяет теоретический предел, который далеко не всегда достигается в реальных приборах. Так, разрешение телевизора или качество биноклей и фотоаппаратов связано вовсе не с принципом неопределенности,

а с количеством точек, используемых для изображения (телевизоры) или с качеством объективов (фотоаппараты). Однако никакой телевизор и никакой фотоаппарат не могут превзойти ограничений, накладываемых принципом Гейзенберга.

Обратимся теперь к математическому смыслу принципа неопределенности. Пусть опыт по измерению координаты частицы показал, что эта частица находится в некоторой точке, скажем в начале координат. Если измерение координаты произведено с точностью  $a$ , то результат измерения, грубо говоря, заключается в том, что  $\psi$ -функция частицы отлична от нуля лишь в области от  $-a$  до  $a$ . Вид  $\psi$ -функции между  $-a$  и  $a$  при этом может быть разным и существенно определяется способом, который был принят для измерения координаты. Поскольку все дальнейшие расчеты будут производиться лишь по порядку величины, мы можем для простоты положить, что в этой области  $\psi$ -функция просто постоянна, как это, изображено на рис. 16 (такой вид имеет  $\psi$ -функция, если измерять с помощью щели координату электрона, имевшего до измерения определенный импульс, как это делалось, например, на рис. 14).

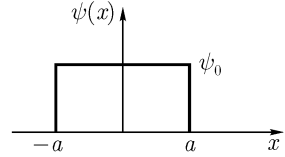


Рис. 16.  $\psi$ -функция электрона после измерения его координаты.

Определим  $\psi_0$ , т. е. величину  $\psi$ -функции на отрезке  $-a < x < a$ . По определению  $|\psi(x)|^2 dx$  равно вероятности найти частицу в интервале  $dx$ .

Вероятность найти частицу в произвольном месте от  $-\infty$  до  $\infty$  равна  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx$ . Поскольку при этом мы вычислили вероятность достоверного события, то

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (1.35)$$

Условию (1.35) или более общему условию

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1 \quad (1.36)$$

должна удовлетворять всякая  $\psi$ -функция, поскольку она является амплитудой вероятности. Условия (1.35) и (1.36) называются обычно условиями нормировки.

Интеграл (1.35) в нашем случае нетрудно вычислить:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-a}^a \psi_0^2 dx = 2\psi_0^2 a = 1.$$

Таким образом,

$$\psi_0 = 1/\sqrt{2a}. \quad (1.37)$$

Функция, изображенная на рис. 16, очевидно, не является плоской волной вида  $e^{ikx}$ . Поэтому после измерения координаты частица не обладает определенным импульсом. Однако  $\psi$ -функция (1.37) может быть разложена в интеграл Фурье, т. е. может быть представлена в виде суперпозиции волн.

В самом деле, по теореме Фурье всякая функция может быть представлена в виде<sup>1</sup>

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)e^{ikx} dk. \quad (1.38)$$

Коэффициенты  $f(k)$  определяют вклад различных волн в рассматриваемую волновую функцию. Поскольку плоская волна представляет собой состояние с определенным импульсом, формула (1.38) определяет распределение по импульсу. Физический смысл (1.38) заключается в том, что величина

$$|f(k)|^2 dk \quad (1.39)$$

определяет вероятность того, что волновое число частицы лежит между  $k$  и  $k+dk$ , и, следовательно, ее импульс заключен между  $\hbar k$  и  $\hbar(k+dk)$ <sup>2</sup>.

Мы видим, таким образом, что *распределение по координатам* (задание  $\psi(x, y, z)$ ) *определяет распределение по импульсам*. Поскольку эти распределения не являются независимыми, между ширинами распределений существует математическая связь. Эта связь и устанавливается принципом неопределенности.

<sup>1</sup>Формула (1.38) отличается от обычных формул разложения, принятых в математике, множителем  $\sqrt{1/2\pi}$ . Если включить этот множитель в  $f(k)$ , формула примет привычный вид.

<sup>2</sup>Если принять не (1.38), а обычную формулу разложения в интеграл Фурье  $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k)e^{ikx} dx$ , то  $|C(k)|^2$  оказывается пропорциональным, но не равным вероятности попасть в интервал  $dk$ . Чтобы  $C(k)$  имело смысл амплитуды вероятности, нужно потребовать, чтобы  $\int_{-\infty}^{\infty} |C(k)|^2 dk = 1$ . Этому условию удовлетворяет функция  $f(k)$ , введенная в (1.38).

В теории интеграла Фурье указывается формула для нахождения функций  $f(k)$ :

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \quad (1.40)$$

Установим с помощью этой формулы явный вид распределения по импульсам для  $\psi$ -функции, изображенной на рис. 16. Подставляя в (1.40) значение  $\psi_0$  из (1.37), найдем

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2a}} \int_{-a}^a e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \left( -\frac{1}{ik} \right) (e^{-ika} - e^{ika}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin(ka)}{k}. \quad (1.41)$$

Вероятность того, что импульс частицы лежит в окрестности  $p$ , равна квадрату модуля  $f(k)$ :

$$|f(k)|^2 = \frac{1}{\pi a} \frac{\sin^2(ka)}{k^2}. \quad (1.42)$$

На рис. 17 приведен график этой функции. Как видно из рисунка, распределение имеет типично «дифракционный» вид. Как и прежде, примем за «ширину» распределения расстояние от середины распределения до первого минимума

$$\Delta k = \pi/a$$

и, следовательно,

$$\Delta p = \hbar \Delta k = \hbar \pi/a.$$

Ширина распределения  $\Delta x$  в нашем случае равна  $2a$ . Имеем, следовательно,

$$\Delta p \Delta x \approx 2\pi \hbar.$$

Таким образом, принцип неопределенности Гейзенберга не представляет собой положения, независимого от других основных положений волновой механики. После того как выясняется необходимость описывать поведение частиц волновыми функциями, принцип неопределенности возникает как математическое следствие теории. В дальнейшем будет показано, что во многих случаях умелое применение принципа неопределенности позволяет угадывать основные черты явлений без точного решения уравнений.

Формула (1.40) показывает, что плоские волны, на которые может быть разложена  $\psi$ -функция, в каждой точке пространства обладают вполне определенным сдвигом фаз, т.е. когерентны между собой. Эта когерентность характерна не только для импульса (для плоских волн),

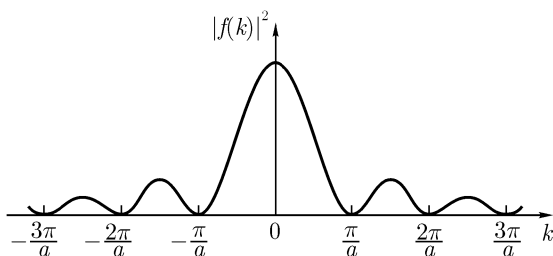


Рис. 17. Распределение электрона по импульсам после измерения его координаты.

но и для всех физических величин, которые характеризуют состояние частицы (момент импульса, спин и т. д.).

Чтобы яснее представить себе ограничения, возникающие из принципа неопределенности, рассмотрим обычный классический метод измерения импульса частиц. В макроскопической физике для определения импульса частицы можно воспользоваться формулой

$$p = mv. \quad (1.43)$$

Для определения скорости следует измерить путь, проходимый частицей за небольшой (в пределе за бесконечно малый) промежуток времени:

$$v = (x_2 - x_1)/(t_2 - t_1). \quad (1.44)$$

Можно ли использовать предложенный метод в микромире? Измерив координату частицы  $x_1$  в момент  $t_1$ , мы неизбежно изменяем ее импульс и притом тем сильнее, чем точнее измеряется координата. Измерив координату  $x_2$ , мы снова изменим импульс частицы. Подставив измеренные значения  $x_2$ ,  $x_1$ ,  $t_2$  и  $t_1$  в (1.44) и затем в (1.43), найдем некоторое значение импульса. Это значение, однако, не будет соответствовать импульсу частицы: ее импульс в процессе измерения дважды менялся, и полученное число не определяет ни импульса частицы до измерения, ни ее импульса после измерения.

Существенно лучше определять импульс частицы (абсолютную величину импульса) по ее кинетической энергии (например, по разности потенциалов, пройденной электроном в ускоряющем поле) или по характеру дифракционной картины в опыте Девиссона – Джермера<sup>1</sup>.

Подведем некоторые итоги.

<sup>1</sup>При известных условиях может, конечно, применяться и классический метод измерения импульса микрочастиц. Чтобы измеряемое значение импульса искажалось меньше, не

1. Микрообъекты обладают одновременно свойствами частиц и свойствами волн и поэтому не являются ни частицами, ни волнами в классическом смысле этого слова.

2. Состояния микрочастиц описываются волновыми функциями ( $\psi$ -функциями);  $\psi$ -функция свободной частицы, движущейся в определенном направлении и имеющей заданный импульс, является плоской волной.

3. Микрочастицы следует представлять себе размазанными по пространству<sup>2</sup>.

Квадрат амплитуды волновой функции характеризует вероятность нахождения частицы в заданном месте пространства. Скорость микрочастицы совпадает с групповой скоростью волн, определяющих ее состояние.

4. При наличии нескольких — или многих — путей распространения волновые функции складываются по тем же правилам, что и световые волны: величина суммы зависит как от амплитуды, так и от фазы слагающих  $\psi$ -функций. При этом, естественно, возникают характерные для волновых процессов явления интерференции и дифракции.

5. Микрочастицы не обладают определенными траекториями в классическом понимании этого слова. У микрочастиц сохраняются такие характеристики классических частиц, как масса, заряд и т. д.

6. Невозможно одновременно точно измерить координату микрочастицы по некоторой оси и проекцию импульса на ту же ось. Неопределенности в значениях координат и импульсов связаны соотношениями Гейзенберга.

7. Отличительной особенностью микромира является новое понимание опыта. Произвести опыт над микрочастицами — значит изменить состояние частиц, подвергавшихся исследованию. Волновые функции частиц до опыта отличаются от волновых функций частиц после опыта.

Классическая физика исходит из предопределенности мира. Она считает, что если бы удалось одновременно измерить координаты и импульсы всех атомов, то, применяя физические законы, можно было бы рассчитать состояния всех атомов (т. е. полную картину мира) на любой промежуток времени вперед.

---

следует с большой точностью измерять координаты. Погрешность в измерении координат тем меньше сказывается на результате, чем больше разность  $x_2 - x_1$ , т. е. чем больше пролетный путь частицы. Таким образом, на большом пути скорость частицы и, следовательно, ее импульс могут быть измерены с достаточной точностью. Стремиться к тому, чтобы  $\Delta t$  и, следовательно,  $\Delta x$  были как можно меньше (в классической механике скорость  $v = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (\Delta x / \Delta t)$ ), конечно, не следует.

<sup>2</sup>Как уже отмечалось на с. 24, картина размазанного электрона, подобно всякой другой классической аналогии, не полностью соответствует квантовой механике.

Квантовая механика утверждает, что *рассчитать можно только волновые функции, т. е. вероятности, но нельзя предсказать, какая из возможностей в конце концов осуществится*. Какая из возможностей будет реализована — дело случая, и эта неопределенность возникает не вследствие несовершенства квантовой механики, а вытекает из существа законов, действующих в микромире и правильно отражаемых квантовой механикой.



## ГЛАВА 2

# ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

В предыдущей главе было показано, что движение микроробъектов описывается не траекториями, а  $\psi$ -функциями, причем вид  $\psi$ -функции зависит от конкретной физической задачи.

Мы выяснили, кроме того, что  $\psi$ -функция, описывающая сама по себе распределение по координатам, определяет также распределение по импульсам. Очевидно, что и другие динамические характеристики частицы, такие как кинетическая энергия, момент импульса и др., также определяются ее волновой функцией. В самом деле, кинетическая энергия частицы задается числовым значением ее импульса  $p$ , а для определения момента импульса нужно найти векторное произведение координаты  $\mathbf{r}$  и импульса  $\mathbf{p}$ . Таким образом, задание  $\psi$ -функции полностью определяет не только положение частицы, но и все ее динамические характеристики. Задача об определении и правильном истолковании  $\psi$ -функции является поэтому основной проблемой квантовой теории. К решению этой задачи мы и приступаем.

### § 5. Средние значения

Очень важным в физике микромира является понятие среднего значения различных физических величин. Напомним читателю на простом примере, как вычисляются средние значения. Рассмотрим  $N$  молекул, движущихся с различными скоростями и, следовательно, с различными энергиями. Проще всего определить среднюю энергию этих молекул, сложив энергии всех молекул и разделив полученную сумму на число молекул:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i. \quad (2.1)$$

В этой формуле энергия  $i$ -й молекулы обозначена через  $E_i$ , а среднее значение энергии, как это принято в квантовой механике, обозначено той же буквой, что и сама энергия, и заключено в угловые скобки.

Другой способ вычисления средней энергии заключается в следующем. Подсчитаем  $N_k$  — число молекул, энергия которых заключена между  $E_k$  и  $E_{k+1}$  (например, между 0,031 и 0,032 эВ). Произведем такой подсчет для всех наблюдающихся значений энергии.

Сумма, стоящая в числителе (2.1), может быть выражена в виде

$$\sum_{i=1}^N E_i = \sum_k N_k E_k$$

(Эта формула в нашем случае не является вполне точной, так как непрерывно меняющуюся энергию молекул мы заменили дискретным набором  $E_k$ . Однако при достаточно мелком разбиении неточность может быть сделана сколь угодно малой.)

Формула для определения средней энергии примет теперь вид

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N} \sum_k N_k E_k = \sum_k E_k \frac{N_k}{N} = \sum E_k P_k \quad (2.2)$$

Величина  $N_k/N$ , обозначенная через  $P_k$ , определяет долю молекул, энергия которых лежит в  $k$ -м интервале, или, что то же самое, вероятность иметь заданную энергию  $E_k$  (заметим, что сумма всех вероятностей  $P_k$ , как всегда, равна единице).

При непрерывных распределениях вероятность попасть в бесконечно малый интервал между  $E$  и  $E + dE$  зависит от выбранного значения  $E$  и от ширины интервала  $dE$  и обозначается поэтому  $P(E)dE$ . Функция  $P(E)$  определяет в этом случае распределение молекул по энергии и носит название плотности вероятности.

При непрерывных распределениях сумма (2.2) должна быть заменена интегралом ( $P_k$  заменяется при этом на  $P(E)dE$ ):

$$\langle E \rangle = \int EP(E)dE \quad (2.3)$$

Интеграл (2.3) берется по всем возможным значениям  $E$ . В общем случае, когда ищется среднее значение какой-то величины  $x$ , плотность вероятности соответственно обозначается  $P(x)$ . Формула (2.3) широко применяется в науке и используется, например, в кинетической теории газов ( $p(E)$  задается при этом распределением Максвелла).

Перейдем теперь к задаче об определении среднего значения координаты  $x$  для микрочастицы, обладающей волновой функцией  $\psi(x)$ . Квадрат модуля  $\psi$ -функции  $|\psi(x)|^2$  является плотностью вероятности

найти частицу в окрестности точки  $x$ . Саму  $\psi$ -функцию часто называют амплитудой вероятности. Такого математического термина, впрочем, не существует. По аналогии с оптикой термин «амплитуда» применяется здесь для того, чтобы подчеркнуть необходимость возведения  $\psi$ -функции в квадрат при вычислении вероятности.

Согласно (2.3) среднее значение координаты  $x$  следует вычислять по формуле

$$\langle x \rangle = \int x |\psi(x)|^2 dx,$$

или, что то же,

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx. \quad (2.4)$$

В формуле (2.4)  $|\psi(x)|^2$  представлено в виде  $\psi^*(x)\psi(x)$ , где звездочка означает комплексное сопряжение.

Повторяя проведенные рассуждения для вычисления среднего значения  $x^2$ ,  $x^3$  и т. д., нетрудно убедиться, что

$$\langle x^2 \rangle = \int \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx, \quad \langle x^3 \rangle = \int \psi^*(x) x^3 \psi(x) dx$$

и что вообще среднее значение любой функции  $f(x)$  равно

$$\langle f(x) \rangle = \int \psi^*(x) f(x) \psi(x) dx. \quad (2.5)$$

Научимся теперь вычислять среднее значение импульса (для простоты рассмотрим одну из проекций импульса, например проекцию на ось  $x$ ). По формуле (2.3) найдем

$$\langle p_x \rangle = \int p_x P(p_x) dp_x, \quad (2.6)$$

где  $P(p_x) dp_x$  определяет вероятность того, что импульс заключен между  $p_x$  и  $p_x + dp_x$ .

Мы уже знаем, что величина  $P(p_x)$  определяется функцией  $\psi(x)$ . Остается выяснить вид этой зависимости. Для простоты будем считать, что система (или частица, если речь идет об одной частице) находится не в бесконечном пространстве  $-\infty < x < \infty$ , а в некотором огромном ящике  $-A < x < A$ . Если размер ящика  $A$  достаточно велик, частица никогда «не узнает» о том, что свобода ее передвижения ограничена стенками ящика, и на ее движении это никак не скажется.

Если распределение частицы в ящике описывается волновой функцией  $\psi(x)$ , то функция  $\psi(x)$  должна удовлетворять условиям нормировки:

$$I = \int_{-A}^A |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (2.7)$$

(см. (1.35) и (1.36)). Разложим  $\psi(x)$  в ряд Фурье:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2A}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m \exp\left(i\frac{p_m}{\hbar}x\right). \quad (2.8)$$

Коэффициенты  $C_m$  определяют, с каким весом присутствуют в  $\psi$ -функции различные волны де Бройля. В разложении (2.8) мы применяем волны де Бройля  $\frac{1}{\sqrt{2A}} \exp\left(i\frac{p_m}{\hbar}x\right)$ , которые сами удовлетворяют условию нормировки (2.7). Как мы увидим впоследствии, такой выбор делает физический смысл  $C_m$  особенно наглядным.

По известной теореме о рядах Фурье показатель экспоненты на длине ящика должен изменяться на целое кратное от  $2\pi i$ .<sup>1</sup> Поэтому

$$p_m = \frac{\pi\hbar}{A}m, \quad (2.9)$$

где  $m$  — любое целое число.

Чтобы найти коэффициенты  $C_m$ , проще всего умножить уравнение (2.8) на  $\frac{1}{\sqrt{2A}} \exp\left(-i\frac{p_n}{\hbar}x\right)$  и проинтегрировать его затем по  $x$  от  $-A$  до  $+A$ . В правой части уравнения все члены суммы с  $m \neq n$  обратятся в нуль вследствие периодичности функции  $\exp\left(i\frac{p_m - p_n}{\hbar}x\right)$ . Член с  $m = n$  равен  $2AC_n$ . Поэтому

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2A}} \int_{-A}^A \psi(x) \exp\left(-i\frac{p_n}{\hbar}x\right) dx. \quad (2.10)$$

Приведем без доказательства известную из теории рядов Фурье теорему полноты:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} |C_m|^2 = \int_{-A}^A |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (2.11)$$

---

<sup>1</sup>Можно, например, считать, что размер ящика  $2A$  является периодом функции  $\psi(x)$ . Поскольку края ящика отодвинуты достаточно далеко, никакие предположения о поведении функции за ящиком на результатах опыта не сказываются.

Как уже отмечалось, коэффициенты  $C_m$  определяют вес, с которым присутствуют в  $\psi$ -функции различные волны де Бройля, т.е. состояния с определенным импульсом. Формула (2.11) показывает, что смысл вероятности имеют не сами  $C_m$ , а квадраты их модуля, так как только в этом случае сумма вероятностей иметь все возможные импульсы обращается в единицу.

Среднее значение импульса равно поэтому

$$\langle p_x \rangle = \sum_m C_m^* p_m C_m. \quad (2.12)$$

Хотя формула (2.12) и дает однозначное правило определения  $\langle p_x \rangle$ , она крайне неудобна для вычислений, так как требует нахождения всех  $C_m$  (по формуле (2.10)) и вычисления бесконечной суммы (2.12). В теории рядов Фурье показывается, что формула (2.12) может быть приведена к простому виду:

$$\langle p_x \rangle = \int \psi^*(x) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx. \quad (2.13)$$

Доказательство этой формулы приведено в Приложении I.

## § 6. Операторы

Формула (2.13) позволяет решить задачу о нахождении среднего значения импульса без разложения в ряд Фурье непосредственно по функции  $\psi(x)$ . Этой формуле может быть придан вид, аналогичный (2.5):

$$\langle p_x \rangle = \int \psi^*(x) \hat{p}_x \psi(x) dx. \quad (2.14)$$

В (2.14) входит оператор проекции импульса на ось  $x$

$$\boxed{\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}. \quad (2.15)$$

Проверим формулу (2.14) для «обыкновенной» волны де Бройля

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2A}} \exp\left(i \frac{p_m}{\hbar} x\right), \quad (2.16)$$

нормированной в ящике  $-A < x < A$ . Среднее значение импульса в этом случае известно заранее, поскольку написанная волна определяет состояние с вполне определенным значением импульса — значением, равным  $p_m$ .

По формуле (2.14) имеем

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \int_{-A}^A \psi^*(x) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx = \\ &= \int_{-A}^A \frac{1}{\sqrt{2A}} \exp\left(-i\frac{p_m}{\hbar}x\right) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{1}{\sqrt{2A}} \exp\left(i\frac{p_m}{\hbar}x\right) dx = \\ &= \frac{1}{2A} \int_{-A}^A \exp\left(-i\frac{p_m}{\hbar}x\right) p_m \exp\left(i\frac{p_m}{\hbar}x\right) dx = \frac{p_m}{2A} \int_{-A}^A dx = p_m. \end{aligned}$$

Мы видим, что формула (2.14) действительно быстро приводит к правильному ответу.

Общее утверждение квантовой механики заключается в том, что *среднее значение любой физической величины  $f$  находится по формуле*

$$\boxed{\langle f \rangle = \int \psi^*(x) \hat{f} \psi(x) dx,} \quad (2.17)$$

где  $\hat{f}$  — оператор физической величины  $f$ .

Мы уже установили вид  $\hat{f}$  для  $x$  и любой функции от  $x$ . Сравнение (2.4) и (2.5) с (2.17) показывает, что оператор  $x$  приводит к простому умножению на  $x$ , а оператор  $\hat{f}(x)$  — к умножению на функцию  $f(x)$ . Мы нашли также оператор  $\hat{p}(x)$ . Он определяется формулой (2.15). В этой связи нужно только отметить, что для простоты изложения до сих пор формулы писались так, как если бы  $\psi$ -функция всегда зависела от одной координаты  $x$ . В общем случае в расчет следует принимать все три пространственные координаты, так что вместо (2.17) нужно писать

$$\langle f \rangle = \iiint \psi^*(x, y, z) \hat{f}(x, y, z) \psi(x, y, z) dx dy dz,$$

или

$$\langle f \rangle = \iiint \psi^* \hat{f} \psi dV, \quad (2.18)$$

где  $dV$  — элемент объема.

Операторы трех проекций импульса можно написать по аналогии с (2.15):

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, \quad (2.19)$$

или в векторной форме:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla, \quad (2.20)$$

где  $\nabla$  — оператор градиента. Операторы  $\hat{x}$  и  $\hat{p}$  являются основными операторами квантовой механики. Укажем правило, позволяющее находить операторы всех других физических величин. В декартовой системе координат *формулы, которые классическая физика выводит для связи между числовыми значениями физических величин, в квантовой механике следует рассматривать как формулы, связывающие операторы этих величин.* Так, например, связь между кинетической энергией и импульсом в обычной механике определяется формулой

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2). \quad (2.21)$$

Оператор кинетической энергии равен поэтому

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) = \\ &= \frac{1}{2m} \left[ \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) + \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) + \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \right], \end{aligned}$$

т. е.

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right). \quad (2.22)$$

Определенный формулой (2.22) оператор  $\hat{T}$  может быть использован для нахождения среднего значения кинетической энергии по формуле (2.18) или (2.17), если известна  $\psi$ -функция частицы. Рассмотрим, например, волну де Бройля (2.16)  $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2A}} \exp\left(i \frac{p_m}{\hbar} x\right)$ , распространяющуюся вдоль оси  $x$ . Так как  $\psi$ -функция в этом случае не зависит от координат  $y$  и  $z$ , нет нужды прибегать к (2.18) и можно применить для

вычисления  $\langle T \rangle$  формулу (2.17). Замечая, что дифференцирование по  $y$  и  $z$  обращает  $\psi$ -функцию в нуль, получим

$$\begin{aligned}\langle T \rangle &= \int \psi^*(x) \hat{T} \psi(x) dx = \\ &= \frac{1}{2A} \int_{-A}^A \exp\left(-i \frac{p_m}{\hbar} x\right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \exp\left(i \frac{p_m}{\hbar} x\right) dx = \frac{p_m^2}{2m} \frac{1}{2A} \int_{-A}^A dx = \frac{p_m^2}{2m},\end{aligned}$$

как и должно быть. Конечно, такой простой результат возникает не всегда. Он получился здесь потому, что в состоянии, описываемом простой волной де Бройля, импульс и кинетическая энергия имеют вполне определенные значения. Средние значения этих величин совпадают с этим единственным значением.

Покажем, что для достаточно крупных, классических объектов сформулированное правило вычисления операторов обеспечивает выполнение обычных законов классической механики.

Для крупных объектов неопределенности координат и импульсов оказываются несущественными по сравнению с размерами и импульсом самого тела.  $\psi$ -функции таких тел и распределения по другим физическим переменным крайне узки. Практически следует считать, что эти величины имеют одно-единственное, «классическое» значение (которое, конечно, может быть измерено с помощью опыта). Средние значения физических величин поэтому совпадают с этим единственным значением.

Рассмотрим в качестве примера связь между энергией и импульсом какого-нибудь большого тела. В соответствии с (2.22) и (2.18) его средняя энергия равна

$$\begin{aligned}\langle T \rangle &= \int \psi^* \hat{T} \psi dV = \int \psi^* \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \psi dV = \\ &= \frac{1}{2m} \int \psi^* \hat{p}_x^2 \psi dV + \frac{1}{2m} \int \psi^* \hat{p}_y^2 \psi dV + \frac{1}{2m} \int \psi^* \hat{p}_z^2 \psi dV = \\ &= \frac{1}{2m} [\langle p_x^2 \rangle + \langle p_y^2 \rangle + \langle p_z^2 \rangle].\end{aligned}$$

В общем случае эта формула не приводит к классической связи между энергией и импульсом. Чтобы в этом убедиться, достаточно заметить, что, вообще говоря<sup>1</sup>,

$$\langle p_x^2 \rangle \neq \langle p_x \rangle^2.$$

<sup>1</sup>Рассмотрим, например, средний импульс и средний квадрат импульса у частицы, импульс которой с равной вероятностью принимает значения  $a$  и  $b$ . Средний импульс частицы равен  $(a + b)/2$ . Квадраты импульса частицы в первом и втором состояниях равны соот-



При очень узких распределениях, когда средние значения совпадают с единственными, формула дает

$$\langle T \rangle = T = \frac{1}{2m} [\langle p_x^2 \rangle + \langle p_y^2 \rangle + \langle p_z^2 \rangle] = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2),$$

что находится в согласии с классической физикой.

Найдем оператор полной энергии частицы. Этот оператор называется оператором Гамильтона  $\hat{H}$  (по аналогии с гамильтонианом классической механики). С помощью обычных правил получим

$$\boxed{\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = U(x, y, z) - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}. \quad (2.23)$$

При выводе была использована формула (2.22). Оператор потенциальной энергии  $U$ , как оператор всякой функции координат, равен самой функции.

Найдем, наконец, оператор момента импульса. Будем исходить из формулы классической механики

$$\mathbf{M} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}.$$

Выпишем в явном виде оператор проекции момента импульса на ось  $z$ :

$$\hat{M}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = x \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Перейдем к сферическим координатам  $r, \vartheta, \varphi$ , связанным с декартовыми координатами  $x, y, z$  соотношениями (рис. 18)

$$z = r \cos \vartheta, \quad x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi. \quad (2.24)$$

С помощью (2.24) выразим частную производную по  $\varphi$  через производные по декартовым координатам:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \varphi} &= \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} = \\ &= -r \sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x} + r \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial y} = -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y}. \end{aligned}$$

---

ответственно  $a^2$  и  $b^2$ . Средний квадрат импульса  $(a^2 + b^2)/2$  не равен квадрату среднего импульса  $[(a + b)/2]^2$ .

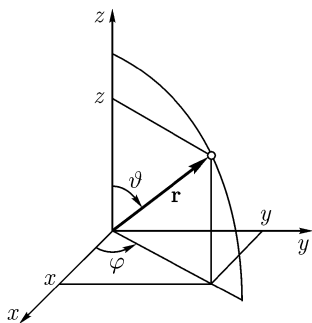


Рис. 18. Связь декартовой и сферической систем координат.

Сравнивая это выражение с формулой для  $\widehat{M}_z$ , найдем

$$\widehat{M}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (2.25)$$

Вид оператора  $\widehat{M}_z$  похож на вид операторов для проекций импульса (2.19). Этому не следует удивляться. В аналитической механике показывается, что  $\varphi$  и  $\widehat{M}_z$  являются обобщенной координатой и обобщенным импульсом. В квантовой механике играет большую роль оператор квадрата момента импульса  $\widehat{M}^2$ . Он имеет, однако, сложный вид, и мы в этой книге им пользоваться не будем.

Вернемся к формуле (2.23) для оператора полной энергии. Найдем с помощью этой формулы связь между средними значениями полной, потенциальной и кинетической энергий:

$$\langle E \rangle = \int \psi^* \widehat{H} \psi dV = \int \psi^* (\widehat{T} + \widehat{U}) \psi dV = \int \psi^* \widehat{T} \psi dV + \int \psi^* \widehat{U} \psi dV,$$

или

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle. \quad (2.26)$$

Среднее значение полной энергии равно сумме средних значений кинетической и потенциальной энергии. Это утверждение не эквивалентно утверждению классической физики о равенстве числовых значений  $E$  и  $T+U$ . При обсуждении этого различия следует помнить, что кинетическая энергия зависит от импульса, а потенциальная энергия — от координат частицы. В силу соотношения неопределенностей потенциальная и кинетическая энергия частицы не могут одновременно иметь определенных значений, так что простое числовое равенство в духе классической физики невозможно. Формула (2.26) показывает, однако, что классическая связь сохраняется между средними значениями  $E$ ,  $T$  и  $U$ .

Формула (2.26) может быть легко обобщена. Повторяя рассуждения, которые предшествовали этой формуле, нетрудно показать, что из операторного соотношения

$$\widehat{A} = \widehat{B} + \widehat{C}$$

возникает равенство

$$\langle A \rangle = \langle B \rangle + \langle C \rangle \quad (2.26')$$

для средних значений.

Остановимся на связи между средним значением некоторой величины  $x$  (не обязательно координаты!) и средним значением ее квадрата  $x^2$ . Всякое конкретное значение  $x$  может быть представлено в виде суммы среднего значения этой величины и некоторого добавка  $\Delta x$ :

$$x = \langle x \rangle + \Delta x.$$

Возьмем среднее от обеих частей равенства. Так как среднее значение суммы равно сумме средних значений (это следует из (2.1)), то немедленно получим  $\langle \Delta x \rangle = 0$ . Найдем теперь среднее значение  $x^2$ :

$$\langle x^2 \rangle = \langle (\langle x \rangle + \Delta x)^2 \rangle = \langle (\langle x \rangle^2 + 2\langle x \rangle \Delta x + (\Delta x)^2) \rangle;$$

$\langle x \rangle$  и  $\langle x \rangle^2$  — это числа. Их средние значения равны им самим. По той же причине среднее значение  $2\langle x \rangle \Delta x$  равно нулю. Имеем поэтому

$$\langle x^2 \rangle = \langle x \rangle^2 + \langle (\Delta x)^2 \rangle. \quad (2.27)$$

Среднее значение положительной величины  $(\Delta x)^2$  (она носит название дисперсии) не может быть отрицательным и обращается в нуль в том единственном случае, когда  $\Delta x$  тождественно равно нулю, т. е. когда нет никакого распределения, и величина  $x$  в условиях поставленной задачи точно определена (и поэтому выражается некоторым определенным числом).

Формула (2.27) указывает критерии, позволяющий во всякой конкретной задаче проверить, имеет ли интересующая нас физическая величина некоторое распределение или является числом. Для этого достаточно сравнить  $\langle x^2 \rangle$  и  $\langle x \rangle^2$ .

## §7. Собственные состояния

Среди задач о нахождении  $\psi$ -функций частиц в различных состояниях особенно важна задача о состояниях, в которых какая-нибудь величина имеет вполне определенное значение. Такие состояния принято называть собственными состояниями этой физической величины. Мы пока встречались с единственной  $\psi$ -функцией такого рода — с волной де Бройля вида  $\exp\left(i\frac{p_m}{\hbar}x\right)$ , описывающей состояние,

при котором проекция импульса на ось  $x$  имеет единственное значение, равное  $p_m$ .

Одним из основных утверждений квантовой механики является утверждение, что *состояние, в котором физическая величина  $f$  имеет определенное значение  $f_0$ , описывается  $\psi$ -функцией, являющейся решением уравнения*

$$\boxed{\widehat{f}\psi = f_0\psi}, \quad (2.28)$$

где  $\widehat{f}$  — оператор физической величины  $f$ .

Покажем, что формула (2.28) правильно решает поставленную задачу. Найдем среднее значение  $f$  в состоянии, которое описывается  $\psi$ -функцией, удовлетворяющей (2.28),

$$\langle f \rangle = \int \psi^* \widehat{f} \psi dV = \int \psi^* f_0 \psi dV = f_0 \int \psi^* \psi dV = f_0. \quad (2.29)$$

При вычислении  $\langle f \rangle$  мы заменили в подынтегральном выражении  $\widehat{f}\psi$  на  $f_0\psi$  в соответствии с (2.28) и воспользовались условием нормировки  $\psi$ -функций (1.35).

Найдем теперь среднее значение  $f^2$ . По общему правилу нахождения операторов заключаем, что оператор  $\widehat{f}^2$  равен

$$\widehat{f}^2 = (\widehat{f}^2) = \widehat{f}\widehat{f}.$$

Дважды используя (2.28), найдем

$$\begin{aligned} \langle f^2 \rangle &= \int \psi^* \widehat{f}^2 \psi dV = \int \psi^* \widehat{f} \widehat{f} \psi dV = \int \psi^* \widehat{f} f_0 \psi dV = \\ &= f_0 \int \psi^* \widehat{f} \psi dV = f_0 \int \psi^* f_0 \psi dV = f_0^2 \int \psi^* \psi dV = f_0^2. \end{aligned}$$

Итак, в нашем случае

$$\langle f^2 \rangle = \langle f \rangle^2 = f_0^2.$$

Как отмечалось в конце предыдущего параграфа, такое равенство возможно лишь в том случае, если величина  $f$  не имеет распределения, а принимает одно-единственное значение. Из (2.29) следует, что это значение равно  $f_0$ . Таким образом,  $\psi$ -функции, являющиеся решениями уравнений (2.28), действительно описывают собственные состояния.

Уравнения типа (2.28), вообще говоря, являются уравнениями в частных производных. Математика учит, что для однозначного решения таких уравнений нужны дополнительные ограничения, например граничные и начальные условия. Условия, которые накладывает квантовая механика на решения уравнений (2.28), имеют несколько другой характер: *физический смысл могут иметь лишь решения всюду конечные, однозначные, непрерывные и гладкие.*

В качестве примера с помощью (2.28) найдем  $\psi$ -функцию состояния, в котором проекция импульса  $p_x$  имеет определенное значение  $p_m$ . Подставляя в (2.28) в качестве оператора  $\hat{f}$  оператор проекции импульса  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ , получим

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_m \psi.$$

Этому уравнению (и всем необходимым условиям!) удовлетворяет функция

$$\psi = C \exp\left(i \frac{p_m}{\hbar} x\right),$$

являющаяся хорошо известной плоской волной.

Выясним теперь, какая связь существует между операторами физических величин и числовыми значениями этих величин, наблюдаемыми на опыте. Произведем опыт по измерению какой-либо физической величины  $f$ . В результате опыта возникает некоторое число — измеренное значение величины  $f$ . Пусть при измерении обнаружилось, что  $f$  имеет значение  $f_0$ . Это не означает, что до опыта значение величины  $f$  равнялось  $f_0$ ; эта величина могла иметь, некоторое распределение, из которого эксперимент выбрал найденное значение  $f_0$ . Поскольку, однако, это значение найдено, состояние системы после опыта описывается  $\psi$ -функцией с определенным значением  $f$ , т. е. функцией, являющейся решением уравнения  $\hat{f}\psi = f_0\psi$ . Мы можем поэтому утверждать, что на опыте могут быть найдены лишь такие значения  $f_0$  величины  $f$ , при которых (2.28) имеет решения, удовлетворяющие сформулированным выше требованиям.

Функции, являющиеся решением уравнения (2.28) и удовлетворяющие условиям конечности, непрерывности, однозначности и гладкости, называются *собственными функциями* оператора  $\hat{f}$ ; те значения  $f_0$ , при которых такие решения существуют, называются *собственными значениями* физической величины  $f$ . Таким образом, *набор собственных значений для оператора  $\hat{f}$  определяет значения  $f_0$ , которые могут быть найдены из опыта при измерении физической величины  $f$ .*

При исследовании (2.28) нередко оказывается, что конечные, однозначные, непрерывные и гладкие решения могут быть найдены не при всех, а лишь при некоторых дискретных значениях  $f_0$ . Набор собственных значений физической величины иногда оказывается непрерывным, а иногда дискретным:  $f_{01}, f_{02}, f_{03}, \dots$ . Опыт показывает, что в таких случаях измеренные значения  $f$  действительно оказываются дискретными и совпадают с собственными значениями  $f_{0i}$ . Хорошим примером дискретности в микромире являются оптические спектры атомов, которые состоят из ряда отдельных тонких линий.

Существенным различием макромира и микромира является то, что в макромире все объекты одного сорта различны, а в микромире — одинаковы. В самом деле, все дома различны, все люди разные, не бывает двух в точности одинаковых песчинок и т. д. И наоборот: опыт свидетельствует, что все электроны одинаковы, все протоны одинаковы и все атомы одного сорта тоже вполне одинаковы. В точности одинаковы и спектры, испускаемые атомами одного и того же сорта (например, атомами водорода или атомами гелия и т. д.).

## § 8. Уравнение Шредингера

Перейдем к изучению изолированных физических систем, т. е. систем, настолько слабо связанных с окружающим миром, что этой связью можно вовсе пренебречь. Как известно, у таких систем сохраняется энергия. Их состояния, следовательно, описываются  $\psi$ -функциями, удовлетворяющими (2.28), в котором в качестве  $\hat{f}$  фигурирует оператор полной энергии системы. Подставляя в (2.28) значение оператора полной энергии (2.23), находим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + U\psi = E_0\psi. \quad (2.30)$$

Это уравнение играет важнейшую роль в квантовой физике и носит название уравнения Шредингера для стационарных состояний (стационарными в квантовой механике называются состояния с неизменной энергией).

Уравнение (2.30) может быть записано в более компактном виде, если для оператора  $\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ , называемого обычно оператором Лапласа, ввести общепринятое обозначение  $\Delta$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U\psi = E_0\psi. \quad (2.31)$$

*Физический смысл имеют лишь конечные, однозначные, непрерывные и гладкие решения этого уравнения*<sup>1</sup>.

В отличие от уравнений Ньютона уравнение Шредингера является не просто дифференциальным уравнением, а дифференциальным уравнением в частных производных. Такие уравнения аналитически решаются крайне редко. Поэтому в квантовой физике существует очень узкий круг задач, решаемых в аналитическом виде до конца. Однако можно научиться оценивать результат и в тех случаях, когда точное решение не может быть получено из-за сложности уравнения. Для этого в следующей главе будут проведены исследования общих свойств решений уравнения Шредингера на простых примерах, когда такие решения можно получить и проанализировать полностью.

В заключение отметим, что уравнение Шредингера для стационарных состояний является частным случаем более общего уравнения Шредингера, описывающего поведение любых нерелятивистских систем:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \quad (2.32)$$

Обсуждение этого уравнения выходит за рамки книги. Уравнение (2.30) получается из общего уравнения Шредингера, если гамильтониан  $\hat{H}$  явно не зависит от времени. В этом случае волновая функция  $\Psi$  может быть представлена в виде произведения функции  $\psi(x, y, z)$ , зависящей только от координат, и функции  $\varphi(t)$ , зависящей только от времени, так что

$$\Psi(t, x, y, z) = \psi(x, y, z)\varphi(t).$$

Подставляя это выражение в (2.32) и деля обе части полученного уравнения на  $\Psi(t, x, y, z)$ , найдем

$$\frac{i\hbar}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{\psi} \hat{H}\psi.$$

Левая часть этого уравнения зависит только от времени, а правая — только от координат. Они не зависят, следовательно, ни от координат, ни от времени и равны некоторой константе. Обозначив эту константу через  $E$ , найдем

$$i\hbar \frac{d\varphi}{dt} = E\varphi, \quad \hat{H}\psi = E\psi.$$

Первое из приведенных уравнений приводит к уже известной зависимости волновой функции от времени

$$\varphi(t) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right),$$

а второе совпадает с уравнением Шредингера для стационарных состояний, т. е. с (2.30).

<sup>1</sup>Об исключениях из этого правила см. текст после формулы (3.8).

## ГЛАВА 3

# ЧАСТИЦА В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ. КВАНТОВАНИЕ ЭНЕРГИИ. ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ

### § 9. Прямоугольная потенциальная яма. Принцип соответствия

Рассмотрим случай, когда потенциальная энергия частицы  $U(x)$  равна нулю на отрезке  $0 \leq x \leq a$ , обращается в бесконечность при  $x < 0$  и равна некоторой положительной величине  $U$  при  $x > a$  (рис. 19)<sup>1</sup>. Если полная энергия частицы  $E < U$ , то говорят, что частица находится в «потенциальной яме».

Рассмотрим вначале, как будут себя вести в такой яме классические частицы. На отрезке  $0 \leq x \leq a$  они движутся с постоянной кинетической энергией и, следовательно, с постоянной скоростью. Энергия частиц в яме может иметь любое значение. При  $0 \leq E \leq U$  частицы не могут выйти за край ямы, потому что вне ямы потенциальная энергия больше полной и кинетическая энергия должна была бы иметь отрицательное значение, что невозможно. Подойдя к краю ямы, частицы «отражаются» от стенки и движутся в противоположную сторону, там снова отражаются и т. д. Таким образом, частицы, подчиняющиеся классической физике, отсутствуют вне потенциальной ямы и могут быть с равной вероятностью найдены в любом месте ямы.

Частицы, подчиняющиеся квантовой механике, ведут себя существенно иначе. Основные особенности движения могут быть поняты без расчетов. Мы уже знаем, что  $\psi$ -функция частицы должна быть непрерывной и гладкой. Поэтому  $\psi$ -функция не может «оборваться» у правой стенки и должна продолжаться за ней<sup>2</sup>, хотя за краем ямы полная

---

<sup>1</sup>Для простоты мы рассматриваем одномерную задачу.

<sup>2</sup>О том, как ведет себя  $\psi$ -функция при обращении потенциальной энергии в бесконечность, мы поведем речь ниже. После этого можно будет обсуждать поведение  $\psi$ -функции у левой стенки.



энергия меньше потенциальной. Следует ожидать, что этот заход в запретную с классической точки зрения область будет тем меньше, чем тяжелее частицы, так как очень крупные, «классические» частицы в области с  $E < U$  заходить не могут.

После этих предварительных замечаний перейдем к точному решению задачи о движении частицы в потенциальной яме. Уравнение Шредингера в одномерном случае имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi. \quad (3.1)$$

Так как функция  $U(x)$  является ступенчатой (рис. 19), то для решения задачи удобно разбить область изменения  $x$  на два участка с постоянными значениями  $U$ , получить решения для каждого участка в отдельности, а затем «сшить» их так, чтобы  $\psi$ -функция была непрерывной и гладкой. Область  $x < 0$ , как будет видно из дальнейшего, интереса не представляет.

Назовем область  $0 < x < a$  областью *I* и все решения в этой области снабдим индексом 1. Область  $x > a$  назовем областью *II* и припишем индекс 2 решениям во второй области. Уравнение (3.1) в области *I* примет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} = E\psi_1, \quad (3.2)$$

а в области *II* запишется в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + U\psi_2 = E\psi_2. \quad (3.3)$$

Введем обозначения

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E). \quad (3.4)$$

При этом уравнения (3.2) и (3.3) примут простой вид:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - k_2^2\psi_2 = 0. \quad (3.5)$$

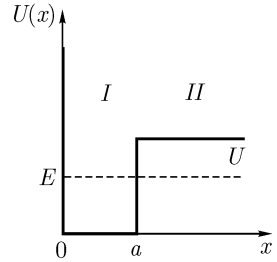


Рис. 19. Прямоугольная потенциальная яма с бесконечно высокой стенкой при  $x = 0$ .

Как следует из (3.4),  $k_1^2$  и  $k_2^2$  — величины положительные. Решая уравнения (3.5), найдем

$$\psi_1 = A \sin(k_1 x + \varphi), \quad \psi_2 = B e^{k_2 x} + C e^{-k_2 x}. \quad (3.6)$$

В формулах (3.6)  $A$ ,  $\varphi$ ,  $B$ ,  $C$  — некоторые константы.

Примем теперь во внимание условия, которым должна удовлетворять  $\psi$ -функция. Учтем прежде всего, что  $\psi$ -функция должна быть всюду конечной (в том числе и в бесконечно удаленной точке!). Будем считать  $k_2$  положительной величиной (выбор отрицательных значений вместо положительных приводит просто к обмену местами первого и второго членов второй формулы (3.6)). Член  $\exp(k_2 x)$  при  $x \rightarrow \infty$  неограниченно возрастает. Поэтому необходимо, чтобы  $B = 0$ . Потребуем, чтобы решения  $\psi_1$  и  $\psi_2$  в точке  $a$  были равны (чтобы решение было непрерывным) и переходили одно в другое без излома (чтобы оно было гладким). Приравнявая  $\psi_1(a)$  и  $\psi_2(a)$ , найдем

$$A \sin(k_1 a + \varphi) = C e^{-k_2 a}. \quad (3.7)$$

Полагая  $d\psi_1/dx$  в точке  $a$  равным  $d\psi_2/dx$ , получим

$$k_1 A \cos(k_1 a + \varphi) = -k_2 C e^{-k_2 a}.$$

Деля эти два равенства друг на друга, найдем

$$\operatorname{tg}(k_1 a + \varphi) = -k_1/k_2. \quad (3.8)$$

Исследуем прежде всего случай, когда  $U$  очень велико. Как следует из (3.4),  $k_1$  при увеличении  $U$  не изменяется, а  $k_2$  возрастает. Поэтому при  $U \rightarrow \infty$  отношение  $k_1/k_2 \rightarrow 0$ . При бесконечно высокой стенке, следовательно,

$$\operatorname{tg}(k_1 a + \varphi) = 0,$$

что возможно лишь в тех случаях, когда  $\sin(k_1 a + \varphi) = 0$ , а значит, и  $\psi_1(a)$  обращается в нуль. Мы замечаем, таким образом, что в точке, где потенциальная энергия бесконечно возрастает,  $\psi$ -функция обращается в нуль. За стенкой  $\psi$ -функция начинается с нулевого значения, а далее может только затухать, как это следует из (3.6). Она, следовательно, остается равной нулю. Производная  $d\psi_1/dx$  при  $U \rightarrow \infty$  в нуль не обращается. Мы видим, таким образом, что в точке, где потенциальная энергия обращается в бесконечность,  $\psi$ -функция обращается в нуль, остается непрерывной, но перестает быть гладкой. Потеря гладкости является «наказанием» за нефизическое допущение

о том, что потенциальная энергия обращается в бесконечность. Но даже при таком допущении  $\psi$ -функция остается непрерывной.

Проведенные выше рассуждения полностью применимы к бесконечно высокой левой стенке ямы, т. е. при  $x = 0$  функция  $\psi_1$  должна обратиться в нуль. Имеем поэтому

$$\varphi = 0. \quad (3.9)$$

$\psi$ -функция остается равной нулю налево от точки  $x = 0$ , т. е. при всех отрицательных значениях  $x$ .

Уравнения (3.6) с учетом (3.7) и (3.9) сильно упрощаются и приобретают окончательный вид:

$$\psi_1 = A \sin(k_1 x), \quad \psi_2 = C \exp(-k_2 x). \quad (3.10)$$

Вместо уравнения (3.8) получим

$$\operatorname{tg}(k_1 a) = -k_1/k_2. \quad (3.11)$$

В уравнение (3.11) не входит ни одна произвольная константа, и из него следует, что решение задачи имеется не при любых значениях параметров. Если задаться шириной  $a$  и глубиной  $U$  потенциальной ямы, уравнение (3.11) в силу (3.4) определяет возможные значения  $E$ . Однако это уравнение является трансцендентным, и рассматривать его неудобно.

Отложим поэтому дальнейшее обсуждение уравнения (3.11) и рассмотрим вначале более простой случай, когда не одна, а обе стенки у ямы бесконечно высокие. Так как при этом  $k_1/k_2 \rightarrow 0$ , то уравнение (3.11) принимает простой вид:

$$\operatorname{tg}(k_1 a) = 0. \quad (3.11')$$

Уравнение (3.11') удовлетворяется при

$$k_1 a = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

или

$$k_1 = \pi n/a. \quad (3.12)$$

Решение  $k_1 = 0$  (при  $n = 0$ ), которое формально удовлетворяет уравнению (3.11'), на самом деле является лишним. В самом деле, при  $k_1 = 0$  функция  $\psi_1$ , а вместе с ней и  $\psi_2$  тождественно обращаются в нуль. Это означает, что речь идет о случае, когда частицы в яме нет. Решения приобретают смысл при целых  $n$ , начиная с единицы.

От решения (3.12) с помощью первого из равенств (3.4) перейдем к возможным решениям для энергии

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k_1^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.13)$$

Формула (3.13) показывает, что частица, «запертая» в потенциальной яме, может иметь только дискретные, квантованные значения энергии. Эти значения принято называть *уровнями энергии*

Для бесконечно глубокой ямы вычисление положения уровней, как мы видели, легко доводится до конца в общем виде. В произвольном случае положение уровней вычисляется с помощью уравнений типа (3.11), которые проще всего решать графически.

Выясним причину, по которой возникает квантование энергии. Решения уравнения Шредингера в отдельных областях пространства, приведшие к (3.10), сами по себе к квантованию энергии не приводят. Квантование возникло из-за того, что мы сшивали волновые функции на границе областей, в которых решение описывается существенно различными функциями: тригонометрической и экспоненциальной.

Существует общая теорема квантовой механики, в которой доказывается, что *энергия всегда квантуется у систем, которые не могут уходить на бесконечность, и не квантуется у систем, способных уходить на бесконечность*. Таким образом, если частица в яме «не заперта», т. е. при  $E > U$ , квантование энергии не возникает.

К этому результату в рассматриваемом случае можно придти и путем точного решения задачи. При  $E > U$  вместо (3.4) введем обозначения

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad \kappa_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \quad (3.14)$$

и вместо (3.5) найдем

$$\frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} + \kappa_1^2 \varphi_1 = 0, \quad \frac{d^2 \varphi_2}{dx^2} + \kappa_2^2 \varphi_2 = 0. \quad (3.15)$$

Решение первого уравнения имеет вид, аналогичный первому из равенств (3.10):

$$\varphi_1 = A' \sin(\kappa_1 x) = \frac{A'}{2i} (e^{i\kappa_1 x} - e^{-i\kappa_1 x}), \quad (3.16)$$

а решением второго является функция<sup>1</sup>

$$\varphi_2 = B'e^{i\kappa_2 x} - C'e^{-i\kappa_2 x}. \quad (3.17)$$

Сождем решения  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  в точке  $a$ . Приравнивая  $\varphi_1(a) = \varphi_2(a)$ , найдем

$$\frac{A'}{2i}(e^{i\kappa_1 a} - e^{-i\kappa_1 a}) = B'e^{i\kappa_2 a} - C'e^{-i\kappa_2 a}. \quad (3.18)$$

Приравнивая производные, получим

$$\frac{A'}{2i}i\kappa_1(e^{i\kappa_1 a} + e^{-i\kappa_1 a}) = i\kappa_2(B'e^{i\kappa_2 a} + C'e^{-i\kappa_2 a}). \quad (3.19)$$

Уравнения (3.18) и (3.19) позволяют найти  $B'$  и  $C'$  через  $A'$ . Амплитуду одной из волн, например  $A'$ , следует считать заданной. Как нетрудно убедиться,

$$B' = \frac{A'}{4i}e^{-i\kappa_2 a} \left\{ e^{i\kappa_1 a} \left( \frac{\kappa_1}{\kappa_2} + 1 \right) + e^{-i\kappa_1 a} \left( \frac{\kappa_1}{\kappa_2} - 1 \right) \right\},$$

$$C' = \frac{A'}{4i}e^{i\kappa_2 a} \left\{ e^{i\kappa_1 a} \left( \frac{\kappa_1}{\kappa_2} - 1 \right) + e^{-i\kappa_1 a} \left( \frac{\kappa_1}{\kappa_2} + 1 \right) \right\}.$$

Решение может быть найдено при любых действительных значениях  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$ , т. е. при любом  $E > U$ .

Решения (3.16) и (3.17) проще всего интерпретировать, начиная с функции  $\varphi_2$ . Эта функция представляет собой сумму двух волн де Бройля: волны  $\exp(-i\kappa_2 x)$ , движущейся справа налево, и волны  $\exp(i\kappa_2 x)$ , движущейся слева направо. Пришедшая из  $+\infty$  волна частично отражается и преломляется на границе  $x = a$  потенциальной ямы ( $\kappa_2$  меняется на  $\kappa_1$ ), отражается от стенки, расположенной при  $x = 0$  (к члену, содержащему  $\exp(-i\kappa_1 x)$ , прибавляется член с  $\exp(i\kappa_2 x)$ , снова преломляется на границе  $x = a$  и уходит в бесконечность.

В рассматриваемом простом случае особенно ясно видна причина, приводящая к квантованию энергии при  $E < U$ . При  $E > U$  сшивка функций приводит к двум уравнениям для двух неизвестных коэффициентов  $B'$  и  $C'$ . Эти уравнения всегда имеют решения. При  $E < U$  мы вынуждены были положить в уравнении (3.6)  $B = 0$ . Поэтому сшивание

<sup>1</sup>Можно было бы записать это решение в виде  $\varphi_2 = D \sin(\kappa_2 x + \vartheta)$ , однако приведенное в тексте выражение, как будет видно из дальнейшего, имеет более простой физический смысл.

решений привело к двум уравнениям, с помощью которых нужно было найти всего один коэффициент  $C$ . А это возможно не при всех, а лишь при некоторых, характерных для рассматриваемого случая, значениях энергии.

Вернемся к обсуждению формулы (3.11). Разделив эту формулу на  $k_1$ , получим

$$\frac{1}{k_1} \operatorname{tg}(k_1 a) = -\frac{1}{k_2}.$$

В правой части этой формулы стоит существенно отрицательная величина (о выборе знака  $k_2$  см. текст после формулы (3.6)). Чтобы левая часть равенства также была отрицательной, необходимо, чтобы  $k_1 a$  лежало в областях

$$\pi/2 < k_1 a < \pi, \quad 3\pi/2 < k_1 a < 2\pi \text{ и т. д.}$$

Во всяком случае, необходимо, чтобы выполнялось условие  $k_1 a > \pi/2$ . Возведя это неравенство в квадрат и заменяя  $k_1^2$  через  $E$  с помощью (3.4), найдем

$$\frac{2mE}{\hbar^2} a^2 > \frac{\pi^2}{4}, \quad \text{или} \quad E > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

Вспомним теперь, что стационарные уровни возникают лишь в том случае, если  $E < U$ . Поэтому уровни в потенциальной яме рассматриваемого вида возникают лишь при условии, что

$$Ua^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}.$$

В левой части этого неравенства стоят параметры потенциальной ямы, а в правой — только постоянные числа и универсальные постоянные. Если полученное нами условие не выполнено (потенциальная яма слишком узкая или слишком мелкая), в ней не помещается ни одного энергетического уровня. Такие случаи встречаются не так уж редко. Силы взаимодействия между двумя нейтронами являются силами притяжения, однако ядра, состоящего из двух нейтронов, в природе не существует. Аналогичным образом не существует и ядра, состоящего из двух протонов. В обоих случаях потенциальная яма сил притяжения недостаточно глубока для образования связанного состояния. Сила притяжения между нейтроном и протоном не намного больше сил, действующих между двумя нейтронами или двумя протонами. Этого небольшого различия, однако, достаточно для того, чтобы у уравнения Шредингера появилось

одно решение. Соответствующее связанное состояние нейтрона и протона называется дейтроном. Поскольку в этом случае имеется всего одно решение, дейтрон не имеет возбужденных состояний<sup>1</sup>.

Исследуем поведение  $\psi$ -функции внутри потенциальной ямы. Для бесконечно глубокой ямы

$$\begin{aligned} k_1 &= \pi/a, & \psi(x) &= A \sin(\pi x/a) & \text{при } n = 1, \\ k_1 &= 2\pi/a, & \psi(x) &= A \sin(2\pi x/a) & \text{при } n = 2, \\ k_1 &= 3\pi/a, & \psi(x) &= A \sin(3\pi x/a) & \text{при } n = 3. \end{aligned}$$

Графики этих функций изображены на рис. 20. Ограничимся решениями, приведенными на рис. 20. При возрастающих значениях  $n$  решения испытывают все более быстрые колебания и много раз обращаются в нуль. Таким образом, пространство, в котором движется частица, оказывается разбитым нулями  $\psi$ -функции на ряд отдельных областей.

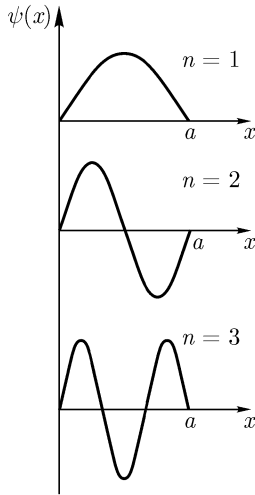


Рис. 20.  $\psi$ -функция частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.

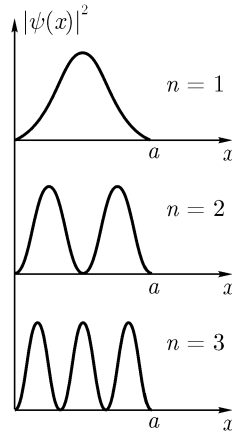


Рис. 21. Распределение частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.

Вероятность найти частицу в окрестности любой точки пропорциональна  $|\psi(x)|^2$ . На рис. 21 приведены графики для  $|\psi(x)|^2$  при  $n =$

<sup>1</sup>Более подробно эти вопросы рассматриваются в гл. 14.

= 1, 2, 3. Мы видим, что в низшем энергетическом состоянии ( $n = 1$ ) с наибольшей вероятностью частицу можно найти посередине ямы; вероятность нахождения частицы вблизи краев ямы равна нулю. Такое поведение частицы резко отличается от поведения «классической» частицы, которое мы обсуждали в начале параграфа.

Заметим, что минимальное значение, которое может иметь энергия частиц в яме, т. е. значение энергии при  $n = 1$ , отлично от нуля:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

В классической физике частица может «лежать» на дне ямы. В квантовой физике это невозможно. И это можно было предсказать заранее, до решения задачи. Ведь помещая частицу в яму, мы тем самым ограничили область возможных значений ее координаты; у такой частицы в силу принципа неопределенности должен существовать разброс по импульсам, а следовательно, и отличная от нуля энергия.

Попробуем определить эту энергию по порядку величины без точного решения — на основании принципа неопределенности. Неопределенность положения частицы в нашем случае равна  $a$ . Поэтому  $\Delta x \approx a$ . Согласно соотношению неопределенностей (1.33)

$$\Delta p_x \approx \frac{2\pi\hbar}{\Delta x} \approx \frac{2\pi\hbar}{a}.$$

Мы уже выяснили (2.27), что  $\langle p^2 \rangle = \langle p \rangle^2 + \langle (\Delta p)^2 \rangle$ . В нашем случае положительные и отрицательные  $p$  равновероятны, так что  $\langle p \rangle = 0$ . Поэтому

$$E = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\langle (\Delta p)^2 \rangle}{2m} \approx 4 \frac{\pi^2}{2ma^2} \hbar^2 = 2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2}.$$

Сравнивая полученное выражение с  $E_1$ , убеждаемся в том, что мы нашли правильный по порядку величины результат.

Вернемся к рис. 21. Видно, что с увеличением энергии (т. е. с ростом квантового числа  $n$ ) максимумы кривой  $|\psi(x)|^2$  располагаются все ближе и ближе; при очень больших значениях максимумы и минимумы следуют друг за другом так быстро, что при не очень точных опытах (практически при любых опытах с макроскопическими телами) картина «сливается» и представляется равномерным распределением, известным из классики.

Оценим расстояние между уровнями. Для этого возьмем логарифмическую производную от равенства (3.13):

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = 2 \frac{\Delta n}{2} = \frac{2}{n}.$$



Из полученного равенства видно, что расстояние между энергетическими уровнями, отнесенное к величине энергии, уменьшается с увеличением  $n$  и для очень больших  $n$  так мало, что распределение разрешенных значений энергии оказывается практически непрерывным.

Мы уже ввели ранее критерий, при выполнении которого достаточную точность дает классическая физика, и применять формулы квантовой механики не обязательно. Этот критерий был записан в виде  $L \gg \lambda$ . Смысл его заключается в том, что при длинах волн, много меньших размеров системы, в которой движется частица, квантовомеханические особенности частиц оказываются несущественными. В рассмотренной задаче действует, вообще говоря, этот же самый критерий. В самом деле, с увеличением энергии (числа  $n$ ) длина волны  $\lambda$  уменьшается, и при тех же размерах системы (в нашем случае — потенциальной ямы) критерий применимости классической физики выполняется все лучше. При больших квантовых числах, как мы видели, частицы начинают вести себя совсем «по-классически». С увеличением размеров системы (с увеличением ширины потенциальной ямы) «квантовомеханическая частица» при все меньшей энергии превращается в «классическую частицу». В этом легко убедиться, решая конкретные примеры с различными значениями ширины ямы  $a$ .

Таким образом, при определенных условиях (при больших  $n$ ) квантовая физика переходит в классическую физику; поведение частиц при выполнении этого условия все более утрачивает особенности, характерные для микрочастиц.

Этот результат является частным случаем общего физического принципа — принципа соответствия. Согласно этому принципу любая новая теория, претендующая на большую общность, чем общепринятая теория, обязательно должна переходить в старую, классическую теорию в тех условиях, в которых «старая физика» была построена и проверена на опыте. Квантовая механика, как мы видим, принципу соответствия удовлетворяет.

Перейдем к яме с конечной высотой стенки. Как следует из (3.10), в области II решение не равно нулю и имеет вид спадающей экспоненты. Это означает, что частица может заходить в область, где  $E < U$ , но, как и следует ожидать исходя из принципа соответствия, вероятность нахождения в этой области тем меньше, чем дальше мы отойдем от края ямы. В классической физике частица вовсе не может заходить в области с  $E < U$ , так как при этом кинетическая энергия частицы оказалась бы отрицательной. В квантовой механике, как мы видим, такая ситуация возможна. Объясняется это тем, что равенство  $E = T + U$  в квантовой механике нельзя понимать как численное равенство. В квантовой механике это равенство справедливо для операторов  $\hat{E} = \hat{T} + \hat{U}$  и для

средних значений  $\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle$ . Численное равенство  $E = T + U$  для мгновенных значений  $T$  и  $U$  в микромире невозможно уже потому, что оно бессмысленно: как мы уже отмечали, потенциальная и кинетическая энергия в силу принципа неопределенности не могут одновременно принимать определенные значения. В самом деле, потенциальная энергия зависит от координат, а кинетическая — от импульса частицы. Поэтому не следует удивляться тому, что в некоторых точках пространства полная энергия оказывается меньше потенциальной.

Рассмотрим обсуждаемый вопрос еще с одной точки зрения. В области II волновая функция пропорциональна экспоненте  $e^{-k_2 x}$ , где  $k_2 = \sqrt{2m(U - E)}/\hbar$ . Вероятность нахождения частицы в запретной зоне быстро падает с увеличением  $x$ . При значении  $x = 1/k_2$  волновая функция уменьшается в  $e$  раз, а вероятность найти частицу на таком расстоянии от границы ямы уменьшается в  $e^2$  раз, т. е. почти на порядок. Примем значение  $x = 1/k_2$  за меру неопределенности положения частицы в запретной зоне и обозначим ее  $\Delta x$ :

$$\Delta x \approx \hbar / \sqrt{2m(U - E)}.$$

В этом выражении под корнем стоит «нехватка» энергии  $U - E$ . Если бы под корнем стоял нуль, то частица могла бы сколь угодно далеко заходить в запретные области.

Величина  $\sqrt{2m(U - E)}$  имеет размерность импульса и может интерпретироваться как «нехватка» импульса  $\delta p$ . Следовательно,

$$\delta p = \hbar / \Delta x.$$

Мы знаем, что неопределенность импульса выражается приближенным равенством

$$\Delta p \approx 2\pi\hbar / \Delta x.$$

Таким образом, «нехватка» импульса, как и следовало ожидать, по порядку величины равна его неопределенности.

## § 10. Потенциальный барьер. Туннельный эффект

Проникновение частиц в область, где потенциальная энергия оказывается больше полной, может проявляться в ряде важных физических явлений. Рассмотрим потенциальную яму, изображенную на рис. 22. Этот случай отличается от случая, изображенного на рис. 19, тем, что область, в которой потенциальная энергия отлична от нуля, занимает не все полупространство  $x > a$ , а узкую область от  $a$  до  $b$ . Область

$a < x < b$ , где  $E < U$ , называют в этом случае **потенциальным барьером**.

Запрет в начале опыта серию частиц в области  $0 < x < a$ . Экспоненциально падающее решение (3.10) в точке  $b$  будет мало, но все-таки отлично от нуля. Наши частицы смогут поэтому проникнуть в область *III*, расположенную за потенциальным барьером, и уйти из потенциальной ямы. Попавшие в область *III* частицы беспрепятственно уходят в сторону больших  $x$  и обратно не возвращаются. Соответствующая  $\psi$ -функция имеет вид бегущей (уходящей) волны. Через достаточно большой промежуток времени все частицы уйдут из области  $0 < x < a$ .

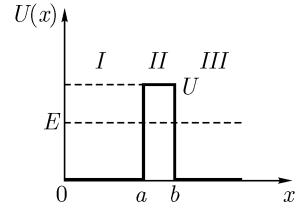


Рис. 22. Потенциальный барьер.

Просачивание частиц сквозь потенциальный барьер носит название **туннельного эффекта**.

Как ясно из предыдущего, задача о проникновении частиц сквозь потенциальный барьер является примером из квантовой механики нестационарных систем (систем, состояние которых зависит от времени). Рассмотрение таких задач, вообще говоря, выходит за рамки этой книги. Формула (3.10), однако, позволяет сделать важную оценку, основанную на том, что туннельный эффект происходит медленно, и задача о проникновении частиц сквозь потенциальный барьер является «почти стационарной», так что без большой погрешности для расчета можно применять (3.10).  $\psi$ -функция частиц за потенциальным барьером отличается от  $\psi$ -функции перед барьером множителем  $e^{-k_1(b-a)}$ . Вероятность нахождения частицы определяется квадратом волновой функции. Плотность частиц за барьером поэтому отличается от плотности частиц до барьера множителем  $D$ <sup>1</sup>:

$$D = e^{-2k_2(b-a)} = \exp\left[-2(b-a)\sqrt{2m(U-E)/\hbar^2}\right]. \quad (3.20)$$

Величина  $D$  называется **проницаемостью барьера**.

Важным примером прохождения частиц сквозь потенциальный барьер является  $\alpha$ -распад радиоактивных ядер. При  $\alpha$ -распаде материнское ядро испускает  $\alpha$ -частицу, состоящую из двух протонов и двух нейтронов и превращается в дочернее ядро. На рис. 23 изображен график потенциальной энергии взаимодействия  $\alpha$ -частицы с дочерним ядром. При

<sup>1</sup>Как ясно из вывода, формула (3.20) справедлива только для «почти стационарных» решений, т. е. при  $D \ll 1$ .

больших расстояниях между ядром и  $\alpha$ -частицей их взаимодействие с хорошей точностью описывается законом Кулона

$$U_{II}(r) = Ze \cdot ze/r, \quad (3.21)$$

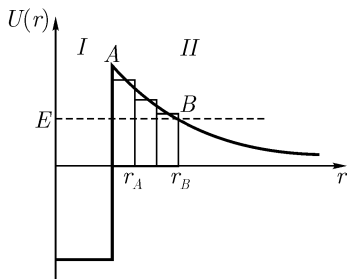


Рис. 23. Потенциальный барьер для  $\alpha$ -частицы в ядре.

где  $Ze$  — заряд дочернего ядра,  $ze$  — заряд  $\alpha$ -частицы ( $z = 2$ ). Этот участок кривой обозначен на рис. 23 римской цифрой II. При малых расстояниях между дочерним ядром и  $\alpha$ -частицей начинают сказываться короткодействующие силы притяжения — ядерные силы. Поэтому при малых расстояниях потенциальная энергия меняет знак и становится отрицательной. Зависимость ядерных сил от расстояния плохо известна. Сколько-нибудь точно восстановить форму потенциальной ямы в области I не удастся. К счастью, результат расчета не очень к этому чувствителен, так что в области I

яму просто считают прямоугольной. Ширина прямоугольной ямы близка к размерам ядра. Для тяжелых элементов, расположенных в конце периодической системы, радиус ядра  $r_A$  по порядку величины равен  $10^{-12}$  см.

Рассмотрим в качестве примера  $\alpha$ -распад  $^{210}\text{Po}$ . Заряд ядра полония равен  $84e$ . Полоний испускает  $\alpha$ -частицы с энергией 5,30 МэВ; его период полураспада равен 138 дням. Дочернее ядро  $^{206}\text{Pb}$  имеет заряд, равный  $82e$ .

Вычислим высоту потенциального барьера — значение потенциальной энергии в точке A (рис. 23). С помощью (3.21) найдем

$$U_A = \frac{Ze \cdot ze}{r_A} \approx \frac{82 \cdot 2(4,8 \cdot 10^{-10})^2}{10^{-12}} = 3,7 \cdot 10^{-5} \text{ эрг} \approx 23 \text{ МэВ.}$$

Мы видим, что энергия  $\alpha$ -частиц существенно меньше высоты барьера, так что  $\alpha$ -распад возможен только в результате туннельного эффекта.

Формула (3.20) описывает вероятность прохождения частиц под прямоугольным барьером, в то время как форма барьера при  $\alpha$ -распаде скорее «треугольная», чем прямоугольная. Выражение для прозрачности барьера произвольной формы в общем виде получить не удастся. Приближенное же значение для проницаемости барьера можно получить, заменяя истинную форму барьера суммой прямоугольных участков, как это показано на рис. 23. Полная картина прохождения частицы сквозь

такой барьер складывается из ослабления волновой функции при движении на отдельных участках и из последовательных отражений от границ участков. Если барьер достаточно плаван (его высота мало меняется на расстоянии, равном длине волны), отражения не очень существенны, и ослабление волновой функции в основном определяется ее затуханием при движении в областях с  $E < U$ . В этом случае проникаемость всего барьера  $D$  равна произведению проникаемости  $D$ , соответствующих участков. При перемножении показатели экспонент складываются, так что

$$D = \exp\left(-2 \sum_i \Delta r_i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_i - E)}\right) \rightarrow \exp\left(-2 \int_{r_A}^{r_B} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[U(r) - E]} dr\right). \quad (3.22)$$

Оценка показателя экспоненты в формуле (3.22) дает значение, близкое к 60. Таким образом, проникаемость кулоновского барьера для  $\alpha$ -распада оказывается очень малой, а периоды полураспада радиоактивных ядер, которые обратно пропорциональны коэффициентам прозрачности, наоборот, очень велики.

## § 11. Линейный гармонический осциллятор. Колебательные уровни молекул

На рис. 24 изображен классический гармонический осциллятор, представляющий собой шарик с массой  $m$ , прикрепленный к пружине. Если мы направим ось  $x$  вдоль оси пружины и за начало отсчета примем положение равновесия шарика, то сила  $F$ , действующая на шарик, будет связана с координатой  $x$  формулой

$$F = -kx, \quad (3.23)$$

где  $k$  — жесткость пружины. Потенциальная энергия шарика

$$U = kx^2/2. \quad (3.24)$$

Будучи выведенным из состояния равновесия, такой шарик совершает гармонические колебания с частотой

$$\omega_0 = \sqrt{k/m}. \quad (3.25)$$

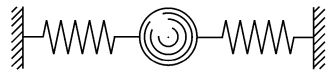


Рис. 24. Модель гармонического осциллятора.

Из (3.24) видно, что потенциальная кривая гармонического осциллятора является параболой (рис. 25). Поэтому задача о гармоническом осцилляторе — это задача о поведении частицы в потенциальной яме параболической формы.

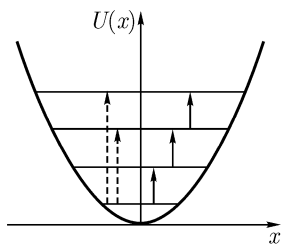


Рис. 25. Уровни энергии и разрешенные переходы для гармонического осциллятора.

К задаче об осцилляторе всегда сводятся задачи о малых колебаниях. В точке равновесия потенциальная энергия имеет минимум. Разложение потенциальной энергии в ряд Тейлора в окрестности точки равновесия начинается поэтому с квадратичных членов. При малых отклонениях всеми остальными членами можно пренебречь и колебания можно считать гармоническими.

В атомной физике к осциллятору сводится задача о колебаниях молекул и многие другие важные задачи. При решении таких задач следует, конечно, применять не классическую, а квантовую механику.

Для решения задачи о квантовомеханическом осцилляторе необходимо найти конечное, однозначное, непрерывное и гладкое решение уравнения Шредингера при  $U = kx^2/2$ , т. е. уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{k}{2} x^2 \psi = E\psi. \quad (3.26)$$

Используя полученные выше выводы, мы можем предсказать, что решение будет удовлетворять всем необходимым условиям не при всех, а лишь при некоторых дискретных значениях энергии осциллятора, так как при удалении от положения равновесия потенциальная энергия быстро возрастает и колеблющаяся частица не может «уйти на бесконечность». Точное решение уравнения (3.26) приводит к следующему выражению для спектра возможных значений энергии осциллятора (математические выкладки слишком длинные, и мы их опускаем):

$$E_n = \sqrt{\frac{k}{m}} \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Вводя обозначение  $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ , найдем

$$E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.27)$$

Выражение для  $\omega_0$  совпадает с (3.25) для частоты классического осциллятора.

Как и следовало ожидать, наименьшее значение энергии осциллятора не равно нулю: при  $n = 0$   $E_0 = \hbar\omega_0/2$ . Значение  $E_0$  называется «нулевой энергией». Квантовомеханическая частица не может «лежать» на дне параболической потенциальной ямы, точно так же как она не может лежать на дне прямоугольной или какой бы то ни было другой потенциальной ямы конечной ширины. Порядок величины для  $E_0$  может быть оценен из соотношения неопределенностей.

Сравним (3.27) с (3.13) для возможных значений энергии в прямоугольной яме. В отличие от энергии уровней в прямоугольной яме, энергия осциллятора пропорциональна первой степени  $n$ , так что энергетические уровни находятся на равных расстояниях друг от друга (эквидистантны). Эти энергетические уровни изображены на рис. 25. Осциллятор «может находиться» на любом из изображенных уровней энергии, но не между ними. Чтобы «раскачать» осциллятор, нужно добавить ему энергию, равную разности энергий соседних уровней:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_0.$$

Если передача энергии осуществляется посредством фотона, то для частоты фотона имеем

$$\omega = \Delta E/\hbar = \omega_0. \quad (3.28)$$

Остановимся на некоторых особенностях классического и квантовомеханического осцилляторов. У классического осциллятора зависимость амплитуды колебаний от частоты раскачивающей силы имеет резко выраженный резонансный характер: осциллятор реагирует лишь на одну частоту, равную частоте собственных колебаний  $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ . Квантовомеханический осциллятор на первый взгляд кажется способным поглощать целый набор частот, кратных частоте (3.28), и переходить при этом с нулевого на один из верхних уровней (пунктирные стрелки на рис. 25).

Чтобы выяснить, как обстоит дело с реальными микроскопически осцилляторами, например с молекулами, необходимо изучить процесс взаимодействия света (фотонов) с молекулами и научиться писать и решать уравнения для систем, меняющих свое состояние во времени (в процессе взаимодействия). Такие задачи решаются, но находятся вне рамок данного курса. Точный расчет показывает, что у осциллятора, взаимодействующего со светом, могут осуществляться переходы только между соседними уровнями; остальные переходы «запрещены» и происходить не могут.

Этот результат можно понять и без расчета, с помощью принципа соответствия. Будем рассуждать так: при очень больших  $n$  квантово-механическое решение должно совпадать с классическим, а классический результат приводит к единственному значению резонансной частоты  $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ . Значит, по крайней мере для высоких уровней должны существовать правила, запрещающие протаскивание через несколько уровней. Так как картина уровней от величины  $n$  не зависит, то следует ожидать, что это правило справедливо для любых  $n$ .

Здесь следует указать, что невозможность «прыжков» через несколько уровней связана не со свойствами осциллятора, а с особенностями его взаимодействия со светом<sup>1</sup>. При других методах возбуждения, например при электронном ударе, такие переходы вполне возможны.

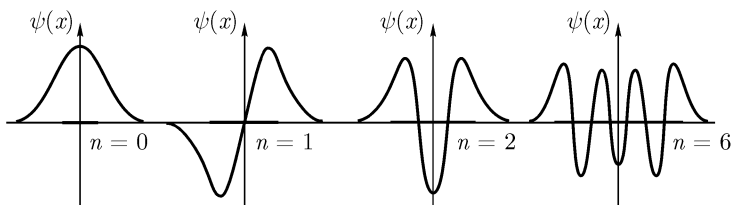


Рис. 26. Волновая функция осциллятора при разных квантовых числах.

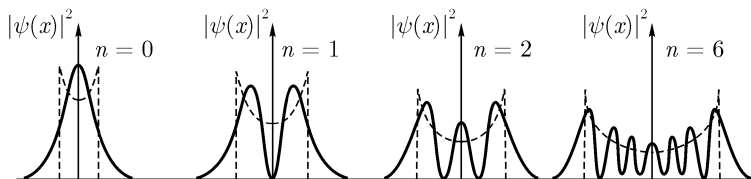


Рис. 27. Распределение частицы при осцилляторном потенциале.

На рис. 26 изображены графики  $\psi$ -функций, являющихся решением уравнения (3.26) при  $n = 0, 1, 2$  и  $6$ ; вдоль оси  $x$  отложены отрезки, равные амплитудам колебаний классического осциллятора при  $E$ , рав-

<sup>1</sup>Сформулированное здесь правило, на самом деле, не является таким жестким и справедливо только для дипольных переходов, которые обычно и происходят в атомных системах. Мультипольные переходы могут происходить между уровнями, которые не являются соседними.



ных  $E_n$ . На рис. 27 сплошными кривыми изображены кривые распределения плотности вероятности  $|\psi(x)|^2$  для тех же состояний квантового осциллятора, а пунктиром — плотность вероятности найти классический осциллятор в окрестности точки  $x$ . Мы видим, что при малых квантовых числах  $n$  квантовомеханический осциллятор ведет себя совершенно иначе, чем классический. Вероятность найти классический осциллятор всегда является наибольшей для точки поворота, так как в этих точках его скорость равна нулю, а для квантовомеханического осциллятора вероятность оказывается максимальной в точках, соответствующих «пучностям»  $\psi$ -функции. При больших  $n$  усредненная кривая для распределения плотности вероятности квантовомеханического осциллятора хорошо согласуется с кривой для классического осциллятора.

Отметим еще одну особенность квантовомеханического осциллятора. Из рис. 26 и 27 видно, что  $\psi(x)$ , а следовательно, и  $|\psi(x)|^2$  не равны нулю за точками поворота (т. е. вне пределов, ограничивающих движение классического осциллятора). Такое поведение  $\psi$ -функции, как уже объяснялось в предыдущем параграфе, связано с тем, что она должна быть непрерывной и гладкой везде, в том числе и у точек «поворота».

Применим полученные выводы к колебаниям молекул. Молекулы состоят из связанных между собой атомов. Связь осуществляется внешними (валентными) электронами атомов; внутренние электроны, расположенные наиболее близко к ядрам атомов, в образовании молекул не участвуют.

Мы не будем здесь рассматривать природу химических сил, объединяющих атомы в молекулы. Этот вопрос будет подробно обсуждаться в гл. II. Ограничимся хорошо известным из опыта утверждением, что при равновесии входящие в состав молекулы атомы находятся на таком расстоянии друг от друга, при котором силы притяжения и отталкивания уравновешивают друг друга и потенциальная энергия минимальна. При сближении или удалении атомов энергия возрастает по параболическому — в первом приближении — закону.

Входящие в состав молекулы атомы могут колебаться друг относительно друга. При малых колебаниях молекулы ведут себя почти как идеальные гармонические осцилляторы, так что нижние колебательные уровни эквидистантны.

Наличие дискретных колебательных уровней у молекул приводит к появлению в молекулярных спектрах линий, связанных с переходами между этими уровнями. Мы уже отмечали, что правила отбора разрешают переходы только между соседними колебательными уровнями и, таким образом, весь колебательный спектр слабо возбужденной моле-

кулы должен состоять всего из одной линии<sup>1</sup>. Так как расстояния между колебательными уровнями сравнительно невелики ( $0,1 - 1$  эВ), то такие линии обнаруживаются в инфракрасных спектрах поглощения молекул ( $\lambda = 0,5 - 5$  мкм).

К спектрам молекул, в том числе и к колебательному, мы вернемся в гл. 5, после того как познакомимся с вращательными уровнями молекул.

---

<sup>1</sup>При больших амплитудах колебаний (соответствующих высоким уровням) отличие закона изменения потенциальной энергии от параболического (ангармонизм) становится все более заметным. Сделанные выше выводы при этом перестают быть точными.

## ГЛАВА 4

# ВОДОРОДОПОДОБНЫЕ АТОМЫ

Простейшими атомными системами являются атом водорода и водородоподобные атомы, т.е. такие атомы, у которых в поле ядра находится только один электрон. К водородоподобным атомам относятся однократно ионизированный атом гелия  $\text{He}^+$  с зарядовым числом  $Z = 2$ , двукратно ионизированный атом лития  $\text{Li}^{2+}$  с  $Z = 3$  и т.д.

## § 12. Энергетические уровни водородоподобных атомов

Потенциальная энергия водородоподобного атома равна

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}; \quad (4.1)$$

потенциальная кривая изображена на рис. 28.

Уравнение Шредингера для электрона в атоме ( $E < 0$ ) имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{Ze^2}{r}\psi = E\psi, \quad (4.2)$$

где  $m$  — масса электрона. Физический смысл, как всегда, имеют лишь однозначные, конечные, непрерывные и гладкие решения этого уравнения.

Выражение (4.1) сферически-симметрично. Поэтому целесообразно решать уравнение (4.2) в сферических координатах  $r, \vartheta, \varphi$  (рис. 18). В общем случае волновая функция является функцией трех координат:  $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi)$ . Мы ограничимся, однако, исследованием сферически-симметричных решений, т.е. решений, не зависящих от углов  $\vartheta$  и  $\varphi$ . При этом, конечно, большое количество решений будет потеряно. К ним мы вернемся несколько позже.

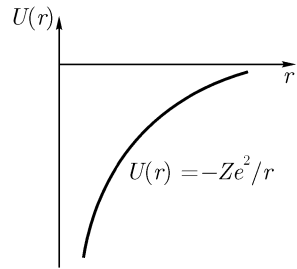


Рис. 28. Потенциальная энергия в водородоподобных атомах.

Воспользуемся выражением оператора Лапласа в сферических координатах, когда  $\psi$  зависит только от  $r$ :<sup>1</sup>

$$\Delta_r = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}. \quad (4.3)$$

Подставим (4.3) в уравнение Шредингера (4.2):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} \right) - \frac{Ze^2}{r} \psi = E\psi.$$

Обозначив  $d\psi/dr = \psi'$  и  $d^2\psi/dr^2 = \psi''$ , получаем

$$\psi'' + \frac{2}{r} \psi' + \frac{\beta}{r} \psi = k^2 \psi, \quad (4.4)$$

где

$$\beta = 2mZe^2/\hbar^2, \quad k^2 = -2mE/\hbar^2. \quad (4.5)$$

Чтобы упростить это уравнение, произведем замену переменных. Положим

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r}. \quad (4.6)$$

Тогда

$$\psi' = \frac{u'}{r} - \frac{1}{r^2}u, \quad \psi'' = \frac{u''}{r} - \frac{2}{r^2}u' + \frac{2}{r^3}u.$$

Подставляя эти выражения в (4.4), получим уравнение Шредингера в виде

$$u'' + \beta \frac{u}{r} = k^2 u. \quad (4.7)$$

Исследуем это уравнение. Прежде всего изучим поведение функции  $u(r)$  на бесконечности. При  $r \rightarrow \infty$  членом  $(\beta/r)u$  можно пренебречь по сравнению с  $k^2u$ . Поэтому при больших  $r$  вместо (4.7) получим

$$u''_{\infty} = k^2 u_{\infty}.$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$u_{\infty} = Ae^{-kr} + Be^{kr},$$

---

<sup>1</sup>Вывод выражения (4.3) приведен в Приложении II.

где  $A$  и  $B$  — некоторые константы. Функция  $u_\infty$ , остается ограниченной в бесконечно удаленной точке лишь в том случае, если  $B = 0$ . Следовательно,

$$u_\infty = Ae^{-kr}. \quad (4.8)$$

Функция (4.8) не является решением уравнения (4.7), но правильно отражает поведение этого решения на бесконечности. Поэтому будем искать решение уравнения (4.7) в виде

$$u = e^{-kr} f(r). \quad (4.9)$$

Поскольку поведение  $u(r)$  при больших  $r$  правильно описывается функцией  $e^{-kr}$ , функция  $f(r)$  при  $r \rightarrow \infty$  должна изменяться медленнее, чем экспонента.

Найдем производные от  $u$ :

$$u' = -ke^{-kr} f + f'e^{-kr}, \quad u'' = k^2 e^{-kr} f - 2ke^{-kr} f' + f''e^{-kr}.$$

Подставим эти выражения и (4.9) в (4.7); после приведения подобных членов получим

$$f'' - 2kf' + \frac{\beta}{r} f = 0. \quad (4.10)$$

Решение этого уравнения будем искать в виде степенного ряда

$$f(r) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m r^m. \quad (4.11)$$

Подставив (4.11) в (4.10), получим

$$\sum_{m=1}^{\infty} a_m m(m-1)r^{m-2} - 2k \sum_{m=1}^{\infty} a_m m r^{m-1} + \beta \sum_{m=1}^{\infty} a_m r^{m-1} = 0. \quad (4.12)$$

Так как равенство (4.12) должно удовлетворяться тождественно для любых значений  $r$ , сумма коэффициентов при любой степени  $r$  должна равняться нулю.

Приравняем нулю сумму коэффициентов при  $r^{n-1}$ :

$$a_{n+1}(n+1)n - 2ka_n n + \beta a_n = 0. \quad (4.13)$$

Из (4.13) легко получить рекуррентную формулу для коэффициентов ряда (4.11):

$$a_{n+1} = a_n \frac{2kn - \beta}{n(n+1)}. \quad (4.14)$$

В зависимости от величины  $\beta$  ряд (4.11) может оказаться бесконечным или может оборваться на некотором  $n$ -м члене, т. е. свестись к полиному. Если ряд не обрывается, то при  $n \rightarrow \infty$

$$a_{n+1} = a_n \frac{2k - \beta/n}{n+1} \approx \frac{2k}{n+1} a_n, \quad (4.15)$$

или

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} \approx \frac{2k}{n+1}.$$

Такая рекуррентная формула, как нетрудно убедиться, справедлива для коэффициентов ряда<sup>1</sup>

$$e^{2kr} = \sum_n \frac{1}{n!} (2kr)^n. \quad (4.16)$$

Таким образом, если ряд, в который разлагается функция  $f(r)$ , не оказывается полиномом, то при больших  $n$  функция  $f(r)$  ведет себя как  $\exp(2kr)$ , и  $\psi(r)$  растет с увеличением  $r$  как  $(1/r) \exp(kr)$ , т. е. неограниченно возрастает. Это решение, следовательно, должно быть отброшено.

Рассмотрим теперь случай, когда ряд (4.11) обрывается на  $n$ -м члене. При этом для некоторого  $n$  числитель в (4.14) должен обращаться в нуль:

$$2kn - \beta = 0.$$

Таким образом, ряд оканчивается на  $n$ -м члене, если

$$k = \beta/2n, \quad (4.17)$$

где  $n$  — некоторое целое число.

Подставляя в (4.17) значения  $k$  и  $\beta$  из (4.5), найдем возможные значения энергии водородоподобных атомов:

$$E_n = -Z^2 \frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2},$$

или

$$\boxed{E_n = -Z^2 R_1/n^2}, \quad (4.18)$$

---

<sup>1</sup>Обозначим через  $b_n$  и  $b_{n+1}$  коэффициенты ряда (4.16) при  $r^n$  и  $r^{n+1}$  и составим для них отношение

$$\frac{b_{n+1}}{b_n} = \frac{(2k)^{n+1} n!}{(n+1)! (2k)^n} = \frac{2k}{n+1},$$

что совпадает с (4.15).

где<sup>1</sup>

$$R_1 = me^4/2\hbar^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.19)$$

Как и в случае прямоугольной потенциальной ямы (§ 9), возможные значения энергии оказываются дискретными. Дискретность возникает из-за того, что мы потребовали, чтобы волновая функция электрона была конечной на сколь угодно больших расстояниях от ядра. При  $E > 0$  энергия не квантуется, так как электрон, имеющий положительную энергию, атому не принадлежит и может уходить на бесконечное расстояние от ядра.

Вернемся к формуле (4.19). Обратим внимание на структуру величины  $R_1$ . Перепишем  $R_1$  в виде

$$R_1 = \frac{mc^2}{2} \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^2.$$

Величина  $R_1$  определяет энергию атома и соответственно имеет размерность энергии. Размерность определяется величиной  $mc^2$  — энергией покоя электрона. Кроме  $mc^2$ , в формулу входят универсальные постоянные  $\hbar$ ,  $c$  и заряд  $e$ , определяющий кулоновское взаимодействие электрона с ядром. Эти величины входят в формулу в виде безразмерной комбинации  $e^2/\hbar c$ . Следует запомнить, что электрические заряды входят в решения квантовомеханических задач всегда в виде этой комбинации, называемой постоянной тонкой структуры  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}. \quad (4.20)$$

Числовое значение  $\alpha$  полезно запомнить. Теперь определим числовое значение  $R_1$ :

$$R_1 = \frac{mc^2}{2} \alpha^2 = \frac{0,511 \cdot 10^6 \text{ эВ}}{2} \cdot \left( \frac{1}{137} \right)^2 = 13,6 \text{ эВ}.$$

Для водорода  $Z = 1$ ; из (4.18) для энергии стационарных состояний атома водорода получим

$$E_n = -13,6 \cdot \frac{1}{n^2} \text{ эВ},$$

---

<sup>1</sup>Константа  $R_1$  носит название постоянной Ридберга или энергии Ридберга. Она имеет размерность энергии. Постоянной Ридберга называют также величину  $R = R_1/2\pi\hbar c$ , имеющую размерность  $[\text{см}^{-1}]$  (см. (4.22')).

т. е.

$$E_1 = -13,6 \text{ эВ} \quad \text{при } n = 1,$$

$$E_2 = -13,6/2^2 = -3,4 \text{ эВ} \quad \text{при } n = 2,$$

$$E_3 = -13,6/3^2 = -1,5 \text{ эВ} \quad \text{при } n = 3,$$

и т. д. Значения  $E_1, E_2, E_3, \dots$  образуют набор уровней энергии и для атома водорода. Уровни сгущаются при  $E \rightarrow 0$ . При  $E > 0$  электрон является свободным и уровни энергии, как мы уже знаем, не квантуются (образуют непрерывный спектр). Схема уровней энергии атома водорода изображена на рис. 29. Уровню с наименьшей энергией  $E_1$  соответствует основное состояние атома. Остальные уровни определяют энергию возбужденных состояний.

Сделаем одно важное замечание. Те решения, которые мы получили, вообще говоря, не представляют собой полного набора решений. При решении уравнения Шредингера мы не рассматривали волновые функции, зависящие от углов  $\vartheta$  и  $\varphi$ . Поэтому уровни энергии, которые были получены, — это уровни состояний, не зависящих от углов  $\vartheta$  и  $\varphi$ , т. е. уровни с нулевым угловым моментом (моментом импульса).

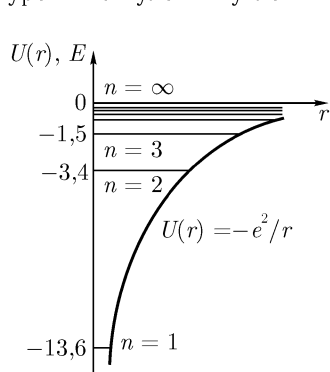


Рис. 29. Уровни энергии в атоме водорода.

Электрическое поле точечного заряда обладает той характерной особенностью, что рассмотрение полной задачи, включающей решения с ненулевыми моментами импульса, не приводит к появлению новых уровней энергии. Поэтому формула (4.18) содержит все уровни энергии водорода и водородоподобных атомов<sup>1</sup>.

С точки зрения классической физики устойчивые состояния электрона с нулевым угловым моментом невозможны, так как при отсутствии вращения электрон должен был бы «упасть» на ядро. В квантовой механике такие состояния могут осуществляться, так как электрон не может «упасть» на ядро даже при нулевом угловом моменте. Это легко понять, применив к электрону, находящемуся в поле ядра, соотношение неопределенностей. При приближении электрона к ядру неопределенность координаты становится все меньше и меньше, но зато при этом возрастает

<sup>1</sup> Это утверждение является правильным с точностью до так называемого тонкого расщепления уровней. Этот вопрос обсуждается в § 27.



$\Delta p \approx 2\pi\hbar/\Delta x$ , а с ростом  $\Delta p$  растет и кинетическая энергия<sup>1</sup>. Так как кинетическая энергия возрастает пропорционально  $(\Delta p)^2$ , то при уменьшении расстояния между электроном и ядром ее рост перегоняет уменьшение потенциальной энергии, и полная энергия электрона начинает расти. Дальнейшее уменьшение расстояния между электроном и ядром становится энергетически невыгодным, так что «упасть» на ядро электрон не может.

### § 13. Экспериментальные исследования энергетических уровней атома. Потенциалы возбуждения и ионизации

Дискретность атомных уровней проявляется по многим опытам и в первую очередь в опытах по возбуждению и ионизации атомов электронным ударом. Схема установки, с помощью которой можно проводить такие опыты, изображена на рис. 30.

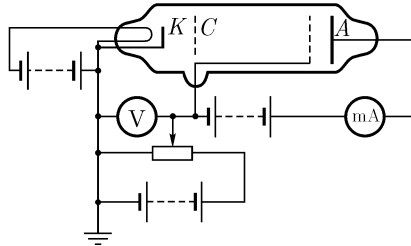


Рис. 30. Опыты Франка и Герца (схема установки).

Основной частью установки является трубка, заполненная исследуемым газом при небольшом давлении (так что пробег электрона оказывается порядка размеров трубки). Внутри трубки находится подогреваемый катод  $K$ , являющийся эмиттером электронов, сетка  $C$  и анод  $A$ . На сетку подается ускоряющий потенциал  $V_c$ , величина которого может

<sup>1</sup>В самом деле,

$$\langle T \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\langle p \rangle^2}{2m} + \frac{\langle (\Delta p)^2 \rangle}{2m} = \frac{\langle \Delta p \rangle^2}{2m}.$$

При этом выводе была использована формула (2.27). В сферически-симметричном случае среднее значение всякой векторной величины, в том числе и импульса, конечно, равно нулю,

плавно изменяться; между анодом и сеткой приложен небольшой задерживающий потенциал ( $V_3 \approx 0,2-0,5$  В). Электроны, ускоренные в зазоре между катодом и сеткой, попадают затем в свободное от поля пространство, ограниченное сеткой  $C$ ; в этом пространстве в основном и происходят их столкновения с атомами. Те электроны, которые потеряли почти всю свою энергию в результате столкновений с атомами, не могут преодолеть задерживающего поля  $V_3$ ; остальные электроны попадают на анод  $A$  и создают в цепи анода ток  $i_a$ , регистрируемый гальванометром.

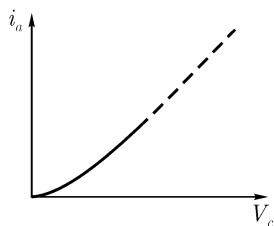


Рис. 31. Зависимость тока от ускоряющего напряжения.

При повышении потенциала сетки  $V_c$  число электронов, отсасываемых от катода, увеличивается и ток в анодной цепи растет (рис. 31). Это возрастание, однако, происходит монотонно лишь в том случае, если прибор хорошо откачан.

На рис. 32 *a* изображена зависимость тока  $i_a$  от ускоряющего потенциала  $V_c$  для случая, когда трубка заполнена парами ртути (опыты Франка и Герца, 1913 г.). Начальный (возрастающий) участок кривой имеет вид, типичный для вольт-амперных характеристик термоэлектронных приборов (рис. 31). Но при  $V_c \approx 4,9$  В ток резко падает, а затем снова начинает возрастать. Менее резкие скачки наблюдаются и при значениях  $V_c$ , пропорциональных 4,9 В.

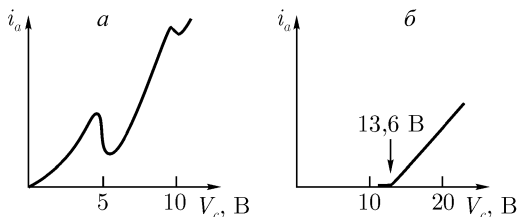


Рис. 32. Зависимость  $i_a$  от  $V_c$ : *a* — для атомов ртути (возбуждение); *б* — для атомов водорода (ионизация).

Выясним причины, определяющие вид кривой на рис. 32 *a*. Атомы ртути, так же как и водородоподобные атомы и все атомы вообще, обладают дискретными энергетическими уровнями, поэтому электроны с небольшой энергией их возбуждают по могут. Возбуждение атома, т. е.

переход электрона с нижнего на один из верхних уровней, происходит в том случае, когда атому передается энергия, равная разности энергий этих уровней. Эта энергия, деленная на заряд электрона, называется потенциалом возбуждения. При достижении этой энергии электроны испытывают неупругие столкновения с атомами и передают им практически всю свою энергию; число электронов, попадающих на анод, при этом резко уменьшается.

По кривой на рис. 32 *a* можно определить только первый потенциал возбуждения ртути, равный 4,9 В. Первый потенциал возбуждения называется резонансным потенциалом и соответствует переходу атомов с нижнего энергетического уровня на ближайший. Вероятность возбуждения атомов при столкновении с электронами особенно велика, когда энергия электронов равна разности энергии уровней. Поэтому первый скачок на кривой тока для ртути при  $V_c = 4,9$  В очень резкий. Менее резкий скачок появляется тогда, когда энергия электронов оказывается достаточной для последовательного возбуждения двух атомов; на рис. 32 *a* такой скачок наблюдается при  $V_c = 9,8$  В.

На установках, аналогичных описанной, можно производить измерения первых и более высоких потенциалов возбуждения различных атомов, а также измерение ионизационных потенциалов. Ионизационным потенциалом называется энергия ионизации (энергия, необходимая для отрыва электрона от атома), деленная на заряд электрона.

Измерение ионизационных потенциалов наиболее удобно проводить по току положительных ионов, возникающих в результате ионизации атомов электронным ударом. Для проведения таких измерений нужно увеличить разность потенциалов между сеткой и анодом, создав в этом зазоре достаточно большое поле, задерживающее для электронов и ускоряющее для положительных ионов. При такой постановке опыта гальванометр регистрирует появление тока в анодной цепи только при значениях  $V_c$ , превышающих ионизационный потенциал. На рис. 32 *б* приведена зависимость тока  $i_a$  от ускоряющего потенциала  $V_c$  для случая, когда трубка заполнена водородом. Ток появляется при  $V_c = 13,6$  В и с увеличением  $V_c$  быстро возрастает. Кривая тока находится в соответствии с теми представлениями об энергетических уровнях атома водорода, к которым мы пришли в конце предыдущего параграфа. Ионизация атомов водорода означает выбрасывание электрона с нижнего (основного) уровня атома ( $E_1 = -13,6$  эВ) в область непрерывного спектра ( $E > 0$ ) и может осуществляться, следовательно, при столкновениях с атомами электронов, имеющих энергию не ниже 13,6 эВ.

## § 14. Спектры водородоподобных атомов

**Спектр атома водорода. Постоянная Ридберга.** Основное состояние атома водорода характеризуется квантовым числом  $n = 1$ . В этом состоянии атом обладает наименьшей энергией. Возбуждение атомов возникает в тех случаях, когда электрон тем или иным путем приобретает энергию, достаточную для перехода на один из уровней, лежащих выше. Способы возбуждения могут быть самыми различными: облучение электронами, электрический разряд, нагрев, облучение фотонами и т. д. Возбужденные атомы самопроизвольно переходят в состояния с меньшей энергией (меньшими значениями квантового числа  $n$ ); освобождающаяся при таких переходах энергия чаще всего уносится в виде электромагнитного излучения.

Спектр атома водорода, т. е. набор частот, испускаемых возбужденными атомами водорода, экспериментально определяется с большой точностью. Поэтому представляет интерес сравнить эти экспериментальные данные с теорией,

Вспользуемся (4.18) и найдем выражение для энергии спектральных линий атома водорода ( $Z = 1$ ). Так как любая спектральная линия возникает при переходе электронов между двумя уровнями, то энергия квантов должна равняться разности энергий этих уровней:

$$E_{21} = E_2 - E_1 = -R_1 \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) = R_1 \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right). \quad (4.21)$$

На рис. 33 изображены уровни энергии атома водорода, а стрелками обозначены переходы между уровнями, соответствующие наблюдаемым спектральным линиям.

В спектроскопии принято, однако, оперировать не энергиями фотонов, а длинами волн и величинами, обратными длинам волн<sup>1</sup>:  $\lambda^{-1}$  [см<sup>-1</sup>]. Так как  $1/\lambda = \omega/2\pi c = E/2\pi\hbar c$ , то

$$\frac{1}{\lambda_{21}} = \frac{R_1}{2\pi\hbar c} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

или

$$\frac{1}{\lambda_{21}} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (4.22)$$

<sup>1</sup>Величина  $\lambda^{-1}$  называется в спектроскопии волновым числом. Так как определенное таким образом волновое число в  $2\pi$  раз отличается от волнового числа  $k$ , принятого в атомной физике (и в настоящей книге), мы этим термином пользоваться не будем.

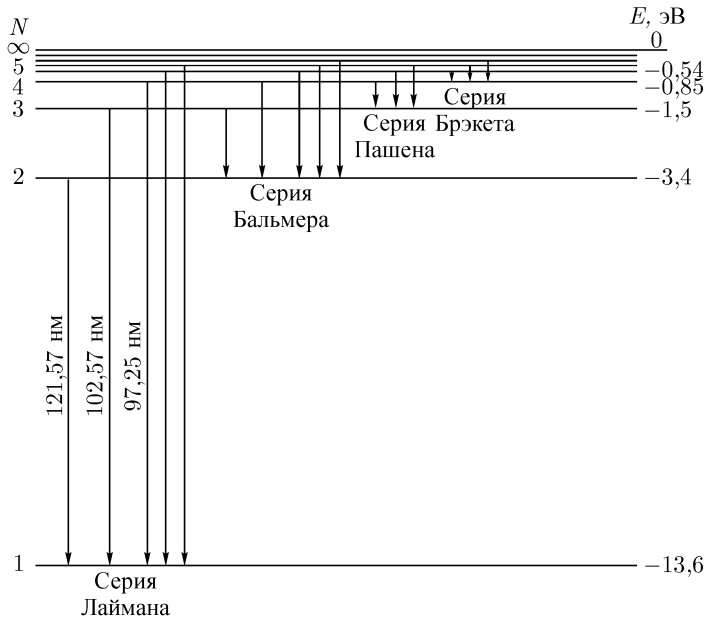


Рис. 33. Спектр атомарного водорода.

где

$$R = R_1/2\pi\hbar c. \quad (4.22')$$

Константа  $R$  называется постоянной Ридберга.

Формула (4.22) известна в спектроскопии еще с конца прошлого века. Она была найдена эмпирически и получила название обобщенной формулы Бальмера. Формула правильно описывает экспериментальные значения длин волн спектральных линий водорода при  $R$ , равном  $109\,677,6 \text{ см}^{-1}$ . Физический смысл формулы в то время был непонятен.

На рис. 33 вдоль некоторых стрелок проставлены экспериментальные значения длин волн. Из рисунка видно, что каждая линия в спектре водорода входит в одну из спектральных серий; для всех линий серии значение  $n_1$  остается постоянным, а  $n_2$  может принимать любые значения от  $(n_1 + 1)$  до  $\infty$ . Самая длинноволновая линия в каждой серии ( $n_2 = n_1 + 1$ ) называется головной линией данной серии. В сторону коротких длин волн линии сгущаются к границе серии, которой соответствует  $n_2 = \infty$ . Серия с  $n_1 = 1$  называется серией Лаймана. Она

находится в ультрафиолетовой части спектра. Серия с  $n_1 = 2$  носит название серии Бальмера; четыре линии этой серии находятся в видимой части спектра: головная линия обозначается  $H_\alpha$ , следующие линии —  $H_\beta$ ,  $H_\gamma$  и  $H_\delta$ . Серия с  $n_1 = 3$  называется серией Пашена; следующие серии названы именами Брэкета ( $n_1 = 4$ ) и Пфунда ( $n_1 = 5$ ); эти серии расположены в инфракрасной части спектра.

Интересно отметить, что часть линий в спектре водорода обнаружена и измерена не с помощью лабораторных источников, а в спектре Солнца.

Найдем теоретическое значение постоянной Ридберга  $R$ . Согласно (4.22') и (4.19)

$$R = \frac{m\epsilon^4}{4\pi\hbar^3c} = \frac{1}{4\pi} \frac{mc}{\hbar} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = \frac{1}{4\pi} \frac{\alpha^2}{\lambda_e}.$$

Подставляя сюда значения комptonовской длины волны электрона  $\lambda_e$  и постоянной тонкой структуры  $\alpha$ , найдем

$$R = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{137}\right)^2 \frac{1}{3,86 \cdot 10^{-11}} \text{ см}^{-1}.$$

Точный расчет дает  $R = 109\,737,3 \text{ см}^{-1}$ . Мы получили числовое значение  $R$ , почти совпадающее, но все-таки не равное значению  $R = 109\,677,6 \text{ см}^{-1}$ , определенному для водорода экспериментально. Исследуем причину этого расхождения.

При составлении уравнения Шредингера для водородоподобных атомов мы считали, что электрон находится в кулоновском поле неподвижного ядра. На самом же деле следовало рассматривать движение электрона и движение ядра вокруг их общего центра масс. Как известно из классической механики, в уравнение движения в таких случаях вместо масс взаимодействующих тел входит приведенная масса  $\mu$  обеих частиц. Этот вывод сохраняется и в квантовой механике. В нашем случае

$$\mu = \frac{mM_{\text{яд}}}{m + M_{\text{яд}}} = \frac{m}{1 + m/M_{\text{яд}}}, \quad (4.23)$$

где  $m$  — масса электрона,  $M_{\text{яд}}$  — масса ядра.

Из (4.23) видно, что  $\mu = m$  только при условии, что  $M_{\text{яд}} = \infty$ . Следовательно, при расчете мы получили значение постоянной Ридберга не для реального, а для некоторого мысленного бесконечно тяжелого ядра:  $R_\infty = 109\,737,3 \text{ см}^{-1}$ . Воспользовавшись числовым значением  $R_\infty$ ,

легко получить величину  $R$  для любого конкретного ядра. В частности, для водорода  $m/M_{\text{яд}} = 1/1836,1$  и

$$R_{\text{H}} = \frac{R_{\infty}}{1 + 1/1836,1} = 109\,677,6 \text{ см}^{-1}. \quad (4.24)$$

Превосходное согласие вычисленного из теории значения  $R_{\text{H}}$  и значения  $R$ , полученного для водорода экспериментально, является блестящим подтверждением правильности применения квантовомеханических представлений к атомам.

В табл. 1 приведены  $\lambda_{\text{эксп}}$  и  $\lambda_{\text{теор}}$ , вычисленные по формуле (4.22) с учетом (4.24) для первых трех линий серии Бальмера<sup>1</sup>.

**Изотопический сдвиг.** Кроме легкого изотопа водорода  ${}^1\text{H}$ , существуют два тяжелых изотопа водорода: дейтерий  ${}^2\text{D}$  и тритий  ${}^3\text{T}$ . Ядро дейтерия, кроме протона, содержит один нейтрон, а ядро трития — два нейтрона. Спектры тяжелых изотопов водорода описываются, конечно, той же формулой (4.22), но в качестве  $R$  следует брать  $R_{\text{D}}$  для дейтерия и  $R_{\text{T}}$  для трития. Расчет по формуле (4.24) дает

$$R_{\text{D}} = 109\,707,4 \text{ см}^{-1}, \quad R_{\text{T}} = 109\,717,5 \text{ см}^{-1}.$$

Различие  $R_{\text{H}}$ ,  $R_{\text{D}}$  и  $R_{\text{T}}$  приводит к различию длин волн одних и тех же линий в спектрах различных изотопов водорода.

Ниже приведены для сравнения длины волн первых трех линий серии Лаймана в спектрах водорода и дейтерия.

Таблица 1. Теоретические и экспериментальные значения  $\lambda$  для трех первых линий серии Бальмера

Линия	$\lambda_{\text{эксп}}$ , нм	$\lambda_{\text{теор}}$ , нм
$H_{\alpha}$	656,28	656,47
$H_{\beta}$	486,13	486,27
$H_{\gamma}$	434,05	434,17

$\lambda_{\text{H}}$ , нм	$\lambda_{\text{D}}$ , нм	$\Delta\lambda$ , нм
121,566	121,533	0,033
102,572	102,544	0,028
97,253	97,227	0,026

Еще большее различие наблюдается в спектрах водорода и дейтерия для длин волн серии Бальмера. Например, линии  $H_{\alpha}$  и  $D_{\alpha}$  различаются на 0,17 нм.

<sup>1</sup>Еще лучшее согласие с опытом получается при расчете с помощью Уравнения Дирака, учитывающего релятивистские эффекты.

Различие в длинах волн идентичных линий в спектрах различных изотопов одного и того же элемента называется *изотопическим сдвигом*. Изотопический сдвиг в спектрах водорода и дейтерия настолько велик, что отчетливо обнаруживается с помощью обычных спектральных приборов.

**Водородоподобные ионы.** Напишем спектральную формулу для однократно ионизованного атома гелия  ${}^2\text{He}^+$ :

$$\frac{1}{\lambda_{\text{He}^+}} = R_{\text{He}} Z_{\text{He}}^2 \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = 4 \frac{R_{\infty}}{1 + m/M_{\text{He}}} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Эта формула, так же как и формула для спектральных серий водорода, была найдена эмпирическим путем и получила объяснение только в квантовой теории.

Аналогичным образом могут быть написаны спектральные формулы для ионов  ${}^3\text{Li}^{2+}$ ,  ${}^4\text{Be}^{3+}$  и др. Первые члены серии Лаймана ( $n_1 = 1$ ) для этих ионов обнаружены; они находятся в далекой ультрафиолетовой части спектра.

**Позитроний.** Интересной системой, состоящей, как и атом водорода, всего из двух частиц, является *позитроний*. Позитроний содержит две частицы, отличающиеся только зарядом: положительно заряженный позитрон и отрицательно заряженный электрон. При пропускании позитронов через газ позитроны захватывают электроны атомов, в результате чего и образуются «атомы» позитрония. В отличие от атомов водорода, «атомы» позитрония являются метастабильными и через довольно короткое время  $\tau$  после образования прекращают свое существование<sup>1</sup>. Однако время существования «атомов» позитрония достаточно для их изучения. Измерение энергии ионизации позитрония показало, что она равна 6,8 эВ.

Энергия ионизации равна взятой с обратным знаком энергии основного состояния и может быть вычислена по формуле (4.18) при  $m = \mu$  и  $n = 1$ . Так как массы электрона и позитрона равны, то приведенная масса  $\mu$ , равна половине массы электрона:

$$\mu = \frac{m_{\text{эл}} m_{\text{поз}}}{m_{\text{эл}} + m_{\text{поз}}} = \frac{m_{\text{эл}}}{2}.$$

<sup>1</sup>Позитроний может образовываться в двух состояниях: с направленными в одну сторону (ортопозитроний) или противоположно направленными спинами позитрона и электрона (парапозитроний). Эти состояния имеют разные моды распада, соответственно, на три и на два фотона и разные времена жизни  $1,4 \cdot 10^{-10}$  и  $1,2 \cdot 10^{-7}$  сек. Суммарная энергия фотонов равна  $2m_e c^2$ .



Поэтому по формуле (4.18) для позитрония получаем

$$E_{\text{ион}} = R_1/2 = 13,6/2 = 6,8 \text{ эВ.}$$

## § 15. Распределение электронной плотности в атоме водорода

Распределение электронной плотности в атоме водорода определяется квадратом модуля  $\psi$ -функции. Вычислением  $\psi$ -функции мы занимались в § 12. Объединяя (4.6), (4.9) и (4.11), найдем

$$\psi(r) = \frac{1}{r} e^{-kr} \sum_{m=1}^{\infty} a_m r^m.$$

Для вычисления  $a_m$  следует применить рекуррентную формулу (4.14). Входящий в нее параметр  $\beta$  определяется (4.5). Возможные значения  $k$  находятся по формуле (4.17).

Найдем  $\psi$ -функцию для  $n = 1$ , т. е. для основного состояния атома. Подставив  $n = 1$  в (4.17), находим, что  $k_1 = \beta/2$ . Примем для простоты  $a_1 = 1$ .<sup>1</sup> Подставив  $n = 1$  в (4.14), убеждаемся, что все члены ряда (4.11), начиная с  $a_2$ , обращаются в нуль; первый же член ряда оказывается равным  $r$ .

Воспользовавшись соотношениями (4.6) и (4.9), получаем

$$\psi_1(r) = e^{-k_1 r}. \quad (4.25)$$

Здесь

$$k_1 = \frac{\beta}{2} = Z \frac{m e^2}{\hbar^2} = Z \frac{m c}{\hbar} \frac{e^2}{\hbar c} = Z \frac{\alpha}{\lambda_e},$$

где  $\lambda_e$  — комптоновская длина волны электрона,  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры. Итак,  $\psi$ -функция основного состояния является экспонентой с максимумом в начале координат (рис. 34).

С точки зрения классической физики электрон обладает наименьшей энергией, находясь в начале координат. Квантовая механика, как мы видим, приводит к непрерывному распределению с максимумом в начале

<sup>1</sup>На самом деле значение  $a_1$  находится из условия нормировки

$$\int |\psi|^2 dV = 1.$$

координат. Однако из (4.25) не следует, что вероятность найти электрон на нулевом расстоянии от начала координат является максимальной. Вероятность того, что электрон находится в объеме  $dV$ , как мы знаем, равна  $|\psi(r)|^2 dV$ . В качестве элемента объема возьмем сферический слой толщиной  $dr$  на расстоянии  $r$  от начала координат:  $dV = 4\pi r^2 dr$ . Вероятность найти электрон в шаровом слое, находящемся на расстоянии  $r$  от ядра, при  $n = 1$  равна  $4\pi dr |\psi_1(r)|^2$  т. е. определяется функцией  $r^2 |\psi_1(r)|^2 = r^2 e^{-2k_1 r}$ ; график этой функции также изображен на рис. 34.

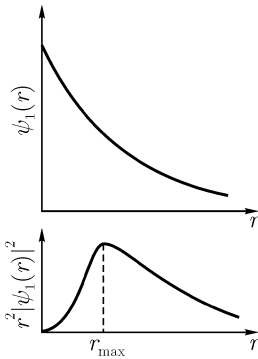


Рис. 34. Пространственное распределение электрона в атоме водорода (основное состояние).

Функция  $r^2 |\psi_1(r)|^2$ , определяющая пространственное распределение электрона в невозбужденном атоме водорода, обращается в нуль вместе с  $r^2$  в начале координат и экспоненциально убывает при больших  $r$ . Найдем значение  $r = r_{1\max}$  при котором эта функция достигает максимума. Для этого приравняем нулю производную от  $r^2 e^{2k_1 r}$ :

$$2r_{1\max} e^{-2k_1 r_{1\max}} - 2k_1 r_{1\max}^2 e^{-2k_1 r_{1\max}} = 0.$$

После сокращения получаем

$$r_{1\max} = \frac{1}{k_1} = \frac{2}{\beta} = \frac{1}{Z} \frac{\lambda_e}{\alpha}. \quad (4.26)$$

Для водорода

$$r_{1\max} = \lambda_e / \alpha. \quad (4.27)$$

Величину (4.27) принято называть радиусом первой боровской орбиты атома водорода. В действительности никаких орбит у электронов в атомах, конечно, не существует; название же это, как и некоторые другие, перешло в современную физику из полуклассической теории Бора строения атома<sup>1</sup>. Вычислим  $r_{1\max}$ :

$$r_{1\max} = \lambda_e / \alpha = (3,86 \cdot 10^{-11} \text{ см}) \cdot 137 \approx 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см};$$

$r_{1\max}$  определяет по порядку величины размер невозбужденных атомов водорода и обозначается обычно  $\alpha_1$ .

<sup>1</sup>Более подробно теория Бора рассмотрена в § 28.

Рассмотрим волновую функцию для первого возбужденного состояния атома водорода ( $n = 2$ ). При  $n = 2$   $k_2 = \beta/4$ ; ряд (4.11) обрывается на втором члене, и волновая функция имеет следующий вид:

$$\psi_2(r) = e^{-k_2 r}(1 - k_2 r). \quad (4.28)$$

На рис. 35 изображены функции  $\psi_2(r)$ ,  $|\psi_2(r)|^2$  и  $r^2|\psi_2(r)|^2$ ; последняя функция, как мы видели, характеризует вероятность найти электрон на расстоянии  $r$  от ядра. Из рисунка видно, что распределение электронной плотности при  $n = 2$  оказывается довольно сложным. Еще более сложными являются распределения электронов в следующих возбужденных состояниях. Общим свойством всех распределений является отличная от нуля вероятность найти электрон как на очень малых, так и на довольно больших расстояниях от ядра.

В заключение еще раз подчеркнем, что пространственное распределение электронов в атоме можно характеризовать либо квадратом волновой функции  $|\psi(r)|^2$ , либо величиной  $r^2|\psi(r)|^2$ . Первое из этих выражений определяет вероятность найти частицу в единичном объеме, а второе — в шаровом слое толщиной  $1/4\pi$ . Величина  $|\psi(r)|^2$  в основном состоянии атома водорода в начале координат максимальна, в то время как  $r^2|\psi(r)|^2$  обращается в нуль. Функция  $\psi(r)$  при удалении от начала координат убывает с отличной от нуля производной. Таким образом,  $\psi(r)$  не является гладкой в начале координат. Этого следовало ожидать. Потенциальная энергия точечного источника обращается в бесконечность в начале координат, а при обращении потенциальной энергии в бесконечность, как было показано в § 9,  $\psi$ -функция приобретает излом.

В заключение приведем оценочную формулу, с помощью которой можно быстро (хотя и грубо) находить «радиус орбиты»  $R$ , т. е. среднее расстояние электрона от ядра в водородоподобных атомах. При главном

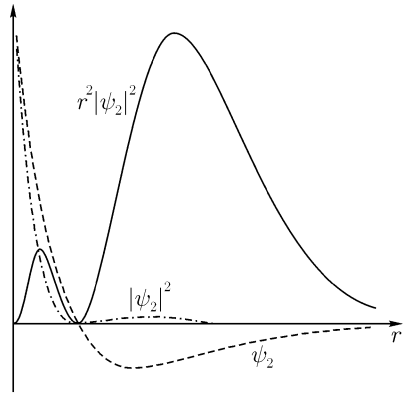


Рис. 35. Пространственное распределение электрона в атоме водорода при  $n = 2$ .

квантовом числе  $n$

$$R_n \approx \frac{1}{Z} \frac{\lambda_e}{\alpha} n^2. \quad (4.29)$$

## § 16. Мезоатомы

Решения, полученные для водородоподобных атомов, могут быть применены к системам, называемым мезоатомами. Мезоатомами называют атомы, в которых один из электронов заменен мезоном. Разумеется, такая замена возможна только, если мезон имеет отрицательный заряд.

Рассмотрим мезоатомы, которые получаются при замене единственного электрона в атоме водорода отрицательным мюоном<sup>1</sup>  $\mu^-$ . Пропуская пучок отрицательных мюонов через водород, можно получить мезоатомы водорода. Образование мезоатомов происходит следующим образом: отрицательный мюон, попадая в кулоновское поле протона, притягивается им и образует систему, аналогичную атому водорода; так как радиус боровской орбиты обратно пропорционален массе частицы, связанной с ядром (точнее говоря, приведенной массе системы частица-ядро), то для мюона этот радиус оказывается существенно меньшим, чем для электрона; на расстояниях, на которых расположен электрон, захваченный мюон экранирует поле ядра, и электрон покидает атом. Энергии уровней в мезоатомах рассчитываются по (4.18) с учетом того, что в  $R_1$  входит масса мюона. Спектр излучения мезоатома водорода хорошо известен и прекрасно описывается этой формулой.

Мезоатомные системы могут образовывать не только атомы водорода, но и любые другие атомы. Так как мезон всегда располагается гораздо ближе к ядру, чем электроны, поле атомных электронов практически не оказывает на мезон никакого действия, и его энергия может рассчитываться так же, как энергия единственного электрона в водородоподобных ионах, т. е. по (4.18). Опыт показывает, однако, что эта формула справедлива только для мезоатомов, в которых заряд ядра невелик ( $Z < 10$ ). При больших  $Z$  радиус орбиты оказывается столь мал, что мюон в существенной мере находится внутри ядра, где поле уже не описывается потенциалом  $-Ze^2/r$ . Отклонения от (4.18) используются для определения радиусов ядер тяжелых атомов.

<sup>1</sup>Мюонами называют частицы с массой, в 207 раз превышающей массу электрона:  $m_\mu = 207m_e$ . В остальном свойства мюонов очень похожи на свойства электронов, в частности, ни те ни другие не способны к ядерным взаимодействиям, так что на них действуют только электрические силы (и силы так называемого «слабого» взаимодействия). Существуют положительные мюоны  $\mu^+$  ( $q_{\mu^+} = +1e$ ) и отрицательные мюоны  $\mu^-$  ( $q_{\mu^-} = -1e$ ). Более подробно об этих частицах см. гл. 16.

## § 17. Ширина уровней

При решении уравнения Шредингера для потенциальной ямы и для атома водорода (и во всех других случаях, когда энергия квантуется) мы нашли, что энергия системы может принимать значения, выражающиеся набором дискретных, вполне точно определенных чисел. Этот результат, означающий, что энергетические уровни атомов не имеют ширины, не соответствует истине и возникает из-за того, что при написании уравнения Шредингера были сделаны некоторые упрощения.

Рассмотрим атом, находящийся в возбужденном состоянии. Такой атом может испустить фотон и перейти в основное или менее возбужденное состояние. Точное уравнение Шредингера должно учитывать эту возможность, возникающую из-за взаимодействия атома с электромагнитным полем — полем, имевшимся до излучения или возникающим в процессе излучения. Учет этого взаимодействия и приводит к появлению «ширины» у энергетических уровней.

Теоретический анализ взаимодействия атомного электрона с излучением вполне возможен, но лежит далеко за пределами нашего курса, в котором мы ограничиваемся исследованием только стационарных — не зависящих от времени — состояний. От квантовомеханического подхода к исследованию ширины уровней нам придется поэтому отказаться. Подойдем к этому вопросу с несколько другой стороны.

Из оптики известно, что световое излучение происходит в виде волновых «цугов», имеющих обычно длину порядка нескольких метров. Цуг конечной длины не может быть вполне монохроматичным и всегда несколько «размазан» по частоте. Соответствующий квант, следовательно, содержит некоторую неопределенность в энергии. Эта неопределенность может возникнуть только в том случае, если энергия возбужденных уровней определена не вполне точно, т. е. если уровни имеют некоторую «естественную ширину».

Оценим неопределенность энергии кванта. Рассмотрим волновой цуг, испускаемый в течение промежутка времени  $\tau$ , движущийся со скоростью  $c$  и представляющий собой отрезок точной синусоиды с частотой  $\Omega$  (рис. 36). Чтобы найти спектральный состав излучения, описывающего цуг, следует произвести его разложение в интеграл Фурье. Введем функцию  $\Phi(t)$ , описывающую световую волну, изображающуюся

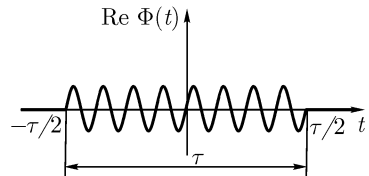


Рис. 36. Волновой цуг.

цугом:

$$\begin{aligned}\Phi(t) &= 0 && \text{при } t < -\tau/2, \quad t > \tau/2, \\ \Phi(t) &= A \exp(i\Omega t) && \text{при } -\tau/2 < t < \tau/2,\end{aligned}$$

и разложим ее в интеграл Фурье:

$$\Phi(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) \exp(i\omega t) d\omega;$$

по известной теореме об интеграле Фурье

$$f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(t) \exp(-i\omega t) dt.$$

Замечая, что вне интервала  $(-\tau/2, +\tau/2)$  волновой цуг отсутствует, имеем

$$\begin{aligned}f(\omega) &= \int_{-\tau/2}^{\tau/2} A \exp(i\Omega t) \exp(-i\omega t) dt = \\ &= A \frac{\exp[i(\Omega - \omega)\tau/2] - \exp[-i(\Omega - \omega)\tau/2]}{i(\Omega - \omega)} = A\tau \frac{\sin[(\Omega - \omega)\tau/2]}{(\Omega - \omega)\tau/2}.\end{aligned}$$

При малых  $(\Omega - \omega)$  эта функция принимает наибольшее возможное значение  $A\tau$ , а с увеличением  $(\Omega - \omega)$  функция колеблется, быстро уменьшаясь по амплитуде. Для оценки ширины распределения, как обычно, выберем расстояние от максимума до первого минимума, Первый минимум возникает при  $(\Omega - \omega)\tau = 2\pi$ , т. е. при  $\Delta\omega = \Omega - \omega = 2\pi/\tau$ . Умножая это равенство на  $\tau$ , найдем

$$\Delta\omega\tau = 2\pi \tag{4.30}$$

Входящее в это равенство время  $\tau$  равно времени испускания световой волны. В квантовой механике такое постепенное испускание света невозможно, так как никакие промежуточные состояния между исходным и конечным квантовыми состояниями не существуют.

При точном квантовомеханическом описании оказывается, что в процессе перехода атом описывается суперпозицией волновых функций

начального и конечного состояний. Коэффициент при волновой функции начального состояния экспоненциально падает, а коэффициент при волновой функции конечного состояния соответственно растет. Время «вымирания» волновой функции начального состояния или, как чаще говорят, среднее время жизни атома в возбужденном состоянии и соответствует временной продолжительности цуга  $\tau$ .

Чтобы перейти к ширине уровней, умножим равенство (4.30) на  $\hbar$ , так как  $\Delta E = \hbar\Delta\omega$ . Таким образом, имеем  $\Delta E\tau = 2\pi\hbar$ , где  $\Delta E$  — ширина возбужденного уровня, а  $\tau$  — время жизни атома в возбужденном состоянии. Полученное соотношение обычно записывают без множителя  $2\pi$ :

$$\boxed{\Delta E\tau = \hbar.} \quad (4.31)$$

Соотношение (4.31) аналогично соотношению неопределенностей Гейзенберга и носит название соотношения неопределенностей для энергии и времени. Появление этого соотношения является вполне естественным. Произведение  $Et$ , как и  $\mathbf{p}\mathbf{r}$ , имеет размерность действия. Оба эти произведения симметричным образом входят в показатель экспоненты волны де Бройля (1.20).

Однако смысл соотношений (1.33) и (4.31) различен. Физическая сущность первого соотношения была рассмотрена выше и заключается, в частности, в невозможности одновременного точного определения  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{r}$ . Энергия же фотона (или частицы) может быть определена точно в любой заданный момент времени. Равенство (4.31) в нашем случае означает, что *при переходе атомных систем из возбужденного состояния в основное существует разброс  $\Delta E$  в энергии излучаемых фотонов*, связанный с временем жизни атома  $\tau$  в возбужденном состоянии; причиной разброса является конечная ширина энергетических уровней возбужденных атомов, также равная  $\Delta E$ .

Средние времена жизни возбужденных атомов, как правило, уменьшаются с увеличением энергии возбуждения; ширины уровней атомов поэтому растут (рис. 37). В невозбужденных (основных) состояниях атомы могут находиться бесконечно долго ( $\tau = \infty$ ), и ширина уровней для таких состояний  $\Delta E = 0$ . Возбужденные состояния неустойчивы; средние времена жизни атомов в возбужденных состояниях при испускании видимого света по порядку величины равны  $10^{-8}$  с. Энергетическая ши-

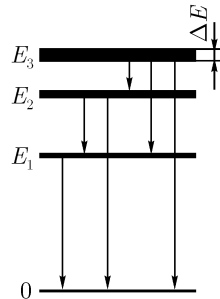


Рис. 37. Ширина уровней.

рина квазистационарных уровней атомов, имеющих такие времена жизни, оказывается существенно меньшей, чем расстояния между самими уровнями. Расчет дает

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau} = \frac{1,05 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}}{10^{-8} \text{ с} \cdot (1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг/эВ})} \approx 10^{-7} \text{ эВ}.$$



# ГЛАВА 5

## УГЛОВОЙ МОМЕНТ И МАГНИТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭЛЕКТРОНОВ, АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

### § 18. Угловой момент

**Угловой момент.** Угловой момент (момент импульса) является одной из важнейших характеристик движения как отдельных частиц, так и целых систем. Угловой момент изолированной частицы или замкнутой системы частиц при движении сохраняется. Момент сохраняется и при движении в центрально-симметричных полях.

Центрально-симметричные поля часто встречаются в атомных системах. В атоме водорода и в водородоподобных атомах единственный электрон движется в центральном поле кулоновских сил ядра. В сложных атомах электрическое поле, действующее на электроны, строго говоря, не является центральным, так как каждый электрон взаимодействует не только с ядром, но и со всеми остальными электронами атома. Однако и в этом случае поле, действующее на выбранный электрон со стороны всех остальных частиц, в первом приближении сохраняет сферическую симметрию, т. е. оказывается почти центральным. Таким образом, закон сохранения углового момента в микромире играет не меньшую роль, чем в классической физике. Познакомимся с квантовомеханическими особенностями углового момента микрочастиц.

**Проекция углового момента.** Найдем собственные (возможные) значения, которые может принимать  $M_z$  — проекция углового момента  $\mathbf{M}$  на некоторую ось; для определенности назовем ее осью  $z$ . Для этого воспользуемся уравнением (2.28), которое в нашем случае имеет вид

$$\widehat{M}_z \psi = M_z \psi.$$

Согласно (2.25) оператор  $\widehat{M}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$ . Подставив это выражение в уравнение для  $M_z$  найдем

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = M_z\psi. \quad (5.1)$$

Решением этого уравнения является функция

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(i\frac{M_z}{\hbar}\varphi\right). \quad (5.2)$$

(Множитель  $1/\sqrt{2\pi}$  введен для нормировки  $\psi$ -функции, так что  $\int_0^{2\pi} \psi^*\psi d\varphi = 1$ .)

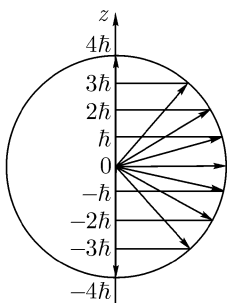


Рис. 38. Квантование углового момента.

Решение (5.2) всюду конечно, но не всегда однозначно. В тех случаях, когда  $\psi$ -функция является однозначной, она оказывается непрерывной и гладкой.

Функция (5.2) однозначна в том случае, если при изменении  $\varphi$  на  $2\pi$  она возвращается к своему прежнему значению, т. е. если

$$\frac{M_z}{\hbar} \cdot 2\pi = m \cdot 2\pi,$$

где  $m$  — любое целое число (положительное, отрицательное, равное нулю). Следовательно,

$$\boxed{M_z = m\hbar}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (5.3)$$

Итак, проекция углового момента на любую ось квантуется; она равна целому числу постоянных Планка<sup>1</sup>.

Исследуем физический смысл этого результата. Рассмотрим некоторый вектор углового момента  $\mathbf{M}$ . На первый взгляд может показаться, что квантование проекции  $M_z$  приводит к тому, что вектор  $\mathbf{M}$  может составлять лишь определенные углы с осью  $z$  (рис. 38). Поскольку, однако, ось  $z$  в пространстве может быть направлена как угодно, эта точка

<sup>1</sup>Сформулированное утверждение относится к орбитальным моментам импульса. Спинные моменты могут принимать и полужелые значения.

зрения не имеет смысла. Полученный результат следует понимать иначе. Формула (5.3) показывает, что при измерении проекции углового момента мы в результате опыта обязательно получим число, являющееся кратным  $\hbar$ . Однако значение  $M_z$  до опыта вовсе не должно быть равно целому числу  $\hbar$ . До и после опыта  $\psi$ -функции вовсе не обязаны совпадать. Мы можем, тем не менее, утверждать, что  $\psi$ -функция состояния, имевшегося до опыта, т.е.  $\psi$ -функция любого физического состояния, может быть представлена в виде суперпозиции собственных решений:

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m = \sum_m c_m \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \right). \quad (5.4)$$

Система, описываемая такой  $\psi$ -функцией, не обладает определенной проекцией момента  $\mathbf{M}$ . Вектор  $\mathbf{M}$  при этом может быть направлен произвольным образом. (Направление вектора  $\mathbf{M}$  определяется абсолютными величинами и фазами коэффициентов  $c_m$ ). Но при измерении  $M_z$  всегда будет найдено какое-то одно из значений, входящих в сумму (5.4). Вероятность найти значение  $M_z = m\hbar$  определяется, как всегда, величиной  $|c_m|^2$ .

Чтобы лучше уяснить смысл этого утверждения, рассмотрим простой оптический опыт (на первый взгляд не имеющий прямого отношения к рассматриваемому вопросу). Пропустим луч света через призму Николя (рис. 39). Выходящий из призмы свет разделяется на два луча — обыкновенный  $o$  и необыкновенный  $e$ . В каждом из лучей свет плоскополяризован<sup>1</sup>. Сумма интенсивностей

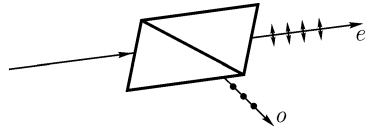


Рис. 39. Расщепление света призмой Николя.

обоих лучей равна интенсивности падающего света. Будем теперь уменьшать интенсивность света до тех пор, пока световые кванты не начнут пролетать через призму «поштучно». Мы увидим, что все кванты, прошедшие через призму, разделяются на два сорта: на кванты, поляризованные в горизонтальном, и на кванты, поляризованные в вертикальном направлении (для простоты считаем, что необыкновенный луч поляризован в плоскости рисунка, а обыкновенный — в плоскости, перпендикулярной к плоскости рисунка). Значит ли это, что до измерения поляризации, т.е. до прохождения через призму Николя, все световые кванты делились на те же два сорта? Конечно, нет. До прохождения через

<sup>1</sup>В простых призмах Николя обыкновенный луч поглощается оправой и не выпускается наружу. В призмах лучшего качества выводятся оба луча, причем свет в призме почти не поглощается.

призму свет мог быть поляризован как угодно или не быть поляризован вовсе. Что же дает исследование света с помощью призмы Николя? Что означает результат опыта, состоящий в том, что после прохождения через призму Николя свет разделяется на два луча, плоскополяризованных в двух взаимно перпендикулярных направлениях?

Первый и самый важный вывод заключается в том, что *любое поляризационное состояние фотона может быть представлено как суперпозиция двух (и только двух!) независимых состояний* (если бы состояний было больше, то после прохождения через призму Николя кванты оказались бы частично поглощенными либо распались бы не на две, а на большее число групп). Эти два независимых состояния могут быть выбраны по-разному. Чтобы убедиться в этом, проще всего повернуть призму Николя на некоторый угол вокруг оси, совпадающей с направлением пучка; плоскости поляризации лучей повернутся на тот же угол. Известно, далее, что любое поляризационное состояние фотона может быть описано не только с помощью двух плоскополяризованных компонент. Так, например, оно может быть представлено как суперпозиция двух циркулярно поляризованных состояний (право- и левовращающихся).

Второе заключение состоит в следующем. Выберем в плоскости, перпендикулярной к лучу, некоторое направление и будем изучать поляризацию света относительно этого направления (например, с помощью призмы Николя). *Как бы ни было выбрано это направление, измерение всегда покажет, что фотон поляризован либо по этому направлению, либо перпендикулярно к нему.* Или, что то же самое, проекция вектора поляризации фотона на любое перпендикулярное к лучу направление всегда равна либо нулю (вектор поляризован перпендикулярно к этому направлению), либо единице (вектор поляризации параллелен выбранному направлению).

Вернемся теперь к опыту по измерению проекции углового момента на какую-либо ось. Формула (5.3) показывает, что при измерении всегда будут найдены целочисленные значения этой проекции и что, следовательно, любое состояние системы может быть представлено в виде ряда (5.4). Физическая ценность первого утверждения несомненна. Второе утверждение не имеет особой ценности и с точки зрения математики является очевидным. В самом деле, любая однозначная непрерывная функция азимутального угла  $\varphi$  периодична с периодом  $2\pi$ . Согласно теореме Фурье любая такая функция может быть разложена в ряд (5.4). Таким образом, формула (5.4) не накладывает никаких ограничений на вид  $\psi$ -функции.

Здесь следует предостеречь читателя от поспешных выводов. Если в начале рассуждений могло показаться, что квантование проекции

углового момента требует полного пересмотра всех представлений о пространстве, то недостаточно внимательное чтение этого параграфа может создать впечатление, что вообще ничего существенно нового как будто и не возникло. Оба вывода неверны. Смысл и важность полученных результатов огромны. Они будут обсуждаться на протяжении всей книги.

**Квадрат углового момента.** Найдем теперь возможные значения квадрата углового момента  $M^2$ .

Прямой подход к решению этой задачи требует решения уравнения, получающегося при подстановке в (2.28) оператора квадрата углового момента  $\widehat{M}^2$ :

$$\widehat{M}^2\psi = M^2\psi.$$

Однако оператор  $\widehat{M}^2$  имеет громоздкий вид и решение задачи требует знакомства со специальными функциями (с полиномами Лежандра). Поэтому мы подойдем к задаче о нахождении возможных значений квадрата углового момента с несколько другой стороны.

В классической механике квадрат углового момента равен сумме квадратов его проекций на координатные оси:

$$M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2.$$

В квантовой механике это равенство следует понимать как формулу, связывающую соответствующие операторы,

$$\widehat{M}^2 = \widehat{M}_x^2 + \widehat{M}_y^2 + \widehat{M}_z^2.$$

и средние значения,

$$\langle M^2 \rangle = \langle M_x^2 \rangle + \langle M_y^2 \rangle + \langle M_z^2 \rangle.$$

Рассмотрим частицу, движущуюся в сферически-симметричном поле. Пусть квадрат ее углового момента имеет некоторое определенное значение. Задание квадрата углового момента определяет состояние частицы не полностью, так как при этом проекция углового момента на ось  $z$  может принимать разные значения. Нас будет интересовать сферически-симметричное состояние частицы с заданным значением квадрата момента. Так как ось  $z$  ничем не выделена из остальных координатных осей, то при сферически-симметричном состоянии частицы

$$\langle M_x^2 \rangle = \langle M_y^2 \rangle = \langle M_z^2 \rangle$$

и, следовательно,

$$\langle M^2 \rangle = 3\langle M_z^2 \rangle. \quad (5.5)$$

Симметричное решение, конечно, не обладает какой-либо определенной проекцией углового момента, так как все такие состояния ограничивают область углов, в которых может находиться вектор  $\mathbf{M}$ . Оно является суперпозицией решений со всеми возможными проекциями  $M_z$ . Более того, в симметричном решении все проекции на любую ось, в том числе и на ось  $z$ , равновероятны и потому представлены с одинаковым весом. Поэтому  $\langle M_z^2 \rangle$  равно среднему из всех возможных значений  $M_z^2$ . Согласно (5.3) возможные значения  $M_z$  равны целому числу постоянных Планка  $\hbar$ :

$$M_z = 0, \pm 1\hbar, \pm 2\hbar, \dots, \pm m_{\max}\hbar.$$

Максимальное значение проекции момента  $M_z$  по модулю не может превышать  $|M|$ . Обозначим максимальное значение  $m$  через  $l$ , так что  $m_{\max} = l$ . Мы уже знаем, что  $l$  — целое положительное число. Выпишем полный набор возможных значений  $M_z$  и  $m$ :

$$\begin{aligned} M_z &= l\hbar, \quad (l-1)\hbar, \dots, (-l)\hbar, \\ m &= l, (l-1), \dots, 1, 0, -1, \dots, -l. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Мы видим, что при всяком данном  $l$  проекция момента  $M_z$  может принимать  $2l+1$  различных значений: одно нулевое,  $l$  положительных и  $l$  отрицательных. Среднее значение  $\langle M_z^2 \rangle$  равно поэтому

$$\begin{aligned} \langle M_z^2 \rangle &= \hbar^2 \frac{l^2 + (l-1)^2 + \dots + (-l)^2}{2l+1} = 2\hbar^2 \frac{1^2 + 2^2 + \dots + l^2}{2l+1} = \\ &= \frac{2\hbar^2}{2l+1} \frac{l(l+1)(2l+1)}{6} = \frac{\hbar^2}{3} l(l+1). \end{aligned}$$

Подставив полученное значение  $\langle M_z^2 \rangle$  в (5.5), получим

$$\boxed{M^2 = \hbar^2 l(l+1)}, \quad (5.7)$$

где  $l$  — целое положительное число (или нуль).

Формула (5.6) перечисляет все значения  $M_z$ , возможные при данном  $l$ . Равенство (5.7) определяет закон квантования квадрата углового момента.

Сравнение формул (5.6) и (5.7) показывает, что  $M_{z_{\max}}^2 < M^2$  при любом значении  $l > 0$ , так как  $M_{z_{\max}}^2 = \hbar^2 l^2$ , а  $M^2 = \hbar^2 l(l+1)$ . Этот результат, непонятный в рамках классической физики, легко объясняется в квантовой механике. Исследование показывает (мы примем этот

результат на веру), что проекции момента на две различные оси, например  $M_z$ , и  $M_x$ , не могут быть одновременно известны; для них существует соотношение неопределенности, аналогичное соотношению неопределенности для координаты и импульса. Зафиксировав состояние с определенным  $M_z$ , мы вносим неопределенность в проекции  $M_x$  и  $M_y$ . Средние значения  $\langle M_x^2 \rangle$  и  $\langle M_y^2 \rangle$  в таких «размазанных» состояниях, конечно, отличны от нуля:  $\langle M_x^2 \rangle > 0$ ,  $\langle M_y^2 \rangle > 0$ . Поэтому

$$M^2 = (\langle M_x^2 \rangle + \langle M_y^2 \rangle + \langle M_z^2 \rangle) > M_z^2.$$

В отличие от двух проекций вектора  $\mathbf{M}$ , квадрат момента  $M^2$  и одна из его проекций, например  $M_z$ , могут быть определены одновременно. (Мы примем это утверждение также без доказательства.) Более того, в квантовой механике доказывается, что задание  $M_z$  и  $M^2$  полностью определяет вращательное состояние частицы.

Обратимся к математическому смыслу полученных формул. Состояние с данным  $M^2$  определяется заданием одного (или набора) из  $2l + 1$  возможных значений  $M_z$ . Таким образом, ряд (5.4) при заданном  $M^2 = \hbar^2 l(l + 1)$  состоит из  $2l + 1$  членов. Конечно, вращательное состояние системы с данным  $M^2$  не обязательно уточнять, задавая именно проекции на ось  $z$ , хотя такой способ является общепринятым. Как бы мы, однако, ни задавали вращательное состояние системы с определенным  $\mathbf{M}$ , для этого всегда нужно указать  $2l$  чисел (последнее  $(2l + 1)$ -е число определится из условия нормировки)<sup>1</sup>. Конкретный набор чисел, определяющих состояние, зависит от выбора осей и от особенностей описываемого состояния. Напомним в заключение, что при экспериментальном измерении проекции углового момента на какую-либо ось получается одно из  $2l + 1$  возможных значений.

## § 19. Вращательные уровни молекул. Молекулярные спектры

В предыдущем параграфе мы с помощью квантовой механики выяснили основные свойства угловых моментов микрочастиц. Главным результатом, который мы получили, является квантование момента и его проекций.

Свойства угловых моментов, установленные в § 18, подтверждают громадной совокупностью экспериментальных данных. Однако лишь

<sup>1</sup>Строго говоря, чтобы полностью задать состояние системы, следует еще указать сдвиг фаз между состояниями с различными  $m$ . Для обсуждения вопросов, излагаемых в этой книге, сдвиг фаз не представляет интереса.

немногие из них могут быть рассмотрены на базе материала, изложенного в предыдущих главах книги. Большую часть экспериментальных данных мы рассмотрим в следующих главах, посвященных сложным атомам и атомным ядрам и их магнитным свойствам. Здесь же остановимся на вращательных (ротационных) уровнях молекул и ядер.

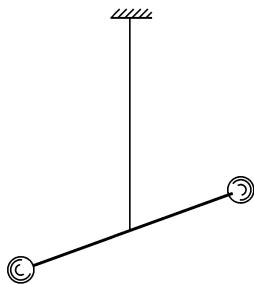


Рис. 40. Модель ротатора.

Рассмотрим квантовомеханический ротатор, изображенный на рис. 40 и являющийся моделью двухатомной молекулы. Оператор энергии вращения такого ротатора  $\hat{E}$  связан с оператором углового момента  $\hat{M}^2$  формулой, аналогичной формуле для энергии классического ротатора:

$$\hat{E} = \frac{\hat{M}^2}{2J},$$

где  $J$  — момент инерции молекулы. Из этой формулы видно, что собственные значения оператора энергии, так же как и собственные значения оператора квадрата углового момента, являются квантовыми величинами. Согласно (5.7) имеем

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2J} l(l+1), \quad (5.8)$$

где  $l = 0, 1, 2, \dots$  — вращательное квантовое число<sup>1</sup>. Из формулы (5.8) следует, что расстояние между вращательными уровнями ротатора растет с увеличением квантового числа  $l$ . Действительно, расстояние между уровнями  $l$  и  $l-1$  равно

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{J} l. \quad (5.9)$$

Вращательные уровни проявляются у многих квантовомеханических систем. Их не удается наблюдать у атома водорода. Как уже отмечалось, «случайное» вырождение в кулоновском поле приводит к тому, что уровни, характеризующиеся как вращением электрона, так и возбуждением его радиального движения, совпадают по энергии с другими уровнями, в которых возбуждение радиального движения представлено сильнее, а вращение вообще отсутствует (см. также § 20). У сложных атомов это не так, но такие атомы малопригодны для сравнения теории с экспериментом, поскольку положение уровней в сложных атомных системах,

<sup>1</sup>В молекулярной оптике вращательное квантовое число обозначается обычно буквой  $j$ .



состоящих из ядра и нескольких электронов, с трудом поддается расчету.

Одним из простых примеров вращающихся квантовомеханических систем являются несферические атомные ядра. В природе такие ядра представлены довольно широко; к ним, в частности, принадлежат ядра большинства  $\alpha$ -радиоактивных элементов, расположенных в конце таблицы Менделеева. Рассмотрим в качестве примера ядро  $^{232}\text{Th}$ . Положение нижних уровней этого ядра легко исследовать по спектру  $\alpha$ -частиц, испускаемых ядром  $^{236}\text{U}$ . Ядро  $^{236}\text{U}$  распадается из основного состояния. Энергия, которую уносят  $\alpha$ -частицы, определяется тем, на каком уровне оказывается дочернее ядро  $^{232}\text{Th}$  после  $\alpha$ -распада. Измеряя энергии  $\alpha$ -частиц, испускаемых  $^{236}\text{U}$ , нетрудно определить положение уровней  $^{232}\text{Th}$ .

На рис. 41 изображена схема уровней  $^{232}\text{Th}$ . Около уровней представлены вращательные квантовые числа  $l$ .

Сопоставим энергии возбуждения уровней  $^{232}\text{Th}$  с (5.8):

$$E_2 : E_4 : E_6 : E_8 = 49,8 : 163 : 330 : 550 = 3 : 9,8 : 19,9 : 33,1,$$

в то время как (5.8) требует

$$E_2 : E_4 : E_6 : E_8 = (2 \cdot 3) : (4 \cdot 5) : (6 \cdot 7) : (8 \cdot 9) = 3 : 10 : 21 : 36.$$

Мы видим, что согласие экспериментальных и расчетных данных, в общем, является хорошим, но по мере увеличения  $l$  ухудшается. Этого и следовало ожидать, поскольку при быстром вращении центробежные силы деформируют ядро и меняют его момент инерции<sup>1</sup>.

Скажем несколько слов о том, почему вращение наблюдается только у несферических ядер. Атомное ядро меньше всего похоже на твердый шарик. Лучше представлять себе ядро как общую, созданную притяжением всех протонов и нейтронов ядра потенциальную яму, в которой все они находятся и движутся. Вращение ядра представляет собой вращение контура потенциальной ямы. Если яма имеет сферическую форму, такое

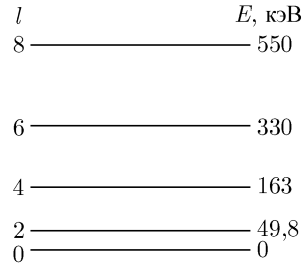


Рис. 41. Схема нижних уровней ядра  $^{232}\text{Th}$ . Вращательные состояния атомных ядер с четными значениями  $Z$  и  $A$  осуществляются только при четных  $l$ .

<sup>1</sup>Другие примеры проявления вращательных уровней у ядер, получающихся при  $\alpha$ -распаде, приведены в гл. 14.

вращение не сказывается на движении нуклонов и вообще не может быть обнаружено. Говорить о нем, следовательно, не имеет смысла. Положение меняется, если форма потенциальной ямы несферична. В этом случае движение границы ядра может быть обнаружено и увлекает за собой входящие в состав ядра частицы — протоны и нейтроны.

Другой важный пример вращающихся систем дают нам молекулы. Рассмотрим состоящую из двух атомов молекулу NaCl и оценим расстояние между вращательными уровнями этой молекулы. При расчете момента инерции будем для простоты считать, что атомы в молекуле находятся на расстоянии  $r \approx 10^{-8}$  см и вращение происходит вокруг оси, проходящей через центр инерции, перпендикулярно к линии, соединяющей атомы. Тогда

$$J = \frac{m_{\text{Na}}m_{\text{Cl}}}{m_{\text{Na}} + m_{\text{Cl}}}r^2 = \frac{23 \cdot 35}{23 + 35} \cdot 1,67 \cdot 10^{-23} \text{ г} \cdot (10^{-8} \text{ см})^2 \approx 2 \cdot 10^{-38} \text{ г} \cdot \text{см}^2,$$

$$\Delta E \approx \frac{(10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с})^2}{(2 \cdot 10^{-38} \text{ г} \cdot \text{см}^2) \cdot (1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг/эВ})} l \approx 3 \cdot 10^{-5} l \text{ эВ}.$$

Спектр вращательных уровней энергии молекулы NaCl изображен на рис. 42. В квантовой механике показывается, что осуществляются лишь такие электромагнитные переходы между вращательными уровнями, при которых квантовое число  $l$  меняется на единицу. Такие переходы изображены на рис. 42. Нетрудно подсчитать, что чисто вращательные спектры молекул должны находиться в далекой инфракрасной области и в области сантиметровых радиоволн.

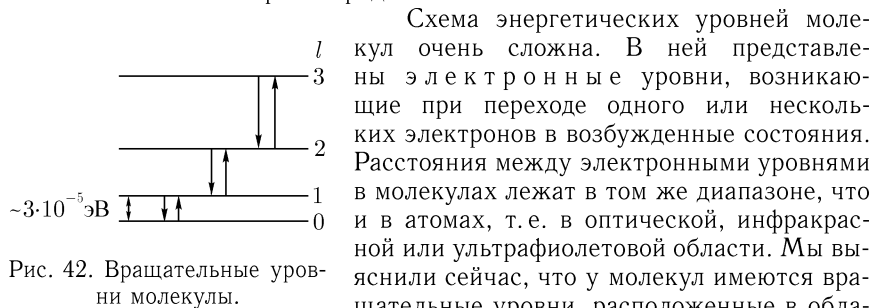


Рис. 42. Вращательные уровни молекулы.

Схема энергетических уровней молекул очень сложна. В ней представлены электронные уровни, возникающие при переходе одного или нескольких электронов в возбужденные состояния. Расстояния между электронными уровнями в молекулах лежат в том же диапазоне, что и в атомах, т.е. в оптической, инфракрасной или ультрафиолетовой области. Мы выяснили сейчас, что у молекул имеются вращательные уровни, расположенные в области сантиметровых длин волн. Кроме того,

для молекул характерно наличие колебательных уровней, положение которых описывается формулой (3.27):

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2).$$

При обсуждении систем, которые могут быть представлены в виде гармонического осциллятора, мы говорили, что в первом приближении к ним можно отнести любые колебательные системы, находящиеся в состоянии, близком к равновесию, в том числе, конечно, и молекулы в слабо возбужденных колебательных состояниях. Характерную для колебания молекул энергию  $\hbar\omega$  можно оценить с помощью следующих соображений. Связь атомов в молекулы происходит под влиянием тех же электрических сил, которые связывают ядра и электроны в атомы. Поэтому «упругость пружинки»  $k$ , связывающей атомы в молекулы, грубо говоря, та же, что и у электронов в атомах. Однако характерная масса оказывается в несколько тысяч раз больше, потому что раньше речь шла о движении электронов, а теперь — о движении атомов. Следует поэтому ожидать, (см. (3.27)), что энергия колебаний окажется в корень из отношения масс, т. е. в несколько десятков раз, меньше, чем  $R_1 = 13,6$  эВ (§ 12). Опыт подтверждает эти соображения: расстояние между колебательными уровнями составляет сотые (или десятые) доли электронвольта (далекая инфракрасная область).

В первом приближении полная энергия молекулы может быть представлена в виде суммы:

$$E = E_{\text{эл}} + E_{\text{колеб}} + E_{\text{вращ}}.$$

Схема уровней молекулы изображена на рис. 43. (Масштаб по шкале энергий не выдержан!) На этой схеме изображены два электронных уровня  $a$  и  $b$ , колебательные уровни с квантовыми числами  $n'$  и  $n''$  и вращательные уровни с квантовыми числами  $l'$  и  $l''$ .

При поглощении или испускании фотонов возможны переходы с любого верхнего уровня на нижние, если только данный переход не запрещен правилами отбора (§ 33). Поэтому молекулярные спектры оказываются очень сложными и состоят из систем полос, в которых удастся различить отдельные линии лишь при помощи приборов, обладающих большой разрешающей способностью.

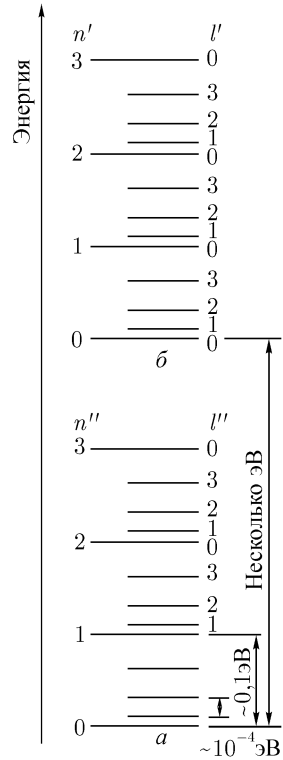


Рис. 43. Структура энергетических уровней молекулы.

По существу, лишь вращательные спектры можно наблюдать в чистом виде. Изучаются вращательные уровни в основном методом микроволновой радиоспектроскопии. Генератор электромагнитных волн с частотой порядка  $10^{10}$  Гц возбуждает волновод, внутри которого находится исследуемое вещество в газообразном состоянии. После прохождения через вещество измеряется интенсивность излучения. Если частота генератора совпадает с частотой одного из переходов между вращательными уровнями, то приемник излучения регистрирует резкое уменьшение интенсивности.

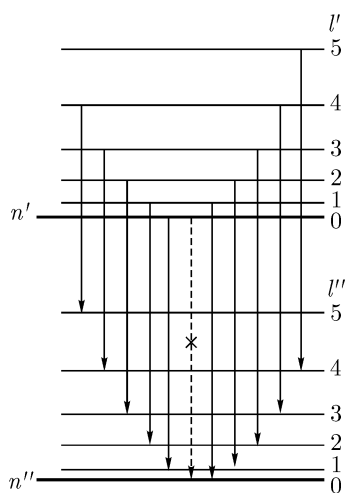


Рис. 44. К происхождению колебательно-вращательных спектров молекул.

Колебательные спектры наблюдаются в инфракрасной области ( $\lambda^{-1} \approx 10^3 \text{ см}^{-1}$ ) и исследуются методом инфракрасной спектрометрии. При этом наблюдаются не чисто колебательные, а колебательно-вращательные спектры. Схема возникновения колебательно-вращательного спектра изображена на рис. 44. Мы видим, что вместо одной линии, соответствующей переходу между двумя колебательными уровнями, возникает целая серия переходов с близкими частотами, образующая колебательно-вращательную полосу.

При обсуждении методов исследования вращательных и колебательных спектров молекул следует иметь в виду, что чистые опыты возможны только в газообразных веществах. В жидких и твердых телах взаимодействие молекул друг с другом приводит к сильному усложнению явления.

В видимой и ультрафиолетовой частях молекулярного спектра наблюдаются электронно-колебательно-вращательные спектры, в которых при недостаточном разрешении вращательные линии в колебательно-вращательных полосах сливаются, и весь спектр кажется состоящим из электронно-колебательных полос.

Одним из плодотворных методов изучения молекулярных спектров является метод комбинационного рассеяния, позволяющий перевести исследование колебательно-вращательных спектров из инфракрасной области в область видимого света. Явление комбинационного рассеяния было открыто Л. И. Мандельштамом и Г. С. Ландсбергом (1928 г.) в СССР и одновременно Раманом в Индии. Рассмотрим сущность этого явления.

При рассеянии света в веществе, кроме обычного рассеяния, возможно рассеяние с изменением энергии. Такое рассеяние происходит в тех случаях, когда падающие фотоны передают молекулам среды энергию, необходимую для перевода молекулы с одного уровня на другой. Поэтому при исследовании рассеянного монохроматического света наряду с несмещенной линией  $\omega_0$  наблюдаются линии с меньшей частотой  $\omega_0 - \Delta\omega$  и с большей частотой  $\omega_0 + \Delta\omega$ . Линии с меньшей частотой называются «красными спутниками» («стоксова» часть спектра) и образуются из-за поглощения невозбужденными молекулами части энергии рассеивающихся фотонов. Линии с большей частотой называются «фиолетовыми спутниками» («антистоксова» часть спектра) и связаны с передачей рассеивающимся фотонам энергии молекул, находящихся в возбужденных вращательных и колебательных состояниях. Поскольку число таких молекул невелико, интенсивность стоксовых линий, особенно при низких температурах, существенно превосходит интенсивность антистоксовых.  $\Delta\omega$  связано с энергиями уровней следующим очевидным соотношением:

$$\Delta\omega = \frac{1}{\hbar} [(E'_{\text{колеб}} - E''_{\text{колеб}}) + (E'_{\text{вращ}} - E''_{\text{вращ}})].$$

Таким образом, сведения о колебательных и вращательных уровнях молекул могут быть получены из разностей частот основной линии и линий комбинационного рассеяния.

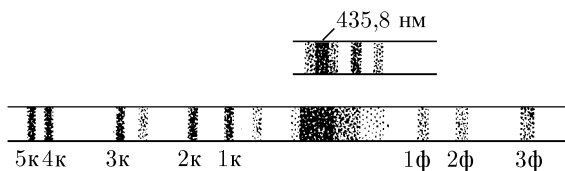


Рис. 45. Спектр комбинационного рассеяния для линии ртути с  $\lambda = 435,8$  нм на молекулах  $\text{CCl}_4$ .

На рис. 45 изображен спектр ртутной лампы, используемый в качестве источника монохроматического света, и спектр комбинационного рассеяния на молекулах  $\text{CCl}_4$ . Спектр ртутной лампы содержит фиолетовый триплет, в котором самой яркой является линия с  $\lambda = 435,8$  нм; эта линия и дает наиболее отчетливые спутники, обозначенные в нижней части рисунка цифрами. Каждый из спутников представляет собой целую колебательно-вращательную полосу, распадающуюся на отдельные ли-

нии при увеличении разрешающей способности прибора и при условии, что исследуемое вещество находится в газообразном состоянии.

## § 20. Классификация состояний электронов. Главное квантовое число. Вырождение уровней

Как мы уже знаем, электроны атома движутся в центральном (или почти центральном) электрическом поле и могут обладать как нулевым, так и ненулевым угловым моментом. Момент электрона  $\mathbf{l}$  и его проекция  $l_z$ , квантуются по правилам (5.6) и (5.7):

$$l^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.10)$$

$$l_z = \hbar m_l, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l; \quad (5.11)$$

величину  $\mathbf{l}$  принято называть орбитальным угловым моментом, а  $l$  — орбитальным квантовым числом<sup>1</sup>. Эти названия, так же как и «радиусы боровских орбит» (§ 15), остались в квантовой механике от полуклассической боровской теории атома. С современной точки зрения эти названия малоудачны, но широко используются по традиции. Более подробно представления теории Бора изложены в § 28. Величина  $m_l$  называется магнитным квантовым числом; оно определяет возможные значения проекций орбитального момента  $\mathbf{l}$  на какую-либо ось. Происхождение термина «магнитное число» будет разъяснено ниже.

В атомной физике принята следующая классификация состояний: состояние электрона с  $l = 0$  называется  $s$ -состоянием; состояние с  $l = 1$  носит название  $p$ -состояния; при  $l = 2$  имеем  $d$ -состояние; затем следуют состояния  $f$ ,  $g$ ,  $h$  и далее по алфавиту. Эти обозначения состояний являются общепринятыми, и их следует запомнить<sup>2</sup>.

Вернемся к атому водорода. При решении уравнения Шредингера для атома водорода мы ограничились сферически-симметричными решениями, не зависящими от углов  $\vartheta$  и  $\varphi$ , т. е. решениями для  $s$ -состояний. Но электрон в атоме водорода может находиться и в состояниях с  $l \neq 0$ .

<sup>1</sup>Обращаем внимание читателя на то, что в общепринятых обозначениях  $\mathbf{l}$  и  $l$  описывают одну и ту же физическую величину — угловой момент, но  $\mathbf{l}$  имеет размерность углового момента, т. е. ту же размерность, что и  $\hbar$  [эрг·с], а  $l$  — безразмерная величина (простое число).

<sup>2</sup>Буквы  $s$ ,  $p$ ,  $d$  и  $f$ , применяющиеся для обозначения состояний электронов с  $l = 0, 1, 2, 3$ , являются первыми буквами слов sharp, principal, diffuse, fundamental, которые используются в атомной спектроскопии для названия серий в оптических спектрах щелочных атомов.

Тогда нужно искать решение уравнения Шредингера, зависящее от  $r$ ,  $\vartheta$  и  $\varphi$ . Это решение может быть найдено в виде произведения функции  $R$ , зависящей только от  $r$ , и функции  $Y$ , зависящей только от  $\vartheta$  и  $\varphi$ , так что

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi).$$

Радиальная волновая функция  $R(r)$  квантуется так же, как  $\psi$ -функция  $s$ -состояний (§ 12). Ее последовательные значения нумеруются «радиальным» квантовым числом  $n_r$ . Вид функции  $Y$  зависит от орбитальных квантовых чисел  $l$  и  $m_l$ . Вычисление показывает, что в чисто кулоновском поле энергия электрона зависит только от квантового числа  $n$ , равного сумме  $n_r$  и  $l$ , и не зависит от каждого из этих чисел в отдельности<sup>1</sup>. Поэтому решение задачи об атоме водорода в самом общем случае приводит к уже известной нам формуле (4.18) для энергий уровней:

$$E_n = -R_1 Z^2 \frac{1}{n^2}. \quad (5.12)$$

Здесь

$$n = n_r + l. \quad (5.13)$$

Квантовое число  $n$ , определяющее энергию атома водорода, называется главным квантовым числом. Так как орбитальное квантовое число  $l$  может принимать любые значения, начиная от нуля, а «радиальное» квантовое число  $n_r$  — любые значения от единицы, то главное квантовое число  $n$ , являющееся суммой чисел  $n_r$  и  $l$ , может принимать любые значения, также начиная от единицы:

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.14)$$

Для сферически-симметричных решений ( $l = 0$ ), которые мы получили в предыдущей главе,  $n_r \equiv n$  и формулы (4.18) и (5.12) совпадают. Из (5.13) видно, что при любом значении  $n > 1$  возможны не только  $s$ -состояния (т. е. состояния с  $l = 0$ ), но и состояния со всеми значениями  $l$  в интервале  $0 \leq l \leq n - 1$  — всего  $n$  различных состояний. Для всех этих состояний энергия оказывается одной и той же и выражается (5.12).

Если мы учтем теперь, что при каждом данном значении  $l$  электрон может находиться в  $2l + 1$  состояниях с различными значениями  $m_l$ , то окажется, что число состояний с разными  $l$  и  $m_l$  на уровне равно

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

<sup>1</sup>Иногда «радиальным» квантовым числом называют число  $n'_r$ , связанное с введенным здесь  $n_r$  следующим соотношением:  $n'_r = n_r - 1$ . Вид (5.12) при этом сохраняется, а  $n = n'_r + l + 1$ .

Таблица 2. Квантовые числа и кратность вырождения уровней водородоподобных атомов по орбитальному угловому моменту

$n$	$n_r$	$l$	$m_l$	Состояние	Кратность вырождения <sup>2</sup>
1	1	0	0	1s	1
2	2	0	0	2s	1 } 4
2	1	1	0, ±1	2p	
3	3	0	0	3s	1 } 9
3	2	1	0, ±1	3p	
3	1	2	0, ±1, ±2	3d	
4	4	0	0	4s	1 } 16
4	3	1	0, ±1	4p	
4	2	2	0, ±1, ±2	4d	5 } 16
4	1	3	0, ±1, ±2, ±3	4f	

<sup>1</sup>Из-за наличия спина полное вырождение уровней в два раза больше.

Дополнительное увеличение числа совпадающих (как мы увидим далее, приблизительно совпадающих) по энергии уровней связано с наличием у электрона собственного вращения (спина). Число состояний, расположенных на каждом уровне, оказывается поэтому в два раза больше:

$$N_{\text{сост}} = 2n^2. \quad (5.15)$$

Более подробно этот вопрос рассмотрен в § 24 и далее.

Если уровню энергии соответствует больше чем одно состояние, говорят, что он **вырожден**. Число состояний с одинаковой энергией называется **кратностью вырождения**. В атоме водорода и в водородоподобных атомах невырожденным (с учетом спина — двукратно вырожденным) является только уровень с  $n = 1$ , т. е. уровень, определяющий основное состояние атома. Уровень с  $n = 2$  оказывается четырехкратно (восьмикратно) вырожденным и т. д. (табл. 2).

## § 21. Правила сложения угловых моментов

Рассмотрим систему, состоящую из двух частиц, имеющих орбитальные моменты  $\mathbf{I}_1$  и  $\mathbf{I}_2$ , и найдем возможные значения суммарного углового момента  $\mathbf{L}$  этой системы. Угловые моменты — векторные величины, и складываться они должны по правилам сложения векторов. Абсолютное значение суммарного момента  $\mathbf{L}$  зависит от взаимной ориентации составляющих моментов  $\mathbf{I}_1$  и  $\mathbf{I}_2$ . В квантовой механике векторный



характер моментов сохраняется, но при обсуждении правил сложения следует помнить, что как сам момент  $\mathbf{L}$ , так и его проекция  $L_z$  квантуются по уже известным правилам:

$$|\mathbf{L}^2| = \hbar^2 L(L + 1), \quad (5.16)$$

$$L_z = \hbar m_L. \quad (5.17)$$

Здесь  $L = 0, 1, 2, \dots$  (орбитальное квантовое число системы);  $m_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L$  (магнитное квантовое число, определяющее проекцию момента  $\mathbf{L}$  на ось  $z$ ). Квантовый характер угловых моментов (и их «размазанность», связанная с принципом неопределенности) лишает угловой момент простой классической наглядности и заставляет внимательно исследовать правила сложения моментов.

Здесь следует отметить, что само понятие «вектор» к угловому моменту следует применять с осторожностью. До сих пор в этой книге мы имели дело с двумя векторами — с вектором, определяющим координату (радиус-вектор), и с вектором импульса. Эти величины являются векторами в классическом смысле этого слова. Проекции радиус-вектора на все три оси декартовой системы координат могут быть измерены одновременно. По ним можно восстановить модуль и направление самого вектора. Аналогичное утверждение справедливо и для вектора импульса. Принцип неопределенности не вносит ничего нового в векторный характер каждой из этих физических векторных величин — он только указывает на их связь и ограничивает возможность их одновременного определения.

Иначе обстоит дело с угловым моментом. Одновременно определить можно только квадрат и проекцию момента на одну из координатных осей (мы выбрали ось  $z$ ). Две другие проекции при этом не имеют определенного значения. Конец вектора момента не указывает, как в классической физике, в одну точку, а «размазан» по основанию конуса, описанного вокруг оси  $z$ . Такие «векторы» в классической физике не встречаются. Но проекция углового момента на ось  $z$  является обычным числом, обращение с которым не требует никаких новых правил. Найдем связь между квантовыми числами  $L$ ,  $m_L$  и квантовыми числами складывающихся векторов  $l_1$  и  $m_{l_1}$ ,  $l_2$  и  $m_{l_2}$ . Для этого рассмотрим проекции моментов на ось  $z$  (рис. 46). Обычные правила сложения показывают, что  $\hbar m_L$  равно сумме  $\hbar m_{l_1}$  и  $\hbar m_{l_2}$ , или

$$m_L = m_{l_1} + m_{l_2}. \quad (5.18)$$

Обратимся теперь к возможным значениям  $L$ . Мы уже знаем, что  $L$  должно быть целым числом, величина которого зависит от величины

и взаимной ориентации  $\mathbf{I}_1$  и  $\mathbf{I}_2$ . Задача будет полностью решена, если будут найдены максимальное и минимальное значения квантового числа  $L$ . Наибольшее возможное значение  $L$  равно наибольшему возможному числу  $m_L$ . Следовательно,

$$L_{\max} = m_{L_{\max}} = m_{l_{1\max}} + m_{l_{2\max}} = l_1 + l_2. \quad (5.19)$$

Рассмотрим геометрический смысл найденного решения. Выберем наибольший из векторов  $\mathbf{I}_1$  и  $\mathbf{I}_2$ . Пусть это будет вектор  $\mathbf{I}_1$ . Направим ось  $z$  так, чтобы проекция вектора  $\mathbf{I}_1$  на эту ось была максимальной, т. е. чтобы  $m_{l_1} = l_1$  (рис. 47 а)<sup>1</sup>. Направим, далее, вектор  $\mathbf{I}_2$  так, чтобы его проекция на эту же ось  $z$  также была максимальной и, следовательно, равнялась  $\hbar l_2$ . В классической физике этот случай соответствует сложению параллельных векторов.

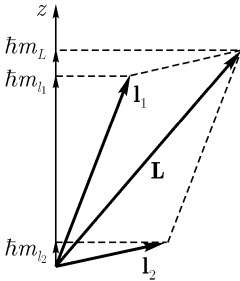


Рис. 46. Сложение проекций углового момента.

Минимальное значение суммарного вектора в классической физике получается при антипараллельной ориентации векторов. На векторной диаграмме моментов минимальное значение получается при такой ориентации векторов  $\mathbf{I}_1$  и  $\mathbf{I}_2$ , когда проекции этих векторов на ось  $z$  максимальны, но имеют различные знаки. Оставим направление  $\mathbf{I}_1$  прежним, а направление  $\mathbf{I}_2$  заменим на противоположное (рис. 47 б), проекция этого вектора на ось  $z$  теперь равна  $-\hbar l_2$ . Поэтому имеем

$$L_{\min} = l_1 - l_2.$$

Это выражение правильно лишь при  $l_1 > l_2$ . При  $l_1 < l_2$  оно становится отрицательным, что не имеет смысла. Правильная запись имеет вид

$$L_{\min} = |l_1 - l_2|. \quad (5.20)$$

Согласно (5.19) и (5.20) имеем

$$\boxed{|l_1 - l_2| \leq L \leq l_1 + l_2.} \quad (5.21)$$

Из (5.21) следует, что  $L$  может принимать  $2l_2 + 1$  значение, если  $l_1 > l_2$ , и  $2l_1 + 1$  значение, если  $l_1 < l_2$ .

«Особый» характер вектора углового момента приводит к нарушению справедливости некоторых привычных равенств. Так, при сложении классических

<sup>1</sup>Направления оси  $z$  и вектора  $\mathbf{I}_1$ , как легко видеть, при этом не совпадают, а образуют наименьший возможный угол.

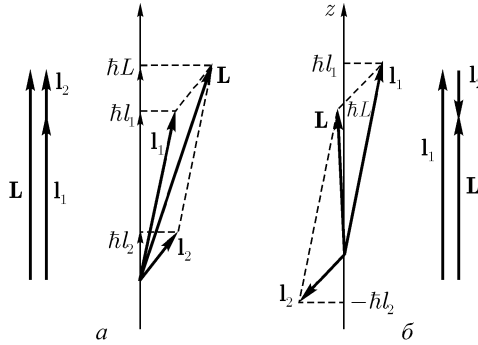


Рис. 47. К правилу сложения векторов углового момента: *a* — наибольший суммарный момент; *б* — наименьший суммарный момент.

векторов максимальное значение суммарного вектора равно сумме длин составляющих векторов:

$$|\mathbf{L}_{\text{класс}}|_{\text{max}} = |\mathbf{L}_1| + |\mathbf{L}_2|.$$

В квантовой механике это не так. Прежде всего нужно попытаться понять, что следует подразумевать под длиной вектора. Как мы знаем, определенные значения одновременно могут иметь проекция вектора на некоторую ось (которую обычно считают осью  $z$ ) и его квадрат. Под длиной вектора  $\mathbf{L}$  (будем обозначать ее  $|\mathbf{L}|$ ) естественно понимать корень из его квадрата:  $|\mathbf{L}| = \sqrt{\mathbf{L}^2}$ . Легко видеть, что в квантовой механике

$$|\mathbf{L}_{\text{max}}| \leq |\mathbf{L}_1| + |\mathbf{L}_2|, \quad (5.22)$$

причем равенство возможно только в том случае, если  $\mathbf{L}_1$  или  $\mathbf{L}_2$  равно нулю. В самом деле, чтобы доказать сказанное, достаточно заметить, что

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar^2} |\mathbf{L}|_{\text{max}}^2 &= L_{\text{max}}(L_{\text{max}} + 1) = (l_1 + l_2)(l_1 + l_2 + 1) = \\ &= l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1) + 2l_1l_2 \leq l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1) + \\ &\quad + 2\sqrt{l_1(l_1 + 1)}\sqrt{l_2(l_2 + 1)}. \end{aligned}$$

Аналогичным образом можно показать, что

$$|\mathbf{L}_{\text{min}}| \geq ||\mathbf{L}_1| - |\mathbf{L}_2||. \quad (5.22')$$

По этому же правилу находится суммарный момент частицы, если она участвует одновременно в двух вращениях.

Если система состоит не из двух, а из многих частиц, то квантовое число  $L$ , определяющее результирующий момент  $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 + \mathbf{L}_3 + \dots$ , находится путем последовательного применения правила (5.21).

## § 22. Орбитальный магнитный момент электрона

Из курса электродинамики известно, что со всяким электрическим током связаны магнитные поля. Поэтому электрон атома, обладающий отличным от нуля угловым моментом, должен обладать также и магнитным моментом. Чтобы найти связь орбитального механического и магнитного моментов электрона в атоме, рассмотрим классическую задачу о магнитном моменте электрона, движущегося со скоростью  $\mathbf{v}$  по кругу с радиусом  $r$  (рис. 48). При таком движении электрона образуется «токовый листок» с площадью  $S = \pi r^2$ . Угловой момент электрона

$$\mathbf{M} = m[\mathbf{r} \times \mathbf{v}]. \quad (5.23)$$

Магнитный момент «токового листка» (в гауссовой системе единиц) равен

$$\mathbf{p}_m = \frac{1}{c} i \mathbf{S} = \frac{1}{c} \frac{qv}{2\pi r} \cdot \pi r^2 \mathbf{n} = \frac{q}{2c} r v \mathbf{n}, \quad (5.24)$$

где  $\mathbf{n}$  — единичный вектор нормали к «токовому листку». Если мы учтем, что заряд электрона  $q = -e$ , где  $e$  — абсолютная величина элементарного заряда, то вместо (5.24) получим

$$\mathbf{p}_m = -\frac{e}{2c} r v \mathbf{n}. \quad (5.24')$$

Сравнивая (5.23) и (5.24'), находим

$$\mathbf{p}_m = -\frac{e}{2c} r v \mathbf{n} = -\frac{e}{2mc} m[\mathbf{r} \times \mathbf{v}] = -\frac{e}{2mc} \mathbf{M},$$

т. е.

$$\mathbf{p}_m = -\frac{e}{2mc} \mathbf{M}. \quad (5.25)$$

Итак, магнитный момент электрона, движущегося по плоской орбите, направлен в сторону, противоположную механическому моменту и связан с ним множителем  $e/(2mc)$ . Кроме универсальных постоянных  $e$  и  $c$ , в него входит масса  $m$  движущейся частицы — электрона. Очевидно, что для проекций моментов  $p_{m,z}$  и  $M_z$  сохраняется та же связь:

$$p_{m,z} = -\frac{e}{2mc} M_z. \quad (5.26)$$

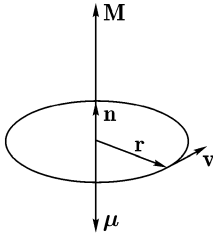


Рис. 48. Магнитный и механический моменты в классической физике.

Переходя к квантовой механике, как всегда, следует числовые равенства классической физики заменять операторными равенствами. Формулы (5.25) и (5.26) связывают операторы орбитального момента  $\hat{\mathbf{l}}$ , орбитального магнитного момента  $\hat{\mathbf{p}}_m$  и их проекций  $\hat{l}_z$  и  $\hat{p}_{m,z}$ :

$$\hat{\mathbf{p}}_m = -\frac{e}{2mc}\hat{\mathbf{l}}. \quad (5.25')$$

$$\hat{p}_{m,z} = -\frac{e}{2mc}\hat{l}_z. \quad (5.26')$$

Эти формулы в одинаковой мере справедливы как для электрона, движущегося в атоме с орбитальным моментом  $\mathbf{l}$ , так и для любых других заряженных частиц, обладающих не равным нулю угловым моментом.

Найдем правило квантования  $p_{m,z}$ . Для этого в уравнение (2.28) подставим оператор  $\hat{p}_{m,z} = -\frac{e}{2mc}\hat{l}_z = -\frac{e}{2mc}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$ :

$$-\frac{e}{2mc}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\psi = \mu_l\psi. \quad (5.27)$$

Решением этого уравнения является функция

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-i\frac{2mc}{e\hbar}\mu_l\varphi\right), \quad (5.28)$$

которая, как и функция (5.2), является однозначной, непрерывной и гладкой лишь в тех случаях, когда

$$-\frac{2mc}{e\hbar}\mu_l \cdot 2\pi = m_l \cdot 2\pi, \quad (5.29)$$

где  $m_l$  — целое число.

Из (5.29) следуют правила квантования для  $\mu_l$ :

$$\mu_l = -\frac{\hbar e}{2mc}m_l; \quad (5.30)$$

$m_l$  — магнитное квантовое число, определяющее, согласно (5.30), возможные значения проекции магнитного момента электрона. Подставляя (5.30) в (5.28), найдем, что при данном  $m_l$   $\psi$ -функция имеет вид

$$\psi = (1/\sqrt{2\pi})\exp(im_l\varphi). \quad (5.31)$$

Но именно такое распределение имеет  $\psi$ -функция состояния с проекцией углового момента  $m_l \hbar$ . Квантовое число  $m_l$ , таким образом, одновременно определяет проекции механического и магнитного моментов. Согласно (5.6)  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ .

Мы пришли к выводу, который нетрудно было предсказать заранее по виду равенства (5.26): проекции углового момента электрона  $l_z$  и связанного с ним магнитного момента  $\mu_z$  определяются одним и тем же квантовым числом  $m_l$ ; разница заключается только в том, что  $l_z$  выражается в единицах  $\hbar$ , а  $\mu_z$  — в единицах  $\hbar e/2mc$ . Единица измерения магнитных моментов электронов  $\hbar e/2mc$  называется магнетоном Бора:

$$\mu_B = \frac{\hbar e}{2mc}. \quad (5.32)$$

Формула (5.32), определяющая магнетон Бора, кроме универсальных постоянных, содержит массу частицы. Масса протона почти в 2000 раз больше массы электрона, а единица измерения ядерных моментов — ядерный магнетон  $\mu_N = \hbar e/2m_p c$  — почти в 2000 раз меньше магнетона Бора. Поэтому магнитные моменты ядер оказываются в тысячи раз меньше электронных и магнитные свойства вещества в основном определяются структурой электронных оболочек атомов и в гораздо меньшей степени зависят от свойств атомных ядер. Самые легкие после электрона частицы — мюоны — имеют массу, в 207 раз превосходящую массу электрона. При тех же механических моментах они обладают в 200 раз меньшими магнитными моментами.

В гауссовой системе единиц магнетон Бора для электрона равен  $\mu_B = 0,927 \cdot 10^{-20}$  эрг/Гс. Окончательно имеем

$$\mu_{l_z} = -\mu_B m_l, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (5.33)$$

Правило квантования для  $\mu_l$ , мы запишем исходя из вида равенства (5.25') и уже известного правила квантования (5.7):

$$|\mu_l| = \frac{e\hbar}{2mc} \sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)}, \quad (5.34)$$

где  $l = 0, 1, 2, \dots$  — орбитальное квантовое число. Вместо этого равенства в литературе часто применяется запись

$$\mu_l = -\mu_B l. \quad (5.34)$$

Эта запись противоречит правилам, принятым при написании (5.10), так как постоянная Планка  $\hbar$  исключена из  $l$  и перенесена в  $\mu_B$ . Поэтому

при пользовании готовыми формулами необходимо следить за размерностью и при необходимости добавлять или исключать  $\hbar$ . Величина  $|\mu_l|$ , так же как и  $|l|$ , никогда не встречается в приложениях. Иметь дело приходится либо с проекциями этих векторов на некоторую ось, либо с их квадратами  $\mu_l^2$  и  $l^2$ . Обе эти величины, как мы знаем, могут быть определены совместно.

### § 23. Экспериментальное определение угловых и магнитных моментов

В предыдущем параграфе мы выяснили, что электрон с орбитальным моментом  $\mathbf{l}$  обладает магнитным моментом  $\mu_l = -\mu_B \mathbf{l}$ . Обсудим способы экспериментального определения  $\mathbf{l}$  и  $\mu_l$ . Из курса электричества известно, что частица, обладающая магнитным моментом  $\mu$ , при помещении в магнитное поле с индукцией  $\mathbf{B}$  приобретает дополнительную энергию

$$\Delta u = -\mu \mathbf{B}. \quad (5.35)$$

Эта энергия зависит, таким образом, не только от величин  $B$  и  $\mu$ , но и от угла между направлениями магнитного момента и поля; она минимальна при параллельной ориентации, максимальна при антипараллельной ориентации момента и поля и равна нулю, когда  $\mu$  и  $\mathbf{B}$  оказываются взаимно перпендикулярными.

Направим ось  $z$  по направлению магнитного поля. В этом случае

$$\Delta u = -\mu_z B. \quad (5.36)$$

Так как проекция магнитного момента квантуется, то энергия микрочастиц в магнитном поле может принимать ряд дискретных значений. Если мы рассматриваем электрон, обладающий орбитальным моментом  $\mathbf{l}$  и магнитным моментом  $\mu_l$ , то для него

$$\Delta u = -\mu_{l_z} B = m_l \mu_B B, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (5.37)$$

Мы видим, что уровни, которые до наложения поля были вырожденными по  $m_l$ , при наличии поля расщепляются на  $2l + 1$  подуровней в соответствии с числом возможных значений  $m_l$ . Таким образом, в магнитном поле снимается вырождение уровней по магнитному квантовому числу<sup>1</sup>. На рис. 49 схематически изображено расщепление  $d$ -уровня электрона ( $l = 2$ ) на подуровни при наложении магнитного поля.

<sup>1</sup>С этой особенностью поведения микрочастиц в магнитных полях и связано название магнитного квантового числа.

Дискретный характер углового момента дает возможность использовать новые по сравнению с классической физикой методы измерений. Если в классической физике для определения углового момента необходимо проводить, вообще говоря, довольно сложные количественные измерения, то в микросистемах, как мы видим, достаточно узнать, на сколько компонент расщепляется уровень в магнитном поле.

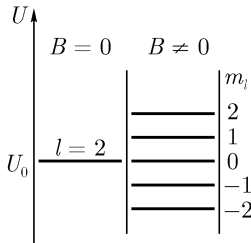


Рис. 49. Расщепление  $d$ -уровня в магнитном поле.

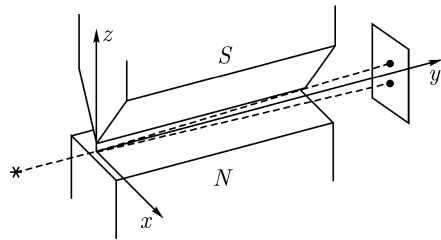


Рис. 50. Схема опыта Штерна – Герлаха.

Формула (5.37) показывает, что расстояние между соседними уровнями равно  $\mu_B B$ . Измерив это расстояние на опыте, мы можем определить величину  $\mu_B$ , если известно магнитное поле, или определить величину поля по известному значению магнетона Бора. Оба эти способа играют важную роль в науке.

Опыты по исследованию расщепления уровней в магнитном поле были впервые поставлены Штерном и Герлахом (1921 г.). В этих опытах пучки нейтральных атомов или молекул пропускались через область, в которой создавалось неоднородное магнитное поле. В неоднородном поле на частицы действует сила

$$\mathbf{F} = -\text{grad } U = \text{grad}(\mu_B B),$$

способная расщепить пучок на отдельные компоненты<sup>1</sup>. Чтобы увеличить расщепление пучка, в опытах Штерна и Герлаха использовалось сильно неоднородное магнитное поле. Схема этих опытов изображена на рис. 50. С помощью полюсных наконечников  $S$  и  $N$  (находящихся в вакууме) создавалось поле, резко неоднородное вблизи полюса  $S$ , имевшего форму ножа. Частицы пропускались вдоль оси  $y$ . Наблюдалось расщепление пучка вдоль оси  $z$ . Сила  $F_z$ , действующая на частицы

<sup>1</sup>Однородное магнитное поле ориентирует частицы, обладающие магнитным моментом, но не вызывает расщепления пучка, так как при движении нейтральных атомов через однородное поле никаких сил не возникает (могут возникать только моменты сил).



в направлении оси  $z$ , равна

$$F_z = \mu_x \frac{\partial B_x}{\partial z} + \mu_y \frac{\partial B_y}{\partial z} + \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}.$$

В плоскости  $yz$  (под «ножом») отлична от нуля только одна составляющая поля  $B_z$ . Эта составляющая быстро увеличивается при приближении к магнитному полюсу — «ножу». Остальные члены суммы появляются только при смещении пучка из плоскости  $x = 0$ .

Итак, основная составляющая силы

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}. \quad (5.38)$$

Величина силы зависит от  $\mu_z$  и пучок частиц, прошедших через установку вблизи «ножа», должен расщепиться на столько компонент, сколько возможных проекций имеет магнитный момент. Если магнитный момент вызван наличием у заряженной частицы орбитального момента  $\mathbf{l}$ , то пучок должен расщепиться на  $2l + 1$  компонент.

Мы не будем рассматривать опытов Штерна и Герлаха, проделанных со сложными атомами<sup>1</sup>. Наибольшую важность представляет опыт с атомарным водородом. Этот опыт и его результаты мы и рассмотрим в следующем параграфе.

## § 24. Спин электрона

Атом водорода представляет собой нейтральную систему, состоящую из ядра (протона) и единственного электрона. Ядра атомов обладают магнитными моментами, составляющими  $10^{-3}$  от магнитных моментов электронов. Поэтому магнитный момент атома водорода в основном определяется значением магнитного момента электрона.

Выясним, какие результаты должны получаться при пропускании пучка атомов водорода через установку, изображенную на рис. 50. Если атомы водорода не возбуждены и находятся на нижнем уровне, т. е. в  $s$ -состоянии ( $l = 0$ ), то пучок вообще не должен был бы расщепляться, так как магнитный момент таких атомов, казалось бы, должен быть равным нулю. Если же в пучке есть атомы в  $p$ -состоянии ( $l = 1$ ), то следовало бы ожидать, что пучок расщепится на три компоненты в соответствии с числом возможных значений магнитного квантового числа:  $m_l = 0, \pm 1$ .

<sup>1</sup>Впервые эти опыты проводились с атомами серебра.

Опыт обнаруживает, однако, что пучок «холодного» ( $l = 0$ ) водорода расщепляется не на одну и даже не на три, а на две компоненты. Этот неожиданный результат приводит к необходимости пересмотра положений, которые до сих пор мы использовали<sup>1</sup>.

Вспомним, каким образом были получены правила квантования для углового момента и затем рассчитана кратность вырождения уровней с определенным значением момента. Рассуждения проводились по общим правилам квантовой механики: в (2.28) мы подставили оператор проекции момента (2.25) и получили

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\psi = M_z\psi.$$

Решая это уравнение, мы выяснили, что волновая функция удовлетворяет необходимым условиям конечности, однозначности, непрерывности и гладкости при значениях  $M_z$  равных

$$M_z = \hbar m_l, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

Число возможных значений проекции углового момента  $\mathbf{l}$ , так же как и число проекций связанного с ним магнитного момента  $\boldsymbol{\mu}_l$ , определяется числом возможных значений магнитного квантового числа  $m_l$  при заданном значении  $l$  и равно  $2l + 1$ . Взаимодействие магнитного момента с магнитным полем приводит к тому, что в магнитном поле уровни энергии частицы с моментом импульса  $\mathbf{l}$  должны расщепляться на  $2l + 1$  подуровней. Никаких отступлений от общей схемы квантовомеханических расчетов не допускалось.

Расхождение результатов опыта с предсказаниями теории заставляет поэтому сделать один из трех возможных выводов:

- 1) неверна общая схема квантовой механики;
- 2) неверно записан оператор углового момента;
- 3) написанный оператор углового момента описывает не все возможные вращения; существуют вращения, требующие введения новых операторов.

Анализ этих выводов показывает, что для первых двух предположений нет никаких оснований. Третье предположение, наоборот, является вполне естественным, так как до сих пор мы рассматривали движение электрона (или любой другой частицы), не учитывая его возможного вращения вокруг собственной оси.

<sup>1</sup>Первые указания на необходимость такого пересмотра были получены при исследовании оптических спектров щелочных металлов.

Установление вида оператора собственного углового момента требует несколько иной, матричной, формулировки квантовой механики, так как этот оператор, в отличие от тех, которые рассматривались до сих пор, не является дифференциальным. Подробное рассмотрение этого вопроса лежит далеко за пределами курса и здесь проводиться не будет. Поскольку основные свойства собственного момента вытекают непосредственно из сравнения с экспериментом, вернемся к результатам опытов Штерна и Герлаха.

Как уже отмечалось, пучок невозбужденных атомов водорода в этих опытах расщеплялся на две компоненты. Это означает, что магнитный момент, наличие которого вызвало расщепление, имеет две проекции на направление магнитного поля и, следовательно, соответствующее квантовое число, которое мы обозначим через  $m_s$ , может принимать два значения. Далее мы знаем, что число возможных значений магнитного квантового числа на единицу превышает удвоенное квантовое число, характеризующее соответствующий механический момент. (Этот вывод справедлив для любого углового момента, в том числе и собственного.) Обозначим это квантовое число через  $s$ . Из равенства  $2s + 1 = 2$  получаем

$$s = 1/2. \quad (5.39)$$

Квантовое число  $s$  называется спиновым квантовым числом и описывает собственный, или спиновый, момент  $\mathbf{s}$  (или просто спин<sup>1</sup>).

Магнитное квантовое число  $m_s$  определяющее проекции спинового механического момента и спинового магнитного момента, как мы видели, имеет два значения. Так как  $m_{s \max} = s = 1/2$ , а  $m_{s \min} = -s = -1/2$ , то никаких других значений не существует, так что

$$m_s = \pm 1/2. \quad (5.40)$$

Спиновый угловой момент электрона и его проекция квантуются по обычным правилам:

$$s^2 = \hbar^2 s(s+1) = \frac{3}{4} \hbar^2, \quad (5.41)$$

$$s_z = \hbar m_s = \pm \frac{1}{2} \hbar. \quad (5.42)$$

При измерении величины  $s_z$  на опыте может быть найдено одно из двух возможных значений  $s_z$ . До измерения возможна любая их суперпозиция.

---

<sup>1</sup>Термин «спин» происходит от английского слова spin, означающего вращение вокруг собственной оси.

Следует предостеречь читателя от слишком буквального понимания термина «собственное вращение». При таком буквальном понимании приходится представлять себе, что отдельные части элементарных частиц движутся с одинаковыми угловыми, но разными линейными скоростями. Более того, частицы так малы (размер электрона до сих пор экспериментально определить не удалось, известно только, что он менее  $10^{-14}$  см), что окружные скорости, которые должны были бы иметь наружные части электрона при  $s_z = 1/2$ , превосходят скорость света. Таким образом, нерелятивистское рассмотрение спина невозможно. Релятивистская квантовая теория отличается от нерелятивистской, которой мы здесь занимаемся, многими новыми чертами. Так, оказалось, что логически стройная теория должна не только учитывать спины частиц, но и существование античастиц (античастицами электронов являются позитроны — частицы, имеющие ту же массу, что и электроны, и равный по величине, но противоположный по знаку заряд). Уравнение Дирака, заменяющее уравнение Шредингера в релятивистской квантовой механике, содержит четыре компоненты и одновременно описывает оба спинных состояния частицы и античастицы.

Здесь следует специально отметить, что, начиная с гл. 5, мы перестали пользоваться термином «момент импульса» и стали говорить только об «угловом моменте». Термин «момент импульса» широко применяется в классической физике и естественно связан с определяющими его формулами:  $\mathbf{L}$  равно  $[\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$  для одной частицы и сумме или интегралу от приведенного выражения для нескольких частиц или сплошного тела. Мы уже выяснили, что при переходе к спиновому моменту эта формула приводит к трудностям и термин «момент импульса» теряет буквальную применимость. Поэтому в квантовой физике обычно пользуются более нейтральным термином «угловой момент». Аналогичное выражение «angular momentum» принято в английской литературе.

Продолжим обсуждение результатов опыта Штерна и Герлаха с водородом. Зная  $\partial B_z / \partial z$ , Штерн и Герлах по величине расщепления рассчитали величину проекции спинового магнитного момента электрона  $\mu_s$  на направление магнитного поля. Она оказалась равной одному магнетону Бора. Этот результат также является неожиданным. В самом деле, для  $l_z$  и  $\mu_z$  мы имели (см. (5.33))

$$\mu_{l_z} = -\frac{e}{2mc} l_z = -\frac{e\hbar}{2mc} m_l = -\mu_B m_l.$$

Если бы связь между  $\mu_{s_z}$  и  $s_z$  была такой же, то следовало бы ожидать, что

$$\mu_{s_z} = -\frac{e}{2mc} s_z = -\frac{e}{2mc} m_s = \pm \frac{1}{2} \mu_B,$$

т. е. проекция спинового магнитного момента равнялась бы половине  $\mu_B$ . Но опыт дал для  $\mu_{s_z}$  величину, равную целому магнетону Бора. Следовательно, соотношение (5.33) неприменимо к спину и связанному с ним магнитному моменту. Из опыта следует, что между  $\mu_{s_z}$  и  $s_z$  осуществляется связь<sup>1</sup>

$$\frac{\mu_{s_z}}{s_z} = -2 \frac{e}{2mc},$$

так что

$$\mu_{s_z} = \pm \mu_B. \quad (5.43)$$

В заключение отметим, что «спиновое вращение» настолько существенно отличается от обычного, что появление новой связи между механическим и магнитным моментами не является удивительным.

## § 25. Магнитомеханические явления

После того как было установлено наличие спина у электрона, удалось объяснить непонятный ранее результат опытов Эйнштейна и де Газа (1915 г.), в которых впервые была экспериментально обнаружена связь между магнитным и механическим моментами<sup>2</sup>. В этих опытах образцы исследуемых парамагнитных и ферромагнитных веществ в виде небольших цилиндриков подвешивались на тончайшей кварцевой нити внутри соленоида (рис. 51). К цилиндрикам прикреплялось зеркальце. При пропускании тока через катушку соленоида цилиндрик намагничивался и при этом поворачивался. При изменении направления тока в катушке направление поворота изменялось на обратное. Поворот стержня обнаруживался с помощью луча, отраженного от зеркала.

Вращение подвешенного цилиндрика объясняется следующим образом. При наложении магнитного поля на парамагнетик энергия электронов с магнитным моментом, направленным по полю, оказывается ниже, чем энергия электронов, магнитный момент которых направлен против поля (см. (5.36)).

При столкновениях электронов с решеткой они чаще оказываются в более низком энергетическом состоянии, чем в более высоком. Таким образом, по полю оказывается ориентировано большее число электронов, чем против поля. Электроны приобретают некоторый суммарный магнитный, а следовательно, и суммарный механический моменты. Так как полный момент импульса свободного тела изменяться не может,

<sup>1</sup>При решении уравнения Дирака правильное соотношение между спиновым угловым моментом и соответствующим магнитным моментом возникает само по себе.

<sup>2</sup>На существование такой связи впервые указал Ричардсон (1908 г.).

парамагнитный цилиндр не только намагничивается, но и приобретает момент отдачи в сторону, противоположную вращению электронов. Так как наблюдаемый эффект для парамагнетиков оказывался очень малым, в опытах использовался резонанс: частота изменения тока в катушке была равна частоте собственных крутильных колебаний цилиндрика; при этом амплитуда существенно увеличивалась и делалась вполне доступной наблюдению.

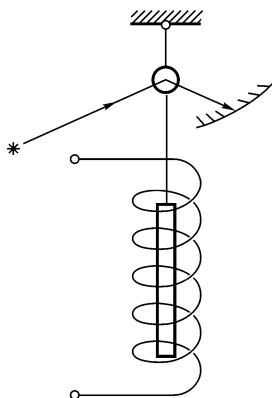


Рис. 51. Схема опыта Эйнштейна и де Гааза.

Существенно легче наблюдать вращение ферромагнитных образцов. По направлению возникающего углового момента можно было сделать заключение о том, что намагничивание действительно обусловлено движением отрицательных зарядов, т. е. электронов. Из опытов можно было вычислить и отношение магнитного момента  $\mu$  к механическому моменту  $M$ . При этом ожидалось, что в согласии с формулой (5.25) эксперименты дадут

$$\mu = -\frac{e}{2mc}M.$$

На опыте обнаружилось, что отношение моментов  $\mu/M$  в два раза больше ожидаемой величины. Этот результат показывает, что магнетизм связан не с орбитальным, а с собственным вращением, т. е. со спином электрона.

Квантовая электродинамика вносит небольшие поправки в указанное соотношение и показывает, что собственный магнитный момент электрона превосходит магнетон Бора приблизительно на 0,1%. Этот вывод прекрасно подтверждается экспериментом. Указанное различие носит название аномального магнитного момента электрона.

На опыте наблюдается также эффект, обратный эффекту Эйнштейна и де Гааза: при закручивании ферромагнитных стерженьков происходит их намагничивание. Этот эффект наблюдался впервые Барнетом и носит его имя.

## § 26. Полные угловой и магнитный моменты электрона

Полный момент импульса электрона обозначается  $\mathbf{j}$  и складывается из орбитального  $\mathbf{l}$  и спинового  $\mathbf{s}$  моментов:

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}. \quad (5.44)$$

Правила сложения моментов не зависят от того, являются ли моменты орбитальными или спиновыми. Поэтому квантовое число  $j$  (его иногда называют внутренним квантовым числом), определяющее полный угловой момент электрона, равно

$$j = |l \pm s| = |l \pm 1/2|. \quad (5.45)$$

При  $l \neq 0$   $j$  принимает два значения, при  $l = 0$   $j = 1/2$ ;  $\mathbf{j}$  и  $j$  связаны обычным соотношением:

$$\mathbf{j}^2 = \hbar^2 j(j + 1). \quad (5.46)$$

Проекция полного момента электрона на какое-нибудь направление (например, направление внешнего магнитного поля) квантуется по очевидному правилу

$$j_z = \hbar m_j, \quad (5.47)$$

где  $m_j = \pm j, \pm(j - 1), \pm(j - 2), \dots$  (всего  $2j + 1$  значений).

Сложение спинового и орбитального моментов электрона приводит к сложению соответствующих магнитных моментов. Строгое теоретическое рассмотрение этого вопроса сопряжено с серьезными математическими трудностями. Читателей, интересующихся этим вопросом, мы отсылаем к учебникам по квантовой механике. Здесь мы рассмотрим сложение магнитных моментов с помощью векторной модели.

На рис. 52 сплошными линиями изображены угловые моменты  $\mathbf{s}$ ,  $\mathbf{l}$  и суммарный момент  $\mathbf{j}$ ; за единицу длины этих векторов выбрана постоянная Планка  $\hbar$ . На том же рисунке изображены магнитные моменты  $\boldsymbol{\mu}_s$  и  $\boldsymbol{\mu}_l$ ; за единицу длины векторов магнитных моментов выбран магнетон Бора. При таком выборе единиц вектор  $\boldsymbol{\mu}_l$  имеет ту же длину, что вектор  $\mathbf{l}$ , а вектор  $\boldsymbol{\mu}$ , оказывается вдвое длиннее, чем  $\mathbf{s}$ . Суммарный вектор магнитного момента  $\boldsymbol{\mu}_{\text{сум}}$  поэтому не параллелен вектору  $\mathbf{j}$ . В центральном электрическом поле атома (как и во всяком центральном поле) вектор  $\mathbf{j}$  сохраняет модуль и направление. Векторы  $\mathbf{s}$  и  $\mathbf{l}$  направления не сохраняют из-за наличия магнитного взаимодействия. Вместе с тем модуль  $\mathbf{s}$  не меняется ( $s = 1/2$ ). Сохраняется и модуль вектора  $\mathbf{l}$ . Эта картина соответствует вращению векторов  $\mathbf{s}$  и  $\mathbf{l}$  вокруг суммарного вектора  $\mathbf{j}$ . Вместе с  $\mathbf{s}$  и  $\mathbf{l}$  вокруг  $\mathbf{j}$  вращаются  $\boldsymbol{\mu}_s$ ,  $\boldsymbol{\mu}_l$  и  $\boldsymbol{\mu}_{\text{сум}}$ . При таком вращении у вектора  $\boldsymbol{\mu}_{\text{сум}}$  будет сохраняться

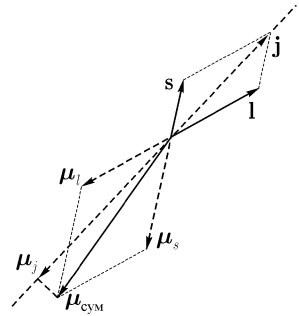


Рис. 52. Векторная модель сложения магнитных моментов.

только проекция  $\mu_j$  на направление вектора  $\mathbf{j}$ . Проекция, перпендикулярная к направлению  $\mathbf{j}$ , быстро вращается, ее среднее взаимодействие со внешними магнитными полями равно нулю, и среднее значение самой проекции также равно нулю. Таким образом, поведение электрона во внешних полях характеризуется проекцией суммарного магнитного момента на направление полного момента  $\mu_j$ .

Поскольку векторы  $\mathbf{j}$  и  $\mu_j$  параллельны друг другу, можно записать:

$$\mu_j = -g\mu_B\mathbf{j}. \quad (5.48)$$

Коэффициент пропорциональности  $g$  для частиц носит название *г* и *р* - *магнитного отношения*, а для атомных электронов называется фактором Ланде. Как нетрудно понять, гиромангнитное отношение равно отношению магнитного момента, выраженного в числе магнетонов Бора, к механическому моменту, выраженному в числе постоянных Планка.

Рассчитаем фактор Ланде с помощью векторной модели. Суммарный механический момент равен

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s},$$

а суммарный магнитный момент определяется формулой

$$-\mu_{\text{сум}} = \mu_B\mathbf{l} + 2\mu_B\mathbf{s}.$$

Проекция  $\mu_{\text{сум}}$  на  $\mathbf{j}$  равна

$$-\mu_j = \frac{-\mu_{\text{сум}}\mathbf{j}}{|\mathbf{j}|} = \mu_B \frac{\mathbf{l}\mathbf{j} + 2\mathbf{s}\mathbf{j}}{|\mathbf{j}|}.$$

Вектор  $\mu_j$  равен поэтому

$$-\mu_j = \frac{\mathbf{l}\mathbf{j} + 2\mathbf{s}\mathbf{j}}{j^2} \mu_B \mathbf{j} = g\mu_B \mathbf{j}.$$

Множитель Ланде  $g$ , следовательно, равен

$$g = \frac{1}{j^2}(\mathbf{l}\mathbf{j} + 2\mathbf{s}\mathbf{j}) = \frac{1}{j^2}[1(\mathbf{l} + \mathbf{s}) + 2\mathbf{s}(\mathbf{l} + \mathbf{s})] = \frac{l^2 + 2s^2 + 3\mathbf{s}\mathbf{l}}{j^2}.$$

Умножим это соотношение на  $j^2$ :

$$gj^2 = l^2 + 2s^2 + 3\mathbf{s}\mathbf{l}.$$



При переходе к квантовой механике  $\mathbf{j}^2$ ,  $\mathbf{l}^2$ ,  $\mathbf{s}^2$  и  $\mathbf{s}\mathbf{l}$  следует заменить их операторами (напоминаем, что фактор Ланде  $g$  — это просто число и в замене не нуждается):

$$\widehat{g\mathbf{j}^2} = \widehat{\mathbf{l}^2} + 2\widehat{\mathbf{s}^2} + 3(\widehat{\mathbf{s}\mathbf{l}}).$$

Найдем среднее значение  $g\mathbf{j}^2$ . Мы уже отмечали (см. (2.26')), что операторные равенства приводят к равенству средних величин. Поэтому

$$g\langle(\mathbf{j}^2)\rangle = \langle(\mathbf{l}^2)\rangle + 2\langle(\mathbf{s}^2)\rangle + 3\langle(\mathbf{s}\mathbf{l})\rangle.$$

Средние значения  $\mathbf{j}^2$ ,  $\mathbf{l}^2$  и  $\mathbf{s}^2$  нам известны: это  $j(j+1)$ ,  $l(l+1)$  и  $s(s+1)$ . Среднее значение  $\mathbf{s}\mathbf{l}$  можно вычислить следующим образом. В классической физике

$$\mathbf{j} = \mathbf{s} + \mathbf{l}.$$

Возведем это равенство в квадрат и выделим член  $2\mathbf{s}\mathbf{l}$  в левую часть:

$$2\mathbf{s}\mathbf{l} = \mathbf{j}^2 - \mathbf{s}^2 - \mathbf{l}^2.$$

Рассматривая это равенство как операторное и снова заменяя его равенством средних величин, найдем

$$\langle(\mathbf{s}\mathbf{l})\rangle = \frac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)].$$

Найденные выражения следует подставить в формулу для  $g$ . Подстановка дает

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}. \quad (5.49)$$

## § 27. Тонкая структура уровней атома водорода и водородоподобных атомов

Вернемся к атому водорода. Формула (5.12) для энергии уровней водорода и водородоподобных атомов была получена при решении уравнения Шредингера, т. е. нерелятивистского уравнения, не учитывающего спина электрона. Волновое уравнение, учитывающее релятивистскую зависимость массы от скорости и спин электрона, было предложено Дираком (1928 г.). Решением этого уравнения для уровней водородоподобных атомов является не (4.18), а несколько более сложная формула, так называемая формула тонкой структуры. Эта формула приведена

в конце параграфа, так как до ознакомления с нею полезно выяснить, каким образом спин электрона должен влиять на положение энергетических уровней атома. Качественные рассуждения, к которым мы сейчас переходим, справедливы для любых атомов, а не только для водородоподобных.

Рассмотрим электрон, у которого  $l \neq 0$ . С орбитальным механическим моментом связан магнитный момент и, следовательно, некоторое магнитное поле  $B_l$ . Проекция спина электрона на направление этого поля может, как мы уже знаем, принимать два значения, так как  $m_s = \pm 1/2$ . Таким образом, для электрона с  $l \neq 0$  возможны два состояния,  $j_1 = l + 1/2$  и  $j_2 = l - 1/2$ . Собственный (спиновый) магнитный момент электрона в этих состояниях по-разному взаимодействует с магнитным полем, которое возникает из-за орбитального движения (спин-орбитальное взаимодействие). Поэтому энергия этих двух состояний различна. Уровни энергии с неравным нулю значением  $l$  являются поэтому не одиночными, а двойными. Так как величина магнитного поля, создаваемого орбитальным движением электрона, зависит от  $l$ , то состояния с одинаковым главным квантовым числом  $n$ , но с различными значениями  $l$  и  $j$  обладают несколько разными энергиями. Расщепление уровней с данным  $n$  из-за магнитного взаимодействия спинового и орбитального движения электрона носит название тонкой структуры. «Тонкой» она называется потому, что расщепление уровней мало по сравнению с расстоянием между уровнями с различными  $n$ . Однако это расщепление отчетливо проявляется в оптических спектрах и хорошо изучено на опыте<sup>1</sup>.

На рис. 53 изображена схема спин-орбитального расщепления уровней с  $n = 2$ . Уровень с  $l = 0$  не расщепляется:  $s$ -состояния с  $m_s = \pm 1/2$  имеют одну и ту же энергию, так как «орбитальное магнитное поле» в этих случаях отсутствует. Для обозначения уровней с одинаковыми  $l$ , но с различной энергией используется классификация, учитывающая значение квантового числа  $j$ . Так, например,  $2p_{1/2}$  означает, что электрон находится в состоянии с  $n = 2$ ,  $l = 1$  и  $j = 1/2$ ; в состоянии  $2p_{3/2}$  электрон при тех же значениях  $n$  и  $l$  обладает  $j = 3/2$ .

В § 20, говоря о вырождении уровней, мы не учитывали спин-орбитального взаимодействия и связанного с ним расщепления и получи-

<sup>1</sup>Спин-орбитальное расщепление представляет собой не единственную причину сдвига атомных уровней. Во всех атомах, кроме водородоподобных (и, конечно, самого водорода), большую роль играет «экранирование» поля ядра полем других атомных электронов. Величина экранирования зависит от радиального положения электрона, а значит — при данном  $n$  — от величины  $l$  (напомним, что  $n = n_r + l$ ). У водородоподобных атомов имеется всего один электрон и экранирование отсутствует. Однако и в этом случае, кроме спин-орбитальной связи, следует учитывать релятивистские поправки, которые приводят к дополнительному сдвигу уровней.

ли, что кратность вырождения каждого уровня с данным  $n$  равна  $2n^2$ . Теперь мы видим, что такое глубокое вырождение имеет место лишь с точностью до спин-орбитального взаимодействия. Спин-орбитальное взаимодействие снимает вырождение по орбитальному моменту, так что уровни оказываются вырожденными только по значениям проекций полного углового момента. Уровень с квантовым числом  $j$  имеет кратность вырождения  $2j + 1$  в соответствии с числом различных значений  $m_j$ .

Тонкая структура атома водорода и водородоподобных атомов, как уже указывалось в начале параграфа, может быть рассчитана с помощью уравнения Дирака. Решение этого уравнения приводит к следующей формуле для энергии уровней водородоподобных атомов:

$$E = -R_1 Z^2 \frac{1}{n^2} - \frac{\alpha^2 R_1 Z^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (5.50)$$

С первым членом в этой формуле мы хорошо знакомы (см. выражение (5.12)), а второй член представляет собой добавку, обуславливающую тонкое расщепление уровней. В этот член входит квадрат постоянной тонкой структуры  $\alpha^2 = (e^2/\hbar c)^2 = (1/137)^2 \approx \approx 5 \cdot 10^{-5}$ ; малость этого множителя и определяет «тонкость» расщепления уровней, возникающего из-за спин-орбитального взаимодействия.

Из формулы (5.50) следует, что добавочный член зависит от  $l$  только через  $j$ , так что уровни с одинаковыми  $j$ , но разными  $l$  (например,  $3p_{3/2}$  и  $3d_{3/2}$ ) совпадают, тогда как из предыдущего текста следует, что эти уровни должны были бы различаться по энергии. Совпадение уровней с одинаковыми  $n$  и  $j$  при разных  $l$  возникает только у водорода и водородоподобных атомов. Причиной этого совпадения является частичная компенсация спин-орбитальной поправки и поправки, учитывающей релятивистскую зависимость массы электрона от скорости.

Экспериментальное исследование спектров водорода и водородоподобных атомов подтвердило справедливость (5.50). Из формулы видно, что тонкую структуру легче наблюдать у водородоподобных атомов, чем у водорода, так как во второй член входит  $Z^4$ . На рис. 54 изображена тонкая структура уровней иона гелия  $\text{He}^+$  с главными квантовыми числами 3 и 4. Если бы не было тонкой структуры, то между уровнями с  $n = 4$  и  $n = 3$  наблюдался бы один переход с испусканием фотонов с  $\lambda \approx 468,6$  нм. Из-за спин-орбитального расщепления вместо одного возникает много переходов; те из них, которые не запрещены правилами отбора (§ 33), обозначены на рисунке стрелками. Видно, что спектр  $\text{He}^+$

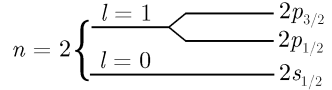


Рис. 53. Тонкая структура уровня с  $n = 2$  (в многоэлектронном атоме).

вблизи  $\lambda = 468,6$  нм состоит из многих линий; линии, соответствующие самым интенсивным переходам, обозначены на рисунке жирными стрелками.

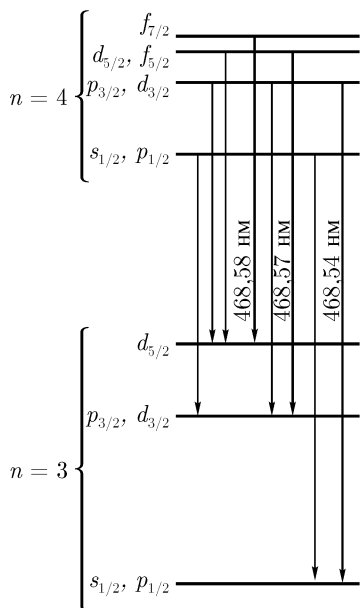


Рис. 54. Тонкая структура линии с  $\lambda = 468,6$  нм в спектре иона  $\text{He}^+$ .

В заключение отметим, что, кроме тонкой структуры, в спектре водорода, так же как и в спектрах многих других атомов, наблюдается также сверхтонкая структура; она возникает из-за взаимодействия магнитных моментов электронов со слабыми магнитными полями ядер и формулой (5.50) не описывается. Формула (5.50) не описывает также наблюдающегося на опыте очень слабого расщепления уровней с одинаковыми  $j$  у водородоподобных атомов (Лэмб и Ризерфорд, 1948 г.). Это расщепление объясняется взаимодействием электрона с флуктуациями электромагнитного поля. Подобно осциллятору электромагнитное поле в вакууме обладает некоторой нулевой энергией и поэтому всегда отлично от нуля. Взаимодействие электрона с этим «нулевым» полем зависит от пространственного распределения электрона и является причиной лэмбовского расщепления уровней. Теория этого эффекта хорошо разработана в квантовой электродинамике и находится в превосходном согласии с опытом.

## § 28. Строение атома по Бору

Построение основ квантовой механики, давшей ключ к пониманию явлений микромира, происходило в 20-е годы нашего столетия и сопровождалось отказом от привычных представлений классической физики. Наибольший вклад в создание новой физики внес Нильс Бор, впервые определивший, в чем состоят новые черты, отличающие микромир от макромира; его по праву называют отцом новой физики. Бору удалось выяснить особенности, которым должна удовлетворять еще не построенная к тому времени волновая механика; эти особенности были сформу-

лированы Бором в виде нескольких положений или, как часто говорят, постулатов. Создатели квантовой механики, Шредингер и Гейзенберг, строили теорию так, чтобы постулаты Бора получались в ней естественным образом.

Первоначально Бор представлял себе атом как систему, состоящую из атомного ядра и электронов, вращающихся вокруг него по круговым или эллиптическим орбитам подобно тому, как планеты обращаются вокруг Солнца. Согласно классической электродинамике такое вращение, как и всякое ускоренное движение, должно сопровождаться излучением. Потери энергии на излучение должны приводить к постепенному уменьшению вращательной энергии электрона и к его постепенному падению на ядро, чего на самом деле не происходит. Бор постулировал, что предоставленные сами себе атомы не излучают и находятся, таким образом, в стационарных (не меняющихся со временем) состояниях. Излучение или поглощение энергии происходит при переходе атома из одного стационарного состояния в другое (все атомные состояния, кроме состояния, обладающего наименьшей энергией, строго говоря, вполне стационарными не являются, поскольку атомы самопроизвольно переходят из них в состояния с меньшей энергией). Частота света, излучаемого атомами, связана с разностью энергий атома в стационарных состояниях соотношением  $\hbar\omega = E_2 - E_1$ , где  $E_2$  — энергия атома в начальном, а  $E_1$  — в конечном состояниях. Мы уже выяснили, что эти утверждения Бора являются верными.

Бор предложил также правило, позволяющее отбирать из множества допускаемых классической механикой орбит «правильные», осуществляющиеся на опыте орбиты. Он высказал утверждение, что могут существовать только такие орбиты, на которых момент импульса равен целому числу постоянных Планка  $\hbar$ . Мы знаем теперь, что утверждение о квантовании момента импульса является правильным, а представления об орбитах — неверными.

Мы видим, что Бор правильно предугадал важнейшие черты современной квантовой механики. Недостатком боровских представлений является их непоследовательность. На классическую физику накладывались дополнительные требования, которые не только не следуют из основных уравнений механики и электродинамики, но иногда прямо им противоречат (например, утверждение о том, что движущийся по круговой орбите электрон не излучает или что частота излучаемого света не равна частоте его обращения вокруг ядра). В то же время классические уравнения механики и электродинамики оставались и заменим им не предлагалось. Бор прекрасно понимал непоследовательность своей

теории и приветствовал построение новой, логически непротиворечивой науки — современной квантовой механики. Создатели квантовой механики были прямыми учениками Бора и всегда отмечали животворное влияние его идей. Что же касается самой теории Бора, то мы видим, что она основана на применении как правильных (постулаты Бора), так и неправильных (классические уравнения движения, представление об орбитах и т. д.) представлений. Соответствующие расчеты приводили поэтому то к верным, то к неверным результатам, причем никогда нельзя было знать заранее, какой результат окажется правильным, а какой ошибочным.

Рассмотрим в качестве примера водородоподобные атомы. Ограничимся состояниями, в которых электрон движется по круговым орбитам. Для движения по окружности в классической механике нужна центростремительная сила  $mv^2/r$ . Этой силой является сила кулоновского притяжения между электроном и ядром атома (с зарядом  $Ze$ ). Поэтому

$$\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}. \quad (5.51)$$

Угловой момент электрона при таком движении равен  $mvr$ . Приравняв его целому числу  $\hbar$ , найдем

$$mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.52)$$

Исключая с помощью этого равенства  $v$  из (5.51), найдем разрешенные значения для радиусов орбит:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{Ze^2m} n^2. \quad (5.53)$$

Разрешенные равенством (5.53) значения  $r_n$  носят название радиусов боровских орбит. Для водорода  $Z = 1$  и

$$r_n = \frac{\hbar^2}{e^2m} n^2 = a_1 n^2, \quad (5.54)$$

где  $a_1 = \hbar^2/e^2m$  — радиус первой боровской орбиты. Сравним  $a_1$  с  $r_{1 \max}$  — расстоянием, на котором вероятность найти электрон в невозбужденном атоме водорода оказывается максимальной. Согласно (4.27)  $r_{1 \max} = \lambda_e/\alpha$ ; принимая во внимание, что  $\lambda_e = \hbar/mc$ , а  $\alpha = e^2/\hbar c$ , получаем

$$a_1 = r_{1 \max} = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см.}$$

Согласно (5.54) радиусы боровских орбит в возбужденных атомах водорода вычисляются через боровский радиус  $a_1$  следующим образом:

$$a_n = a_1 n^2.$$

Таким образом, согласно теории Бора в атоме водорода, находящемся в первом возбужденном состоянии, электрон должен двигаться по орбите с радиусом  $a_2 = 4a_1$ .

Вернемся к рис. 35, на котором изображен график функции  $r^2 |\psi_2(r)|^2$ , характеризующей вероятность найти электрон в состоянии с  $n = 2$  на расстоянии  $r$  от ядра. Эта функция имеет довольно сложный вид, и значение  $r_{2 \max}$ , при котором вероятность оказывается максимальной, лишь приблизительно равна  $a_2 = 4a_1$ . Приближенное равенство  $a_n$  и  $r_{n \max}$  наблюдается и для следующих возбужденных состояний атома водорода. Термином «боровская орбита» гораздо удобнее пользоваться, чем точным, но длинным наименованием  $r_{n \max}$ ; поэтому это название сохранилось в науке.

Найдем теперь полную энергию электрона, движущегося по боровской орбите. Эта энергия складывается из потенциальной энергии

$$U = -\frac{Ze^2}{r} = -\frac{Ze^2 \cdot Ze^2 m}{\hbar^2 n^2} = -\frac{Z^2 e^4 m}{\hbar^2 n^2}$$

и кинетической энергии

$$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{(mvr)^2}{mr^2} = \frac{1}{2} \frac{(n\hbar)^2}{m} \left( \frac{Ze^2 m}{\hbar^2 n^2} \right)^2 = \frac{1}{2} \frac{Z^2 e^4 m}{\hbar^2 n^2}.$$

Полная энергия электрона равна таким образом,

$$E = T + U = -\frac{1}{2} \frac{mZ^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (5.55)$$

Сравнив это выражение с (4.18), убеждаемся в том, что формула для энергии уровней найдена правильно. Заметим, однако, что  $n$  в (5.55), как это следует из (5.52), определяет момента импульса. При точном квантовомеханическом решении задачи мы выяснили, однако, что все значения энергии, определяемые (5.55), возможны и при нулевом значении момента. Нулевые значения момента по (5.52) вообще невозможны, так как требуют либо нулевого значения радиуса, либо нулевой скорости. Как то, так и другое предположение несовместимо с (5.51). Расчет

по теории Бора всех других атомов (не водородоподобных) приводит к неверным результатам.

Рассмотренный пример является хорошей иллюстрацией того, как представления Бора приводят к смешению верных и ошибочных результатов.

В заключение еще раз отметим, что в 20-е годы теория Бора имела огромное значение для развития правильных физических представлений. Сформулировав свои постулаты, Бор указал направление, в котором многие годы успешно развивается новая физика.



## ГЛАВА 6

# СТРУКТУРА И СПЕКТРЫ СЛОЖНЫХ АТОМОВ

При рассмотрении оптических спектров неводородоподобных атомов прежде всего бросается в глаза их сложность. Даже спектры гелия и лития очень богаты линиями, а число линий в спектрах тяжелых атомов иногда достигает нескольких десятков тысяч. В качестве примера на рис. 55 приведены спектры железа в области 370–400 нм (*а*) и углерода в области 240–330 нм (*б*). Спектры оказываются сложными, потому что сложными являются сами атомы.

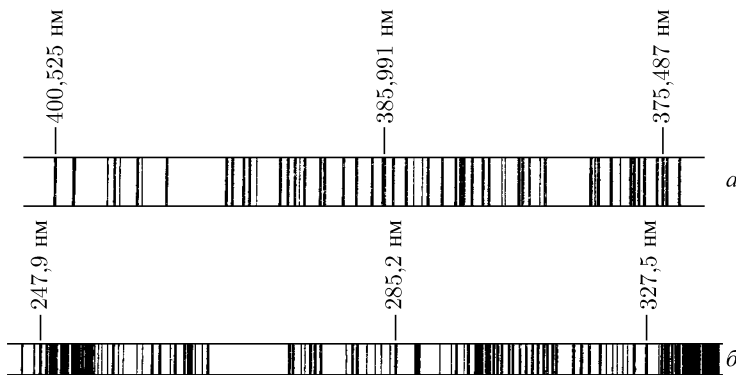


Рис. 55. Спектр железа в области 370–400 нм (*а*) и углерода в области 240–330 нм (*б*).

Ряд важнейших особенностей физики микромира был установлен при изучении спектров водорода и водородоподобных атомов. Изучение спектров более сложных атомов позволило выяснить ряд новых особенностей. Так, например, гипотеза о существовании спина у электрона была впервые выдвинута Уленбеком и Гаудсмитом (1925 г.) для объяснения тонкой структуры спектров щелочных металлов (§ 33); сверхтонкая

структура, впервые наблюденная в спектрах щелочных металлов Терениным и Добрецовым (1928 г.), явилась указанием на то, что и у атомных ядер есть магнитный и механический моменты (подробнее см. гл. 14); анализ экспериментальных данных, полученных при изучении спектров атомов с несколькими электронами, позволил Паули (1925 г.) еще до создания квантовой механики установить важнейший принцип, управляющий поведением электронов, — принцип исключения, часто называемый просто принципом Паули (§ 31).

Теория атомов, содержащих больше чем один электрон, неизмеримо сложнее теории атомов с одним электроном. При написании уравнения Шредингера для таких атомов нужно учитывать не только взаимодействие электронов с ядром атома, но и взаимодействие электронов друг с другом. Дифференциальные уравнения, описывающие состояния многоэлектронных атомов, сложны и в общем виде не решаются. Напомним, что и в классической физике, где уравнения движения существенно проще, чем в квантовой механике, задача многих тел в общем виде решена быть не может. Для решения уравнений, описывающих сложные атомы, в квантовой механике созданы различные приближенные методы. Знакомство с этими методами выходит далеко за рамки этой книги. Однако для понимания структуры сложных атомов знание этих методов, как мы увидим, и не потребуется.

Каждый из электронов сложного атома движется в поле, которое получается от сложения поля ядра и поля остальных электронов. Без большой ошибки это поле можно считать центральным. Поэтому у электронов сохраняется угловой момент, и им можно приписать те же квантовые числа, что и электронам в водородоподобных атомах:  $n$ ,  $l$ ,  $j$ ,  $m_j$ .<sup>1</sup> Использование этих простых представлений, принципа Паули и некоторых эмпирических правил, определяющих порядок заполнения электронных оболочек в сложных атомах, позволяет качественно понять структуру сложных атомов и принцип построения периодической системы элементов, а также предсказать основные особенности оптических и рентгеновских спектров атомов.

## § 29. Структура электронных уровней в сложных атомах

В предыдущей главе мы выяснили, что в водородоподобных атомах с точностью до спин-орбитального взаимодействия и релятивистских по-

---

<sup>1</sup>Выбор квантовых чисел, вообще говоря, неоднозначен — их число равно числу степеней свободы рассматриваемой квантовой системы. На каждый электрон приходится четыре степени свободы — три пространственных и одна внутренняя (направление спина).

правок все уровни с одним и тем же значением  $n$ , но различными  $l$  вырождены, т. е. имеют одну и ту же энергию. Мы отмечали также, что вырождение по  $l$  является «случайным» и возникает по той причине, что в водородоподобных атомах электроны находятся в кулоновском поле, потенциал которого падает как  $1/r$ . В сложных атомах поля, в которых движутся электроны, остаются почти центральными, но отнюдь не следуют закону  $1/r$ , так что вырождение уровней по угловому моменту в этих атомах отсутствует. Таким образом, в сложных атомах уровни с одним и тем же значением  $n$ , но с разными значениями  $l$  обладают существенно различной энергией.

Рассмотрим волновые функции электронов с различными  $l$  при одном и том же значении  $n$ . На рис. 56 изображены графики квадрата волновой функции  $|\psi|^2$  (пунктир) и плотности вероятности нахождения в шаровом слое  $|\psi|^2 r^2$  (сплошная линия) в водородоподобном атоме для  $2s$ - и  $2p$ -состояний. Потенциал электрического поля многоэлектронных атомов падает существенно быстрее, чем  $1/r$ , так как при увеличении радиуса все больший вклад в электрическое поле начинают вносить близко расположенные к ядру электроны; таким образом, поле ядра при больших  $r$  экранируется. Основная доля энергии взаимодействия электрона с ядром связана поэтому с той частью волновой функции, которая располагается при малых  $r$ .

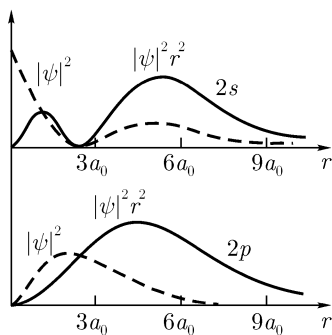


Рис. 56. Пространственное распределение  $2s$ - и  $2p$ -электронов.

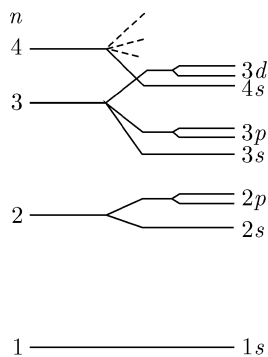


Рис. 57. Схема расщепления уровней в сложных атомах.

Из рис. 56 видно, что у  $s$ -электронов эта часть существенно больше, чем у электронов в  $p$ -состоянии. Поэтому связь с ядром у  $s$ -электронов оказывается более сильной, чем у  $p$ -электронов, у  $p$ -электронов —

более сильной, чем у  $d$ -электронов, и т. д. При одинаковых  $n$  уровни лежат тем глубже, чем меньше  $l$ . Например, энергия уровня  $3s$  в атоме натрия — 5,12 эВ, а энергия уровня  $3p$  — 3,02 эВ. Чем больше электронов в атоме, тем сильнее сказывается экранирование и тем значительнее расщепление уровней с разными  $l$ . В тяжелых атомах расщепление уровней с разными  $l$  так велико, что при некоторых  $n$  уровни с большими значениями  $l$  расположены выше  $s$ -уровней с главным квантовым числом, равным  $n + 1$ . Уровни с различными  $n$  при этом «перепутываются» (рис. 57).

Наличие спин-орбитального взаимодействия (§ 27) приводит к дополнительному, «тонкому» расщеплению электронных уровней с одинаковыми значениями  $n$  и  $l$ , но с разной ориентацией спинового момента  $s$  по отношению к орбитальному моменту  $l$  (или, что то же самое, с разными значениями  $j$ ). Так как при  $s = 1/2$  возможны только две ориентации  $s$ , то каждый уровень с  $l \neq 0$  является дублетным<sup>1</sup>, например уровень  $3p$  является совокупностью двух подуровней:  $3p_{1/2}$  и  $3p_{3/2}$ . В атоме натрия расстояние между этими подуровнями составляет всего  $2 \cdot 10^{-3}$  эВ, т. е. существенно меньше расстояния между уровнями  $3s$  и  $3p$ . Однако из формулы (5.50) видно, что энергия спин-орбитального взаимодействия с увеличением атомного номера растет как  $Z^4$ ; поэтому в тяжелых атомах спин-орбитальное расщепление оказывает существенное влияние на положение уровней. Так же как и в водородоподобных атомах, в сложных атомах в отсутствие внешних магнитных полей сохраняется вырождение уровней по проекциям полного углового момента.

Чтобы задать структуру сложного атома, следует перечислить состояния всех его электронов. Если в каком-нибудь состоянии с данным значением  $n$ ,  $l$  и  $j$  находятся несколько электронов, то запись можно упростить. Например, в невозбужденном атоме гелия оба электрона находятся в состоянии  $1s_{1/2}$ ; поэтому вместо записи  $1s_{1/2}$ ,  $1s_{1/2}$  часто пишут  $[1s_{1/2}]^2$  или  $1s_{1/2}^2$ .

### § 30. Типы связи электронов в атомах

Во многих случаях подробная характеристика структуры атома не требуется, но представляет интерес значение полного углового момента электронной оболочки атома. Этот момент (иногда будем называть его просто полным моментом атома) складывается из спиновых и орбитальных моментов всех его электронов. Опыт показывает, что в легких

<sup>1</sup>В водородоподобных атомах уровни с различными  $l$ , но одинаковыми  $j$  по случайным причинам совпадают (§ 27).

и средних атомах, где спин-орбитальное взаимодействие сравнительно невелико, орбитальные моменты отдельных электронов складываются в суммарный орбитальный момент атома  $\mathbf{L}$ , а спиновые моменты — в суммарный спиновый момент  $\mathbf{S}$ :

$$\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 + \mathbf{l}_3 + \dots, \quad \mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3 + \dots \quad (6.1)$$

Полный момент  $\mathbf{J}$  является суммой  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{S}$ :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \quad (6.2)$$

Моментам  $\mathbf{L}$ ,  $\mathbf{S}$  и  $\mathbf{J}$  соответствуют квантовые числа  $L$ ,  $S$  и  $J$ . Очевидно, что при четном числе электронов в атоме  $S$  и  $J$  являются целыми числами, а при нечетном числе электронов — полуцелыми.

В тех случаях, когда полный угловой момент атома получается по правилам (6.1) и (6.2), говорят о нормальной связи электронов в атоме, или о связи Рессела–Саундерса. В этих случаях константами движения являются не только полный угловой момент атома  $\mathbf{J}$ , но также квантовые числа  $L$  и  $S$ <sup>1</sup>.

Для указания состояния атомов используются принятые в спектроскопии обозначения, аналогичные обозначениям, применяемым для отдельных электронов (§ 20). В зависимости от значения орбитального квантового числа  $L$ , состояния обозначаются прописными буквами:

Значение квантового числа $L$	0	1	2	3
Обозначение состояния	$S$	$P$	$D$	$F$

и далее по алфавиту. Справа внизу указывается значение квантового числа  $J$ , а слева сверху — мультиплетность состояния, т. е. число, равное  $2S+1$ . Смысл этого числа заключается не только в том, что по нему можно определить  $S$ . В тех случаях, когда  $S \leq L$ , число  $2S+1$  равно количеству уровней, появляющихся из-за спин-орбитального взаимодействия, т. е. определяет мультиплетность состояния. Число  $2S+1$  называется мультиплетностью и в тех случаях, когда  $S > L$ , хотя число уровней тонкой структуры равно в этом случае  $2L+1$ , а не  $2S+1$ . Все  $S$ -состояния атомов, так же как и  $s$ -состояния отдельных электронов, являются синглетными. В качестве примера рассмотрим основное, т. е.

<sup>1</sup>При связи Рессела–Саундерса сохраняется вектор  $\mathbf{J}$ , абсолютные значения векторов  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{S}$  (квантовые числа  $L$  и  $S$ ) и проекции векторов  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{S}$  на вектор  $\mathbf{J}$ . При операциях с векторами углового момента большую пользу приносит векторная модель, помогающая понять и запомнить основные результаты. В рамках этой модели следует представлять себе, что векторы  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{S}$  могут вместе вращаться вокруг вектора  $\mathbf{J}$ .

обладающее наименьшей энергией, состояние атома углерода —  ${}^3P_0$ . Запись означает, что атом углерода в основном состоянии имеет  $L = 1$ ,  $S = 1$  и  $J = 0$ . Мультиплетность состояния равна 3, т. е. это состояние является одним из трех близких по энергии состояний с одинаковыми  $L$  и  $S$ , но различными  $J$ :  ${}^3P_0$ ,  ${}^3P_1$  и  ${}^3P_2$ .

Нормальная связь электронов в атомах не является единственно возможной. В тяжелых атомах из-за сильного спин-орбитального взаимодействия полный угловой момент атома складывается из полных угловых моментов отдельных электронов:

$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^n \mathbf{j}_i, \quad \mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i.$$

Такая связь электронов в атомах называется  $j - j$ -связью. В чистом виде эта связь почти никогда не осуществляется на практике, и у тяжелых атомов используется символика, принятая для рессел-саундеровской связи.

### § 31. Принцип Паули (принцип исключения)

В начале этой главы мы выяснили, что электроны могут находиться в различных состояниях, описываемых разными наборами квантовых чисел, например,  $n$ ,  $l$ ,  $j$  и  $m_j$ . Рассмотрим невозбужденный атом. В каких состояниях находятся его электроны?

С точки зрения обычных представлений следовало бы ожидать, что все электроны атома, находящегося в невозбужденном (основном) состоянии, должны занимать уровень с наименьшей возможной энергией, т. е. наиболее глубокий уровень атома. Но опыт указывает на то, что это не так. Но мере увеличения  $Z$  происходит последовательное заполнение электронных уровней атомов. Чтобы объяснить такое заполнение уровней, Паули высказал гипотезу о том, что в *любом квантовом состоянии может находиться только один электрон*. Каждый следующий электрон невозбужденного атома должен поэтому занимать самый глубокий из еще не заполненных уровней. Всесторонняя проверка подтвердила справедливость гипотезы Паули.

Утверждение, что в одном и том же квантовом состоянии не может находиться более одного электрона, имеет всеобщую применимость и обычно называется *принципом исключения или принципом Паули*. Принцип Паули справедлив не только для электронов, находящихся в одном и том же атоме, но и для всех электронов во Вселенной. При этом следует помнить, что состояния электронов

могут отличаться как по энергии, так и по пространственному распределению.

Исследуем математическую сущность принципа Паули. Возьмем систему, состоящую из двух электронов, находящихся в некотором силовом поле. Координаты первого электрона отметим индексом 1, а координаты второго — индексом 2. Пусть первый электрон находится в квантовом состоянии I, которое описывается волновой функцией  $\psi_I(x_1, y_1, z_1)$ , а второй электрон — в квантовом состоянии II с волновой функцией  $\psi_{II}(x_2, y_2, z_2)$ . Поскольку по предположению в состоянии I находится первый электрон,  $\psi_I(x_1, y_1, z_1)$  есть амплитуда вероятности найти этот электрон в окрестности точки  $(x_1, y_1, z_1)$ ;  $\psi_I$  в этом случае является функцией координат первого электрона. Аналогичным образом функция  $\psi_{II}(x_2, y_2, z_2)$  — амплитуда вероятности найти второй электрон в окрестности точки  $(x_2, y_2, z_2)$  — является функцией координат второго электрона.

Рассмотрим теперь распределение *о б о* х электронов. Оно описывается функцией, зависящей от координат как первого, так и второго электронов, т. е. от шести координат  $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2$ . «Выключим» для простоты силы, действующие между электронами. Если бы электроны не подчинялись принципу Паули, их движение в отсутствие взаимодействия было бы независимым. В теории вероятностей показывается, что вероятность события, представляющего собой совпадение двух независимых событий, равна произведению вероятностей обоих событий. В нашем случае в качестве таких событий следует рассматривать нахождение первого электрона в окрестности точки I и второго электрона — в окрестности точки 2. Поэтому следовало бы ожидать, что амплитуда вероятности, описывающая поведение электронов, имеет вид

$$\Psi_{1,2} = \psi_I(x_1, y_1, z_1)\psi_{II}(x_2, y_2, z_2). \quad (6.4)$$

Легко видеть, что такая запись находится в противоречии с представлениями квантовой механики. В самом деле, написанная формула утверждает, что функция  $\psi_I$  описывает распределение именно первого электрона, в то время как поведение второго электрона описывается функцией  $\psi_{II}$ . Иначе говоря, наша запись содержит в неявном виде предположение о том, что можно установить, какой из электронов является первым, а какой — вторым.

Мы уже знаем, что все электроны вполне тождественны, так что отличить их друг от друга по каким либо «внешним признакам» невозможно. Можно ли отличить их по начальному состоянию, например назвать первым электрон, который в некоторый момент времени находился в окрестности точки I, а вторым — тот, который в это время был около

точки 2? Сможем ли мы в дальнейшем установить, который из электронов является первым, а какой вторым? Легко видеть, что нет. В самом деле, положение каждого из электронов описывается  $\psi$ -функциями, размазанными, вообще говоря, по всему пространству. А так как электроны не имеют траекторий, то невозможно установить, какой из электронов пришел в ту точку, где он через какое-то время был обнаружен.

Таким образом, написанное выше выражение позволяет знать об электронах больше, чем может быть обнаружено на опыте, и уже поэтому не может быть правильным.

Существуют два способа записи амплитуды вероятности<sup>1</sup>, которые не обладают отмеченным недостатком:

$$\Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (1/\sqrt{2})[\psi_I(\mathbf{r}_1)\psi_{II}(\mathbf{r}_2) + \psi_{II}(\mathbf{r}_1)\psi_I(\mathbf{r}_2)], \quad (6.5)$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (1/\sqrt{2})[\psi_I(\mathbf{r}_1)\psi_{II}(\mathbf{r}_2) - \psi_{II}(\mathbf{r}_1)\psi_I(\mathbf{r}_2)]. \quad (6.6)$$

В этих формулах  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$  обозначают совокупности трех координат  $x_1, y_1, z_1$  и  $x_2, y_2, z_2$  соответственно. Каждое из этих выражений состоит из двух членов. Первый член описывает состояние, когда в состоянии I находится первый электрон, а в состоянии II — второй электрон, а второй член — состояние, когда в состоянии I находится второй электрон, а в состоянии II — первый. Поскольку эти состояния теперь смешаны, узнать, где находится какой электрон, невозможно.

Обратим внимание на важную особенность функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , определенных (6.5) и (6.6). Назовем первый электрон вторым, а второй — первым. От такого переименования электронов, конечно, ничего измениться не должно. Легко видеть, однако, что при переименовании электронов функция  $\Psi_1$  совсем не изменяется, а функция  $\Psi_2$  меняет знак. Поскольку распределение частиц зависит от квадрата модуля  $\psi$ -функции, изменение знака функции ни на каких наблюдаемых на опыте явлениях обнаружено быть не может. Характер симметричной функции  $\Psi_1$  и антисимметричной функции  $\Psi_2$ , однако, существенно различен. Рассмотрим, например, случай, когда оба состояния  $\psi_I$  и  $\psi_{II}$  идентичны. Функция  $\Psi_2$  при этом тождественно обратится в нуль, в то время как с функцией  $\Psi_1$  ничего существенного не произойдет. Частицы, которые описываются антисимметричными функциями, не могут поэтому быть в одинаковом состоянии, в то время как частицы, которые описываются симметричными функциями, в одинаковых состояниях быть могут<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Множители  $1/\sqrt{2}$  вводятся в (6.5) и (6.6) для нормировки. Дальнейшее обсуждение этого вопроса отложим до § 52.

<sup>2</sup>Рассуждения, которые привели нас к необходимости описывать микрочастицы симметричными и антисимметричными функциями, проводились, для простоты, на примере взаимодействующих частиц. Полученный вывод является, однако, вполне общим.



Опыт показывает, что *электроны и все другие частицы, обладающие полужелым спином* (электроны, протоны, нейтроны и т. д.), *описываются антисимметричными волновыми функциями*. Мы показали, что частицы, описываемые антисимметричными волновыми функциями, не могут находиться в одном и том же состоянии. Существование принципа Паули для электронов является, таким образом, необходимым (но не единственным!) следствием более общего утверждения о том, что электроны описываются антисимметричными волновыми функциями.

Опыт показывает также, что световые кванты,  $\pi$ -мезоны и, вообще, *все частицы, обладающие целым спином, описываются симметричными волновыми функциями*. Такие частицы *принципу Паули не подчиняются*.

Частицы с полужелым спином, на которые распространяется принцип Паули, называются частицами Ферми – Дирака, или фермионами. Частицы с целым спином называются частицами Бозе – Эйнштейна, или бозонами. Разделение микрообъектов на ферми-частицы и бозе-частицы справедливо не только для элементарных частиц, но также и для сложных образований, например для атомных ядер и для самих атомов. Правило остается тем же: симметричными волновыми функциями описываются сложные частицы с целым спином, т. е. системы, состоящие из бозонов или четного числа фермионов. Если же число фермионов нечетно, то система описывается антисимметричной волновой функцией и подчиняется принципу Паули. Так,  $\alpha$ -частицы, состоящие из двух протонов (спин протона равен  $1/2$ ) и двух нейтронов (также обладающих спином  $1/2$ ), являются бозонами, и принцип Паули на них не распространяется, тогда как сами протоны и нейтроны принадлежат к числу фермионов и подчиняются принципу Паули.

На первый взгляд кажется, что необходимость симметризации (или антисимметризации) волновых функций должна приводить к невероятным трудностям. В самом деле, при решении любой задачи об электронах мы должны, строго говоря, найти волновые функции всех электронов во Вселенной, и из них составить полностью антисимметричную функцию, т. е. функцию, меняющую знак при перестановке любой пары электронов. Задача, действительно, фантастическая! К счастью, учет всех электронов вовсе не является необходимым. Простое математическое исследование показывает, что нет необходимости принимать во внимание электроны, волновые функции которых не перекрываются (или почти не перекрываются) с волновой функцией рассматриваемого электрона. Практическое правило заключается в том, что *волновая функция должна быть антисимметризована для всех электронов с заметно перекрывающимися  $\psi$ -функциями*. Поэтому вычисления, произведенные нами для атома водорода, применимы только для изолированных

атомов водорода и не годятся для молекул. В конденсированных веществах только электроны, принадлежащие внутренним оболочкам, могут рассматриваться как принадлежащие одному атому (гл. 11).

## § 32. Периодическая система элементов Д. И. Менделеева

Рассмотрим связь между строением электронной оболочки атомов и их местом в таблице элементов Д. И. Менделеева.

Для подсчета числа возможных состояний электронов можно пользоваться любым набором четырех независимых квантовых чисел, например числами  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  и  $m_s$ . Набор этих чисел определяет некоторое квантовое состояние. Согласно принципу Паули во всяком данном квантовом состоянии может находиться не более одного электрона. При заданном значении  $l$  в атоме существует  $2(2l+1)$  состояний с различными  $m_l$  и  $m_s$ .<sup>1</sup> Таким образом, независимо от значения  $n$ , в  $s$ -состоянии может находиться 2 электрона, в  $p$ -состоянии — 6 электронов, в  $d$ -состоянии — 10 электронов, и т. д.

При данном значении главного квантового числа  $n$ , как мы уже знаем, всего существует  $2n^2$  различных состояний. Все эти состояния образуют  $n$ -слой электронной оболочки атома. Слой может быть заполненным или незаполненным, в зависимости от того, все или не все состояния в нем заняты электронами. Слой с  $n = 1$  называется  $K$ -слоем, с  $n = 2$  —  $L$ -слоем, с  $n = 3$  —  $M$ -слоем и далее по алфавиту.

В  $K$ -слое ( $n = 1$ ) могут находиться только электроны с  $l = 0$ , т. е.  $s$ -электроны. В  $L$ -слое ( $n = 2$ ) могут находиться электроны с  $l = 0$  и  $l = 1$ ; эти электроны заполняют  $s$ - и  $p$ -оболочки этого слоя.  $M$ -слой ( $n = 2$ ) состоит из  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -оболочек, и т. д. Электроны с одними и теми же значениями  $n$  и  $l$  называются эквивалентными (табл. 3).

Рассмотрим строение электронных оболочек различных атомов. В атоме водорода имеется всего один электрон. В невозбужденном атоме электрон находится в состоянии с  $n = 1$ ,  $l = 0$ ,  $m_l = 0$ . Значение  $m_s$ , в данном случае несущественно. Таким образом, основным состоянием атома водорода является терм  $^2S_{1/2}$ .

Слово «терм» употребляется в физике в нескольких разных смыслах. Первоначально оно использовалось для обозначения волнового числа, характерного для данного состояния; волновое число испускаемой или поглощаемой атомом спектральной линии, как мы видели, является

<sup>1</sup>При данном значении  $l$  возможны  $2l+1$  различных значений  $m_l$ ; при каждом значении  $m_l$  возможны состояния с  $m_s = 1/2$  и  $m_s = -1/2$ .

Таблица 3. Электронные структуры атомов

Элемент	Ионизационный потенциал, В	Основное состояние	Распределение электронов по слоям и оболочкам												
			<i>K</i>	<i>L</i>		<i>M</i>			<i>N</i>						
			1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p					
<sub>1</sub> H	13,6	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	1												
<sub>2</sub> He	24,6	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	2												
<sub>3</sub> Li	5,4	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	2	1											
<sub>4</sub> Be	9,3	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	2	2											
<sub>5</sub> B	8,3	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	2	2	1										
<sub>6</sub> C	11,3	<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	2	2	2										
<sub>7</sub> N	14,6	<sup>4</sup> S <sub>3/2</sub>	2	2	3										
<sub>8</sub> O	13,6	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	2	2	4										
<sub>9</sub> F	17,4	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	2	2	5										
<sub>10</sub> Ne	21,6	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	2	2	6										
<sub>11</sub> Na	5,1	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	Конфигурация неона			1									
<sub>12</sub> Mg	7,6	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>				2									
<sub>13</sub> Al	6,0	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>				2	1								
<sub>14</sub> Si	8,2	<sup>3</sup> P <sub>0</sub>				2	2								
<sub>15</sub> P	10,9	<sup>4</sup> S <sub>3/2</sub>				2	3								
<sub>16</sub> S	10,4	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>				2	4								
<sub>17</sub> Cl	12,9	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>				2	5								
<sub>18</sub> Ar	15,8	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>				2	6								
<sub>19</sub> K	4,3	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>				Конфигурация аргона						1			
<sub>20</sub> Ca	6,1	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	2												
<sub>21</sub> Sc	6,7	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>										1		2	
<sub>22</sub> Ti	6,8	<sup>3</sup> F <sub>2</sub>										2		2	
<sub>23</sub> V	6,7	<sup>4</sup> F <sub>3/2</sub>										3		2	
<sub>24</sub> Cr	6,7	<sup>7</sup> S <sub>3</sub>										5		1	
<sub>25</sub> Mn	7,4	<sup>6</sup> S <sub>5/2</sub>										5		2	
<sub>26</sub> Fe	7,8	<sup>5</sup> D <sub>4</sub>										6		2	
<sub>27</sub> Co	7,8	<sup>4</sup> F <sub>9/2</sub>										7		2	
<sub>28</sub> Ni	7,6	<sup>3</sup> F <sub>4</sub>										8		2	
<sub>29</sub> Cu	7,7	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>										10		1	
<sub>30</sub> Zn	9,4	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>										10		2	
<sub>31</sub> Ga	6,0	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>										10	2	1	
<sub>32</sub> Ge	7,7	<sup>3</sup> P <sub>0</sub>										10	2	2	
<sub>33</sub> As	9,8	<sup>4</sup> S <sub>3/2</sub>										10	2	3	
<sub>34</sub> Se	9,7	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>										10	2	4	
<sub>35</sub> Br	11,8	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>										10	2	5	
<sub>36</sub> Kr	14,0	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>										10	2	6	

разностью двух чисел — двух термов, — характеризующих начальное и конечное состояния атома. Затем название «терм» стали применять также для энергии уровня  $E$  и для соответствующей частоты  $E/\hbar$ , поскольку энергия фотона и частота излучения тоже равны разности двух чисел, характерных для начального и конечного состояний. Таким образом, термы могут иметь размерность волнового числа [ $\text{см}^{-1}$ ], энергии [эВ] или частоты [ $\text{с}^{-1}$ ]. Словом «терм» принято называть и само состояние атома, например упомянутое выше состояние  ${}^2S_{1/2}$ .

Энергия ионизации атома водорода была рассчитана в гл. 4: она равна 13,6 эВ. Потенциал ионизации соответственно равен 13,6 В.

У атома гелия ( $Z = 2$ ) один электрон находится в состоянии с  $n = 1$ ,  $l = 0$ ,  $m_l = 0$  и  $m_s = 1/2$ , а второй электрон занимает состояние с теми же значениями  $n$ ,  $l$  и  $m_l$ , но с  $m_s = -1/2$ , так что спины у электронов направлены в противоположные стороны. Структура электронной оболочки гелия —  $[1s_{1/2}]^2$ . Направленные в разные стороны спины электронов при сложении дают нулевой спиновый угловой момент. Поэтому основным состоянием атома является состояние с  $L = 0$ ,  $S = 0$  и  $J = 0$ , т. е. состояние  ${}^1S_0$ . Потенциал ионизации атома гелия равен 24,6 В. Эта величина может быть найдена путем расчета, но расчетную формулу мы приводить не будем. Второй ионизационный потенциал, т. е. потенциал, соответствующий энергии, необходимой для удаления электрона из иона гелия  $\text{He}^+$ , может быть рассчитан по (4.18) и равен 54,4 В. Первый ионизационный потенциал меньше, чем второй, из-за электростатического отталкивания электронов. Однако он существенно выше первых ионизационных потенциалов всех других атомов. Поэтому гелий химически инертен и принадлежит к числу «благородных» газов. Его атомы не объединяются в молекулы и не вступают в соединения ни с какими элементами<sup>1</sup>.

Следующим элементом в таблице Менделеева является литий ( $Z = 3$ ). Первые два электрона в этом атоме находятся в состоянии  $1s_{1/2}$ , как и электроны в атоме гелия. Третий электрон не может занимать ни одного из этих состояний из-за принципа Паули. Ближайшим незанятым состоянием является состояние  $2s$ . Поэтому конфигурация электронной оболочки  ${}_s\text{Li}$  имеет вид  $1s_{1/2}^2 2s_{1/2}$ . Состояние атома в целом определяется состоянием третьего электрона, так как суммарные квантовые числа  $L$ ,  $S$  и  $J$  для заполненного  $K$ -слоя (как и для всех заполненных оболочек и слоев) равны нулю. Поэтому основным состоянием лития является состояние  $2^2S_{1/2}$ .<sup>2</sup> Энергию ионизации атома лития можно грубо

<sup>1</sup>Исключением являются соединения возбужденных атомов инертных атомов инертных газов с атомами галогенов.

<sup>2</sup>Для щелочных элементов, у которых сверх заполненной оболочки находится всего

оценить по (4.18), если положить  $Z = 1$  и  $n = 2$ . Расчет дает 3,4 эВ. Действительное значение энергии ионизации несколько выше (последний электрон находится на самом деле не в поле единичного точечного заряда, а в поле остова, состоящего из ядра с  $Z = 3$  и двух  $K$ -электронов) и составляет 5,4 эВ. Атомы лития химически чрезвычайно активны, так как образование положительных однозарядных ионов лития происходит с малой затратой энергии. В химических соединениях литий всегда оказывается одновалентным.

Рассмотрим атом бериллия ( $Z = 4$ ). В этом атоме два  $K$ -электрона повторяют конфигурацию гелия (но с большей энергией связи!) и два электрона находятся в состоянии  $2s_{1/2}$  с взаимно противоположным направлением спинов:  $1s_{1/2}^2 2s_{1/2}^2$ . Основным состоянием атома бериллия является состояние  $^1S_0$  ( $L = 0$ ,  $S = 0$ ,  $J = 0$ ). Первый и второй ионизационные потенциалы бериллия мало отличаются один от другого, так как оба «наружных» электрона находятся в состоянии  $n = 2$ . Потенциалы ионизации составляют около 9 В и превышают первый ионизационный потенциал лития из-за увеличения  $Z$ . В химических соединениях бериллий двухвалентен.

Перейдем к атому бора ( $Z = 5$ ). В атоме бериллия полностью заполнен  $K$ -слой, а в  $L$ -слое заполнена  $2s$ -оболочка. Поэтому в атоме бора пятый электрон занимает одно из состояний в  $2p$ -оболочке: состояние  $2p_{1/2}$ . Структура электронной оболочки бора имеет вид  $1s_{1/2}^2 2s_{1/2}^2 2p_{1/2}$ . Основным состоянием атома бора является состояние  $^2P_{1/2}$ . Несмотря на то что  $Z_B > Z_{Be}$ , ионизационный потенциал бора ниже, чем у бериллия, и составляет 8,3 В. Причиной этого понижения, как мы уже знаем, является экранирование ядра внутренними электронами атома. Как всегда, для электронов с более высокими  $l$  (в нашем случае для  $p$ -электронов) экранирование оказывается более существенным, чем для электронов с меньшими  $l$  (для  $s$ -электронов).

В оболочке  $2p$  имеется шесть различных состояний, и в следующем атоме — атоме углерода ( $Z = 6$ ) — заняты уже два  $2p$ -состояния. Принцип Паули требует, чтобы по крайней мере одно из двух квантовых чисел ( $m_l$  или  $m_s$ ) для этих двух состояний было различным. Но какие именно значения  $m_l$  и  $m_s$  имеют два  $p$ -электрона углерода, мы заранее сказать не можем, потому что схема заполнения электронных уровней, которой мы сейчас пользуемся, слишком груба — она не учитывает взаимодействия электронов в сложных атомах.

---

один электрон, в символической записи состояния всего атома удобно сохранять значение главного квантового числа этого электрона.

Предсказать конфигурацию электронной оболочки атома углерода в основном состоянии можно с помощью эмпирических правил Хунда. Согласно этим правилам *наименьшей энергией обладает состояние с наибольшим возможным значением  $S$  и с наибольшим возможным при таком  $S$  значением  $L$ . При этом квантовое число  $J$  равно  $|L - S|$ , если заполнено не более половины оболочки, и равно  $L + S$  в остальных случаях.* Таким образом, из всех разрешенных квантовой механикой значений  $J$  при заданных  $L$  и  $S$  согласно правилу Хунда в основных состояниях атомов реализуются только крайние значения<sup>1</sup>.

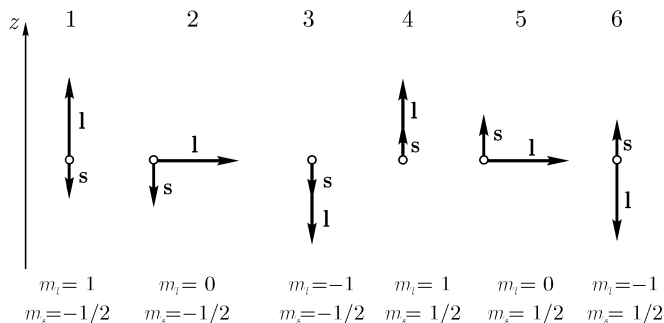
Применим правила Хунда к атому углерода. В атоме углерода заняты электронами только два из шести  $2p$ -состояний. Наибольшее значение суммарного спина достигается, если спины обоих электронов направлены в одну сторону, так что  $S = 1$ . Принцип Паули такого состояния не запрещает, поскольку квантовые состояния электронов могут отличаться направлением векторов  $\mathbf{l}$ . На рис. 58 схематически изображены шесть возможных состояний в  $p$ -оболочке. Первые три состояния отличаются от вторых трех направлением спина. Без ограничения общности можно считать, что оба спина направлены вверх, так что речь идет о последних трех состояниях. Если это не так, нужно перевернуть направление оси  $z$ . Из рис. 58 видно, что состояние с орбитальным моментом  $L = 2$  при этом не может быть получено, так как такое значение  $L$  возникает лишь в том случае, если орбитальные моменты обоих электронов направлены в одну сторону, что запрещено принципом Паули. Наибольшее возможное значение  $L$  равно единице. Применяя последнее из правил Хунда, найдем, что  $J$  должно быть равно нулю, поскольку  $2p$ -подоболочка у углерода заполнена менее чем наполовину. Основное состояние атома углерода является поэтому  ${}^3P_0$ -состоянием.

Пользуясь правилами Хунда и рис. 58, нетрудно сообразить, что основное состояние атома азота ( $Z = 7$ ) —  ${}^4S_{3/2}$ . В самом деле, в этом случае заняты все три  $2p$ -состояния со спином вверх, так что полный спин атома азота  $S = 3/2$ , а мультиплетность равна  $2 \cdot 3/2 + 1 = 4$ . Полный орбитальный момент равен нулю, так как складываются моменты электронов, имеющих все три возможные ориентации вектора  $\mathbf{l}$ .

Основным состоянием атома кислорода ( $Z = 8$ ) является состояние  ${}^3P_2$ . Четыре электрона  $2p$ -оболочки кислорода не могут обладать одним и тем же направлением спина. Один из них должен иметь противоположное направление. Поэтому полный спин равен  $(1/2) \cdot (3 - 1) = 1$ . Орбитальный момент трех электронов с одним направлением спина компенсируется. Остается момент четвер-

<sup>1</sup>Сформулированное выше правило Хунда определяет поведение электронов, принадлежащих к одной оболочке, т. е. эквивалентных электронов. У легких атомов электроны либо входят в состав заполненных оболочек и обладают нулевыми суммарными квантовыми числами, либо принадлежат к вновь заполняемой оболочке. При этом правила Хунда определяют суммарное состояние электронов не только заполняемой оболочки, но и всего атома.

В более тяжелых атомах могут иметься две незаполненные оболочки. В этом случае сначала по правилу Хунда определяются суммарные квантовые состояния электронов, принадлежащих каждой незаполненной оболочке, а затем рассчитываются квантовые числа всего атома. Для этого полученные квантовые числа вновь складываются с помощью правил Хунда.

Рис. 58. Схема возможных квантовых состояний  $p$ -электрона.

того электрона, равный единице. Вектор  $J = S + L = 1 + 1 = 2$ , и т. д. (табл. 3). Все восемь состояний (два  $2s$ -состояния и шесть  $2p$ -состояний) в  $L$ -слое заполнены у атома неона ( $Z = 10$ ). Из рис. 58 видно, что в заполненной  $2p$ -оболочке все угловые моменты взаимно компенсируются и у атома неона  $L = 0$ ,  $S = 0$  и  $J = 0$ . Основное состояние неона —  ${}^1S_0$ .

Основное состояние атомов с почти заполненными оболочками проще всего находить, исходя из состояния со вполне заполненной оболочкой. Так, чтобы найти основное состояние фтора ( $Z = 9$ ) с пятью электронами в  $2p$ -подоболочке, достаточно заметить, что для полного комплекта здесь не хватает одного электрона. Поскольку в заполненной подоболочке  $S = L = J = 0$ , квантовые числа  $S$  и  $L$  атома фтора равны квантовым числам недостающего электрона. Квантовое число  $J$  вычисляется из найденных  $S$  и  $L$  с помощью последнего правила Хунда. Это состояние поэтому является  ${}^2P_{3/2}$ -состоянием. Отсчитывая состояния от заполненной оболочки, указывают число свободных мест в ней, или, как принято говорить, число дырок в оболочке. Квантовые числа дырок равны квантовым числам электронов. Основное состояние фтора является состоянием с одной дыркой в  $2p$ -оболочке. У кислорода две дырки в этой оболочке. Квантовые числа  $S$  и  $L$  должны поэтому совпадать у бора и фтора, у углерода и кислорода — у атомов с одинаковыми количествами электронов или дырок. Квантовые числа  $J$  у этих атомов разные, поскольку у бора и углерода  $J = |L - S|$ , а у кислорода и фтора  $J = L + S$ .

По мере увеличения числа электронов на  $2p$ -оболочке первый ионизационный потенциал почти монотонно возрастает (табл. 3), и у атома неона он достигает 21,6 В. Высокое значение ионизационного потенциала (и малая энергия сродства к «лишнему» одиннадцатому электрону) обуславливает химическую инертность неона. Как и гелий, неон входит в число благородных газов. В нормальных физических условиях они находятся в газообразном состоянии. Их атомы не объединяются в молекулы и не вступают в химические реакции. [Это утверждение является точным только для атомов, находящихся в основ-

Таблица 4. Заполнение электронных оболочек

Период	Оболочка	
	1	2
1	1s	H He s s <sup>2</sup>
2	2s 2p	3 4 Li Be 5 6 7 8 9 10 s s <sup>2</sup> B C N O F Ne p p <sup>2</sup> p <sup>3</sup> p <sup>4</sup> p <sup>5</sup> p <sup>6</sup>
3	3s 3p	11 12 Na Mg 13 14 15 16 17 18 s s <sup>2</sup> Al Si P S Cl Ar p p <sup>2</sup> p <sup>3</sup> p <sup>4</sup> p <sup>5</sup> p <sup>6</sup>
4	4s 3d 4p	19 20 K Ca s s <sup>2</sup>  21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn d <sup>2</sup> d <sup>2</sup> s <sup>2</sup> d <sup>3</sup> s <sup>2</sup> d <sup>5</sup> s d <sup>5</sup> s <sup>2</sup> d <sup>6</sup> s <sup>2</sup> d <sup>7</sup> s <sup>2</sup> d <sup>8</sup> s <sup>2</sup> d <sup>10</sup> s d <sup>10</sup> s <sup>2</sup> 31 32 33 34 35 36 Ga Ge As Se Br Kr p p <sup>2</sup> p <sup>3</sup> p <sup>4</sup> p <sup>5</sup> p <sup>6</sup>
5	5s 4d 5p	37 38 Rb Sr s s <sup>2</sup>  39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd d <sup>2</sup> d <sup>2</sup> s <sup>2</sup> d <sup>3</sup> s <sup>2</sup> d <sup>5</sup> s d <sup>5</sup> s <sup>2</sup> d <sup>7</sup> s d <sup>8</sup> s d <sup>10</sup> d <sup>10</sup> s d <sup>10</sup> s <sup>2</sup> 49 50 51 52 53 54 Jn Sn Sb Te J Xe p p <sup>2</sup> p <sup>3</sup> p <sup>4</sup> p <sup>5</sup> p <sup>6</sup>
6	6s 4f 5d 6p	55 56 Cs Ba s s <sup>2</sup>  71 72 73 74 75 76 77 78 79 80 Lu Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg d <sup>2</sup> d <sup>2</sup> s <sup>2</sup> d <sup>3</sup> s <sup>2</sup> d <sup>4</sup> s <sup>2</sup> d <sup>5</sup> s <sup>2</sup> d <sup>6</sup> s <sup>2</sup> d <sup>7</sup> s <sup>2</sup> d <sup>9</sup> s d <sup>10</sup> s d <sup>10</sup> s <sup>2</sup> 81 82 83 84 85 86 Tl Pb Bi Po At Rn p p <sup>2</sup> p <sup>3</sup> p <sup>4</sup> p <sup>5</sup> p <sup>6</sup>
6	7s 5f 6d	87 88 Fr Ra s s <sup>2</sup>  103 104 Lr Ku d <sup>2</sup> d <sup>2</sup> s <sup>2</sup>



ном состоянии. Возбужденные атомы благородных газов могут входить в состав молекул («эксимеры»). Такие молекулы они образуют с атомами галогенов. Возбужденные молекулы благородных газов ( $\text{ArF}^*$ ,  $\text{XeCl}^*$  и др.) используются в так называемых аксиметрных лазерах, обладающих очень важным свойством — перестраиваемой частотой излучения. Принципу действия и устройству лазеров посвящена гл. 10.] Благородными газами, кроме  ${}^2\text{He}$  и  ${}^{10}\text{Ne}$ , являются все элементы, на которых заканчивается заполнение  $p$ -оболочки: аргон  ${}_{18}\text{Ar}$   $[3p]^6$ , криптон  ${}_{36}\text{Kr}$   $[4p]^6$ , ксенон  ${}_{54}\text{Xe}$   $[5p]^6$ , радон  ${}_{86}\text{Rn}$   $[6p]^6$ .

Перейдем к атомам, у которых начинает заполняться  $M$ -слой ( $n = 3$ ). В атоме натрия ( $Z = 11$ ) десять электронов образуют конфигурацию неона, а последний, одиннадцатый, электрон в невозбужденном атоме находится в  $3s$ -состоянии. Основное состояние атома совпадает с состоянием последнего электрона; это состояние —  $3^2S_{1/2}$ . Энергия связи электрона, находящегося в  $M$ -слое, существенно меньше, чем энергия связи электронов в  $L$ -слое при близких значениях  $Z$ . Поэтому первый потенциал ионизации у натрия мал (5,14 эВ). Атомы с электронными конфигурациями, аналогичными конфигурации натрия (заполнена  $p$ -оболочка и занято одно  $s$ -состояние в следующем слое), обладают очень низкими потенциалами ионизации и, следовательно, высокой химической активностью. К таким атомам, кроме натрия, относятся калий ( $Z = 19$ ), рубидий ( $Z = 37$ ), цезий ( $Z = 55$ ) и франций ( $Z = 87$ ). Все эти атомы вместе с литием входят в группу щелочных элементов. Сходство химических свойств атомов, положенное в основу построения периодической системы элементов, объясняется одинаковой структурой их внешних электронных оболочек.

Обратимся к табл. 3. У атома аргона ( $Z = 18$ ) полностью заполнены  $K$ - и  $L$ -слои, а в  $M$ -слое заполнены только  $3s$ - и  $3p$ -оболочки. В этом слое, однако, возможны и состояния с  $l = 2$ , т. е.  $3d$ -состояния. Естественно было бы ожидать, что в атоме калия с  $Z = 19$  начнет заполняться  $3d$ -оболочка. Однако на самом деле у калия, а затем и у кальция ( $Z = 20$ ) заполняется  $4s$ -оболочка, а  $3d$ -оболочка заполняется только начиная со скандия ( $Z = 21$ ). Причиной отступления от «правильного» порядка заполнения электронных оболочек является уже обсуждавшаяся экранировка ядра атома внутренними электронами.

57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
$ds^2$	$f^2s^2$	$f^3s^2$	$f^4s^2$	$f^5s^2$	$f^6s^2$	$f^7s^2$	$f^7ds^2$	$f^9s^2$	$f^{10}s^2$	$f^{11}s^2$	$f^{12}s^2$	$f^{13}s^2$	$f^{14}s^2$
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No
$ds^2$	$f^2s^2$	$f^2ds^2$	$f^3ds^2$	$f^4ds^2$	$f^6s^2$	$f^7s^2$	$f^7ds^2$	$f^9s^2$	$f^{10}s^2$	$f^{11}s^2$	$f^{12}s^2$	$f^{13}s^2$	$f^{14}s^2$

Для  $s$ -электронов экранировка оказывается наименее существенной. Волновые функции  $s$ -электронов имеют максимум в центре атома, поэтому  $s$ -электроны в среднем оказываются в более сильном поле, чем электроны с меньшими значениями  $n$ , но большими  $l$ ;  $s$ -уровни располагаются в таких случаях глубже, чем уровни одной или даже двух оболочек предыдущего слоя. С увеличением числа электронов в атоме влияние экранировки все сильнее сказывается на порядке заполнения уровней, что можно проследить по электронным конфигурациям, приведенным в табл. 3 и 4.

В табл. 4 указан порядок заполнения уровней для основных состояний всех атомов, включая курчатовий ( $Z = 104$ ). Атомы группируются в периоды, принятые в периодической системе элементов Д. И. Менделеева. Каждый период начинается с заполнения очередной  $s$ -оболочки, периоды со 2-го по 6-й заканчиваются заполнением  $p$ -оболочек.

Из табл. 4 видно, что во всех периодах с ростом  $Z$   $p$ -оболочки заполняются последовательно, а в заполнении  $d$ - и  $f$ -оболочек наблюдаются нерегулярности. Четырнадцать элементов от  ${}_{57}\text{La}$  до  ${}_{70}\text{Yb}$  называют лантаноидами; у этих элементов (за исключением самого лантана) последовательно заполняется  $4f$ -оболочка. Четырнадцать элементов от  ${}_{89}\text{Ac}$  до  ${}_{102}\text{No}$  составляют группу актиноидов; в атомах этих элементов с некоторыми нерегулярностями заполняется  $5f$ -оболочка. Наименее связанные (валентные) электроны этих атомов находятся на заполненной  $s$ -оболочке; энергия ионизации нормальных атомов лантаноидов близка к 6 эВ, для нормальных атомов актиноидов — к 4 эВ.

### § 33. Правила отбора при излучении атомов

В атомах, находящихся в основных состояниях, электроны занимают самые глубокие энергетические уровни. У возбужденных атомов один или несколько электронов находятся на более высоких уровнях, а часть нижних уровней остается незаполненной. При переходах электронов с верхних на нижние незанятые уровни освобождается энергия. Если эта энергия выделяется в виде электромагнитного излучения, наблюдаются оптические (при переходах внешних электронов) или рентгеновские (при переходах внутренних электронов) спектры. Исследование этих спектров является основным методом изучения атомов.

Опыт показывает, что наличие свободного места на одном из нижних уровней необходимо, но не достаточно для испускания кванта электромагнитного излучения. Электромагнитное излучение возникает, если квантовые характеристики атома до высвечивания и после высвечивания удовлетворяют так называемым правилам отбора, которые следуют из законов сохранения и в первую очередь из закона сохранения углового момента.

Правила отбора естественным образом получаются из математического аппарата квантовой механики. Для этого нужно исследовать вза-

имодействие атомов с электромагнитным полем, что требует серьезного расширения математического аппарата. Делать этого мы не будем. Происхождение и смысл правил отбора могут быть, однако, получены и без вычислений — с помощью простых качественных соображений.

Из классической оптики известно, что световые волны могут быть поляризованными. Поляризация света всегда является поперечной. В оптике показывается, что возможны две различные поляризации света. В качестве основных поляризационных состояний в классической физике обычно рассматривают две взаимно перпендикулярные линейные поляризации. Все другие поляризационные состояния могут рассматриваться как суперпозиции этих основных. Так, круговая поляризация может быть представлена в виде суперпозиции равных по амплитуде колебаний, сдвинутых по фазе на  $\pi/2$ ; при неравных амплитудах возникает эллиптическая поляризация и т. д. Такой выбор основных поляризационных состояний обусловлен экспериментальными причинами: обнаружение (и получение!) линейно поляризованного света проще, чем исследование света, например, с эллиптической поляризацией.

Как уже отмечалось, объективным свойством природы является *число* независимых компонент, необходимых для описания того или иного объекта (в нашем случае — две поляризационные компоненты), в то время как выбор тех или других компонент в качестве основных зависит от нашего произвола. В квантовой механике за исходные поляризации удобнее выбирать не линейные, а циркулярные — с вращением электрического вектора по или против часовой стрелки. При таком выборе основных компонент линейная поляризация представляется суперпозицией двух циркулярно поляризованных составляющих.

Рассмотрим циркулярно поляризованный свет, т. е. волну, у которой вектор **E** (равно как и вектор **H**) вращается по кругу. Вектор углового момента электромагнитного излучения направлен при этом по линии движения волны. У правовращающегося света он направлен по направлению движения фотона, а у левовращающегося — против этого направления. Переходя на язык квантовой механики, мы должны сказать, что у фотона есть спин, причем проекция спина на направление движения фотона может принимать два значения. На первый взгляд кажется, что спин фотона должен быть равен  $1/2$ , так как в этом случае существование двух (и только двух!) компонент поляризации получается автоматически. Легко видеть, однако, что это не так. Если бы спин фотона равнялся  $1/2$ , то при электромагнитном излучении угловой момент атома менялся бы на  $1/2$ , т. е. становился бы из целого полуцелым или наоборот. Но это невозможно, так как при испускании фотона число электронов в атоме не изменяется, а момент электронной оболочки атома является целым при четном числе электронов и полуцелым — при

нечетном. Спин фотона должен поэтому выражаться целым числом и заведомо не равен нулю. Более подробное исследование показывает, что *спин фотона равен единице*. У любой другой частицы при этом были бы возможны три проекции спина на направление движения:  $-1$ ,  $0$  и  $+1$ . *Поперечность световой волны выражается в том, что у фотона возможны не три, а только две проекции:  $-1$  и  $+1$*  (отсутствие компоненты с проекцией, равной нулю, называется на языке классической физики поперечностью волны).

В общем случае фотон может описываться любой суперпозицией состояний с проекциями  $-1$  и  $+1$ . В частности, при равном вкладе этих компонент (линейная поляризация) среднее значение проекции углового момента фотона на направление движения равно нулю. Такая суперпозиция, однако, отнюдь не равнозначна волне с нулевой проекцией спина. Если поставить опыт по измерению проекции спина фотона на направление движения, то наша волна, являющаяся суперпозицией волн с проекциями  $-1$  и  $+1$ , будет с равной вероятностью давать оба эти значения, в то время как волна с проекцией, равной нулю (если бы она могла существовать), всегда давала бы одно-единственное, нулевое значение проекции.

Рассмотрим теперь, насколько изменяется момент атома при испускании фотона. Это изменение равно моменту, уносимому фотоном, и, вообще говоря, складывается из двух частей: из спинового момента фотона и из орбитального момента, который появляется при нецентральной испускании кванта. Легко видеть, что «нецентральное испускание» в оптике практически невозможно. Действительно, чтобы такое испускание могло произойти, нужно, чтобы  $\psi$ -функция фотона в момент испускания была велика на одном краю атома и мала на другом краю. Такую  $\psi$ -функцию нужно составить из волн с частотами, по порядку величины равными частоте испускаемого света (частоты могут варьироваться в пределах ширины спектральной линии). Но оптическим частотам соответствует длина волны около  $5 \cdot 10^{-5}$  см, а размер атома по порядку величины равен  $10^{-8}$  см, т. е. в 5000 раз меньше. Ясно, что из световой волны нельзя скомпоновать  $\psi$ -функцию, сколько-нибудь заметно меняющуюся на атомных размерах. Поэтому фотоны, испускаемые атомами, уносят момент, равный спину фотона, т. е. единице. Это не значит, конечно, что испускание фотона с отличным от нуля орбитальным моментом вовсе невозможно, но такое испускание крайне мало вероятно. Возникающая здесь степень запрещения по порядку величины равна  $10^8$ , т. е. на 100 млн. атомов, испускающих фотон без орбитального момента, найдется всего один атом, испускающий квант «с края».

Развитые представления позволяют понять, какие переходы в оптике возможны, а какие невозможны, т. е. понять п р а в и л а о т б о -

ра при излучении. Пусть атом до испускания фотона не имел момента ( $J_{\text{нач}} = 0$ ). Закон сохранения, момента позволяет утверждать, что после излучения момент атома  $J_{\text{кон}}$  окажется равным единице. Аналогичным образом в конечное состояние с  $J_{\text{кон}} = 0$  атом может перейти только из состояния с  $J_{\text{нач}} = 1$ . Таким образом, если либо в начальном, либо в конечном состоянии  $J = 0$ , переход возможен в том и только в том случае, если при излучении момент  $J$  меняется на единицу:

$$\Delta J = 1.$$

В частности, невозможны так называемые  $0 - 0$ -переходы из состояния с  $J_{\text{нач}} = 0$  в состояние с  $J_{\text{кон}} = 0$ .

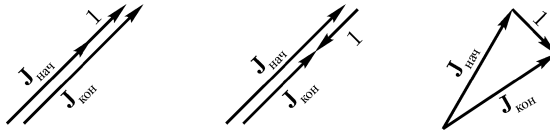


Рис. 59. Векторная модель сложения угловых моментов атома и фотона.

Рассмотрим теперь случай, когда  $J \neq 0$ . Как видно из рис. 59, при сложении единичного вектора с вектором  $\mathbf{J}$  длина последнего может измениться на единицу или не измениться вовсе (никакие другие изменения из-за квантования  $J$  невозможны). Таким образом, возникает следующее правило отбора при излучении:

$$\Delta J = \pm 1, 0 \text{ при } J_{\text{нач}} \neq 0, \quad J_{\text{кон}} \neq 0, \quad (6.7)$$

$$\Delta J = \pm 1 \quad \text{при } J_{\text{нач}} = 0 \text{ или } J_{\text{кон}} = 0. \quad (6.8)$$

Аналогичным образом для квантового числа  $m_J$  найдем

$$\Delta m_J = \pm 1, 0. \quad (6.9)$$

Рассмотрим теперь векторы  $\mathbf{S}$  и  $\mathbf{L}$ . Излучение света связано с электромагнитными свойствами электрона. Во взаимодействии с электромагнитной волной, вообще говоря, участвуют как заряд, так и магнитный момент атома. Испускание света возможно либо в результате изменения движения заряда (изменение  $\mathbf{L}$ ), либо в результате поворота собственного магнитного момента (изменение  $\mathbf{S}$ ), либо по обеим причинам сразу. Расчет показывает, что для электромагнитного излучения, лежащего в оптическом диапазоне, взаимодействие фотона с зарядом электрона

оказывается гораздо сильнее взаимодействия с магнитным моментом, так что можно считать, что излучение не связано с магнитным моментом. Орбитальный и спиновый угловые моменты по-разному сказываются на электрическом и магнитном моментах атома. Орбитальный угловой момент влияет как на первый, так и на второй, а направление спина — только на магнитный момент. Поэтому при испускании фотонов оптического диапазона вектор спина не претерпевает изменений, т. е.

$$\Delta S = 0. \quad (6.10)$$

Выведенные выше правила отбора по  $J$  и  $S$  определяют правило отбора по орбитальному квантовому числу и по его проекции:

$$\begin{aligned} \Delta L &= 0, \pm 1 & \text{при} & \quad L_{\text{нач}} \neq 0, & \quad L_{\text{кон}} \neq 0, \\ \Delta L &= \pm 1 & \text{при} & \quad L_{\text{нач}} = 0 & \text{или} & \quad L_{\text{кон}} = 0, \\ \Delta m_L &= 0, \pm 1. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Укажем в заключение, что переходы с  $\Delta L = 0$  невозможны для атомов, в которых испускание света связано с изменением движения всего одного электрона, в частности для всех переходов в атоме водорода и водородоподобных атомах, а также в атомах с одним электроном сверхзаполненных оболочек. Появление этого запрета связано не с угловым моментом (сохранение которого определяет все остальные правила отбора), а с законом сохранения четности волновой функции. Поскольку обсуждение этого вопроса выходит за рамки книги, указанное правило следует просто запомнить.

Здесь следует еще раз подчеркнуть, что все полученные правила отбора связаны со свойствами фотона и характерны лишь для электромагнитных<sup>1</sup> переходов. Если переход атома с уровня на уровень осуществляется не с помощью света, то правила отбора оказываются другими; часто они вовсе отсутствуют или сводятся к утверждению, что переходы с большим изменением момента мало вероятны. Подобная ситуация имеет место при возбуждении атомов электронным ударом в газовых разрядах, при тепловом возбуждении атома и т. д.

Скажем несколько слов о других способах, которые позволяют атомам избавиться от «лишней» энергии и перейти из возбужденного состояния в основное. Начнем с эффекта Оже<sup>2</sup>. Э ф ф е к т о м О ж е называется явление, при котором переходящий в нижнее состояние электрон не излучает энергию, а передает ее другому атомному электрону. Оже-переходы часто наблюдаются при заполнении свободных мест на внутренних

<sup>1</sup>Точнее — для дипольных электромагнитных переходов.

<sup>2</sup>П. Оже — французский физик, открывший и исследовавший этот эффект.

оболочках. Атомные переходы при этом сопровождаются выделением заметного количества энергии, достаточного для того, чтобы удалить из атома один из внешних электронов. Так как энергия свободных электронов не квантуется, удаляемые из атома электроны могут уносить любое количество энергии, в частности, всю энергию возбуждения атома.

Другим важным примером атомных переходов, происходящих без излучения, являются переходы при так называемых ударах второго рода. При обычных ударах кинетическая энергия сталкивающихся частиц частично расходуется на возбуждение атомов. При процессах второго рода один из сталкивающихся атомов (или оба) находится в возбужденном состоянии. При ударе эта энергия увеличивает кинетическую энергию разлета атомов. Такие переходы всегда возможны, но оказываются существенными лишь в тех случаях, когда обычные переходы с испусканием фотонов в сталкивающихся атомах запрещены правилами отбора, т.е. эти атомы (или один из них) находятся в метастабильном состоянии.

## § 34. Оптические спектры сложных атомов

Исследуем схему уровней и оптический спектр атомов гелия. Основным состоянием атома гелия является  $^1S_0$ -состояние; оба электрона находятся на уровне  $1s$ , а их спины согласно принципу Паули направлены в противоположные стороны. При возбуждении атомов один или оба электрона переходят на более высокие уровни. Мы ограничимся наиболее вероятными случаями, когда один из электронов остается на уровне  $1s$ , а другой переходит в одно из возможных возбужденных состояний; в таких случаях перед обозначением состояния атома часто пишут значение главного квантового числа возбужденного электрона. Если один из электронов атома гелия находится не на уровне  $1s$ , то его спин может быть ориентирован как антипараллельно, так и параллельно спину другого электрона.

Схема уровней атома гелия и наиболее вероятных переходов между ними изображена на рис. 60. На шкале слева указаны энергии уровней, а справа — энергии возбуждения. Энергия ионизации атома равна 24,47 эВ. Рассмотрим сначала уровни, соответствующие состояниям с антипараллельной ориентацией спинов электронов. Для этих уровней  $S = 0$  и мультиплетность  $2S + 1 = 1$ , т.е. уровни являются одиночными (синглетными). Схема этих уровней изображена в левой части рис. 60. Уровни с различными значениями квантового числа  $l$  у возбужденного электрона разнесены в отдельные столбики. Сбоку от уровней

проставлены значения главного квантового числа  $n$  для этого электрона. Для уровня  $1^1S_0$ , соответствующего основному состоянию атома, и для уровней  $2^1S_0$  и  $2^1P_1$  в скобках указаны состояния обоих электронов.

Кроме состояний, в которых спиновый момент атома гелия равен нулю, возможны состояния со спиновым моментом  $S = 1$  и мультиплетностью  $2S + 1 = 3$  (триплетные уровни). Уровни, соответствующие этим состояниям, изображены в правой части рис. 60. Самым нижним из этих состояний является состояние  $2^3S_1$  (для соответствующего уровня в скобке справа указаны состояния обоих электронов). Состояние  $1^3S_1$  запрещено принципом Паули. Уровень  $2^3S_1$  является одиночным, как и все  $S$ -уровни. Этот уровень расположен несколько ниже, чем уровень  $2^1S_0$ : энергия возбуждения для уровня  $2^1S_0$  равна 20,6 эВ, а для уровня  $2^3S_1$  — 19,8 эВ. Следующее состояние атома с  $S = 1$ , когда первый электрон остается на  $1s$ -уровне, а второй переходит на  $2p$ -уровень, состоит из трех близко расположенных уровней, так как при  $S = 1$  и  $L = 1$  вектор  $J$  может принимать три значения: 0, 1 и 2. Соответствующие уровни имеют несколько различную энергию и обозначаются  $2^3P_0$ ,  $2^3P_1$  и  $2^3P_2$ . Тройными являются также уровни  $3^3D_{3,2,1}$  и  $4^3F_{4,3,2}$ , однако их расщепление незначительно и на схеме не обозначено.

Рассмотрим теперь электромагнитные переходы между уровнями. При таких переходах для квантовых чисел  $J$  и  $S$  должны выполняться правила отбора (6.7), (6.8) и (6.10). Для орбитального квантового числа  $L$  должно выполняться правило отбора  $\Delta L = \pm 1$ , так как при рассматриваемых переходах изменяется состояние всего одного электрона. Переходы, не запрещенные этими правилами отбора изображены на рис. 60 стрелками. Линии, соответствующие этим переходам, действительно наблюдаются в спектре гелия. Экспериментальные значения длин волн этих линий обозначены вдоль стрелок.

Важной особенностью оптических переходов является их каскадный характер. Во многих случаях прямые переходы из возбужденного состояния в основное запрещены правилами отбора. Так, только один из уровней  $M$ -слоя ( $3^1P_1$ ) может «высветиться» сразу в основное состояние. Атомы, находящиеся в двух других состояниях ( $3^1S_0$  и  $3^1D_2$ ), могут переходить в основное лишь в «два прыжка». Если атом гелия, находящийся в одном из высоких возбужденных состояний (например, в состоянии  $3^1P_1$ ), после высвечивания оказывается в состоянии  $2^1S_0$ , то возвращение атома из этого состояния в основное путем испускания одного фотона оказывается невозможным<sup>1</sup>. Переход в основное состоя-

<sup>1</sup>Этот переход запрещен сразу двумя правилами отбора. Поскольку в начальном (и в конечном) состоянии атома  $J = 0$ , разрешены только переходы с  $\Delta J = 1$ , а в нашем случае  $\Delta J = 0$ . Кроме того, как и во всех одноэлектронных переходах, запрещены переходы с  $\Delta L \neq 1$ .



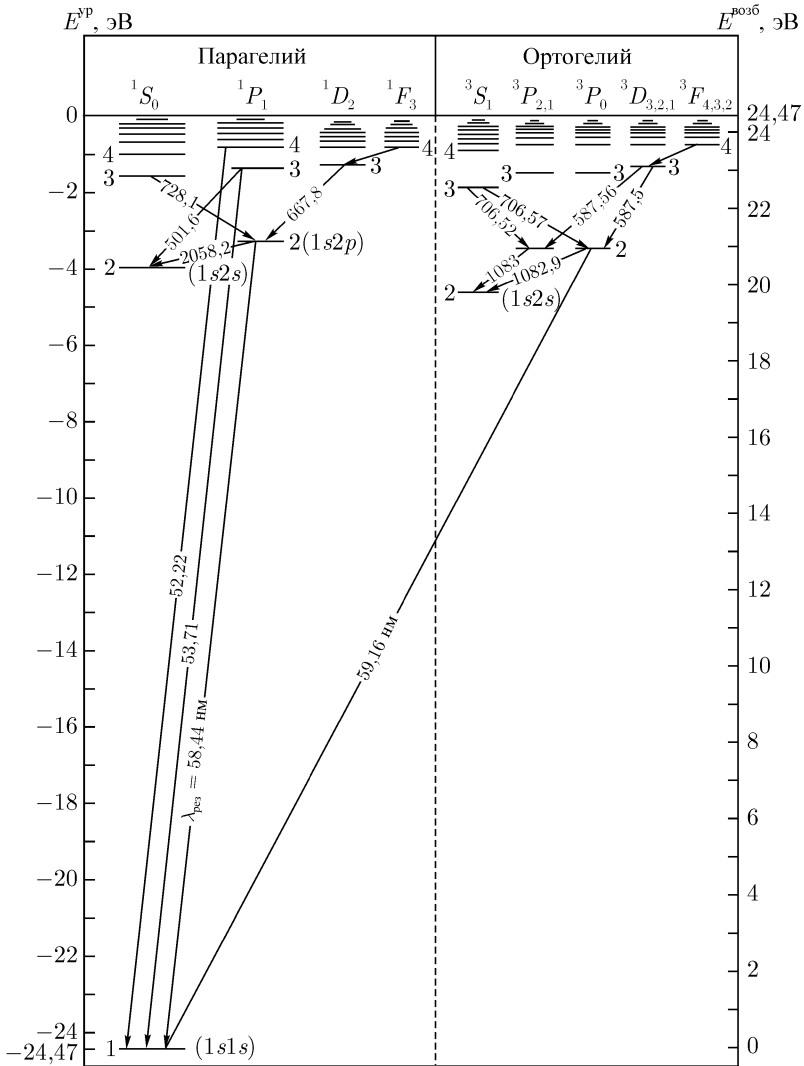


Рис. 60. Схема уровней в переходах в атоме гелия.

ние возможен только путем испускания двух фотонов одновременно или при столкновении атомов. Поэтому  $2^1S_0$ -состояние оказывается долгоживущим или, как говорят, м е т а с т а б и л ь н ы м.

Излучательные переходы между триплетными и синглетными уровнями запрещены правилом отбора по спиновому моменту и осуществляться не могут<sup>1</sup>. Спектры гелия распадаются поэтому на два семейства — на переходы между синглетными и переходы между триплетными уровнями.

Излучательные переходы между синглетными термами гелия образуют ту часть спектра, которая называется спектром п а р а г е л и я; линии спектра парагелия одиночные. Гелий в триплетных возбужденных состояниях называют о р т о г е л и е м; спектр ортогелия состоит из узких триплетов.

Нижнее триплетное состояние  $2^3S_1$  расположено значительно выше основного состояния  $1^1S_0$ , однако переход с испусканием фотонов между этими уровнями запрещен, и состояние  $2^3S_1$  также является метастабильным. В отличие от метастабильного уровня  $2^1S_0$  здесь невозможны и переходы с испусканием двух или нескольких фотонов. Переход из этого состояния в основное возможен только при ударах второго рода.

Отметим, что спектры ионов, у которых в атомной оболочке имеются всего два электрона ( $3\text{Li}^+$ ,  $4\text{Be}^{2+}$  и т. д.), сохраняют особенности спектра гелия. Наличие двух наборов термов (синглетных и триплетных) наблюдается также у многоэлектронных атомов с двумя валентными электронами (например, у атомов щелочноземельных элементов) и у сходных с ними ионов.

Перейдем теперь к атому лития. Основным состоянием атома лития является, как мы знаем, состояние  $2^2S_{1/2}(1s^22s)$ .  $2s$ -электрон связан с ядром гораздо слабее, чем  $1s$ -электроны, поэтому легче всего осуществляются переходы, связанные с возбуждением  $2s$ -электрона. Оптический спектр лития связан с переходами этого валентного электрона.

На рис. 61 изображена схема уровней атома лития. Так как при одноэлектронных переходах в атомах должно выполняться правило отбора  $\Delta L = \pm 1$ , то снова удобно раздвинуть уровни  $S$ ,  $P$  и т. д. в отдельные столбцы, как это и сделано на рисунке; при излучении могут осуществляться только переходы между уровнями соседних столбцов.

Как и во всех сложных атомах, уровни  $2S$  и  $2P$  у лития обладают различной энергией; различна энергия и уровней  $3S$ ,  $3P$  и  $3D$  и вообще у всех уровней с одинаковыми  $n$ , по разными  $L$ .  $S$ -уровни лития одиночные, а все остальные уровни из-за наличия спин-орбитальной связи мультиплетные. Так как спиновое квантовое число атома лития  $S = 1/2$ ,

<sup>1</sup>Исключением является лишь слабый «интеркомбинационный» переход с  $\lambda = 59,16$  нм.

то все эти уровни дублетные.  $P$ -уровни являются совокупностью  $P_{1/2}$ - и  $P_{3/2}$ -уровней.  $D$ -уровни состоят из  $D_{3/2}$ - и  $D_{5/2}$ -уровней, и т. д. У легких атомов спин-орбитальное взаимодействие невелико, поэтому тонкое расщепление уровней оказывается небольшим и на схеме уровней не отражено.

На рис. 61 стрелками изображены наиболее сильные переходы, не запрещенные правилами отбора  $\Delta L = \pm 1$ ,  $\Delta J = 0, \pm 1$ . Линии, соответствующие всем этим переходам, действительно наблюдаются в спектре лития. Из рисунка видно, что все линии сгруппированы в серии. Серия линий  $nP - 2S$  называется главной серией; линии этой серии легко наблюдаются не только в спектре испускания, но и в спектре поглощения лития. Экспериментальные значения длин волн линий этой серии обозначены на стрелках. Серия линий, соответствующая переходам между уровнями  $nS$  и  $2P$ , называется резкой, серия  $nD - 2P$  — д и ф у з н о й. Линии, возникающие при переходах  $4F - 3D$  и  $5F - 3D$ , относятся к ф у н д а м е н т а л ь н о й серии.

В нижней правой части рис. 61 изображено спин-орбитальное расщепление термина  $2P$  и связанное с ним расщепление резонансной линии, т. е. линии, соответствующей переходу между основным и нижним возбужденным состояниями. Как видно из рисунка, спин-орбитальное расщепление линии невелико ( $\Delta\lambda = 0,015$  нм), однако оно легко обнаруживается на опыте при исследовании оптического спектра лития спектрометром с высокой разрешающей способностью. Все остальные линии главной и других серий также не являются одиночными. На схеме переходов указаны лишь усредненные по мультиплетам длины волн. Следует отметить, что с ростом  $Z$  величина спин-орбитального расщепления уровней, а следовательно, и спектральных линий растет и у тяжелых атомов становится весьма значительной.

Схемы уровней других щелочных атомов, у которых, как и у лития, сверх заполненной  $p$ -оболочки находится только один  $s$ -электрон, очень похожи на схему уровней лития; разница заключается в том, что основным состоянием натрия ( $Z = 11$ ) является  $3S_{1/2}$ -состояние, основное состояние калия ( $Z = 19$ ) —  $4S_{1/2}$ , рубидия ( $Z = 37$ ) —  $5S_{1/2}$ , цезия ( $Z = 55$ ) —  $6S_{1/2}$  и франция ( $Z = 87$ ) —  $7S_{1/2}$ . Различны, конечно, и энергии уровней. Энергия ионизации этих атомов монотонно уменьшается с увеличением  $Z$ . Характер спектров полностью сохраняется. В спектрах всех щелочных элементов (и схожих с ними ионов) различают главную, резкую и другие серии. Особенно хорошо изучен оптический спектр натрия. Знаменитый резонансный «желтый дублет» натрия (рис. 62) явился первым экспериментальным указанием на существование у электрона собственного углового момента — спина.

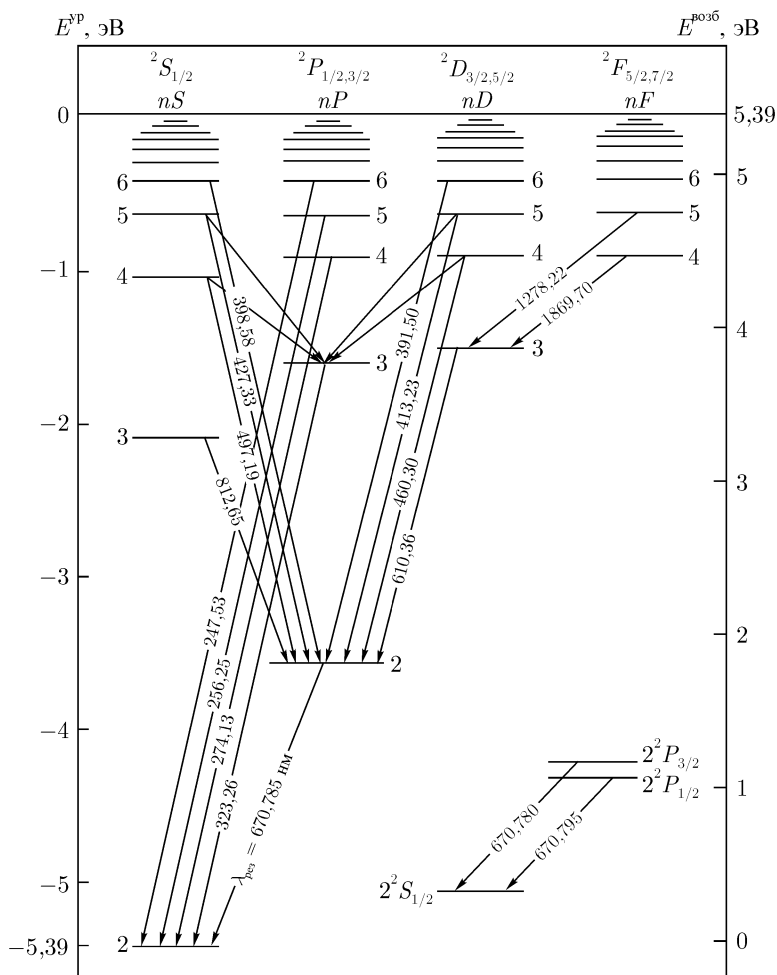


Рис. 61. Схема уровней и оптических переходов в атоме лития.  $S$ -уровни являются синглетными, а все остальные — дублетными. В нижней правой части рисунка без соблюдения масштаба показана структура  $2P$ -уровня и резонансной линии. Для всех остальных линий указано среднее значение длины волны мультиплета.

Строение атомов щелочных элементов (и сходных с ними ионов  $\text{Be}^+$ ,  $\text{Mg}^+$ ,  $\text{Ca}^+$  и т. д.) напоминает строение водородоподобных атомов. У водородоподобных атомов единственный электрон движется в центральном поле ядра, а в атомах щелочных элементов последний, слабо связанный с атомом электрон движется в поле «атомного остатка», состоящего из ядра и  $Z - 1$  электрона. Атомный остаток имеет структуру

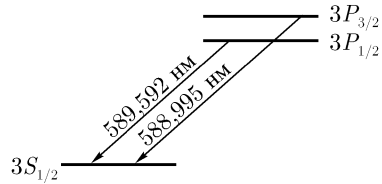


Рис. 62. Схема переходов, соответствующих желтому дублету натрия.

благородного газа и представляет собой очень устойчивое образование. Поэтому многие свойства атомов щелочных металлов похожи на свойства атома водорода. Но между атомами щелочных металлов и водородоподобными атомами имеется и существенное различие. В атоме водорода электрон движется в поле точечного заряда, в то время как «атомный остаток» щелочных металлов отнюдь не является точечным. Волновые функции валентного электрона в разных состояниях, как мы знаем, имеют различное пространственное распределение; поэтому энергия щелочных атомов зависит от орбитального квантового числа  $l$  валентного электрона. Для расчета энергии уровней; в щелочных металлах можно применять формулу

$$E_n = -R_1 Z_{\text{эфф}}^2 \frac{1}{(n - \Delta_l)^2}. \quad (6.12)$$

Формула (6.12) очень похожа на (5.12) для энергия водородоподобных атомов. Здесь, так же как и в (5.12),  $R_1 = me^4/2\hbar^2 = 13,6$  эВ, а  $n$  — главное квантовое число оптического (валентного) электрона.  $Z_{\text{эфф}}$  равно единице для щелочных атомов, двум для однозарядных ионов типа  ${}_4\text{Be}^+$ , трем для двухзарядных ионов таких, как  ${}_5\text{B}^{2+}$ , и т. д. Поправка к главному квантовому числу  $\Delta_l$ , называется к в а н т о в ы м д е ф е к т о м и учитывает зависимость энергии уровней от орбитального квантового числа. Тонкого расщепления уровней (6.12) не учитывает.

Формула (6.12) может быть использована для вычисления волновых чисел и длин волн спектральных линий атомов щелочных металлов и похожих на них ионов. При расчетах нужно знать значение поправки  $\Delta_l$ . Эти поправки могут быть рассчитаны или определены экспериментально. Значения  $\Delta_l$  для Li, Na, K, Rb и Cs приведены в табл. 5.

Таблица 5. Поправки  $\Delta_l$  для атомов щелочных металлов

$Z$	Элемент	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
3	Литий	0,412	0,041	0,002	0,000
11	Натрий	1,373	0,883	0,010	0,001
19	Калий	2,230	1,776	0,146	0,007
37	Рубидий	3,195	2,711	1,233	0,012
55	Цезий	4,131	3,649	2,448	0,022

Мы не будем продолжать разбор схем уровней и спектров других атомов, так как подробное рассмотрение этого вопроса составляет предмет специального раздела физики<sup>1</sup>.

## § 35. Рентгеновское излучение

**Характеристические рентгеновские спектры.** Под действием электронов или фотонов, обладающих большой энергией, из сложных атомов могут быть удалены (или переведены во внешние свободные оболочки) внутренние электроны атомов (рис. 63 *а*). На освободившиеся места переходят электроны с соседних оболочек. Эти переходы, так же как и переходы внешних, оптических электронов, сопровождаются испусканием фотонов (рис. 63 *б* и *в*). При переходах между внутренними оболочками атомов выделяется существенно бо́льшая энергия, чем при переходах между наружными оболочками. Фотоны, испускаемые при переходах электронов с одной внутренней оболочки атомов на другую, имеют энергию в сотни, тысячи, а у тяжелых атомов — даже в десятки тысяч раз большую, чем оптические фотоны. Это излучение называют **характеристическим рентгеновским излучением**.

Спектр характеристического излучения зависит от структуры уровней. Поэтому каждый элемент обладает своим собственным, присущим только ему спектром характеристического рентгеновского излучения. В отличие от оптических спектров, рентгеновские спектры довольно просты и регулярно изменяются от элемента к элементу. Такой характер рентгеновских спектров объясняется тем, что при переходе от элемента к элементу меняется не структура внутренних оболочек, а энергия связи заполняющих эти оболочки электронов.

<sup>1</sup>См., например, книгу М. А. Ельяшевича «Атомная и молекулярная спектроскопия» (М.: Физматгиз, 1962).

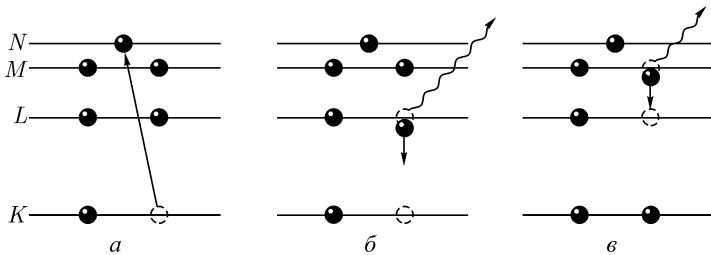


Рис. 63. Схема возникновения характеристического рентгеновского излучения: *a* — возбуждение *K*-электрона; *б* — возникновение  $K_{\alpha}$ -линии характеристического спектра; *в* — возникновение  $L_{\alpha}$ -линии характеристического спектра.

Рассмотрим схему рентгеновских уровней (термов) многоэлектронного атома (рис. 64). Каждый рентгеновский уровень соответствует приращению энергии атома при удалении одного электрона. Рентгеновские уровни носят, таким образом, «дырочный» характер (§ 32). Так как для замкнутой оболочки квантовые числа  $L$ ,  $S$  и  $J$  равны нулю, то  $L$ ,  $S$  и  $J$  у оболочки с удаленным электроном совпадают с  $l$ ,  $s$  и  $j$  удаленного электрона. Поэтому схема рентгеновских уровней имеет тот же вид, что и схема уровней водородоподобных атомов. (Разумеется, энергия уровней зависит от  $Z$  и быстро увеличивается по абсолютной величине с ростом атомного номера.) На рис. 64 справа записаны обозначения уровней. В отсутствие внешнего магнитного поля состояния, отличающиеся направлением момента импульса, вырождены. Поэтому  $K$ -уровень является одиночным. Этому уровню соответствует дырка в  $1s$ -оболочке.  $L$ -уровень состоит из трех компонент  $L_I$ ,  $L_{II}$  и  $L_{III}$ . Самый глубокий из этих трех термов соответствует дырке на  $2S_{1/2}$ -оболочке. Уровни  $2P_{1/2}$  и  $2P_{3/2}$ , соответствующие  $L_{II}$ - и  $L_{III}$ -термам, различаются по энергии из-за спин-орбитальной связи. В легких атомах термы  $L_I$  и  $L_{II}$  очень близки (энергия в основном зависит от  $J$ ), а по мере утяжеления атомов расстояние между ними быстро возрастает, так как разная степень экранирования в  $S$ - и  $P$ -состояниях приобретает все большее значение.  $M$ -терм состоит из пяти компонент,  $N$ -терм — из семи, и т. д.

Переходы электронов с верхних на нижние уровни сопровождаются испусканием рентгеновских квантов и подчиняются обычным для электромагнитного излучения правилам отбора. Так, например, невозможен переход с  $2S_{1/2}$ -уровня на  $1S_{1/2}$ -уровень; этот переход на рис. 64 зачеркнут. Все другие переходы, не удовлетворяющие правилам отбора, на рис. 64 вообще не обозначены. Линии характеристического спектра

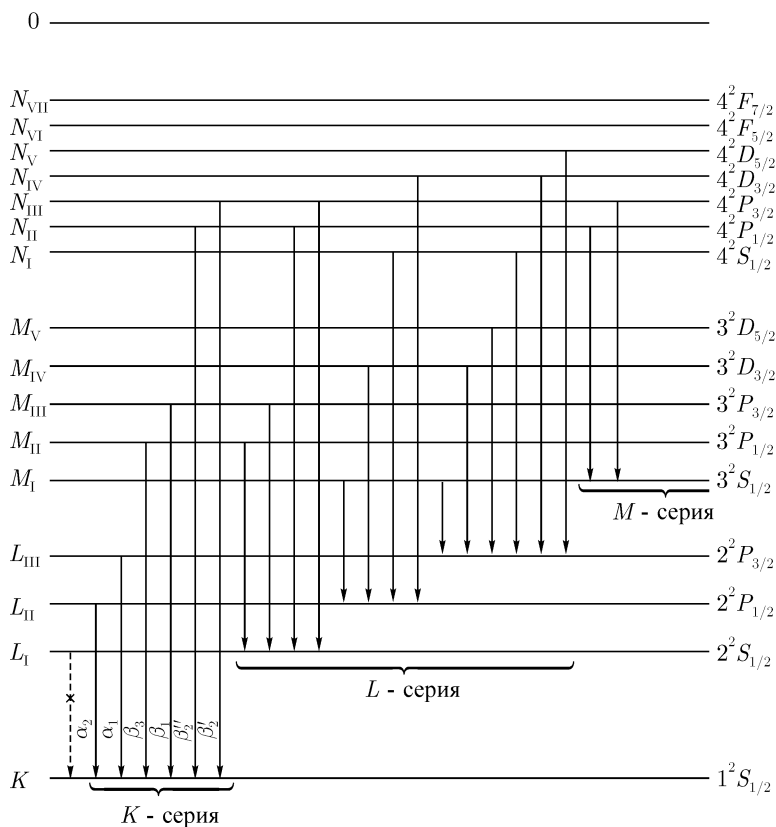


Рис. 64. Схема рентгеновских термов многоэлектронных атомов и переходов, при которых возникает рентгеновское характеристическое излучение. Ось энергии направлена вниз, масштаб не выдержан. Направление стрелок соответствует переходам электронов; «дырки» (вакансии в оболочках атома) передвигаются в обратном направлении, т.е. из состояния с большей энергией в состояния с меньшей энергией.

принято объединять в серии. К серии принадлежат линии, возникающие при переходах электрона на уровни, относящиеся к одному и тому же слою. Если линия возникает при переходе электрона в  $K$ -слой, то она входит в  $K$ -серия,  $L$ -серия состоит из линий, возникающих при переходе электронов на  $L$ -термы, и т. д.



В обозначение каждой линии входит название серии, к которой относится линия, и индекс. Индекс  $\alpha$  указывает на то, что переход осуществляется с термов ближайшего слоя, индекс  $\beta$  присваивается линиям, возникающим при переходах с термов следующего за ближайшим слоя, и т. д.

Кроме того, в рентгеновской спектроскопии линиям присваиваются и цифровые индексы. Для  $K$ -серии эти обозначения приведены на рис. 64. Линии  $K_{\alpha_1}$  и  $K_{\alpha_2}$  незначительно различаются по энергии; они образуют «тонкую структуру» рентгеновских спектров.

**Закон Мозли.** Каждый из электронов атома находится в электрическом поле, которое создают ядро и электроны — «внутренние» и «внешние». Поле внешних электронов не оказывает почти никакого влияния на энергию внутренних электронов. Поэтому в первом приближении энергия рентгеновских уровней рассчитывается по формуле, похожей на (4.18) для водородоподобных атомов<sup>1</sup>:

$$E_n = R_1(Z - \sigma_{nl})^2 \frac{1}{n^2}. \quad (6.13)$$

В отличие от (4.18), эта формула содержит поправку  $\sigma_{nl}$ . Эта поправка носит название постоянной экранирования; она учитывает экранирование поля ядра электронами.  $\sigma_{nl}$  почти не зависит от  $Z$  (ведь строение внутренних оболочек у всех атомов одинаково!), но зависит от  $n$  и  $l$ . Для электронов, находящихся в  $K$ -слое легких атомов, экранирующее действие оказывает главным образом второй электрон этого слоя; в этом случае  $\sigma \approx 1$ . Для электронов  $L$ -слоя легких атомов  $\sigma \approx 8$ . Точные значения  $\sigma_{nl}$  могут быть определены только экспериментально. Формулы (4.18) и (6.13) различаются также по знаку, так как энергия атома с удаленным электроном положительна.

Энергия рентгеновских квантов согласно закону сохранения энергии равна разности энергий начального и конечного состояний атома:

$$\hbar\omega = E_{n_1} - E_{n_2} = R_1(Z - \sigma_1)^2 \frac{1}{n_1^2} - R_1(Z - \sigma_2)^2 \frac{1}{n_2^2}. \quad (6.14)$$

Эмпирические «постоянные экранирования» можно ввести не для уровней, а прямо для спектральных линий. Формула (6.14) приобретает при этом более простой вид:

$$\hbar\omega = R_1(Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right). \quad (6.15)$$

<sup>1</sup>Эта формула написана с точностью до членов, учитывающих спин-орбитальное взаимодействие.

Поправка  $\sigma$  остается почти постоянной для одних и тех же линий в спектрах разных легких атомов. Например,  $\sigma = 1,13$  для линии  $K_\alpha$  у всех атомов с  $20 < Z < 30$ .

Из (6.15) видно, что частота рентгеновских линий при переходе от элемента к элементу возрастает практически как  $Z^2$ . Эта закономерность была экспериментально открыта Мозли в 1913 г., т. е. задолго до появления квантовой механики. Исследуя частоты линий в характеристических спектрах различных элементов, Мозли обнаружил, что корень квадратный из частоты рентгеновского излучения линейно зависит от порядкового номера  $Z$  элемента:

$$\sqrt{\nu} = Za - b, \quad (6.16)$$

где  $a$  и  $b$  — постоянные. Формулы (6.15) и (6.16) отражают одну и ту же зависимость частоты от  $Z$ , которую принято называть законом Мозли.

Закон Мозли сыграл большую роль в установлении правильного порядкового номера элементов в таблице Менделеева (ни о заряде ядра, ни о самом существовании атомных ядер в то время ничего не было известно). Так, например, чтобы исправить нерегулярность зависимости  $\sqrt{\nu}$  от  $Z$ , Мозли переменил порядковые номера у никеля и кобальта (до этого Ni имел меньший порядковый номер, чем Co) и оставил место для элемента с порядковым номером  $Z = 43$ , который в то время не был известен.

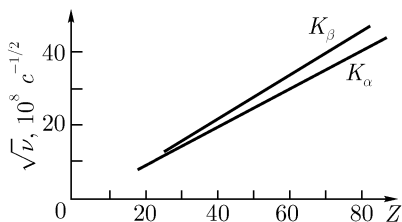


Рис. 65. Зависимость частоты рентгеновских линий от атомного номера.

На рис. 65 приведены графики Мозли для  $K_\alpha$ - и  $K_\beta$ -линий. Графики представляют собой прямые линии, на которых не обнаруживается никаких следов периодичности, присущей химическим свойствам атомов. Такой характер графиков является вполне естественным, так как периодичность связана с последовательным заполнением внешних оболочек, в то время как внутренние оболочки с ростом  $Z$  сжимаются, не меняя своей структуры.

**Получение рентгеновского излучения. Сплошные рентгеновские спектры.** Для возбуждения рентгеновского излучения используют рентгеновские трубки. Рентгеновская трубка состоит из откачанного (до  $10^{-5} - 10^{-7}$  тор) баллона с катодом, фокусирующим электродом и анодом. На рис. 66 представлена схема рентгеновской трубки. Катод

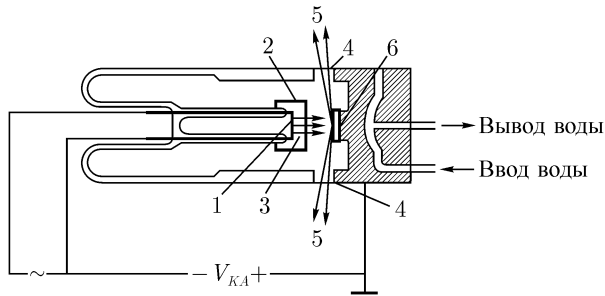


Рис. 66. Схема устройства рентгеновской трубки: 1 — катод, 2 — фокусирующий электрод, 3 — поток электронов, 4 — окно для выпуска рентгеновских лучей, 5 — рентгеновское излучение, 6 — анод.

представляет собой спираль из вольфрама; через эту спираль пропускается ток от низковольтного источника питания, в результате чего нить накаляется до температуры 2000 К и становится источником термоэлектронов. Анод представляет собой массивный охлаждаемый водой металлический стакан, на поверхность которого наносят гальваническим способом или наплавляют тонкие слои тех элементов, характеристические спектры которых исследуются. Между катодом и анодом прикладывают разность потенциалов  $V_{КА}$ , достигающую в обычных рентгеновских трубках нескольких десятков киловольт. Будем постепенно увеличивать  $V_{КА}$  при разогретом катоде. Ускоренные электроны движутся к аноду и тормозятся в нем. Торможение электронов приводит к появлению электромагнитного излучения, имеющего сплошной спектр. Это тормозное рентгеновское излучение. (Как известно, при ускоренном движении заряженных частиц возникает электромагнитное излучение.) На рис. 67 изображена форма спектра тормозного рентгеновского излучения при нескольких значениях  $V_{КА}$ . При  $V_{КА} = 30$  кВ спектр начинается при некотором значении  $\lambda = \lambda_{гп1}$ , а в сторону больших волн простирается практически до бесконечности. С увеличением  $V_{КА}$  коротковолновая граница спектра сдвигается влево, а интенсивность спектра возрастает. Обрыв спектра в области коротких волн естественным образом вытекает из квантовых представлений: энергия рентгеновских квантов, возникающих при торможении электронов, не может превышать кинетическую энергию этих электронов. Обозначив через  $V$  разность потенциалов, ускоряющую электроны, получим

$$\hbar\omega_{гп} = Ve, \quad (6.17)$$

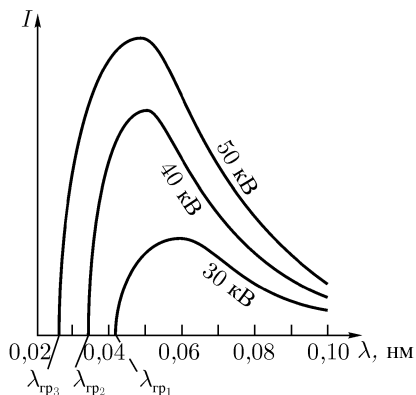


Рис. 67. Спектр тормозного рентгеновского излучения (вольфрамовый анод).

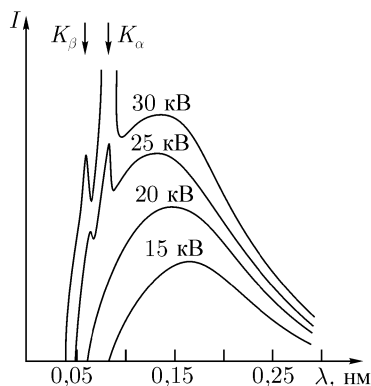


Рис. 68. Возбуждение характеристического рентгеновского спектра (молибденовый анод).

или

$$\lambda_{\text{гр}} = \frac{2\pi c}{\omega_{\text{гр}}} = \frac{2\pi c\hbar}{Ve}. \quad (6.18)$$

Тормозное излучение и фотоэффект представляют собой процессы, идущие в противоположных направлениях: при фотоэффекте поглощение фотона сопровождается увеличением кинетической энергии электрона, а при тормозном излучении уменьшение энергии электрона связано с испусканием фотона.

Возбуждение характеристического спектра становится возможным, если энергия ускоренных электронов оказывается достаточной для выбивания электронов с внутренних оболочек атомов вещества, находящегося на поверхности анода. При некотором напряжении на фоне сплошного тормозного спектра возникают узкие линии характеристического спектра (рис. 68), причем все линии данной серии возникают одновременно (сначала  $M$ -, затем  $L$ - и наконец  $K$ -серия). При дальнейшем увеличении  $V_{KA}$  одновременно увеличивается интенсивность сплошного спектра и характеристических линий, но в то время как граница сплошного спектра при этом сдвигается влево, положение линий остается неизменным. Для возбуждения характеристических линий в легких атомах ( $Z < 15$ ) достаточно, чтобы  $V_{KA} \approx 100$  В, тогда как для возбуждения линий  $K$ -серии у атомов с  $Z \geq 82$  требуется энергия, превышающая 100 кэВ; длины волн характеристических линий изменяются от  $\lambda \approx 40$  нм ( $L$ -серия  $_{11}\text{Na}$ ) до  $\lambda = 0,013$  нм ( $K_{\alpha}$  в спектре  $_{92}\text{U}$ ).

В рентгеновских трубках в энергию рентгеновского излучения переходит около 0,01 кинетической энергии электронов. Остальная энергия превращается в тепло, выделяющееся в основном на аноде; поэтому в мощных рентгеновских трубках анод охлаждается водой.

В настоящее время рентгеновские лучи используются очень широко в науке (для рентгеноструктурного анализа кристаллов, молекул и т. д.), в медицине (для диагностики и лечения различных заболеваний) и в технике (дефектоскопия металлов и т. д.).

**Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом.** При прохождении через вещество рентгеновские лучи взаимодействуют с электронами атомов. Наиболее вероятными процессами взаимодействия являются рассеяние и фотоэлектрическое поглощение квантов.

Фотоэлектрическое поглощение, как мы уже знаем (§ 1), заключается в передаче в с е й энергии кванта одному из электронов атома. Под действием рентгеновских квантов — в результате фотоэффекта — образуется фотоэлектрон и атом с дыркой на одной из внутренних оболочек атома. Естественным продолжением фотоэффекта является заполнение дырок в нижележащих оболочках электронами с вышележащих оболочек. Освобождающаяся при этом энергия испускается в виде квантов электромагнитного излучения (характеристические рентгеновские лучи) или передается одному из внешних электронов, который при этом покидает атом (э ф ф е к т О ж е). Особенно сильно эффект Оже выражен в тех случаях, когда электромагнитные переходы запрещены, например в 0 — 0-переходах. При эффекте Оже вместо однократно ионизованных возникают двукратно ионизованные атомы. На рис. 69 показана схема возникновения рентгеновских квантов и электрона Оже в атоме, у которого в результате фотоэффекта удален  $K$ -электрон. Рис. 69 *a* иллюстрирует процесс возникновения рентгеновского кванта с энергией  $\hbar\omega_1 = E_K - E_L$  при переходе электрона с  $L$ -слоя на свободное место в  $K$ -слое. Свободное место в  $L$ -слое может быть занято  $M$ -электроном, и тогда возникнет еще один рентгеновский квант с энергией  $\hbar\omega_2 = E_L - E_M$  (рис. 69 *б*). Вместо испускания кванта может произойти процесс, изображенный на рис. 69 *в*; свободное место в  $L$ -слое занимает  $M$ -электрон, а избыток энергии передается  $N$ -электрону, который покидает атом. Очевидно, что энергия электрона Оже в этом случае равна

$$E = E_L - E_M - E_N.$$

Эффект Оже может происходить и сразу после возбуждения атома. В этом случае атом испускает электрон не кроме, а вместо испускания рентгеновского кванта.

Процесс фотоэлектрического поглощения рентгеновских лучей, таким образом, сопровождается появлением однократно и двукратно (или

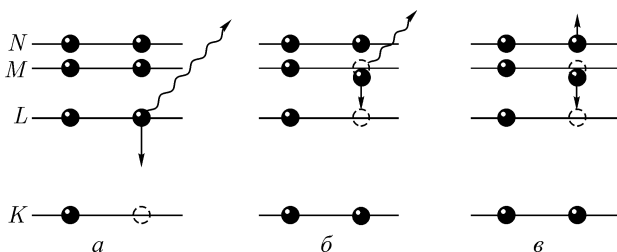


Рис. 69. Схема, иллюстрирующая испускание характеристических рентгеновских квантов и оже-электронов: *a* — испускание фотона  $K_{\alpha}$ -линии; *б* — испускание фотона  $L_{\alpha}$ -линии, *в* —  $L - M$ -переход с испусканием электрона Оже.

даже многократно) ионизованных атомов, характеристических рентгеновских лучей и электронов Оже.

Остановимся на методах регистрации рентгеновских лучей. Эти методы основаны на наблюдении ионизации, возникающей при прохождении излучения через вещество. Ионизация может регистрироваться непосредственно (с помощью ионизационных камер) или по вторичным эффектам. Такими вторичными эффектами являются развитие пробоя в сильном электрическом поле (счетчики Гейгера), почернение фотографической эмульсии, возбуждение оптического излучения в сцинтиллирующих веществах (экраны, используемые при рентгеновском просвечивании) и т. д. Во всех этих случаях первичным актом является ионизация атома и появление свободных электронов. В счетчиках Гейгера ускоряемые полем первичные электроны ионизуют встречные атомы заполняющего счетчик газа и дают начало образованию лавины, содержащей огромное число электронов. В фотографической эмульсии кристаллы бромистого серебра, содержащие хотя бы один ион, в процессе проявления восстанавливаются до металлического серебра. В сцинтиллирующих веществах постепенное заполнение дырок во внутренних оболочках атомов с большой вероятностью приводит к возбуждению оптических электронов.

С помощью ионизационной камеры или какого-нибудь другого детектора легко убедиться в том, что интенсивность параллельного пучка рентгеновских лучей уменьшается при прохождении через вещество, причем уменьшение интенсивности тем заметнее, чем больше толщина вещества. Уменьшение интенсивности пучка рентгеновских лучей происходит из-за поглощения и рассеяния (рассеянные кванты не только теряют направление первичного пучка, но и обладают меньшей энергией; эти кванты затем быстро поглощаются). Рассеяние и поглощение

квантов носит вероятностный характер. Вероятность испытать взаимодействие тем больше, чем большее количество атомов находится на пути кванта, т. е. чем большую толщину вещества проходит пучок. Для параллельного монохроматического пучка рентгеновских лучей (рис. 70) мы можем составить равенство

$$-\Delta N(x) = \mu N(x) \Delta x. \quad (6.19)$$

Здесь  $N(x)$  — число квантов, доходящих до слоя с координатой  $x$ ,  $\mu$  — коэффициент пропорциональности,  $-\Delta N(x)$  — число квантов, выбывших из пучка из-за взаимодействия в слое толщиной  $\Delta x$ .

Заменяя конечные приращения  $\Delta N(x)$  и  $\Delta x$  бесконечно малыми и интегрируя, найдем

$$N_l = N_0 e^{-\mu l}. \quad (6.20)$$

В формуле (6.20) и на рис. 70  $N_0$  обозначает интенсивность пучка, падающего на поверхность слоя,  $N_l$  — интенсивность пучка, прошедшего через слой толщиной  $l$ .

Экспоненциальная зависимость в законе ослабления рентгеновских лучей возникает не из-за каких-либо специфических свойств рентгеновских квантов и особенностей их рассеяния и поглощения в веществе, а из-за вероятностного характера взаимодействия. Вероятностное описание является, как мы знаем, общей особенностью квантовой механики. Поэтому поглощение и рассеяние излучения почти всегда описывается экспоненциальными законами, независимо от того, из каких частиц состоит это излучение. Ослабление теряет экспоненциальный характер лишь в тех случаях, когда коэффициент пропорциональности  $\mu$  сильно зависит от энергии частиц, а частицы быстро теряют энергию в процессе прохождения через вещество.

Физические особенности рассеяния и поглощения разных частиц заключаются, таким образом, не в формуле поглощения, а в величине коэффициента  $\mu$  и в том, как этот коэффициент зависит от энергии.

Коэффициент  $\mu$  в (6.20) называется линейным коэффициентом ослабления. Из (6.19) получаем

$$\mu = -\frac{1}{N} \frac{dN}{dx}.$$

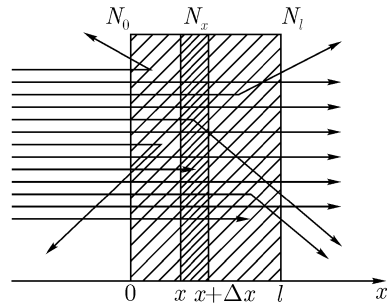


Рис. 70. Рассеяние и поглощение рентгеновских лучей при прохождении через вещество.

<sup>1</sup>Легко видеть, что  $[\mu] = \text{см}^{-1}$ .

Линейный коэффициент ослабления представляет собой, таким образом, относительное изменение интенсивности пучка на единице пути в веществе.

Ослабление пучка связано и с рассеянием, и с поглощением фотонов, поэтому  $\mu$  может быть представлено в виде

$$\mu = \mu_{\text{расс}} + \mu_{\text{погл}}, \quad (6.21)$$

где  $\mu_{\text{расс}}$  — линейный коэффициент рассеяния, а  $\mu_{\text{погл}}$  — линейный коэффициент поглощения. Коэффициенты  $\mu_{\text{расс}}$  и  $\mu_{\text{погл}}$  зависят от энергии рентгеновских лучей и рода вещества, с которым происходит взаимодействие.

Вместо линейных коэффициентов часто пользуются массовыми коэффициентами поглощения, рассеяния и ослабления, которые получаются путем деления линейных коэффициентов на плотность поглотителя. Преобразуем (6.20) так, чтобы в нее вошел массовый коэффициент ослабления:

$$N_l = N_0 e^{-\mu l} = N_0 \exp\left[-\frac{\mu}{\rho}(\rho l)\right]. \quad (6.22)$$

Здесь  $\rho$  — плотность вещества,  $\mu/\rho$  — массовый коэффициент ослабления<sup>1</sup>, а  $\rho l$  — толщина, выраженная в граммах вещества, приходящихся на каждый квадратный сантиметр сечения пучка.

Массовый коэффициент ослабления характеризует ослабление пучка в слое, содержащем 1 г вещества на 1 см<sup>2</sup>.

Для теоретического исследования наиболее удобны атомные коэффициенты  $\sigma$ ,  $\sigma_{\text{расс}}$  и  $\sigma_{\text{погл}}$ , характеризующие ослабление в слое, содержащем 1 атом на 1 см<sup>2</sup>. Чтобы получить эти коэффициенты, нужно  $\mu/\rho$ ,  $\mu_{\text{расс}}/\rho$  и  $\mu_{\text{погл}}/\rho$  разделить на число атомов, содержащихся в 1 г, т. е. на  $N_A/A$ , где  $N_A$  — постоянная Авогадро,  $A$  — атомная масса:

$$\sigma = \frac{\mu}{\rho} \frac{A}{N_A}, \quad \sigma_{\text{расс}} = \frac{\mu_{\text{расс}}}{\rho} \frac{A}{N_A}, \quad \sigma_{\text{погл}} = \frac{\mu_{\text{погл}}}{\rho} \frac{A}{N_A}. \quad (6.23)$$

Коэффициенты  $\sigma$ ,  $\sigma_{\text{погл}}$  и  $\sigma_{\text{расс}}$  имеют размерность площади (см<sup>2</sup>), поэтому они называются также эффективными поперечными сечениями, или просто эффективными сечениями атома для данного процесса (ослабления, рассеяния или поглощения). При использовании этих коэффициентов закон ослабления записывается в форме

$$N_l = N \exp(-\sigma n_0 l), \quad (6.24)$$

<sup>1</sup>Из (6.22) видно, что  $[\mu/\rho] = \text{см}^2 \cdot \text{г}^{-1}$ .



где  $n_0 = \rho N_A / A$  — число атомов в  $1 \text{ см}^3$  вещества. Из сравнения (6.24) и (6.20) следует, что входящее в (6.24) произведение  $\sigma n_0 = \mu$ . Эту величину иногда называют также эффективным макроскопическим сечением. Макроскопическое сечение для вещества, состоящего из атомов разного сорта, равно сумме макроскопических сечений для тех элементов, которые входят в его состав<sup>1</sup>.

Атомные сечения  $\sigma_{\text{расс}}$ ,  $\sigma_{\text{погл}}$  и  $\sigma$  могут быть не только измерены на опыте, но и рассчитаны теоретически<sup>2</sup>.

Рассмотрим основные особенности рассеяния и поглощения рентгеновских лучей.

Начнем с рассеяния. Рассеяние рентгеновских лучей меняет свой характер в зависимости от соотношения между энергией квантов и энергией связи электронов в атоме. Для тех электронов, которые связаны слабо, в основном имеет место эффект Комптона. Он происходит на разных атомах и на различных электронах одного атома независимо. Вероятности — и сечения — комптоновского рассеяния в веществе вычисляются путем сложения вероятностей (или сечений) рассеяния на всех входящих в его состав атомах. Когда речь идет о слабо связанных электронах, имеются в виду те электроны, энергия связи которых существенно меньше энергии квантов. При энергиях квантов несколько сотен килоэлектронвольт и более к их числу принадлежат все электроны всех веществ. В этом случае макроскопическое сечение рассеяния зависит только от полного числа электронов в кубическом сантиметре вещества. В отличие от макроскопических сечений рассеяния (или линейных коэффициентов рассеяния  $\mu_{\text{расс}}$ ) массовые коэффициенты рассеяния  $(\mu/\rho)_{\text{расс}}$  не зависят от плотности веществ.

При меньших энергиях рентгеновских квантов требуется более подробный анализ, так как «слабо связанными» оказываются лишь наружные электроны атома. Этого не нужно делать лишь у самых легких атомов, когда при «обычных» рентгеновских энергиях (10–300 кэВ) все электроны в таких атомах связаны слабо. Соответствующие оценки нетрудно произвести с помощью формулы (6.13).

Слабо связанные электроны при расчетах обычно считают свободными. Эффективное сечение рассеяния рентгеновских лучей на свободных электронах было рассчитано Таммом, Клейном и Нишиной. Соответствующая формула носит их имя.

Рассеяние на сильно связанных электронах носит совсем другой характер. Рассеянное излучение имеет ту же частоту, что и падающее,

<sup>1</sup>Значения  $\mu$ ,  $\mu/\rho$ , а также  $\mu_{\text{расс}}$ ,  $\mu_{\text{погл}}$  и  $\sigma_{\text{расс}}$ ,  $\sigma_{\text{погл}}$ ,  $\sigma$  содержатся в справочниках по атомной и ядерной физике.

<sup>2</sup>Расчетные формулы можно найти в специальной литературе.

и когерентно с ним. Волны, рассеянные на различных электронах атома, складываются по обычным правилам оптики. При больших длинах волн рассеяние на всех электронах атома происходит синфазно, так что интенсивность пропорциональна не  $Z$ , а  $Z^2$ . Благодаря этому вклад когерентного рассеяния на тяжелых атомах оказывается значительным даже при больших энергиях квантов. В спектре рассеянного излучения обычно присутствуют две линии — когерентного и комптоновского рассеяния.

Рассеяние на различных атомах тоже может оказаться когерентным. На этом основано исследование кристаллов с помощью рентгеновских лучей. Направления, в которых складываются волны, рассеянные разными атомами, проявляются на лауэграммах и дебаеграммах. При исследованиях по методу Лауэ пучок моноэнергетического (характеристического) излучения направляется на монокристалл исследуемого вещества. Рассеянное излучение преимущественно сконцентрировано в направлениях, при которых волны, рассеянные разными атомами, оказываются в фазе. При получении дебаеграмм исследуются поликристаллические образцы. Направления сильного рассеяния при этом лежат на конических поверхностях.

В общем случае полное эффективное сечение рассеяния является суммой сечений комптоновского и когерентного рассеяния:

$$\sigma_{\text{расс}} = \sigma_{\text{расс}}^{\text{ког}} + \sigma_{\text{расс}}^{\text{компт}}. \quad (6.25)$$

Расчет сечений  $\sigma_{\text{расс}}^{\text{ког}}$  и  $\sigma_{\text{расс}}^{\text{компт}}$  при малых энергиях очень ненадежен. Поэтому при энергиях  $\hbar\omega < 10$  кэВ лучше всего использовать экспериментальные значения коэффициентов рассеяния. При  $\hbar\omega > 10$  кэВ можно пользоваться расчетными значениями.

Перейдем к поглощению рентгеновского излучения.

При энергии меньше 1 МэВ возможен только один процесс поглощения — фотоэлектрический. Фотоэлектрическое поглощение заключается в том, что фотон передает свою энергию атомному электрону. Этот процесс происходит тем эффективнее, чем тяжелее атом. При реакции со свободным электроном законы сохранения энергии и импульса не могут быть выполнены одновременно, так как импульс и энергия у электрона и кванта связаны между собой разными формулами: для кванта  $E = pc$ , а для электрона  $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ . При поглощении фотона электроном, сильно связанным с ядром, избыток импульса передается ядру, а электрон уносит почти всю энергию кванта, так как при сравнимом импульсе энергия ядра  $p^2/2M_{\text{яд}}$  ничтожно мала по сравнению с энергией электрона вследствие большой массы ядра.

Атомный коэффициент фотоэлектрического поглощения плохо под-

дается расчету. Его изменение в общих чертах описывается формулой

$$\sigma_{\text{погл}} \sim Z^4 \omega^{-3}. \quad (6.26)$$

Числовые значения  $\sigma_{\text{погл}}$  для рентгеновых лучей можно найти в таблицах.

Из формулы (6.26) следует, что проникающая способность рентгеновых лучей возрастает с увеличением их частоты. Так, например, интенсивность мягкого тормозного излучения, возникающего в телевизионной трубке ( $V = 10$  кВ) ослабляется в 1000 раз стеклом толщины всего 1 мм (или слоем алюминия такой же толщины). Рентгеновские же лучи, генерируемые при напряжении на трубке, равном 50 кВ, проходят через такое стекло практически без ослабления; для уменьшения их интенсивности в 1000 раз потребовалось бы стекло толщины 10 см.

Защитная способность вещества, как это видно из формулы (6.26), быстро возрастает с увеличением его атомного номера. У свинца ( $Z = 82$ ) она в  $(82/13)^4 \approx 1600$  раз выше, чем у алюминия ( $Z = 13$ ). Поэтому для защиты от рентгеновских лучей всегда применяют вещества с большим атомным номером, главным образом свинец.

Хотя формула (6.26) правильно передает общий ход изменения  $\sigma_{\text{погл}}$ , реальная зависимость  $\sigma_{\text{погл}}$  от  $\omega$  существенно сложнее; график этой зависимости схематически изображен на рис. 71. В правой части рис. 71 действительно наблюдается предсказываемый формулой (6.26) рост  $\mu_{\text{погл}}$  при уменьшении  $\omega$ . Однако при значении  $\omega = \omega_K$  кривая  $\mu_{\text{погл}}(\omega)$  испытывает резкий скачок, который называется  $K$ -краем полосы поглощения. Появление этого скачка связано с тем, что при  $\omega < \omega_K$  энергия рентгеновских квантов оказывается недостаточной для того, чтобы выбить электрон из  $K$ -слоя, и электроны этого слоя перестают участвовать в поглощении; при  $\omega > \omega_K$  фотоэффект может происходить только на электронах с главным квантовым числом 2, и общая вероятность фотоэффекта резко падает. При дальнейшем уменьшении  $\omega$  величина  $\mu_{\text{погл}}$  снова растет пропорционально  $\omega^{-3}$ . Но когда энергия квантов становится меньшей, чем энергия связи электронов в  $L$ -слое, снова наблюдается скачок в значении  $\mu_{\text{погл}}(\omega)$ . На этот раз кривая имеет три зубца, так как энергия связи электронов на уровнях  $L_1$ ,  $L_{II}$  и  $L_{III}$  различна. Следующий

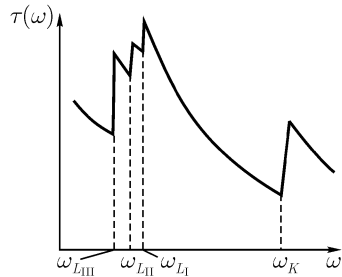


Рис. 71. График зависимости атомного коэффициента поглощения рентгеновских лучей от их частоты.

скачок должен наблюдаться, когда  $\hbar\omega$  становится равной энергии связи электронов в  $M$ -слое. При исследовании поглощения рентгеновских лучей на тяжелых элементах этот скачок на кривой поглощения наблюдается и содержит пять зубцов. Как мы знаем,  $M$ -слой действительно содержит пять компонент.

По экспериментальным значениям краев полос поглощения, которые с хорошей точностью измерены и занесены в таблицы (см. справочники по атомной и ядерной физике), можно найти энергию связи электронов в слоях и оболочках атомов.

Таким образом, поглощение рентгеновских лучей является одним из методов экспериментального исследования структуры атомных уровней и определения их энергии.

Сильная зависимость коэффициента поглощения от частоты позволяет изготавливать фильтры, отсекающие мягкую часть спектра. То обстоятельство, что соответствующий коэффициент входит в показатель экспоненты (6.24), делает эту зависимость очень резкой. Скачки  $\sigma_{\text{полг}}$  в области краев поглощения позволяют отсекаать и коротковолновую часть спектра. Выбирая материал фильтра, можно регулировать положение скачка и таким образом получать селективные фильтры для рентгеновского излучения.

## § 36. Классическая и квантовая физика

При рассмотрении явлений микромира в этой книге использовался последовательный квантовомеханический подход, а соображения, основанные на классической физике, использовались лишь при обсуждении результатов. При этом оказалось, что во многих случаях классические формулы дают правильный по порядку величины, а иногда и точный ответ. Соотношение между квантовомеханическими и классическими результатами частично обсуждалось в тексте, посвященном принципу соответствия. В настоящем параграфе связь между классической и квантовой физикой рассматривается более тщательно. При обсуждении мы не будем доказывать общих теорем, а ограничимся выводами, которые из них следуют, а также физическими доводами и примерами<sup>1</sup>.

I. Математически строгое утверждение состоит в том, что уравнения классической физики могут быть получены из квантовых при формальном устремлении величины  $\hbar$  к нулю. Из этого утверждения путем рассуждений может быть получен другой, более удобный критерий.

<sup>1</sup>Часть рассматриваемых примеров в той или иной мере уже обсуждалась ранее. Мы возвращаемся к ним здесь ради связности изложения.

Рассматривая гармонический осциллятор, мы выяснили, что его энергия квантуется:  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ . Оставим неизменной энергию колебательной системы. Тогда формальное уменьшение  $\hbar$  должно сопровождаться соответствующим увеличением квантового числа  $n$ .

Рассмотрим угловой момент вращающегося тела. Мы знаем, что он квантуется в соответствии с соотношениями  $M_z = m\hbar$ ,  $M^2 = l(l + 1)\hbar^2$ . При неизменной величине момента и его проекций уменьшение  $\hbar$  должно сопровождаться увеличением квантовых чисел  $m$  и  $l$ .

Приведенные примеры, число которых можно существенно увеличить, приводят к выводу, что *результаты квантовой физики должны переходить в классические при больших квантовых числах*. Этот вывод оказывается правильным, хотя его не всегда следует понимать буквально. Чтобы яснее обрисовать ситуацию, продолжим рассмотрение физических примеров.

1. Один из основных выводов квантовой физики заключается в том, что физические величины редко имеют вполне определенные значения, а, как правило, «размазаны» в некоторой области. Эта «размазанность» в классической физике отсутствует. Покажем, что при больших квантовых числах противоречия здесь не возникает. Рассмотрим  $\Delta p$  — распределение частиц по импульсу. Как мы уже знаем, ширина этого распределения связана соотношением неопределенностей  $\Delta p \cdot \Delta x \approx 2\pi\hbar$  с размером  $\Delta x$  области, занятой частицей в координатном пространстве. Пусть для определенности речь идет о частице, находящейся в потенциальной яме с прямоугольными стенками. В этом случае для всех уровней, т. е. при всех квантовых числах,  $\Delta x$  неизменно и равно ширине ямы, а значит, неизменно и  $\Delta p$ . С другой стороны (см. например, (3.12)), при увеличении номера уровня  $n$  волновое число  $k$ , а значит, и импульс неограниченно возрастают. Это означает, что с ростом  $n$  отношение  $\Delta p/p$  становится все меньше, при очень большом значении квантового числа становится исчезающе малым и для больших тел может быть положено равным нулю, что и делается в классической физике.

2. В § 6 отмечалось, что в квантовой механике несправедливо утверждение классической физики о том, что полная энергия частицы является суммой ее потенциальной и кинетической энергии. Это утверждение просто не имеет смысла, поскольку потенциальная энергия зависит от координат частицы, а кинетическая — от ее импульса. В силу принципа неопределенностей координата и импульс не могут быть измерены одновременно, а значит, потенциальная и кинетическая энергия не могут быть одновременно известны.

В § 6 отмечалось далее, что утверждение классической физики о равенстве полной энергии частицы и суммы ее потенциальной и кинетической энергий в квантовой механике заменяется на соответствующую

щие соотношения между средними значениями этих величин. При больших квантовых числах разброс значений кинетической и потенциальной энергии становится несущественным, обе эти энергии с достаточной точностью равны своим средним значениям, так что классическое утверждение приобретает смысл и выполняется с прекрасной точностью. Здесь следует указать на важное исключение. В атоме водорода полная энергия при  $n \rightarrow \infty$  не возрастает, а стремится к некоторому пределу, который удобно полагать равным нулю. Кинетическая и потенциальная энергии электрона при увеличении  $n$  мало меняются. Поэтому утверждение о том, что полная энергия может быть найдена как сумма потенциальной и кинетической энергий, неприменимо к атомам ни при каких квантовых числах. Это важное исключение следует иметь в виду. Квантовая физика при больших квантовых числах, как правило, переходит в классическую, но прежде, чем это окончательно утверждать, в каждом конкретном случае следует убедиться в том, что основные физические величины, характеризующие движение, при больших квантовых числах приобретают неограниченно возрастающие или, по крайней мере, достаточно большие значения. Любопытно, однако, что даже в атоме водорода при увеличении квантовых чисел движение приобретает многие классические черты. Так, с увеличением главного квантового числа  $n$  увеличивается среднее расстояние между электроном и ядром (напомним, что это расстояние возрастает как  $n^2$ ), а следовательно, уменьшается «неклассическая часть» энергии, связанная с неопределенностью импульса, и т. д.

Итак, в большинстве случаев (не относящихся к числу исключений) возрастание квантовых чисел приводит к увеличению числовых значений физических величин. Квантовые соотношения между средними значениями этих величин превращаются в привычные классические формулы.

3. Важнейшим результатом квантовой теории является утверждение о существовании у частиц «нулевой» энергии<sup>1</sup>, которая в классической физике не появляется вообще. Поскольку при увеличении энергии частицы вклад нулевой энергии в полную (см., например, формулу для энергии осциллятора) становится малым, пренебрежение нулевой энергией в классической физике вполне оправдано.

II. Обратимся к еще одному важному различию между классической и квантовой физикой. Классическая физика, как правило, начинается с того, что экспериментатор устанавливает начальное положение и начальную скорость тела. Квантовая физика, наоборот, чаще всего исследует стационарные состояния частиц (состояния с постоян-

---

<sup>1</sup>Имеется в виду наименьшая энергия, которую может иметь система, — ее энергия при нулевых значениях квантовых чисел.

ной энергией) и переходы между ними. Состояния микрочастиц (например, электронов) «размазаны» по значительному объему не потому, что не бывает локализованных состояний, а потому, что такие состояния нас до сих пор не интересовали и, вообще, редко представляют физический интерес, так как они не обладают определенным импульсом, определенной энергией и определенным угловым моментом (см. ниже).

Не составляет, однако, большого труда — если в этом возникает необходимость — описать с помощью квантовой механики локализованные состояния электрона (или любой другой частицы). Повторим здесь рассуждения § 4. Пусть, например, мы установили, что электрон находится в окрестности точки  $x$  и занимает некоторую область  $\Delta x$ , так что его  $\psi$ -функция имеет вид, изображенный на рис. 13. Такое состояние в квантовой физике называют волновым пакетом. Это состояние может быть разложено по набору любых собственных функций уравнения Шредингера, например, представлено в виде суммы или интеграла Фурье:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right) dp. \quad (6.27)$$

Распределение по импульсам  $\varphi(p)$  отлично от нуля при всех (или почти всех) значениях импульса, но главным образом сосредоточено в области с шириной  $\Delta p \approx 2\pi\hbar/\Delta x$ .

Рассуждая в духе классической физики, можно теперь поставить вопрос о движении частицы с известной начальной координатой, т. е. о движении волнового пакета. Задача о движении такого пакета (или, что то же самое, группы волн) хорошо изучена в классической физике. Волны типа  $\exp(ipx/\hbar)$ , или при полной записи  $\exp i(px/\hbar - \omega t)$ , движутся аналогично классическим. Общеизвестный результат заключается в том, что составляющие пакет волны движутся с фазовой скоростью  $\omega/k$ , в то время как гребень волны перемещается с групповой скоростью  $d\omega/dk$ . Это и есть скорость движения волнового пакета. Как мы уже знаем, групповая скорость движения волн де Бройля равна скорости частицы:

$$d\omega/dk = d(\hbar\omega)/d(\hbar k) = dE/dp = p/m = v.$$

Здесь следует отметить, что волновой пакет «размывается» со временем из-за того, что входящие в его состав волны перемещаются в пространстве с разной скоростью. Скорость, с которой «расплывается» волновой пакет, зависит от массы и для больших тел ничтожно мала.

III. Приведенные рассуждения можно провести и для вращательно-го движения, когда одно тело (или частица) обращается в кулоновском

поле другого (атом водорода и другие подобные системы). Мы уже отметили, что в квантовой физике наиболее интересны обладающие определенной энергией стационарные состояния, которые сильно «размазаны» в пространстве. Но если начать исследование движения с локализованного состояния, то волновой пакет и в этом случае некоторое время движется почти как классическое тело<sup>1</sup>. Со временем, однако, сходство пропадает, потому что волновой пакет «расплывается».

Рассмотрим квантовые переходы, при которых вращающееся заряженное тело испускает электромагнитное излучение<sup>2</sup>. Пусть энергия тела на исходном уровне равна  $E_1$ , а на конечном —  $E_2$ . Соответствующие этим энергиям частоты равны  $\omega_1 = E_1/\hbar$  и  $\omega_2 = E_2/\hbar$ . Возникает вопрос, почему вращающийся заряд излучает свет, характеризующийся частотой  $\omega = \omega_1 - \omega_2$ , а не «своими» частотами  $\omega_1$  или  $\omega_2$ ?

Размышление над этим вопросом показывает, что сам вопрос поставлен неправильно. Мы, конечно, вправе ожидать, что частота фотона окажется равной частоте движения заряженного тела или описывающих его волн — но не фазовой частоте, а групповой. Иначе говоря, в соответствии с постановкой задачи в классической физике, мы должны «собрать» волновую функцию в волновой пакет и посмотреть, как этот пакет будет двигаться. При расчетах мы ограничимся случаем больших квантовых чисел, так как только для них можно ожидать согласия между квантовыми и классическими представлениями. Для упрощения рассуждений ограничимся электромагнитными переходами, не затрагивающими радиального движения, и будем считать, что плоскость вращения заряженного тела при излучении сохраняется. Иначе говоря, будем считать, что при излучении не только  $\Delta l = 1$  (правила отбора), но и  $\Delta m = 1$  (сохранение плоскости движения).

После этих предварительных замечаний попробуем установить, с какой частотой вращается волновой пакет, представляющий положение вращающегося заряженного тела. Пусть в начальный момент это положение описывается угловой координатой  $\varphi$ , величина которой установлена с точностью  $\Delta\varphi$ . Это распределение может быть представлено в виде ряда Фурье:

$$\psi(\varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m e^{-im\varphi}. \quad (6.28)$$

Из этого соотношения следует, что «собранный по азимуту»  $\psi$ -функция

<sup>1</sup>Локализовать положение электрона в атоме водорода невозможно, так как при уточнении координаты электрона неизбежно приходится сообщать такую большую энергию, что он отрывается — или почти отрывается — от ядра.

<sup>2</sup>Мы говорим здесь о заряженном теле потому, что «уточнить» координату электрона в атоме, как мы уже знаем, не удастся.



описывает частицу в состоянии, в котором она не имеет определенного углового момента, подобно тому, как «собранный по координате»  $\psi$ -функция описывает частицу, не имеющую определенного значения импульса. При всяком данном  $\Delta\varphi$  распределение по угловому моменту  $A_m$  имеет максимум при некотором  $m$  и характеризуется некоторой шириной  $\Delta m$  подобно тому, как это происходит с координатой и импульсом.

Найдем теперь, с какой угловой скоростью передвигается максимум. Сравнивая (6.28) с (6.27), найдем, что рассматриваемая задача вполне аналогична задаче о движении обычного волнового пакета. Поэтому можно не производить новых расчетов, а заменить переменные в старых: вместо координаты  $x$  следует рассматривать угол  $\varphi$ , вместо импульса  $p$  — угловой момент  $M = m\hbar$ , вместо групповой скорости  $v_{\text{гр}}$  — соответствующую угловую скорость  $\Omega_{\text{гр}}$ . Угловая скорость  $\Omega_{\text{гр}}$  находится по формуле, аналогичной формуле  $v_{\text{гр}} = d\omega/dk$ , которую лучше в этом случае записать в виде  $v_{\text{гр}} = \hbar d\omega/dp$ . Тогда

$$\Omega_{\text{гр}} = \hbar \frac{d\omega}{dM} = \frac{d(\hbar\omega)}{dM} = \frac{dE}{dM} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dm}.$$

В этом выражении появилось дифференцирование по дискретно меняющейся величине  $m$ . При большой величине квантового числа  $m$  в этом нет ничего плохого, надо просто от дифференциалов перейти к конечным разностям, т. е. вместо  $dE/dm$  писать  $\Delta E/\Delta m$ , так что

$$\Omega_{\text{гр}} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar(m_2 - m_1)}.$$

Замечая, наконец, что при рассматриваемых переходах  $m_2 - m_1 = 1$ , находим, что круговая частота обращения волнового пакета действительно совпадает с частотой излучаемого кванта. При движении крупных тел, рассматриваемых классической физикой, их наблюдаемое движение полностью совпадает с движением волнового пакета и выводы классической физики снова оказываются правильными.

IV. Обратимся к соотношениям неопределенностей. Выше уже было показано, что эти соотношения по своему смыслу являются классическими. Они выполняются во всех волновых процессах, в том числе при распространении света. Всякое сужение волнового фронта диафрагмами приводит к размытию направления волны, а всякое ограничение длины волнового цуга сопровождается потерей монохроматичности. Соотношения, которые описывают эти явления, совпадают с соотношениями неопределенностей. Главное различие между квантовой и классической (волновой) формулировками соотношений неопределенностей со-

стоит в том, что в классических формулах связываются ширина дифракты и раствор волнового конуса (неопределенность направления вектора  $\mathbf{K}$ ), длина цуга и разброс волны по частоте, в то время как в квантовой записи предпочитают говорить о размере щели (или «ямы») и разбросе по импульсу, а также о времени жизни состояния и неопределенности его энергии. Соответственно классическая запись этих соотношений не содержит постоянной Планка, тогда как в квантовую она входит. Новый взгляд заключается, таким образом, не в том, что в квантовой физике возникают новые соотношения — соотношения неопределенностей, — а в расширении сферы их действия, в том, что их применимость распространяется на частицы, волновая природа которых в классической физике не выявлялась. В квантовой физике эти соотношения приобретают новую формулировку (через импульс и энергию), которая является естественным следствием введения волн де Бройля.

На этом мы заканчиваем сопоставление квантовой и классической физики. Мы видим, что эти «две физики» отнюдь не противоречат друг другу. При больших квантовых числах классическое рассмотрение оказывается вполне надежным, так что в квантовых расчетах необходимости, как правило, не возникает<sup>1</sup>. При малых квантовых числах необходим квантовомеханический подход. Однако и в этом случае классическая физика обычно позволяет производить неплохие оценки, правильные по порядку (но не более чем по-порядку) величины. Производя такие оценки, конечно, всегда следует помнить об особенностях квантовых систем: об интерференции волновых функций, о квантовании числовых значений основных физических величин при финитном движении, о соотношениях неопределенностей, о существовании нулевой энергии, о принципе Паули для электронов и для других частиц с полуцелым спином. Пренебрежение этими особенностями недопустимо и может приводить к грубейшим ошибкам.

---

<sup>1</sup>Мы не случайно здесь употребили оборот «как правило». Существует ряд явлений, классическое рассмотрение которых невозможно даже при огромных квантовых числах. Мы имеем в виду, например, свойства твердых тел, сверхпроводимость или происходящую под влиянием квантовых флуктуаций излучения раскачку колебаний электронов, движущихся в ускорителе.

## ГЛАВА 7

# АТОМЫ В МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

### § 37. Явление Зеемана

Оптический спектр источника, помещенного в магнитное поле, оказывается более сложным, чем спектр этого же источника в отсутствие поля: каждой линии спектра, снятого в отсутствие поля, соответствует в магнитном поле мультиплет, состоящий из нескольких линий. Расщепление линий спектра в магнитных полях впервые наблюдалось Зееманом (1896 г.) и носит название явления или эффекта Зеемана. Различают простой (нормальный) эффект Зеемана, когда каждая линия расщепляется на три компоненты, и сложный (аномальный) эффект Зеемана, когда каждая из линий расщепляется на много компонент. Названия «нормальный» и «аномальный» возникли по той причине, что расщепление линий на три компоненты удавалось рассчитать классическими методами, а сложный эффект Зеемана классической физикой не объясняется. Квантовая физика успешно объясняет как «сложный», так и «простой» эффекты Зеемана.

Расчет энергии уровней атома, помещенного в магнитное поле, требует решения соответствующего уравнения Шредингера. Входящий в уравнение оператор энергии содержит в этом случае несколько членов:

$$\hat{E} = \hat{T} + \hat{U}_k + \hat{U}_{\text{SL}} + \hat{U}_{\text{SB}} + \hat{U}_{\text{LB}}. \quad (7.1)$$

В этой формуле первый член  $\hat{T}$  учитывает кинетическую энергию электронов и равен сумме  $p_i^2/2m$  для всех электронов. Член  $\hat{U}_k$  определяет потенциальную (кулоновскую) энергию притяжения электронов к ядру и отталкивания их друг от друга. Слагаемое  $\hat{U}_{\text{SL}}$  зависит от спин-орбитального взаимодействия и определяет обычную тонкую структуру уровней. Эти три члена не связаны с внешним магнитным полем. Последние два члена возникают из-за взаимодействия спинового и орбитального моментов электронов с внешним магнитным полем. При написании формулы (7.1) были отброшены квадратичные по полю  $\mathbf{B}$  члены, определяющие диамагнитную восприимчивость атомов.

Решить уравнение Шредингера с оператором энергии (7.1) в общем виде не удастся. Рассмотрим поэтому наиболее важные частные случаи.

**Сложный эффект Зеемана.** Сложный эффект Зеемана возникает в слабых магнитных полях, когда последние два члена в (7.1) малы по сравнению с членом  $\widehat{U}_{\text{SL}}$ . В этом случае в основном сохраняется картина уровней, возникающая без внешнего поля, и происходит лишь незначительное расщепление этих уровней. Внешнее магнитное поле является слабым, когда возникающее в его присутствии дополнительное расщепление мало по сравнению с расстоянием между линиями тонкой структуры (это расстояние как раз и определяется членом  $\widehat{U}_{\text{SL}}$ ).

Рассмотрим расщепление отдельных компонент тонкой структуры в слабом внешнем поле. В отсутствие поля каждый уровень атома характеризуется своими квантовыми числами  $L$ ,  $S$  и  $J$ . Задание этих трех чисел определяет магнитный момент атома  $\boldsymbol{\mu}_J$ .<sup>1</sup> Взаимодействие магнитного момента  $\boldsymbol{\mu}_J$  с внешним полем приводит к дополнительной энергии, зависящей от величины и взаимной ориентации  $\mathbf{B}$  и  $\boldsymbol{\mu}_J$ :

$$U_B = -\boldsymbol{\mu}_J \mathbf{B}. \quad (7.2)$$

Так как  $\boldsymbol{\mu}_J = -g\mu_B \mathbf{J}$ , то из (7.2) получаем

$$U_B = g\mu_B \mathbf{J} \mathbf{B} = g\mu_B m_J B. \quad (7.3)$$

В выражение (7.3) входит магнитное квантовое число  $m_J$ , определяющее проекцию полного момента атома на направление магнитного поля. Мы знаем, что магнитное квантовое число  $m_J$  согласно правилу (5.47) может принимать одно из  $2J + 1$  разрешенных значений:  $\pm J$ ,  $\pm(J - 1)$ ,  $\pm(J - 2)$ , ... В отличие от ситуации, обсуждавшейся в § 18, когда выделенное направление появляется только в момент измерения, теперь (при наличии магнитного поля) пространство и до измерения обладает выделенным направлением — направлением поля.

Формула (7.3) показывает, что энергия атома с угловым моментом  $\mathbf{J}$  в магнитном поле зависит от ориентации момента относительно направления поля. Поэтому при наложении магнитного поля состояние атомов с полным моментом импульса  $\mathbf{J}$  расщепляется на  $2J + 1$  состояний с различными значениями  $m_J$ , и различными энергиями, определяемыми выражением

$$E = E_0 + U_B = E_0 + g\mu_B m_J B. \quad (7.4)$$

Таким образом (как это уже отмечалось в § 23), вырождение уровней по магнитному квантовому числу в магнитном поле снимается. На

<sup>1</sup>Магнитный момент атома  $\boldsymbol{\mu}_J$  связан с угловым моментом атома  $\mathbf{J}$  формулой, аналогичной (5.48); фактор Ланде  $g$ , входящий в эту формулу, зависит от квантовых чисел  $L$ ,  $S$ ,  $J$  и определяется формулой, аналогичной (5.49).

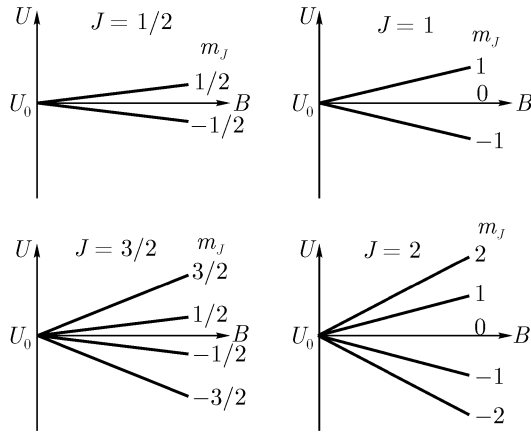


Рис. 72. Расщепление в магнитном поле  $B$  уровней с различными  $J$ .

рис. 72 изображено расщепление в магнитном поле уровней с  $J = 1/2, 1, 3/2$  и  $2$  в зависимости от величины  $B$ . В соответствии с числом возможных значений  $m_J$  уровни при наложении поля расщепляются на 2, 3, 4 и 5 подуровней; значения  $m_J$  для каждого подуровня указаны справа. Так как при переходе к соседней компоненте мультиплета изменение  $m_J$  равно единице, то все уровни, возникающие при расщеплении одного уровня, эквидистантны. Для расстояния между уровнями получаем из (7.3)

$$\Delta U_B = g\mu_B B. \quad (7.5)$$

Формула (7.5) показывает, что при постоянном  $B$  расстояния между компонентами мультиплета для атомных уровней зависят от фактора Ланде  $g$  и для разных уровней оказываются различными. Поэтому при переходах между уровнями атомов, находящихся в магнитных полях, возникает расщепление линий. Число линий определяется картиной расщепления начального и конечного уровней<sup>1</sup> и правилами отбора при излучении (§ 33).

В качестве примера рассмотрим явление Зеемана для резонансного дублета натрия. На рис. 73 слева изображена схема образования резонансного дублета Na в отсутствие поля (линии 1 и 2). Справа изображена схема подуровней, появляющихся вместо уровней  $3P_{3/2}, 3P_{1/2}$  и  $3S_{1/2}$ , при наложении слабого магнитного поля, а также переходы между этими

<sup>1</sup>Уровни атомов в состояниях с  $\mu_J = 0$  не расщепляются.

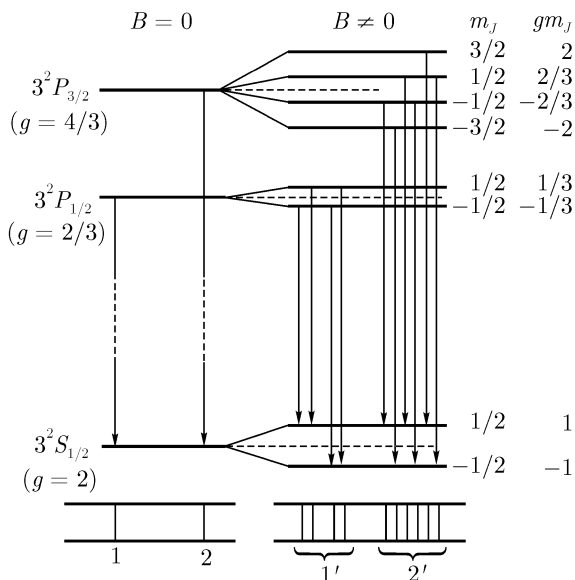


Рис. 73. Расщепление уровней при сложном эффекте Зеемана.

подуровнями, разрешенные правилом отбора (6.9). Применяя это правило, легко убедиться, что вместо одной линии 1 ( $3P_{1/2} - 3S_{1/2}$ ) в магнитном поле возникают четыре перехода  $1'$ , а вместо линии 2 ( $3P_{3/2} - 3S_{1/2}$ ) — шесть переходов  $2'$ . Расстояния между подуровнями, появившимися в результате расщепления, согласно (7.5) зависят от  $g$ ; так как для каждого из трех уровней ( $3P_{3/2}$ ,  $3P_{1/2}$  и  $3S_{1/2}$ )  $g$  имеет различные значения (см. (5.49)), то расщепление этих уровней неодинаково, и среди линий, обозначенных в правой части рис. 73, нет линий с одинаковой энергией (длиной волны). Поэтому при изучении спектра Na от источника, помещенного в слабое магнитное поле, вместо резонансного дублета наблюдается спектр, состоящий из 10 близких линий, расположенных двумя группами.

Энергия и частота линий легко могут быть рассчитаны:

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= E_2 - E_1 = [(E_{02} + g_2\mu_B m_{J_2} B) - (E_{01} + g_1\mu_B m_{J_1} B)] = \\ &= (E_{02} - E_{01}) + (g_2\mu_B m_{J_2} - g_1\mu_B m_{J_1}) B, \\ \omega &= (E_{02} - E_{01})/\hbar + (g_2 m_{J_2} - g_1 m_{J_1}) \mu_B B/\hbar. \end{aligned}$$

Введя для частоты основной линии обозначение  $\omega_0 = (E_{02} - E_{01})/\hbar$ , получаем

$$\omega = \omega_0 + \frac{\mu_B B}{\hbar} (g_2 m_{J_2} - g_1 m_{J_1}). \quad (7.6)$$

Величина расщепления определяется множителем  $\mu_B B$  в энергетических единицах или множителем  $\mu_B B/\hbar$  в единицах частоты. Так как  $\mu_B = 0,927 \cdot 10^{-20}$  эрг/Гс, то

$$\mu_B B = \frac{(0,927 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/Гс}) \cdot B (\text{ Гс})}{1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг/эВ}} = 5,8 \cdot 10^{-9} B \text{ эВ}.$$

Напомним, что различие между линиями резонансного дублета в энергетических единицах составляет  $2 \cdot 10^{-3}$  эВ. Из сравнения этих цифр видно, что при  $B = 10^3$  Гс поле является еще «слабым» для рассматриваемого перехода; при такой напряженности поля зеемановское расщепление по порядку величины составляет всего  $10^{-2}$  от спин-орбитального расщепления. Поэтому для наблюдения явления Зеемана в слабых полях необходимы оптические спектрометры с высокой разрешающей способностью.

Так как при наложении на источник слабого магнитного поля вместо каждой линии спектра в общем случае возникает довольно сложная система из многих линий, то явление Зеемана в слабых магнитных полях и получило название сложного эффекта Зеемана. В сильных магнитных полях, как мы увидим ниже, картина существенно упрощается.

**Простой эффект Зеемана.** Простым эффектом Зеемана называется расщепление линий спектра на три компоненты. Для переходов между синглетными термами ( $S = 0$ ,  $J = L$ ,  $g = 1$ ) простой эффект Зеемана наблюдается независимо от величины индукции магнитного поля. В магнитном поле каждый из таких уровней расщепляется на  $2L + 1$  подуровней, причем все расстояния между подуровнями одинаковы и равны  $\mu_B B$ . Формула (7.6) для рассматриваемого случая приобретает более простой вид:

$$\omega = \omega_0 + \frac{\mu_B B}{\hbar} (m_{L_2} - m_{L_1}). \quad (7.7)$$

В соответствии с правилом отбора (6.11) формула (7.7) дает для двух комбинирующих уровней три частоты:  $\omega_0$  и  $\omega_0 \pm \mu_B B/\hbar$ . Для изменения длины волны относительно основной линии получаем

$$\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right) = \frac{\Delta\omega}{2\pi c} = \frac{\mu_B}{2\pi c\hbar} B. \quad (7.8)$$

На рис. 74 изображены все переходы между расщепившимися в магнитном поле уровнями с  $S_1 = 0$ ,  $J_1 = L_1 = 1$  и  $S_2 = 0$ ,  $J_2 = L_2 = 2$ , разрешенные правилом отбора (6.11). Мы видим, что, вообще говоря, возможны девять переходов; но энергии (частоты) переходов 2 и 8 совпадают с энергией (частотой) основного перехода 5; совпадают также энергии (частоты) переходов 1, 3, 6 и 4, 7, 9. Таким образом, переходы между уровнями с  $S = 0$  в магнитном поле должны образовывать триплет, что и наблюдается на опыте.

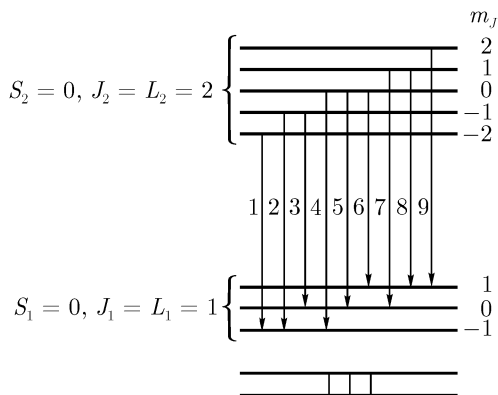


Рис. 74. Простой эффект Зеемана.

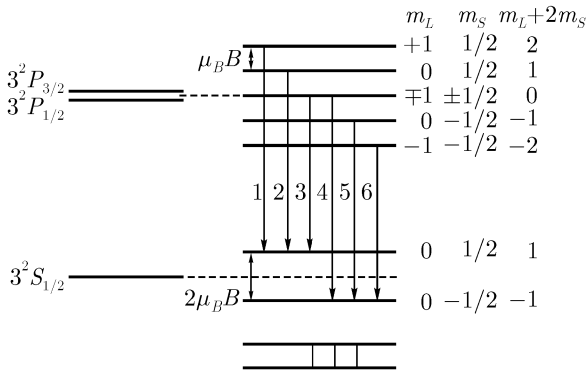
Простой эффект Зеемана наблюдается также для всех переходов без всякого ограничения, если источник излучения помещен в сильное магнитное поле. Сильными (при исследовании эффекта Зеемана) считаются такие магнитные поля, при которых третий член в (7.1) мал по сравнению с четвертым или пятым. Рассуждения предыдущего раздела в этом случае вовсе неприменимы. В самом деле, при рассмотрении слабых магнитных полей мы исходили из уровней, которые возникают при наличии спин-орбитального взаимодействия в отсутствие поля, а затем рассматривали расщепление этих уровней во внешнем поле. То обстоятельство, что от величины внешнего поля при этом зависят лишь детали в расположении уровней, а не сама их классификация, существенно связано со слабостью поля. В сильном поле такой подход, конечно, недопустим, и первый вопрос, который следует себе задать, заключается в том, как правильно классифицировать уровни.

Естественно, что в случае сильного поля из уравнения (7.1) в первом приближении должен быть вычеркнут менее существенный член  $\hat{U}_{LS}$



(при необходимости этот член может быть в дальнейшем учтен в виде поправки, но это нам не потребуется). Оператор энергии (7.1) перестает после этого зависеть от взаимной ориентации векторов  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{S}$  (т.е. от вектора полного момента  $\mathbf{J}$ ) и зависит порознь от проекций  $\mathbf{L}$  на  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{S}$  на  $\mathbf{B}$ .

Условие того, что рассматриваемое магнитное поле является сильным, можно сформулировать и другим, эквивалентным образом: расщепление уровней, вызванное наложением поля, должно существенно превышать спин-орбитальное расщепление, измеренное в отсутствие поля. То обстоятельство, что при сильном поле член  $\widehat{U}_{\mathbf{S}\mathbf{L}}$  в первом приближении может быть вычеркнут из уравнения, часто выражают словами «в сильном поле связь векторов  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{S}$  разрывается». Нередко употребление этого выражения затемняет понимание вопроса, от чего нам хотелось бы предостеречь читателей.



0

Рис. 75. Эффект Зеемана в сильном магнитном поле для резонансной линии натрия.

Из предыдущего ясно, что энергия атома в сильных магнитных полях выражается формулой

$$E = E_0 + U_B = E_0 + (g_L \mu_B m_L B + g_S \mu_B m_S B).$$

Так как согласно (5.49)  $g_L = 1$ , а  $g_S = 2$ , то

$$E = E_0 + \mu_B B (m_L + 2m_S). \tag{7.9}$$

Пользуясь выражением (7.9), легко построить систему подуровней, возникающих в сильном магнитном поле. На рис. 75 изображено расщепление  $3S$ - и  $3P$ -уровней Na в сильном поле. Энергия подуровней зависит теперь от величины  $m_L + 2m_S$ . Вместо уровня  $3S_{1/2}$ , как и в слабом поле, возникают два подуровня; вместо уровней  $3P_{3/2}$  и  $3P_{1/2}$  получается пять подуровней. Расстояния между подуровнями верхней группы в единицах  $\mu_B B$  равны единице, а между нижними подуровнями — двум единицам. На рисунке изображены все переходы, разрешенные правилами отбора  $\Delta m_L = 0, \pm 1$  и  $\Delta m_S = 0$ . Их всего шесть. Однако переходы 2 и 5 одинаковы по энергии и совпадают с энергией основного перехода, т. е. перехода в отсутствие поля. Переходы 1 и 4, 3 и 6 также имеют парно одинаковую энергию.

Можно показать, что в сильном поле расщепление всегда должно происходить на три компоненты. В самом деле, при испускании света переходы происходят только между уровнями с одинаковыми значениями  $m_S$  ( $\Delta m_S = m_{S_2} - m_{S_1} = 0$ ). Энергия квантов поэтому равна

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= [E_{02} + \mu_B B(m_{L_2} + 2m_{S_2})] - [E_{01} + \mu_B B(m_{L_1} + 2m_{S_1})] = \\ &= (E_{02} - E_{01}) + \mu_B B(m_{L_2} - m_{L_1}). \end{aligned} \quad (7.10)$$

Правила отбора разрешают изменение  $m_L$ , не более чем на единицу; поэтому в сильном поле, кроме несмещенной линии, наблюдаются две линии, одна из которых смещена в красную, а другая — в фиолетовую сторону (на одинаковые расстояния).

Обратим внимание еще на одну характерную особенность явления Зеемана в сильных полях. Найдем из (7.10) формулу для расстояния между компонентами мультиплета по частоте:

$$\Delta\omega = \frac{1}{\hbar} \mu_B B = \frac{1}{\hbar} \frac{e\hbar}{2mc} B = \frac{eB}{2mc}. \quad (7.11)$$

Формула (7.11) не содержит ни постоянной Планка, ни квантовых чисел. Поэтому эта формула в принципе может быть получена (и действительно получается!) в классической физике<sup>1</sup>. Эта особенность сильных полей не содержит глубокого физического смысла и является случайной. Так, формула (7.6) для смещения линий в слабых полях содержит квантовые числа (они входят в состав факторов Ланде).

Таким образом, мы видим, что при увеличении магнитного поля сложная картина расщепления (сложный эффект Зеемана) превращается в простую триплетную (простой эффект Зеемана). Это превращение было открыто в 1912 г. Пашеном и Баком и носит их имя.

<sup>1</sup>Частоту  $eB/2mc$  в классической физике называют ларморовой, а триплет линий с частотами  $\omega_0$  и  $\omega_0 \pm eB/2mc$  — нормальным лоренцевым триплетом

В заключение отметим, что наиболее сложной оказывается картина расщепления спектральных линий в промежуточных полях, когда все три последних члена в (7.1) имеют сравнимую величину. Теоретическое рассмотрение этого случая крайне сложно.

**Поляризация зеемановских компонент.** Схема опытов по исследованию явления Зеемана изображена на рис. 76. Источник света (свещающийся газ) помещается между полюсами электромагнита. Спектральный состав излучения изучается с помощью спектрометра, снабженного устройством для исследования поляризации света. Спектральный прибор условно изображен в виде призмного спектрометра. Слабость расщепления (см. выше) заставляет применять приборы с большой разрешающей способностью. Наблюдение спектров чаще всего производят по нормали к направлению магнитного поля («поперечный» эффект Зеемана) или по направлению поля («продольный» эффект Зеемана). Расположение приборов для наблюдения «поперек поля» отмечено на рис. 76 цифрой 1, а расположение для наблюдения «по полю» — цифрой 2. В последнем случае наблюдение ведется через канал, проделанный в одном из полюсов.

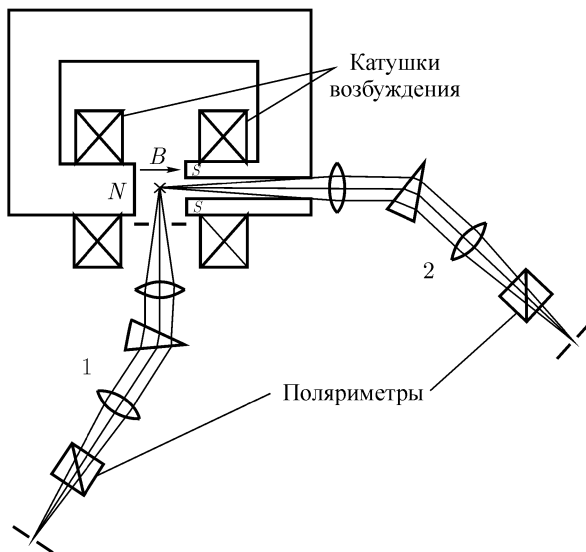


Рис. 76. Исследование поляризации света при эффекте Зеемана: 1 — исследование «поперек поля»; 2 — исследование «вдоль поля».

Опыт показывает, что зеемановские компоненты как при наблюдении вдоль поля, так и при наблюдении поперек поля оказываются поляризованными. Поляризация происходит и при «нормальном», и при «аномальном» эффектах Зеемана. Причина поляризации заключается в том, что каждая компонента зеемановского мультиплета связана со вполне определенным изменением проекции углового момента атома.

Рассмотрим это явление на примере зеемановского триплета (рис. 75). Изображенные на рисунке переходы 1 и 4 происходят при уменьшении  $m_L$ , на единицу;  $m_S$  при оптических переходах не изменяется. Из закона сохранения углового момента следует, что проекция углового момента светового кванта на направление магнитного поля в этом случае равна +1. При наблюдении этой линии вдоль поля мы увидим поэтому кванты, спины которых направлены по направлению движения, т. е. циркулярно поляризованный свет.

Несколько сложнее обстоит дело при наблюдении поперек поля. В этом случае квант обладает единичной проекцией момента на направление, перпендикулярное к направлению его движения. О таких состояниях кванта мы до сих пор не говорили. Из общих соображений ясно, что это состояние может быть представлено в виде некоторой суперпозиции двух основных состояний — состояний с направлением спина по и против направления движения. Чтобы разобраться в этом вопросе до конца, следует, однако, установить сдвиг фаз между этими состояниями. Соответствующий математический аппарат в этой книге не излагался. Мы пойдем несколько, другим путем. С классической точки зрения квант со спином, направленным вдоль магнитного поля, представляет собой электромагнитную волну, в которой вектор  $\mathbf{E}$  вращается в плоскости, перпендикулярной к полю (рис. 77). Эта волна наблюдается и, следовательно, распространяется поперек поля. Нетрудно сообразить, что при наблюдении поперек поля мы увидим, что вектор  $\mathbf{E}$  колеблется по направлению, перпендикулярному к вектору магнитного поля электромагнита. Соответствующая компонента будет поэтому линейно поляризована.

Все сказанное выше непосредственно переносится на линию с  $\Delta m_L = +1$  (переходы 3 и 6 на рис. 75). Эти линии снова являются циркулярно поляризованными (в обратную сторону) при наблюдении вдоль поля и линейно поляризованными при наблюдении поперек поля. Обратимся теперь к несмещенной компоненте (переходы 2 и 5 на рис. 75). В этом случае  $\Delta m_L = \Delta m_S = 0$ . Соответственно квант имеет нулевую проекцию спина на направление магнитного поля. Легко понять, что при наблюдении вдоль поля несмещенная компонента вообще не видна. В самом деле, она должна была бы возникать от квантов, имеющих нулевую проекцию спина на направление движения. Но та-

ких квантов не существует. При наблюдении вдоль поля видны поэтому только две из трех компонент зеемановского триплета.

Рассмотрим теперь поляризацию несмещенной компоненты при наблюдении поперек поля. Чтобы разобраться в явлении, мы должны в этом случае перейти к классическим представлениям. Нетрудно сообразить, что колебания не видны при наблюдении вдоль поля лишь в том случае, если вектор  $\mathbf{E}$  колеблется в этом направлении. Следовательно, несмещенная компонента зеемановского триплета линейно поляризована, причем вектор  $\mathbf{E}$  колеблется вдоль магнитного поля.

Приведенные рассуждения целиком переносятся на компоненты мультиплетов сложного эффекта Зеемана. Отдельные компоненты в этом случае имеют определенную проекцию  $m_J$ , которая с точки зрения поляризационных эффектов ничем не отличается от  $m_L$ , определявших поляризацию компонент «нормального» триплета.

Отметим в заключение, что с точки зрения обычной экспериментальной техники для всех атомов, кроме самых легких, слабые поля являются нормальными, а сильные — необыкновенно сильными. Поэтому названия «нормальный» и «аномальный» по отношению к эффекту Зеемана не выдерживают критики ни с экспериментальной, ни с теоретической точек зрения.

## § 38. Магнитный резонанс

Энергетические уровни частиц (электронов, атомов, атомных ядер, молекул) с отличными от нуля магнитными моментами при наложении магнитного поля испытывают зеемановское расщепление. Спонтанные электромагнитные переходы между компонентами, на которые расщепился уровень, мало вероятны<sup>1</sup>. Однако они происходят под влиянием

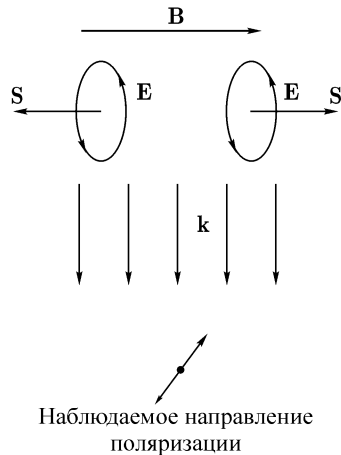


Рис. 77. К определению поляризации света при наблюдении поперек поля.

<sup>1</sup>Проще всего в этом убедиться на примере атома водорода. Расщепление основного уровня связано с различием в величине проекции спина и связанного с ним магнитного момента на вектор магнитной индукции  $\mathbf{B}$ . Переходы между появившимися компонентами уровня возможны поэтому лишь при  $\Delta s \neq 0$ , что запрещено правилами отбора.

достаточно сильного внешнего электромагнитного излучения, если кванты излучения обладают энергией (частотой), равной энергии (частоте) переходов между компонентами уровня, т.е. при выполнении резонансного условия  $\hbar\omega = \Delta U_B$ , или с учетом (7.5)

$$\hbar\omega = g\mu_B B. \quad (7.12)$$

Здесь  $\hbar\omega$  — энергия квантов переменного электромагнитного поля, а  $g\mu_B B$  — расстояние между компонентами расщепившегося уровня (в энергетических единицах) в постоянном магнитном поле с индукцией  $B$ . При выполнении условия (7.12) и наблюдается магнитный резонанс.

В зависимости от типа частиц, магнитный момент которых изучается, различают электронный парамагнитный резонанс (ЭПР) и ядерный магнитный резонанс (ЯМР). В первом случае в условии (7.12) входит магнетон Бора, а во втором — ядерный магнетон  $\mu_N$  и  $g$ -фактор (гиромагнитное отношение) ядра.

Оценим длину волны излучения, удовлетворяющего условию (7.12), в этих двух случаях.

Пусть  $B = 3 \cdot 10^3$  Гс. Тогда для наблюдения ЭПР потребуется излучение с  $\lambda = 2\pi c/\omega = 2\pi c\hbar/g\mu_B B$ . Положив  $g = 2$  и имея в виду, что  $\mu_B = 0,927 \cdot 10^{-20}$  эрг/Гс, получаем

$$\lambda = \frac{6,28 \cdot (3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}) \cdot (1,05 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с})}{2 \cdot (0,927 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/Гс}) \cdot (3 \cdot 10^3 \text{ Гс})} \approx 3 \text{ см}.$$

Этой длине волны соответствует частота  $\nu = 10^4$  МГц. Излучение с такой частотой относится к радиоволнам СВЧ диапазона.

Ядерный магнетон  $\mu_N = e\hbar/2m_p c$  приблизительно в 2000 раз меньше электронного, поэтому ЯМР при том же магнитном поле наблюдается на частотах порядка 5 МГц.

С помощью магнитного резонанса проводятся многие важные исследования: определяются магнитные моменты атомов и атомных ядер, изучаются особенности строения молекул и кристаллов, исследуется кинетика химических реакций и т. д.

Ядерный магнитный резонанс впервые наблюдался в опытах с молекулярными пучками. Метод молекулярных пучков (Раби, 1938 г.) заключается в том, что тонкий пучок нейтральных частиц (атомов, молекул) пропускается в вакууме через магнитные поля и подвергается воздействию радиочастотного поля. На рис. 78 изображена схема установки для наблюдения магнитного резонанса этим методом. Пучок нейтральных частиц вылетает из источника  $I$ , коллимируется диафрагмой  $D$ ,

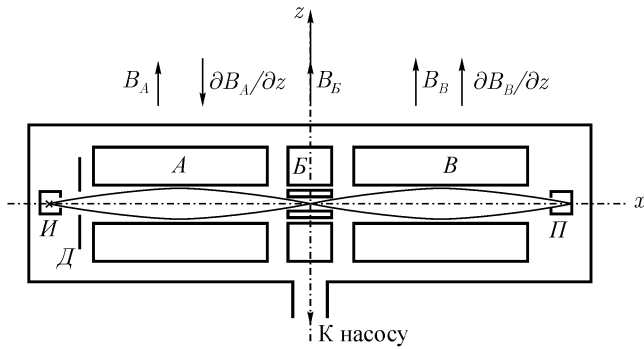


Рис. 78. Схема установки для исследования ЯМР по методу молекулярных пучков.

проходит через магнитное поле магнитов  $A$ ,  $B$  и  $B$  и регистрируется приемником частиц  $\Pi$ . Магнит  $B$  создает сильное однородное поле  $\mathbf{B}_B$ . Поля  $\mathbf{B}_A$  и  $\mathbf{B}_B$  резко неоднородны. Все три поля  $\mathbf{B}_A$ ,  $\mathbf{B}_B$  и  $\mathbf{B}_B$  направлены в одну сторону. Градиенты напряженности магнитов  $A$  и  $B$  направлены в противоположные стороны, как это указано на рис. 78. Поле  $\mathbf{B}_B$  не отклоняет нейтральных частиц, а в неоднородных полях  $\mathbf{B}_A$  и  $\mathbf{B}_B$  частицы отклоняются в противоположные стороны<sup>1</sup>; траектории частиц зависят от величины проекции их магнитного момента на направление поля. Две такие траектории изображены на рис. 78. Индукцию поля  $\mathbf{B}_B$  подбирают так, чтобы отклонение в поле  $\mathbf{B}_A$  компенсировалось отклонением в поле  $\mathbf{B}_B$  (легко видеть, что компенсация одновременно происходит для всех значений проекции  $\mu_z$  на  $\mathbf{B}$ ); при этом в приемник  $\Pi$  попадает наибольшее число частиц. В поле магнита  $B$  уровни испытывают зеемановское расщепление. В зазоре этого магнита создается переменное электромагнитное поле (петля, создающая это поле, изображена на рис. 78 между полюсами магнита  $B$ ) с частотой, удовлетворяющей условию (7.12). Высокочастотное поле вызывает переходы частиц с одного подуровня на другой. Отклонения в магнитах  $A$  и  $B$  происходят у таких частиц при разных значениях проекции магнитного момента на направление поля и не компенсируют друг друга. Число частиц, попадающих в приемник, уменьшается.

Обычно опыты ведут таким образом, что частота генератора, созда-

<sup>1</sup>Напомним, что сила, действующая на магнитный диполь, равна  $\text{grad}(\boldsymbol{\mu}\mathbf{B})$ , где  $\boldsymbol{\mu}$  — магнитный момент, а  $\mathbf{B}$  — индукция магнитного поля. В однородном поле сила обращается в нуль.

ющего переменное электромагнитное поле, держится постоянной, а напряженность поля  $\mathbf{V}_B$  плавно колеблется вокруг некоторого значения. При резонансном значении  $\mathbf{V}_B$  наблюдается резкое уменьшение числа частиц в приемнике. Равенство (7.12) по известным значениям  $\omega$  и  $\mathbf{V}_B$  позволяет определить и, для исследуемых частиц. Точность метода достигает тысячных долей процента. Высокочастотное поле должно быть циркулярно поляризовано или содержать циркулярно поляризованную компоненту. Направление циркулярной поляризации должно совпадать с направлением поля  $\mathbf{V}$ . Чаще всего используется линейно поляризованное (поперек  $\mathbf{V}$ ) поле, которое, как известно, может быть представлено в виде суперпозиции двух циркулярно поляризованных полей.

Методом Раби был с большой точностью измерен и магнитный момент нейтрона. К сожалению, метод молекулярных пучков применим только к нейтральным частицам, что сужает область его использования. В самом деле, в системе координат, связанной с частицей (в которой только и имеет смысл понятие дипольного магнитного момента частицы), движущаяся в этой системе магнитное поле установки приобретает электрическую компоненту  $\mathbf{E} = [\mathbf{v} \times \mathbf{V}]/c$ , которая вызывает сильное смещение при ненулевом электрическом заряде частиц.

В настоящее время метод молекулярных пучков применяется редко. Больше значение имеют методы наблюдения магнитного резонанса в твердых телах и жидкостях, содержащих атомы или ионы с отличным от нуля магнитным моментом (ядерным или электронным). Энергия атомов с  $\mu \neq 0$  во внешнем магнитном поле зависит от ориентации их моментов. При наложении поля через некоторое время устанавливается тепловое равновесие; в соответствии с формулой Больцмана количество атомов, «повернутых вдоль поля» (т. е. с наименьшей энергией) будет больше, чем количество атомов, «повернутых против поля» (с наибольшей энергией). Поэтому результирующий магнитный момент всех атомов образца, помещенного в магнитное поле, оказывается не равным нулю, т. е. образец намагничивается. С этим и связано название «парамагнитный резонанс».

Преимущественная заселенность нижних подуровней приводит к тому, что число атомов, способных поглощать энергию радиочастотного поля, превосходит число атомов, которые могут ее отдавать. Поэтому при наблюдении парамагнитного резонанса обнаруживается поглощение энергии электромагнитного радиочастотного поля. Поглощение электромагнитной энергии приводит к выравниванию количеств атомов в положениях с разными проекциями магнитного момента, а процессы релаксации стремятся вернуть систему к распределению Больцмана. Поэтому величина наблюдаемого эффекта в стационарных условиях зависит от скорости, с которой устанавливается равновесие в образце, т. е.



от времени релаксации магнитных моментов. При больших временах релаксации сигнал парамагнитного резонанса уменьшается по мере выравнивания концентраций в положениях с различными направлениями спина и, наконец пропадает вовсе. Это явление носит название *насыщения*.

Электронный парамагнитный резонанс был открыт советским ученым Е. К. Завойским в 1944 г. Завойский проводил опыты с радиоволнами с длиной волны, равной нескольким дециметрам (в небольших магнитных полях). В связи с развитием техники сантиметровых волн в последнее время для наблюдения ЭПР стали использоваться спектрометры, работающие на длине волны 3 см. Схема наиболее простого такого прибора показана на рис. 79. Исследуемый образец 1 помещается внутрь объемного резонатора 2. Источником монохроматического СВЧ излучения является клистрон 3 (4 — блок питания клистрона, 5 — волномер). От клистрона по волноводу 6 излучение поступает в резонатор 2, проходит сквозь него и принимается детектором 7.

Магнитное поле с помощью специальных модуляционных катушек  $\delta$  колеблется около значения  $B_0$ , соответствующего резонансному условию (7.12). В тот момент, когда оно проходит через значение  $B_0$ , поглощение СВЧ мощности в веществе увеличивается, и прозрачность резонатора падает. Соответственно уменьшается сигнал, поступающий с детектора через усилитель 9 на вертикальные пластины осциллографа 10. Горизонтальная развертка осциллографа синфазна с модуляцией магнитного поля (11 — генератор модуляции магнитного поля, 12 — фазовращатель, 13 — основная обмотка электромагнита). На экране возникает характерная линия поглощения.

С помощью ЭПР получено много важных сведений о кинетике химических реакций, в особенности тех, в которых образуются свободные радикалы, часто играющие роль промежуточных звеньев реакции. Свободные радикалы подобно одновалентным атомам обладают одним электроном с нескомпенсированным спином; для них  $J = 1/2$  и  $\mu = \mu_B$ . Изменение концентрации радикалов в процессе химических реакций легко обнаруживается, если только их количество не слишком мало.

Пёрселл и Блох (1946 г.) разработали методы наблюдения ЯМР в конденсированных средах. На рис. 80 изображена упрощенная схема установки для наблюдения ЯМР, работающей по методу поглощения (1 — контур генератора, 2 — дополнительная катушка, 3 — усилитель, 4 — осциллограф и 5 — образец). Исследуемое вещество помещается в катушку, входящую в состав колебательного контура генератора радиочастоты. Вся установка расположена в сильном однородном магнитном поле<sup>1</sup>, вызывающем зеемановское расщепление энергетических

<sup>1</sup>Для получения сильных полей (до  $20 \cdot 10^4$  Гс) используются сверхпроводящие магниты.

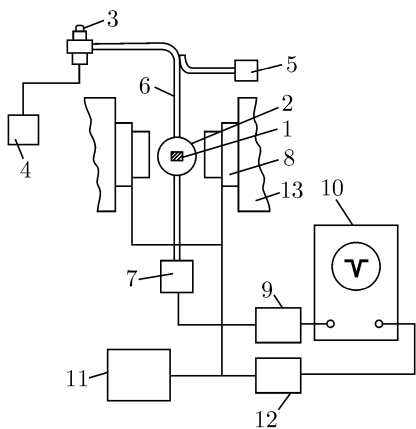


Рис. 79. Блок-схема прибора для наблюдения ЭПР.

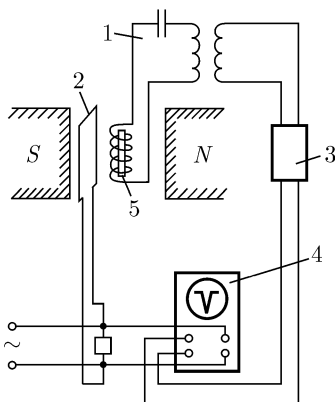


Рис. 80. Исследование ЯМР по методу поглощения.

уровней ядер в образце. Катушка контура располагается так, чтобы переменное поле, создаваемое генератором, было перпендикулярно к постоянному магнитному полю. Если частота генератора удовлетворяет условию (7.12), возникает заметное поглощение энергии и падает добротность колебательного контура. При этом наблюдается уменьшение амплитуды или даже полный срыв генерации. Чаще всего во время опыта частоту генератора не меняют, а напряженность магнитного поля слегка модулируют. Как и при наблюдении ЭПР, сигнал, пропорциональный добавочному магнитному полю, подается на горизонтальный вход осциллографа, а амплитуда генерации наблюдается по вертикальной оси. На огибающей высокочастотного напряжения наблюдается при этом характерный провал.

Метод поглощения с экспериментальной точки зрения проще метода молекулярных пучков и обладает не менее высокой точностью. Этим методом можно изучать вещества в твердом и жидком состояниях, в то время как метод пучков позволяет исследовать изолированные молекулы и атомы. Метод поглощения позволяет проводить исследование с образцами, содержащими всего  $10^{11}$  атомов.

С помощью магнитного резонанса был наиболее точно измерен магнитный момент протона. Значения магнитных моментов протона и нейтрона, полученные описанными выше методами, приведены в гл. 14, § 72.

Как уже отмечалось, аппаратура для наблюдения ЯМР работает в хорошо освоенной области частот. Это позволяет использовать ядер-

ный резонанс для измерения и стабилизации магнитных полей, причем с помощью сравнительно простой аппаратуры удается достичь погрешности  $10^{-5}$ .

Укажем на еще одно важное применение метода ЯМР. В последние годы этот метод все шире используется в медицинской интроскопии («внутривидении») подобно рентгеновским лучам и радиоактивным нуклидам, в отличие от которых он совершенно безвреден. При ЯМР-диагностике используется сигнал резонанса от протонов, концентрация которых особенно велика в мягких тканях. При опухолях и других нарушениях структуры тканей концентрация водорода меняется и сигнал резонанса усиливается или ослабляется. Метод ядерного магнитного резонанса является важным дополнением к рентгеновской диагностике, при которой мягкие ткани видны плохо и которая более пригодна для исследования скелета. (При рентгеновской диагностике сосудов и мягких тканей в кровь или во внутренние полости организма приходится вводить контрастные вещества.)

Разновидностями электронного магнитного резонанса являются ферромагнитный и антиферромагнитный резонансы, связанные с изменением ориентации электронных моментов в ферромагнетиках и антиферромагнетиках, а также диамгнитный резонанс на свободных носителях в полупроводниках и циклотронный резонанс на свободных электронах в металлах.

## ГЛАВА 8

# ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ

Из курса молекулярной физики читатель уже знаком с основными формулами классической статистики. В кинетической теории газов распределения частиц описываются формулами

$$\begin{aligned}dN_M &= A \exp(-E_k/kT) dp_x dp_y dp_z \\ &\text{(распределение Максвелла),} \\ dN_B &= A' \exp(-E_{\text{пот}}/kT) dx dy dz \\ &\text{(распределение Больцмана),}\end{aligned}\tag{8.1}$$

где  $E_k$  — кинетическая, а  $E_{\text{пот}}$  — потенциальная энергия,  $T$  — температура газа,  $k$  — постоянная Больцмана,  $A$  и  $A'$  — нормировочные константы, зависящие от числа частиц. Оба, эти распределения<sup>1</sup> содержат идентичный множитель  $\exp(-E/kT)$ , который мы будем называть множителем Больцмана.

Квантовая теория показывает, что формула (8.1) нуждается в уточнениях. При выводе формулы Максвелла отыскивается наиболее вероятное распределение частиц, т. е. распределение, которое может быть достигнуто наибольшим числом способов. Это распределение находится с помощью обычных методов комбинаторики. При подсчете числа комбинаций предполагается, что частицы одного и того же сорта можно отличить друг от друга. Это означает, например, что распределение, при котором первая частица находится в состоянии  $A$ , а вторая — в состоянии  $B$ , и распределение, при котором в состоянии  $A$  находится вторая частица, а в состоянии  $B$  — первая, являются двумя разными распределениями. Мы знаем теперь, что это не так: частицы одного сорта ничем не отличаются друг от друга, и установить, какая из них является первой, а какая второй, невозможно. Указанные распределения должны

---

<sup>1</sup>В классической статистике используется также распределение Максвелла по скоростям, но оно нам не понадобится.

считаться поэтому за одно, а не за два разных состояния. Таким образом, квантовая физика и классическая физика приводят к различным формулам для расчета числа возможных состояний (к разным правилам комбинаторики) и соответственно к разным формулам для расчета вероятностей или, как обычно говорят, к разным статистикам.

Правила квантовой комбинаторики различаются для частиц с целыми (0, 1, 2 и т.д.) и полуцелыми ( $1/2$ ,  $3/2$  и т.д.) значениями спина. Частицы с полуцелым спином подчиняются принципу Паули: никакие две частицы одного сорта не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии. Комбинаторика, учитывающая неразличимость частиц и принцип Паули, приводит к замене классической статистики статистикой Ферми – Дирака (или просто статистикой Ферми) и распределения Максвелла — распределением Ферми – Дирака. Частицы, подчиняющиеся статистике Ферми – Дирака, называются фермионами. Статистика Ферми описывает поведение электронов в твердых телах и нуклонов в атомных ядрах и понадобится нам при изучении многих свойств твердых тел и для понимания важнейших особенностей ядер.

Частицы с целым спином (например, фотоны) принципу Паули не подчиняются; любое их количество может находиться в одном и том же квантовом состоянии. В этом случае квантовая комбинаторика приводит к статистике и распределению Бозе – Эйнштейна. Частицы, подчиняющиеся статистике Бозе – Эйнштейна (или просто статистике Бозе), называются бозонами. Статистика Бозе потребуется нам для вывода формулы Планка, описывающей спектр равновесного теплового излучения, а также для расчета теплоемкости твердых тел.

## § 39. Число квантовых состояний. Статистический вес

Как уже отмечалось, основной постулат статистической физики утверждает, что равновесным является наиболее вероятное распределение, т.е. распределение, которое может быть получено наибольшим числом способов. (При расчете будем считать, что частицы не взаимодействуют друг с другом и что все распределения, приводящие к данной суммарной энергии частиц, равновероятны.) Чтобы найти такое распределение, нужно прежде всего знать число состояний, по которым могут распределяться исследуемые частицы. Рассчитаем это число для электромагнитного излучения, т.е. для фотонов. Полученные формулы нетрудно будет затем обобщить на любые другие частицы.

Заклучим излучение в зеркальный ящик. Запертые в ящике фотоны не могут уходить на бесконечность. Их энергетические уровни,

следовательно, квантуются. Найдем соответствующие формулы. Пусть зеркальный ящик имеет форму параллелепипеда, как это изображено на рис. 81. Обозначим длины его сторон через  $A$ ,  $B$ ,  $C$ .

Пси-функцией фотонов являются световые волны<sup>1</sup>. Стационарные состояния, соответствующие определенным уровням энергии фотона, описываются стоячими волнами. Стоячие волны в прямоугольном ящике могут быть представлены в виде разложения по волнам, зависящим от каждой координаты:

$$\psi(x, y, z) = \sum_{n,m,l} A_{n,m,l} \sin(k_x n x) \sin(k_y m y) \sin(k_z l z). \quad (8.2)$$

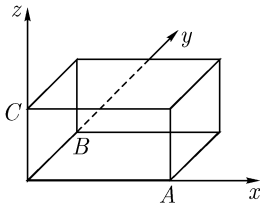


Рис. 81. Зеркальный ящик, в который «заперто» излучение.

Зависимость от времени в (8.2) опущена. (Она входит в волновую функцию в виде обычных множителей  $\exp(-i\omega t)$  и сейчас не будет для нас представлять интереса.) Частота света связана с волновым числом известным соотношением

$$\omega = kc = c\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}. \quad (8.3)$$

Выберем в качестве светового вектора электрический вектор волны  $E_{эл}$ . На гранях зеркального ящика вектор  $E_{эл}$  должен обращаться в нуль. Выбор в качестве тригонометрической функции синуса (а не косинуса) в разложении (8.2) обеспечивает обращение  $E_{эл}$  в нуль на гранях  $x = 0$ ,  $y = 0$  и  $z = 0$ . Чтобы  $E_{эл}$  обращалось в нуль на остальных гранях параллелепипеда, должны быть выполнены условия  $k_x A = n\pi$ ,  $k_y B = m\pi$ ,  $k_z C = l\pi$ , или

$$k_x = n\pi/A, \quad k_y = m\pi/B, \quad k_z = l\pi/C,$$

где  $n$ ,  $m$ ,  $l$  — произвольные целые положительные числа<sup>2</sup>. Эти формулы определяют квантование энергии фотонов, поскольку

$$E = c|\mathbf{p}| = \hbar c|\mathbf{k}| = \hbar c\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}. \quad (8.4)$$

Рассчитаем число фотонных квантовых уровней в области, где энергия фотонов меньше некоторого  $E_0$ . Для этого следует рассчитать число

<sup>1</sup>Как мы уже отмечали, световая волна и  $\psi$ -функция фотонов на самом деле различаются коэффициентом пропорциональности, что для дальнейших рассуждений несущественно.

<sup>2</sup>При целых отрицательных числах  $n$ ,  $m$ ,  $l$  не возникает новых решений, поэтому их рассматривать не следует.

разрешенных наборов  $k_x, k_y, k_z$  в области  $k < k_0 = E_0/c\hbar$ . Как видно из рис. 82, это число равно числу разрешенных точек, помещающихся в положительном октанте сферы, описанной радиусом  $r = k_0$  в пространстве, по осям которого отложены  $k_x, k_y, k_z$ . В этом пространстве разрешенные состояния располагаются в виде точек, находящихся в углах «кристаллической решетки» с шагами  $\pi/A, \pi/B$  и  $\pi/C$  по трем осям. Сечение этого пространства плоскостью  $k_z = \text{const}$  изображено на рис. 83. В такой «решетке» каждое разрешенное состояние (каждая точка на рис. 83) принадлежит восьми ячейкам (четыре ячейки расположены под секущей плоскостью и четыре — над ней), а каждая ячейка представляет собой параллелепипед и содержит восемь разрешенных состояний, соответствующих углам ячейки. Объем, приходящийся на каждый узел, равен, следовательно, объему одной ячейки, т.е.  $(\pi/A)(\pi/B)(\pi/C) = \pi^3/V$ , где  $V$  — объем зеркального ящика. Чтобы найти число разрешенных состояний в октанте сферы, следует разделить объем всего октанта на объем, приходящийся на каждое разрешенное состояние. Полное число фотонных состояний будет на самом деле вдвое больше указанного, так как во всяком разрешенном состоянии возможны две независимые поляризации. Имеем поэтому

$$N(E_0) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi k_0^3 : \frac{\pi^3}{V} = \frac{1}{3\pi^2} k_0^3 V. \quad (8.5)$$

В этой формуле  $N(E_0)$  определяет число различных возможных фотонных состояний с энергией, меньшей  $E_0$ .

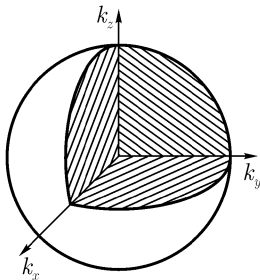


Рис. 82. К расчету числа состояний. Сфера в пространстве волновых чисел.

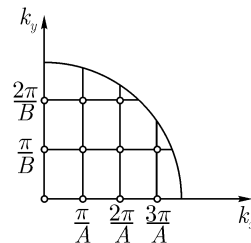


Рис. 83. К расчету числа состояний. «Разрешенные точки» на плоскости волновых чисел.

Преобразуем формулу (8.5) к виду, удобному для запоминания. Перейдем от волнового числа к импульсу  $p$  посредством обычного соот-

ношения  $p = k\hbar$ . Рассмотрим шестимерный фазовый объем  $\Gamma$ , по трем осям которого отложены пространственные координаты, а по трем другим осям — составляющие импульса фотона. Полный шестимерный объем равен произведению объема в пространстве координат на объем  $(4/3)\pi p_0^3$  в пространстве импульсов (при  $p < p_0$ )

$$\Gamma = (4/3)\pi p_0^3 V. \quad (8.6)$$

Подставляя (8.6) в (8.5) и перейдя от  $k_0$  к  $p_0$ , найдем

$$N = 2 \frac{\Gamma}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (8.7)$$

Формула (8.7) является частным случаем очень общей формулы

$$N = (2J + 1) \frac{\Gamma}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (8.8)$$

позволяющей рассчитывать число разрешенных состояний любых частиц. Множитель  $2J + 1$  ( $J$  — момент импульса) определяет число состояний, не связанных с перемещением частицы в пространстве (число возможных проекций спина). У фотона это число определяется числом возможных направлений поляризации и равно 2.<sup>1</sup>

Обратимся теперь к множителю  $\Gamma/(2\pi\hbar)^3$ . Этот множитель показывает, что число состояний, зависящих от перемещения в пространстве, пропорционально фазовому объему  $\Gamma$ . Из структуры этого множителя ясно, что знаменатель  $(2\pi\hbar)^3$  равен величине фазового объема, приходящегося на одно состояние. Этот результат имеет фундаментальное значение. В плоских задачах вместо  $(2\pi\hbar)^3$  следует писать  $(2\pi\hbar)^2$ , а в одномерных — просто  $2\pi\hbar$ . Таким образом, на одно состояние для каждой координаты приходится фазовый объем, равный  $2\pi\hbar$ .

Величина фазового объема, приходящегося на каждую координату,  $2\pi\hbar$ , с точки зрения принципа неопределенности представляется вполне естественной. Произведение неопределенностей координаты и импульса  $\Delta x \Delta p \approx 2\pi\hbar$ . Эта величина и определяет «место», занимаемое в фазовом объеме каждым квантовым состоянием.

Рассчитаем теперь  $g(E)$  — число уровней, приходящихся на единичный интервал энергии. По определению, имеем

$$g(E)\Delta E = N(E + \Delta E) - N(E) = \frac{dN(E)}{dE} \Delta E.$$

<sup>1</sup>Из-за «поперечности» световой волны проекция спина фотона может принимать два, а не три значения и множитель  $2J + 1$  должен быть заменен на 2.



Величина  $dN(E)/dE$  для фотонов легко может быть найдена из (8.5). Как мы уже отмечали, однако, эта формула неудобна для запоминания и не обладает достаточной общностью. Покажем, как вычисляется  $g(E)$  из общей формулы (8.8):

$$g(E)dE = \frac{dN}{dE}dE = \frac{dp}{dE} \frac{dN}{dp}dE = (2J+1) \frac{dp}{dE} \frac{d}{dp} \left( \frac{4}{3} \frac{\pi p^3 V}{(2\pi\hbar)^3} \right) dE,$$

или

$$g(E)dE = (2J+1) \frac{4\pi p^2 V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp}{dE} dE. \quad (8.9)$$

Эта формула имеет простой физический смысл. Множитель  $4\pi p^2 dp$  равен объему шарового слоя в импульсном пространстве. Умножение этого объема на  $V$  дает величину фазового объема  $d\Gamma$ , приходящегося на интервал  $dp$ . Наконец, умножение на  $(2J+1)/(2\pi\hbar)^3$  дает искомое число уровней. Формула (8.9) является общей. Для фотонов вместо  $2J+1$  следует подставить 2 и принять во внимание, что  $E = pc$ , так что

$$g(E)dE = \frac{VE^2}{\pi^2 c^3 \hbar^3} dE \quad (\text{фотоны}). \quad (8.10)$$

Для частиц, обладающих отличной от нуля массой, при не слишком больших скоростях  $p = \sqrt{2mE}$ . Подставляя это выражение в (8.9), найдем

$$g(E)dE = (2J+1) \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi\hbar^3} V \sqrt{E} dE \quad (8.11)$$

(нерелятивистские частицы с массой  $m$ ).

Величина  $g(E)$ , определяемая формулами (8.9), (8.10) или (8.11), равна числу уровней, приходящихся на единичный интервал энергии. Она называется статистическим весом и играет огромную роль в физике. *Статистический вес всегда пропорционален объему, занятому частицами. Статистический вес увеличивается с энергией и при малых энергиях стремится к нулю. При малых энергиях уровни (квантовые состояния) расположены редко, а при больших энергиях сближаются и в классическом пределе располагаются непрерывно.* Такое поведение статистического веса связано с трехмерным характером рассматриваемой задачи — с множителем  $4\pi p^2 dp$  в (8.9).

## § 40. Заполнение уровней. Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака

Рассчитаем теперь число способов, которыми можно распределить имеющиеся частицы по квантовым уровням. Как мы уже знаем, цель расчета заключается в том, чтобы найти наиболее вероятное распределение частиц. Это распределение и должно обнаруживаться на опыте. Разобьем энергетический интервал на ряд следующих друг за другом областей с одинаковым шагом  $\Delta E$  между ними. Выберем размер шага небольшим, чтобы внутри каждой области распределение частиц по уровням можно было считать равномерным. Потребуем вместе с тем, чтобы ширина  $\Delta E$  была велика по сравнению с расстоянием между уровнями. Тогда в каждой области поместится много уровней и можно будет применять статистический метод расчета к каждой области в отдельности. Легко видеть, что при достаточно большом ящике (см. (8.9), (8.10)) плотность уровней оказывается огромной и эти требования не противоречат друг другу.

При расчете числа способов, которыми можно осуществить всякое данное распределение, важно помнить, что частицы неотличимы друг от друга. Мы уже об этом говорили. Состояние, в котором первая частица находится на уровне 1, а вторая — на уровне 2, неотлично от состояния, в котором на уровне 1 находится вторая, а на уровне 2 — первая частица. При расчете числа способов распределения частиц по уровням мы должны считать эти размещения за одно, а не за два.

Дальнейшие расчеты будут проведены для фотонов, т. е. для частиц с целым спином, на которые принцип Паули не распространяется. Формулу для фермионов мы приведем без вывода.

Возьмем для расчетов один из выбранных выше энергетических интервалов. Присвоим ему индекс  $i$ . Пусть в этом интервале имеется  $g_i$  и возможных фотонных состояний и  $n_i$  квантов. Число способов, которыми можно разместить  $n_i$  неразличимых между собой квантов при  $g_i$  возможных состояниях, можно вычислить с помощью обычных методов комбинаторики. Оно равно

$$\frac{(g_i + n_i - 1)!}{(g_i - 1)! n_i!}.$$

Для вывода этой формулы применим следующий прием. Отделим уровень  $y_1$  от остальных. Все остальные уровни и кванты будем считать равноправными объектами, вначале не различая, где квант ( $i$ ), а где уровень ( $y$ ). Полное число объектов будет равно  $n_i + g_i - 1$ . Выстроим все объекты в произвольном порядке в одну линию справа от уровня  $y_1$ . Пусть при этом, например,

возникает комбинация

$$y_1, i_8, i_9, i_{27}, y_6, y_{14}, i_{11}, i_{28}, y_{16}, \dots$$

Придадим этой комбинации следующий смысл. Поместим все кванты на первый находящийся слева от них уровень. В нашем случае восьмой, девятый и двадцать седьмой кванты попадут на первый уровень, шестой уровень окажется пустым, одиннадцатый и двадцать восьмой кванты попадут на четырнадцатый уровень, и т. д. Теперь ясно, зачем первый уровень с самого начала был исключен из рассмотрения и помещен в начало последовательности. Если бы это не было сделано, первым мог оказаться не уровень, а квант, который в этом случае остался бы без места.

Вычислим число возможных перестановок из  $(g_i + n_i - 1)$  объектов. Как известно, оно равно  $(g_i + n_i - 1)!$  Учтем теперь, что каждое состояние было сосчитано много раз. При нашем способе расчета расстановки  $y_1 i_2 y_2 i_1$  и  $y_2 i_1 y_1 i_2$ , например, считались различными, хотя они тождественны даже с точки зрения классической физики: в обоих случаях на уровне  $y_1$  находится второй квант, а на уровне  $y_2$  — первый. Переставляя между собой уровни (но не меняя их заполнения фотонами!), мы обнаружим, что каждое состояние было сосчитано  $(g_i - 1)!$  раз. Учтем теперь неразличимость квантов. Число способов, которыми можно переставить кванты, равно  $n_i!$

Итак, число способов, которыми можно разместить  $n_i$  квантов по  $g_i$  уровням, равно

$$\frac{(g_i + n_i - 1)!}{(g_i - 1)! n_i!}.$$

Рассчитаем теперь число способов, которыми можно осуществить распределение, при котором в первой энергетической области находится  $n_1$  фотонов, во второй —  $n_2$  фотонов, и т. д. Расстановка фотонов в разных энергетических областях не зависит друг от друга. Поэтому полное число способов  $P$  равно произведению:

$$P = \prod_i \frac{(g_i + n_i - 1)!}{(g_i - 1)! n_i!}. \quad (8.12)$$

Как было уже указано, «истинным» распределением является то, которое может быть достигнуто наибольшим числом способов, т. е. распределение, при котором  $P$  имеет максимум. При отыскании максимума следует помнить, что полная энергия излучения определяется температурой стенок и должна считаться заданной. В то же время число фотонов является свободным, так как они непрерывно поглощаются и испускаются стенками<sup>1</sup>. Обозначая через  $E_i$  среднюю энергию фотонов в  $i$ -й

<sup>1</sup>Идеально зеркальные стенки не поглощают и не испускают фотонов. Однако достаточ-

энергетической области, найдем, что максимум выражения (8.12) следует искать при условии, что полная энергия излучения  $\varepsilon$  задана:

$$\varepsilon = \sum_i E_i n_i = \text{const.} \quad (8.13)$$

Итак, наша задача сводится к вычислению максимума функции (8.12) при условии (8.13). Расчет показывает, что этот максимум достигается при

$$n_i = g_i \frac{1}{\exp(E_i/\theta) - 1}, \quad (8.14)$$

где  $\theta$  — некоторое число, смысл которого еще предстоит установить.

Выведем формулу (8.14). Находить максимум произведения сложно. Существенно проще вычислять максимум функции  $S = \ln P$ , являющейся суммой, а не произведением членов, относящихся к отдельным уровням.

Применяя формулу Стирлинга

$$\ln n! \approx n \ln n - n,$$

которая справедлива при больших  $n$ , и пренебрегая в (8.12) единицей по сравнению с большими числами  $g_k$  и  $n_k$ , найдем

$$\begin{aligned} S = \ln P &= \sum_k [\ln(g_k + n_k)! - \ln g_k! - \ln n_k!] = \\ &= \sum_k [(g_k + n_k) \ln(g_k + n_k) - g_k \ln g_k - n_k \ln n_k]. \end{aligned}$$

Задача сводится к тому, чтобы найти максимум этого выражения при условии

$$F = \varepsilon - \sum_k E_k n_k = 0.$$

Используя метод неопределенных множителей Лагранжа для нахождения условного экстремума функции многих переменных, найдем

$$dS + (1/\theta) dF = 0,$$

где  $\theta$  — некоторый множитель (обозначение  $1/\theta$  введено здесь вместо обычного лагранжева обозначения  $\lambda$ ).

---

но, чтобы стенки чуть-чуть «потускнели», чтобы такое взаимодействие начало происходить и установилось тепловое равновесие между стенками и излучением. Небольшое «потускнение» стенок не сказывается на расчете числа фотонных состояний.

Вариация  $dS$  должна вычисляться при переменных  $n_k$  и постоянных  $g_k$ , поскольку число уровней задано, а заполнение их может меняться. Наше уравнение примет при этом вид

$$\sum_i \left[ dn_i \ln(g_i + n_i) + \frac{g_i + n_i}{g_i + n_i} dn_i - dn_i \ln n_i - \frac{n_i}{n_i} dn_i - \frac{1}{\theta} E_i dn_i \right] = 0,$$

или

$$\sum_i dn_i \left( \ln \frac{g_i + n_i}{n_i} - \frac{E_i}{\theta} \right) = 0.$$

Поскольку это равенство должно выполняться при любых  $dn_i$ , имеем

$$\ln \frac{g_i + n_i}{n_i} = \frac{E_i}{\theta}.$$

Из этой формулы следует (8.14).

Выясним смысл постоянной  $\theta$ . Рассмотрим распределение квантов по очень высоким уровням. При больших  $E_i$  уровни мало заселены, и при расчете числа возможных распределений становится несущественным, являются ли кванты различимыми или неразличимыми. Следует поэтому ожидать, что найденные формулы перейдут в классические.

При больших  $E_i$  экспоненциальный член в знаменателе (8.14) становится велик, и единицей можно пренебречь по сравнению с ним. Отношение  $n_i/g_i$  равно вероятности заселения уровней с энергией  $E_i$ . Мы видим, что вероятность заселения при больших  $E_i$  равна  $\exp(-E_i/\theta)$ . Сравнивая это выражение с формулой Максвелла (8.1), находим, что

$$\theta = kT,$$

где  $k$  — постоянная Больцмана. Подставляя  $\theta = kT$  в (8.14), найдем окончательно

$$n_i = g_i \frac{1}{\exp(E_i/kT) - 1}. \quad (8.15)$$

Исследуем структуру полученной формулы. Первый множитель в правой части равен числу уровней в рассматриваемом интервале. Значит, второй множитель показывает, сколько фотонов — в среднем — находится на каждом уровне. Это число равно

$$\boxed{n_{\text{фот}} = \frac{1}{\exp(E/kT) - 1}}. \quad (8.16)$$

Формула (8.16) заменяет формулу Максвелла для электромагнитного излучения.

Приведем формулу для других бозонов. Если масса частиц отлична от нуля, то в дополнение к условию (8.13), задающему энергию частиц, появляется еще одно условие — неизменность их числа. Решение задачи об отыскании экстремума приводит в этом случае к формуле

$$n_{\text{Бозе}} = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/kT] - 1}. \quad (8.17)$$

Формулы (8.16) и (8.17) определяют распределение Бозе – Эйнштейна. Параметр  $\mu$  носит название химического потенциала. Его величина определяется по числу имеющихся частиц: заменяя второй множитель в (8.15) на (8.17), получим очевидную формулу для определения  $\mu$ :

$$N = \sum_i g_i \frac{1}{\exp[(E_i - \mu)/kT] - 1}. \quad (8.18)$$

Для фермионов (частиц с полуцелым спином) вместо (8.17) следует писать

$$n_{\text{Ферми}} = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/kT] + 1}. \quad (8.19)$$

Эта формула выводится аналогично (8.16) и называется распределением Ферми – Дирака. Мы приводим ее здесь без вывода. Химический потенциал  $\mu$  в (8.19) обычно называется энергией Ферми. Как и для бозонов, его величина определяется числом частиц.

Заметим, что при распределении Ферми  $n$  не может быть большим единицы, так как в знаменателе (8.19) к единице прибавляется существенно положительная величина. Этого, конечно, и следовало ожидать, поскольку принцип Паули не позволяет двум частицам находиться в одном квантовом состоянии. Каждое состояние может быть либо занято, либо свободно, — в среднем занято меньше чем один раз. Это простое рассуждение позволяет запомнить, что между экспонентой и единицей в знаменателе распределения Ферми стоит знак плюс, а в знаменателе распределения Бозе — знак минус.

В системе частиц, занимающей объем  $V$ , распределение частиц, по импульсу в классической физике определяется (8.1)<sup>1</sup>:

$$dN = A \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) V dp_x dp_y dp_z = A \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) d\Gamma$$

<sup>1</sup>В (8.1) объем  $V$  входит в нормировочную константу  $A$ .

или

$$dN = A \frac{(2\pi\hbar)^3}{2J+1} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \frac{2J+1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\Gamma}{dE} dE. \quad (8.20)$$

Множитель  $\frac{2J+1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\Gamma}{dE} dE$  равен числу квантовых состояний  $g(E) dE$  в интервале энергии  $dE$  (см. (8.9)). Преобразуем первый множитель формулы (8.20), введя потенциал  $\mu$  по формуле

$$\ln \mu = \frac{1}{kT} A \frac{(2\pi\hbar)^3}{2J+1}. \quad (8.21)$$

После этого распределение Максвелла принимает вид

$$dN = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/kT]} g(E) dE.$$

Сравнивая эту формулу с (8.15), найдем, что число частиц  $n$ , приходящихся на одно квантовое состояние, определяется множителем Больцмана, имеющим вид

$$n = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/kT]}. \quad (8.22)$$

Эту формулу и следует сравнивать с (8.17) и (8.19). Распределения (8.17), (8.19) и (8.22) изображены на рис. 84. При больших значениях аргумента, когда среднее число частиц, приходящихся на каждый уровень, оказывается много меньше единицы, все три распределения совпадают — квантовые распределения переходят в классическое.

Рассмотрим распределение Ферми при низких температурах. Если энергия состояния хотя бы и не намного (на несколько  $kT$ ) превосходит энергию Ферми  $\mu$ , то в знаменателе формулы (8.19) появляется очень большое число, и заполнение оказывается малым: *при низких температурах уровни, расположенные выше энергии Ферми, не заполнены*. Если, наоборот, энергия уровня меньше энергии Ферми (на несколько  $kT$ ), то экспоненциальный множитель мал и почти ничего не прибавляет к единице. *Уровни, расположенные ниже энергии Ферми, заполнены*. Между этими областями имеется область, ширина которой по порядку величины равна нескольким  $kT$ . В этой области происходит переход от заполненных уровней к пустым. При низких температурах этот переход очень резок, так что все нижние уровни, вплоть до некоторого, полностью заняты, а все верхние — совсем пусты. Вопрос о том, какие температуры являются достаточно низкими, зависит от конкретной ситуации, т. е. от плотности уровней и от числа имеющихся частиц

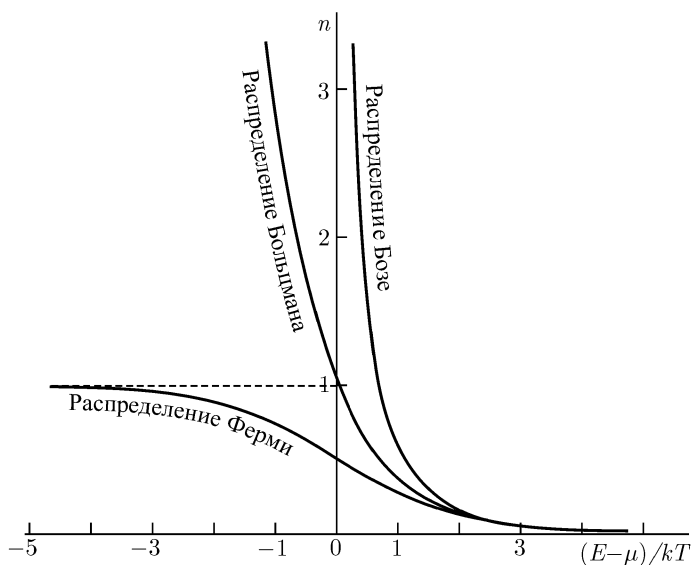


Рис. 84. Распределения Бозе, Ферми и Больцмана.

(точнее — от их плотности, т.е. от числа частиц в единице объема). Для протонов и нейтронов в ядрах и для электронов в твердых телах «достаточно низкими» оказываются обычные температуры.

Обратимся теперь к распределению Бозе. Число частиц, которые могут находиться на одном уровне, при распределении Бозе не ограничено единицей и при малых значениях  $(E - \mu)/kT$  может оказаться очень большим. Скопление частиц на нижних уровнях характерно и для классического распределения Максвелла–Больцмана. У бозонов это скопление выражено еще сильнее. Более того, при достаточно низких температурах в одном-единственном состоянии с  $E = 0$ , несмотря на его равный нулю статистический вес (см. (8.11)), скапливается конечное, а иногда и большое число частиц. Это явление носит название бозе-конденсации, а совокупность частиц с  $E \equiv 0$  называется бозе-конденсатом или просто конденсатом. С образованием конденсата связаны явления сверхтекучести и сверхпроводимости.

Появление бозе-конденсата при низких температурах легко понять, анализируя (8.18). Запишем эту формулу для инфинитного движения, когда распределение частиц по энергии является непрерывным, для чего заменим сумму



интегралом. Статистический вес состояния возьмем из (8.11):

$$N = (2J + 1) \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2} \pi^2 \hbar^3} V \int_0^\infty \frac{\sqrt{E} dE}{\exp[(E - \mu)/kT] - 1}. \quad (8.23)$$

Исследуем эту формулу. Знаменатель подынтегрального выражения определяет среднее число частиц в состоянии с энергией  $E$  и должен быть положительной величиной. Для этого необходимо, чтобы  $\exp[(E - \mu)/kT]$  было больше единицы, а значит, чтобы  $E - \mu$  не принимало отрицательных значений ни при каких  $E$ , включая  $E = 0$ . Из этого требования следует, что

$$\mu \leq 0. \quad (8.24)$$

Теперь нетрудно показать, что при достаточно низких температурах формула (8.23) не может выполняться, так как правая часть оказывается меньше левой. Исследуем входящий в нее интеграл. При выполнении условия (8.24)

$$I = \int_0^\infty \frac{\sqrt{E} dE}{\exp[(E - \mu)/kT] - 1} \leq \int_0^\infty \frac{\sqrt{E} dE}{\exp(E/kT) - 1}.$$

Введем вместо  $E$  переменную  $x = E/kT$ :

$$I \leq (kT)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1}. \quad (8.25)$$

Входящий в эту формулу интеграл является некоторым числом (можно показать, что он равен 2.3). При уменьшении температуры (8.25), а вместе с ним и правая часть (8.23), уменьшается как  $T^{3/2}$  и становится меньше любого наперед заданного числа. Вследствие этого формула (8.23) при низких температурах не может выполняться. Это означает, что часть входящих в  $N$  частиц должна находиться в состоянии, ничего не вносящем в интеграл  $I$ . Им является состояние с  $E \equiv 0$ , хотя оно и обладает нулевым статистическим весом. Частицы, находящиеся в этом состоянии, и образуют бозе-конденсат.

## ГЛАВА 9

# ТЕПЛОВОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

В этой главе будут рассмотрены свойства равновесного теплового излучения, т. е. электромагнитного излучения, находящегося в тепловом равновесии со стенками полости, в которой оно заключено. Исследование свойств такого излучения долгое время являлось одним из центральных вопросов физики. Развивая теорию равновесного излучения, Планк ввел в науку квант действия  $h$ <sup>1</sup>. При изложении свойств теплового излучения, мы, как и в предыдущих главах, откажемся от следования по историческому пути ради ясности и краткости изложения.

### § 41. Равновесное излучение. Закон Кирхгофа

Рассмотрим два непрозрачных тела, обменивающихся электромагнитным излучением и имеющих одинаковую температуру. Заклучим эти тела в зеркальную оболочку, полностью отражающую излучение. Такая оболочка играет в нашем случае роль обычной в термодинамике адиабатической оболочки, изолирующей тела от окружающего мира. По второму принципу термодинамики ни одно из этих тел не может нагревать другое. Это требование приводит к важным следствиям.

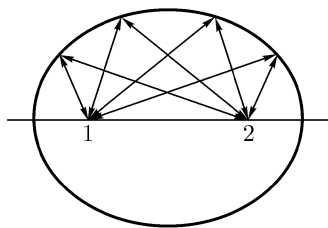


Рис. 85. Источники света в зеркальной оболочке эллипсоидальной формы.

Пусть, для простоты, оболочка имеет вид эллипсоида, а тела помещены в его фокусы (рис. 85). По известной из оптики теореме все излучение, уходящее от первого тела, попадает в этом случае на второе, а все излучение, уходящее от второго тела, — на первое. Отметим индексом 1 величины, относящиеся к первому телу, и индексом 2 — ко второму.

<sup>1</sup>Квант действия  $h = 2\pi\hbar = 6,626 \cdot 10^{-27}$  эрг·с.

Обозначим через  $U_1$  и  $U_2$  потоки энергии, излучаемые этими телами. Эти потоки не равны потокам  $W_1$  и  $W_2$ , уходящим от тел, поскольку уходящая от каждого из них энергия складывается из излучаемой и отражаемой. Запишем это утверждение в виде формулы. Введем для этого коэффициент поглощения  $\alpha$ , равный отношению интенсивностей поглощенного и падающего на тело излучения. Так как излучение, падающее на тело, может либо отражаться, либо поглощаться, то коэффициент отражения равен  $(1 - \alpha)$ .<sup>1</sup> Поток энергии, отраженной первым телом, равен поэтому  $(1 - \alpha_1)W_2$  (энергия падающего на первое тело излучения равна уходящей от второго тела энергии  $W_2$ ). Таким образом,

$$W_1 = U_1 + (1 - \alpha_1)W_2. \quad (9.1)$$

Аналогичная формула может быть записана и для второго тела, но она нам не потребуется.

Заметим теперь, что при равновесии поток энергии  $U_1$ , испускаемой первым телом, равен поглощаемому им потоку энергий  $\alpha_1 W_2$ :

$$U_1 = \alpha_1 W_2. \quad (9.2)$$

Подставляя (9.2) в (9.1), получим

$$W_1 = W_2. \quad (9.3)$$

Эта формула показывает, что *при тепловом равновесии уходящая от тел электромагнитная энергия не зависит от конкретных свойств этих тел*. Не зависящее от свойств испускающих тел тепловое излучение представляет само по себе физический объект, изучению которого и посвящена настоящая глава.

Аналогично (9.2) можно записать

$$U_2 = \alpha_2 W_1. \quad (9.4)$$

Деля (9.2) на (9.4) и замечая, что  $W_1 = W_2$ , найдем

$$\frac{U_1}{\alpha_1} = \frac{U_2}{\alpha_2}. \quad (9.5)$$

Таким образом, *количество энергии, излучаемой телом, пропорционально его коэффициенту поглощения*.

---

<sup>1</sup>Коэффициент поглощения  $\alpha$  и коэффициент отражения  $1 - \alpha$  называются также поглощательной и отражательной способностью тела и являются безразмерными величинами.

Установим во второй фокус тело, поглощающее все падающее на него излучение. Такие тела называются *абсолютно черными*<sup>1</sup>. По определению, в этом случае  $\alpha_2 = 1$ . Формула (9.5) показывает, что *излучение абсолютно черных тел является максимально возможным при данной температуре*. Энергия, излучаемая любым другим телом, может быть найдена путем умножения энергии, излучаемой абсолютно черным телом, на коэффициент поглощения рассматриваемого тела. Сформулированное правило справедливо, конечно, не только для полной излучаемой телом энергии, но и для энергии  $R_3$ , излучаемой телом в единицу времени с единицы поверхности. Физическая величина  $R_3$ , называется *энергетической светимостью* или *интегральной излучательной способностью* тела и является функцией температуры.

Обозначим через  $R_3^*$  энергетическую светимость абсолютно черного тела. Тогда энергетическая светимость тела, имеющего коэффициент поглощения  $\alpha$ , равна

$$R_3 = \alpha R_3^*. \quad (9.6)$$

Соотношение (9.6) называется *законом излучения Кирхгофа*.

Формулы (9.5) и (9.6) часто вначале вызывают удивление. В их справедливости, однако, убеждает нас повседневный опыт. Горячее, но прозрачное для излучения пламя спиртовой горелки почти не испускает света. Зато ярко светится более холодное пламя керосиновой лампы, содержащее частицы черной сажи, сгорающие лишь в самой верхней части пламени (или не сгорающие вовсе, когда лампа коптит).

Окружим теперь изображенные на рис. 85 тела 1 и 2 зеркальными сферами, пропускающими излучение в узком диапазоне частот и отражающими всякое другое излучение. Поскольку такие сферы не поглощают излучения, они не могут его и испускать. Тепловое равновесие тел поддерживается теперь только той спектральной частью излучения, которая пропускается сферами. Все рассуждения, которые были приведены выше, остаются при этом в силе. Мы видим, таким образом, что второй закон термодинамики требует выполнения равенств (9.5) и (9.6) для каждой длины волны.

Введем понятие спектральной плотности энергетической светимости. Обозначим  $dU$  количество энергии, излучаемой за время  $dt$  участком тела с поверхностью  $dS$  в выбранном спектральном интервале  $d\omega$  или  $d\lambda$ .

<sup>1</sup>«Очень» черные реальные тела (сажа, платиновая чернь и др.) при частотах, соответствующих видимому свету, имеют  $\alpha$ , близкие к единице.

Очевидно, что  $dU$  пропорционально  $dS$ ,  $dt$  и  $d\omega$  или  $d\lambda$ :

$$dU = E_\lambda dS dt d\lambda, \quad (9.7 \text{ а})$$

или

$$dU = E_\omega dS dt d\omega. \quad (9.7 \text{ б})$$

Входящие в (9.7 а) и (9.7 б) функции  $E_\lambda$  и  $E_\omega$  носят название спектральных плотностей энергетической светимости или спектральных излучательных способностей тела.

Спектральные и интегральная излучательные способности тела связаны очевидными соотношениями

$$R_\vartheta = \int_0^\infty E_\omega d\omega = \int_0^\infty E_\lambda d\lambda. \quad (9.8)$$

Найдем связь между  $E_\omega$  и  $E_\lambda$ . Для этого заметим, что излучательная способность тела не зависит от того, как она выражена — через частоту или через длину волны. Поэтому

$$dR_\vartheta = E_\omega d\omega = E_\lambda d\lambda. \quad (9.8')$$

Приращения  $d\omega$  и  $d\lambda$  нетрудно связать, продифференцировав выражение  $\lambda = 2\pi c/\omega$ :

$$d\lambda = -\frac{2\pi c}{\omega^2} d\omega. \quad (9.9)$$

Подставляя это выражение в (9.8') (и опуская знак минус, указывающий на то, что длина волны убывает с возрастанием частоты), найдем

$$E_\omega = \frac{2\pi c}{\omega^2} E_\lambda = \frac{\lambda^2}{2\pi c} E_\lambda. \quad (9.10)$$

Выше мы уже пришли к выводу, что закон Кирхгофа справедлив не только для интегральных, но и для спектральных излучательных способностей. Следовательно,

$$E_\lambda = \alpha_\lambda E_\lambda^*, \quad (9.11 \text{ а})$$

$$E_\omega = \alpha_\omega E_\omega^*, \quad (9.11 \text{ б})$$

где  $E_\lambda^*$  и  $E_\omega^*$  описывают спектральную излучательную способность абсолютно черного тела. Входящие в эти формулы  $\alpha_\lambda$  и  $\alpha_\omega$  называются спектральными коэффициентами поглощения.

Физические величины  $R_\varepsilon$ ,  $E_\lambda$ ,  $E_\omega$ ,  $\alpha_\lambda$ ,  $\alpha_\omega$  зависят от температуры. Поэтому в обозначения этих величин часто вводят индекс  $T$ :  $R_{\varepsilon,T}$ ,  $R_{\lambda,T}$  и т. д.

Излучательная способность абсолютно черного тела не зависит от материала, из которого изготовлено это тело. Она может быть определена теоретически. Эта излучательная способность связана простой формулой с плотностью энергии равновесного излучения, и мы вернемся к ней после того, как получим формулы для расчета этой плотности.

В рассуждениях этой главы мы несколько раз прибегали к абстракциям — стенки изготовлялись из абсолютно отражающих материалов, рассматривались абсолютно черные тела и т. д. В этих абстракциях нет ничего физически и логически неприемлемого, так же как и в идеальных адиабатических оболочках, которые рассматриваются в учении о теплоте. В частности, существуют очень хорошие зеркала с коэффициентом отражения, близким к единице. Что же касается абсолютности черных тел, то такие тела могут быть изготовлены простыми средствами. Почти идеальным абсолютно черным телом является небольшое отверстие, проделанное в полом теле. Если размер отверстия очень мал по сравнению с размером полости, то подавляющая часть входящего через отверстие излучения «запутывается» в полости и не выходит обратно.

Разберем еще один вопрос. Наблюдая окружающие предметы, мы видим, что одни из них кажутся нам зелеными, другие — красными и т. д. Не находится ли этот факт в противоречии с нашим утверждением, что в каждом спектральном интервале потоки энергии, уходящие от тел (в результате лучеиспускания и отражения), определяются только их температурой и не зависят от сорта и материала этих тел? Небольшое размышление показывает, что это не так. Все тела были бы одного цвета, если бы идущее от них излучение было равновесным. Но оно чаще всего таковым не является. Приходящее от Солнца излучение по спектральному составу близко к равновесному излучению при температуре фотосферы Солнца. При температуре Земли оно отнюдь не равновесно: часть излучения, лежащая в оптическом диапазоне, почти нацело является «лишней». Неравновесный спектр излучения «перედельвается» освещенными телами в другие неравновесные спектры. Индивидуальность тел сказывается при этом в полной мере. Но если заключить наблюдателя в замкнутый, лишенный внешнего освещения ящик с равномерно нагретыми стенками и следить за электромагнитным излучением, исходящим от стенок и от всех тел, находящихся в ящике, то все они будут светиться с одинаковой яркостью и будут одного цвета, из каких бы материалов они ни были изготовлены!

## § 42. Формула Планка

В предыдущем параграфе ряд важных свойств равновесного излучения был установлен с помощью термодинамических методов. Мы перейдем теперь к статистическому рассмотрению, которое позволяет вывести основную формулу равновесного излучения — формулу Планка. Из этой формулы будет затем получен ряд других важных соотношений. Воспользуемся для расчетов формулами, полученными в предыдущей главе.

Рассчитаем энергию излучения, заполняющего полость тела, нагретого до некоторой температуры  $T$ . Эта энергия складывается из энергий отдельных фотонов. Рассмотрим фотоны, энергия которых лежит в интервале от  $E$  до  $E + dE$ . Из этих фотонов состоит излучение, заполняющее спектральный интервал между частотами  $\omega = E/\hbar$  и  $\omega + d\omega = (E + dE)/\hbar$ . Их число равно  $ng(E)dE$ , где  $g(E)dE$  — число разрешенных фотонных состояний в рассматриваемой полости, а  $n$  — число фотонов в каждом таком состоянии. Поскольку энергия каждого фотона равна  $E$ , их суммарная энергия равна  $ng(E)E dE$ .

Выразим теперь эту энергию через объемную спектральную плотность излучения  $u_\omega$ , т. е. через энергию излучения, отнесенную к единице объема и к единичному интервалу изменения частоты. Эта энергия равна  $u_\omega V d\omega$ , где  $V$  — объем полости. Имеем, следовательно,

$$u_\omega V d\omega = ng(E)E dE. \quad (9.12)$$

Подставляя в это выражение значение  $g(E)$  из (8.10) и значение  $n$  из (8.16), найдем

$$u_\omega V d\omega = \frac{VE^2}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \frac{E dE}{\exp(E/kT) - 1}.$$

Сокращая обе части равенства на  $V$ , заменяя  $E$  на  $\hbar\omega$  и  $dE$  на  $\hbar d\omega$ , найдем окончательно

$$u_\omega d\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}. \quad (9.13)$$

Полученное соотношение называется формулой Планка.

Формулу Планка часто записывают через спектральную плотность излучения, отнесенную не к единичному изменению частоты, а к единичному интервалу длин волн. Подставляя (9.9) в (9.13), и опуская знак минус, найдем

$$u_\lambda d\lambda = 16\pi^2 \frac{\hbar c}{[\exp(2\pi\hbar c/\lambda kT) - 1] \lambda^5}. \quad (9.13)$$

Эта формула также носит название формулы Планка.

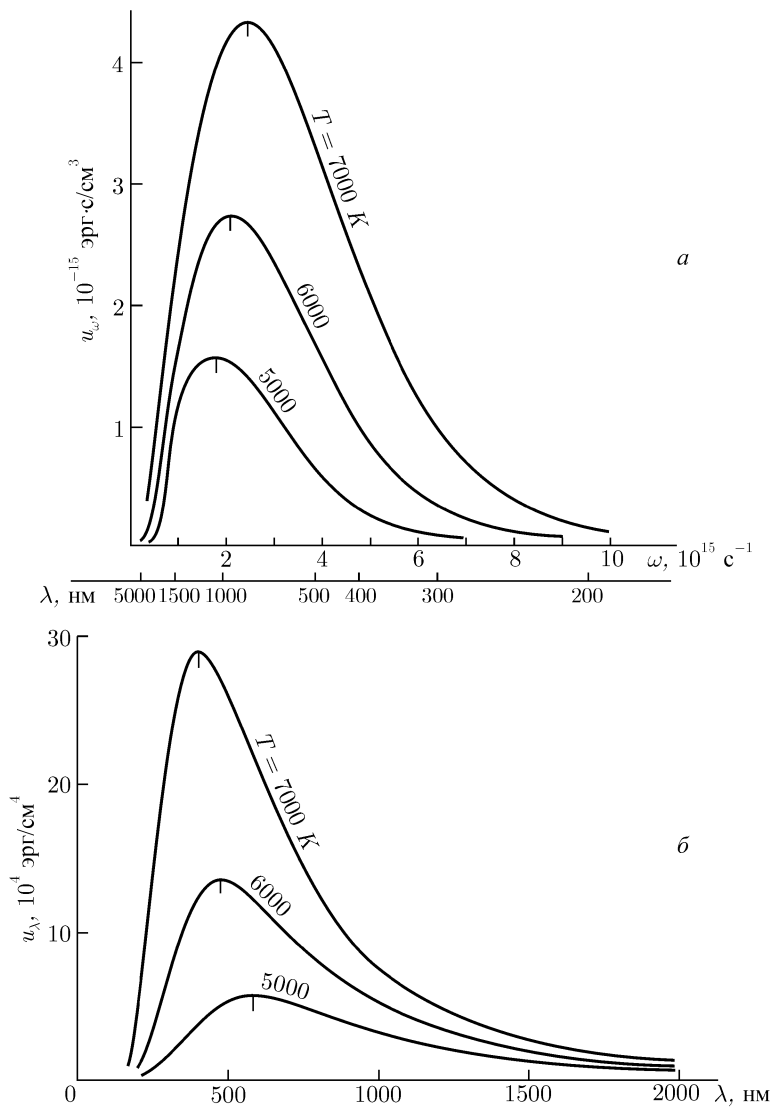


Рис. 86. Зависимость спектральной плотности излучения от частоты (а) и длины волны (б).



Функции  $u_\omega$  для разных температур изображены на рис. 86 а. Они представляют собой кривые с максимумами. Спад кривых в сторону малых  $\omega$  (больших длин волн) объясняется уменьшением статистического веса  $g(E)$ , а спад в сторону больших  $\omega$  (малых длин волн) — увеличением экспоненциального члена в знаменателе (9.13). При увеличении  $T$  плотность излучения возрастает на всех частотах, а максимум  $u_\omega$  смещается в сторону больших частот (коротких длин волн).

На рис. 86 б для тех же температур изображены функции  $u_\lambda$ . Спектральные плотности  $u_\lambda$  возрастают с температурой так же, как и  $u_\omega$ . Однако  $u_\lambda$  и  $u_\omega$  — разные функции. Они имеют разную размерность и различаются по форме. Максимумы этих функций — при одной и той же температуре — сдвинуты друг относительно друга (мы вернемся к этому вопросу в следующем параграфе),

### § 43. Классические формулы для равновесного излучения

Из формулы Планка (9.13) легко может быть получено несколько важных формул. Найдем прежде всего полную (проинтегрированную по  $\omega$ ) плотность энергии равновесного излучения при температуре  $T$

$$u(T) = \int_0^{\infty} u_\omega d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \frac{\omega^3 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}.$$

Преобразуя интеграл к переменной  $x = \hbar\omega/kT$ , найдем

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

Входящий в это выражение интеграл равен  $\pi^4/15$ . Поэтому

$$u(T) = \frac{\pi^2 k^4}{15 c^3 \hbar^3} T^4 = \sigma' T^4. \quad (9.15)$$

К тому же результату, конечно, приводит вычисление  $u(T)$  путем интегрирования (9.14). В формуле (9.15) комбинация констант, стоящая перед  $T^4$ , заменена одной константой  $\sigma'$ . Утверждение о том, что полная энергия равновесного излучения пропорциональна четвертой степени температуры, может быть получено без статистического рассмотрения задачи на основе термодинамических соображений. Эта формула

была получена Стефаном и Больцманом задолго до формулы Планка и носит их имя. Формула Планка позволяет, однако, вычислить постоянную  $\sigma'$ , которая до этого бралась из опыта.

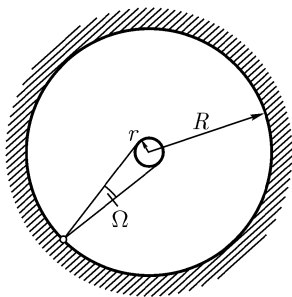


Рис. 87. К выводу формулы Стефана – Больцмана.

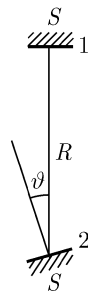


Рис. 88. К выводу закона Ламберта.

Обратимся к структуре формулы (9.15). Вывод о том, что плотность энергии излучения пропорциональна четвертой степени температуры, является физическим утверждением, которое следует запомнить. Постоянная  $\sigma'$  с точностью до малосущественного коэффициента  $\pi^2/15$  легко может быть получена из соображений размерности. Эту задачу в качестве полезного упражнения мы предоставляем читателям.

С помощью (9.15) нетрудно вычислить энергию, излучаемую поверхностью абсолютно черного тела. Рассмотрим для этого сферическую полость большого радиуса  $R$  с абсолютно черными стенками (рис. 87).

Найдем прежде всего  $I_{\perp}$  — отнесенную к единице телесного угла энергию, излучаемую в единицу времени единицей площади по направлению нормали к поверхности. Выделим в центре полости небольшой шаровой объем радиуса  $r$ . Телесный угол, под которым виден этот объем из каждой точки поверхности шаровой полости, равен

$$\Omega = \pi r^2 / R^2.$$

С единицы площади полости в единицу времени на рассматриваемый объем падает излучение, переносящее энергию  $I_{\perp} \Omega$ . Это излучение проходит через сечение  $\pi r^2$  и движется со скоростью  $c$ . Плотность его энергии равна поэтому

$$\frac{I_{\perp} \Omega}{\pi r^2 c} = \frac{I_{\perp}}{c R^2},$$

а полная плотность энергии в  $4\pi R^2$  больше указанной, так что

$$u = 4\pi R^2 \frac{I_{\perp}}{cR^2} = \frac{4\pi}{c} I_{\perp}. \quad (9.16)$$

Найдем теперь, как энергия, излучаемая поверхностью абсолютно черного тела, зависит от угла излучения. На рис. 88 изображены два нагретых до одной и той же температуры равных участка поверхности (площадь каждого участка равна  $S$ ); один из них повернут к другому под углом  $\vartheta$ . Из термодинамических соображений следует, что потоки энергии, которыми они обмениваются, должны быть равны друг другу. Первый участок виден из второго под углом  $(S/R^2)$ , а второй из первого — под углом  $(S/R^2) \cos \vartheta$ . Приравнявая потоки, найдем

$$I_{\vartheta} \frac{S}{R^2} = I_{\perp} \frac{S}{R^2} \cos \vartheta.$$

Индекс  $\vartheta$  при  $I$  указывает угол, под которым испускается излучение. Сокращая равенство на  $S/R^2$ , найдем

$$\boxed{I_{\vartheta} = I_{\perp} \cos \vartheta.} \quad (9.17)$$

Формула (9.17) носит название з а к о н а Л а м б е р т а. Для абсолютно черных тел она, как мы видели, является точной, а для большинства других тел — приближенной.

Найдем теперь  $R_{\vartheta}^*$  — энергетическую светимость абсолютно черного тела. Она равна

$$R_{\vartheta}^* = \int I_{\vartheta} d\Omega = \int I_{\perp} \cos \vartheta 2\pi \sin \vartheta d\vartheta = 2\pi I_{\perp} \int \sin \vartheta d(\sin \vartheta).$$

Интегрирование следует распространить на всю переднюю полусферу, т. е. от  $\vartheta = 0$  до  $\vartheta = \pi/2$ . Произведя интегрирование, получим

$$R_{\vartheta}^* = \pi I_{\perp}. \quad (9.18)$$

Подставляя в это выражение значение  $I_{\perp}$  из (9.16) и значение  $u$  из (9.15), найдем

$$\boxed{R_{\vartheta}^* = \frac{\pi^2}{60} \frac{k^4}{\hbar^3 c^2} T^4 = \sigma T^4.} \quad (9.19)$$

$R_{\vartheta}^*$  определяет полную мощность излучения, испускаемого с единицы поверхности абсолютно черного тела. Соотношение (9.19) так же, как

и (9.15), носит название закона Стефана – Больцмана, а входящая в него константа  $\sigma$  называется постоянной Стефана – Больцмана:

$$\sigma = \frac{\pi^2}{60} \frac{k^4}{\hbar^3 c^2}. \quad (9.20)$$

Числовое значение  $\sigma$  в системе СГС равно  $5,67 \cdot 10^{-5}$  эрг/(с·см<sup>2</sup>·К<sup>4</sup>).

Сравним формулы (9.15) и (9.19). Они имеют один и тот же вид и различаются только величиной входящих в них констант  $\sigma$  и  $\sigma'$ . Как нетрудно найти,

$$\sigma = \frac{c}{4} \sigma'. \quad (9.21)$$

Формула (9.21) очень напоминает формулу для числа ударов молекул о стенку, которая выводится в кинетической теории газов и имеет вид

$$N = \frac{nv}{4},$$

где  $n$  — плотность молекул,  $v$  — их скорость, а  $N$  — число ударов в единицу времени, приходящихся на единицу площади стенки.

Умножая эту формулу на среднюю энергию молекул  $\langle E \rangle$ , получим

$$N \langle E \rangle = \frac{n \langle E \rangle}{4} v. \quad (9.22)$$

Сравним эту формулу с (9.21). Для этого умножим (9.21) на  $T^4$ :

$$\sigma T^4 = \frac{\sigma' T^4}{4} c. \quad (9.23)$$

Числители дробей, стоящих в правых частях формул (9.22) и (9.23), определяют энергию молекул и соответственно энергию электромагнитного излучения в единице объема. Скорость молекул  $v$  заменяется на скорость фотонов  $c$ . В левой части формул стоят соответственно полная энергия молекул, ударяющихся о единицу площади стенки в единицу времени, и полная энергия фотонов, испускаемых в единицу времени с каждой единицы площади стенки. Эта энергия, как мы уже знаем, равна энергии падающих на стенку фотонов, так что левые части сравниваемых формул имеют один и тот же смысл. Формулы (9.22) и (9.23), таким образом, по сути дела идентичны.

Вернемся к формуле (9.18). Если бы излучение испускалось во все стороны равномерно, то полная мощность излучения оказалась бы в  $2\pi$  раз больше, чем мощность  $I_{\perp}$ , испускаемая в единицу телесного угла в перпендикулярном направлении. На самом деле она оказывается всего в  $\pi$  раз больше. Это показывает, что мощность, излучаемая в единицу телесного угла перпендикулярно к стенке, в два раза больше,

чем средняя мощность, излучаемая в единицу телесного угла. Этот результат тоже полезно запомнить.

Формула (9.21) связывает плотность энергии равновесного излучения (которая характеризуется константой  $\sigma'$ ) с энергетической светимостью абсолютно черного тела (константа  $\sigma$ ). Возвращаясь к рис. 87 и к рассуждениям, которые привели нас к (9.21), нетрудно установить, что плотность энергии излучения и излучательная способность абсолютно черного тела связаны между собой множителем  $c/4$  в каждом спектральном интервале. Это замечание позволяет использовать формулы (9.13) и (9.14) для расчета спектральных излучательных способностей  $E_\omega^*$  и  $E_\lambda^*$ :

$$E_\omega^* = \frac{c}{4} u_\omega = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \frac{\omega^3 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}, \quad (9.24 \text{ а})$$

$$E_\lambda^* = \frac{c}{4} u_\lambda = 4\pi^2 \hbar c^2 \frac{1}{\exp(2\pi\hbar c/\lambda kT) - 1} \frac{d\lambda}{\lambda^5}. \quad (9.24 \text{ б})$$

Обратимся снова к формуле (9.19). Мы видим, что энергетическая светимость пропорциональна очень высокой (четвертой) степени температуры. При обычных (комнатных) условиях и температурах основные тепловые потери связаны с конвекцией и теплопроводностью. Эти потери, однако, пропорциональны первой, а не четвертой степени температуры. Поэтому при достаточно высоких температурах основную роль начинают играть именно потери на излучение. С излучением связана и теплопроводность сильно нагретых тел, например горячей плазмы (как в лабораторных, так и в астрофизических условиях): электроны, находящиеся в более горячих участках плазмы, испускают излучение, которое поглощается электронами в более холодных ее участках.

В некоторых специальных условиях (сосуды Дьюара, колбы термосов), когда потери на конвекцию и теплопроводность искусственным образом снижены, потери на излучение становятся существенными уже при нормальной температуре. Поэтому стенки таких сосудов делают зеркальными.

Выведем еще один важный закон, так называемый закон смещения Вина. Найдем частоту, при которой (для данной температуры) излучательная способность абсолютно черного тела максимальна. Приравнявая нулю  $du_\omega/d\omega$ , найдем из (9.13)

$$\frac{du_\omega}{d\omega} = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{d}{d\omega} \left[ \frac{\omega^3}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \right] = 0.$$

Вычисления приводят к трансцендентному уравнению, решение которого

дает

$$\omega_{\max} = 2,8 \frac{kT}{h}, \quad (9.25)$$

где  $\omega_{\max}$  — частота, при которой спектр излучения имеет максимум.

Аналогичным образом, дифференцируя (9.14), нетрудно найти длину волны  $\lambda_{\max}$ , при которой достигает максимума спектральная плотность излучения  $u_{\lambda}$ . Вычисление даст

$$\lambda_{\max} = 0,29 \frac{1}{T}. \quad (9.26)$$

В (9.26) температура выражена в градусах Кельвина, а длина волны — в сантиметрах. Выражения (9.25) и (9.26) носят название *закон Вина*.

Как уже отмечалось в конце предыдущего параграфа,  $u_{\omega}$  и  $u_{\lambda}$  имеют максимумы при разных частотах (и соответственно при разных длинах волн). Так, при  $T = 6000$  К, приблизительно соответствующей температуре фотосферы Солнца, спектральная плотность излучения  $u_{\lambda}$  имеет максимум при

$$\lambda = 483 \text{ нм},$$

а спектральная плотность  $u_{\omega}$  при этой температуре максимальна при

$$\omega = 2,20 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}.$$

Этой частоте соответствует длина волны  $2\pi c/\omega = 856$  нм.

Зависимость  $\lambda_{\max} \sim T^{-1}$ , выражаемая законом Вина (9.26), хорошо известна из повседневного опыта. При комнатных температурах излучение тел сконцентрировано в далекой инфракрасной области и не регистрируется человеческим глазом. Это излучение мы воспринимаем как тепло, испускаемое нагретыми предметами. Исходящий от них световой поток — это только перерассеянное солнечное излучение. При комнатной температуре в оптической области обычные тела света не испускают. При повышении температуры появляется видимое свечение — сначала вишнево-красное, затем розовое, потом желтое и наконец белое (очень горячие тела имеют голубоватый оттенок).

Определение температуры по цвету широко используется не только в быту, но и в науке. Так, в частности, была определена температура фотосферы Солнца. Определение температуры по цвету производится путем спектрального исследования испускаемого телом излучения. Точность измерений оказывается невысокой из-за того, что исследуемое излучение редко является равновесным. Неравновесное излучение плохо

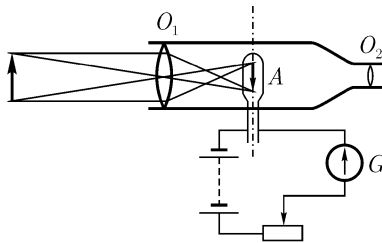


Рис. 89. Схема оптического пирометра.

описывается формулами Планка, законами Стефана – Больцмана и Вина. На составе и интенсивности излучения при этом сильно сказывается то обстоятельство, что излучающие тела отнюдь не являются абсолютно черными. Степень «нечерноты» этих тел, как правило, неизвестна и зависит от частоты. Поэтому различают «цветовую» температуру тела — температуру, определяемую по формуле (9.25) или (9.26), его «яркостную» температуру, определяемую по формуле (9.19), и его истинную температуру.

При определении температуры оптическими методами пользуются разного рода пирометрами. В оптических пирометрах, измеряющих яркостную температуру (рис. 89), изображение исследуемого тела<sup>1</sup>, создаваемое объективом  $O_1$ , накладывается на подогреваемую током нить  $A$ , температура которой может быть определена по величине идущего через нее тока. Ток в нити меняют до тех пор, пока она не перестанет быть видна в окуляре  $O_2$  на фоне исследуемого тела.

Оптическая пирометрия — почти единственный способ определения температуры сильно нагретых и, особенно, удаленных тел.

## § 44. Формула Рэля – Джинса

Исследуем спектр излучения абсолютно черного тела в области низких частот, т. е. при  $\hbar\omega \ll kT$ . Сделаем это сначала с помощью (9.12). Заменяв  $u_\omega d\omega$  на  $u_E dE$  и подставив значение  $n$  из (8.16), найдем

$$Vu_E dE = g(E)E \frac{1}{\exp(E/kT) - 1} dE.$$

<sup>1</sup>Как известно, в хороших оптических приборах яркость изображения практически равна яркости изображаемого предмета.

Разлагая экспоненту в ряд и ограничиваясь первым членом разложения, найдем

$$Vu_E dE \approx kTg(E) dE. \quad (9.27)$$

Эта формула имеет простой физический смысл. В левой части равенства стоит энергия электромагнитного излучения, заключенная в интервале  $dE$ . Множитель  $g(E)dE$  определяет число уровней в этом интервале, а значит,  $kT$  равно средней энергии, приходящейся на один уровень. К этой формуле можно было сразу прийти из соображений, развиваемых в кинетической теории. В самом деле, в классической физике доказывается, что кинетическая энергия, приходящаяся на каждую степень свободы частицы, равна  $(1/2)kT$ . Полная энергия, приходящаяся на каждую степень свободы, зависит от соотношения между кинетической и потенциальной энергиями. Можно показать, что для квантов электромагнитного излучения эти энергии следует считать равными (роль кинетической и потенциальной энергии играют в этом случае энергии электрического и магнитного полей электромагнитной волны), так что на каждую степень свободы должна приходиться энергия, равная  $kT$ . Формула (9.27) после этого становится очевидной.

Формула (9.27) была получена задолго до появления квантовых представлений. Она записывалась, однако, не через энергию, а через частоту. Используя для  $g(E)dE$  формулу (8.10) и возвращаясь от энергии к частоте, получим

$$u_\omega d\omega = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} kT. \quad (9.28)$$

Это выражение носит название *формулы Рэлея–Джинса*, как мы теперь понимаем, неизбежно возникает при распространении закона равномерного распределения энергии по степеням свободы на электромагнитные колебания. Если бы формула (9.28) была применима не только к малым, но и ко всем частотам, то полная энергия электромагнитного излучения оказалась бы бесконечной, так как интеграл  $\int \omega^2 d\omega$  при больших частотах расходится. Но бесконечной энергии быть не может. Полученный результат, таким образом, означает, что тепловое излучение не может находиться в тепловом равновесии со стенками. Этот парадокс, конечно, сразу был отмечен, но в рамках классической физики не мог быть объяснен. Он получил название «ультрафиолетовой катастрофы» («катастрофы» при больших частотах). В квантовой физике никаких «катастроф» не возникает. Формула (9.28) получается из формулы Планка лишь при  $\hbar\omega \ll kT$ . При больших частотах формула (9.28), так же как и закон равномерного распределения энергии, оказывается несправедливой.



Сделаем одно замечание терминологического характера. В оптике число уровней принято называть *числом осцилляторов*, а вместо того, чтобы говорить о том, что количества энергии, приходящиеся на разные уровни, не равны друг другу, говорят о том, что осцилляторы имеют *разную силу*. Указанные названия не соответствуют терминологии, принятой в квантовой механике, и с современных позиций крайне неудачны, но до сих пор встречаются в научной литературе.

## § 45. Давление излучения

Вычислим давление, которое оказывает на тела электромагнитное излучение<sup>1</sup>. Рассмотрим сначала тепловое излучение, заключенное в полости, стенки которой абсолютно черные. Давление этого излучения на стенки складывается из двух составляющих — из давления фотонов, поглощаемых стенками, и из отдачи, которую испытывают стенки при испускании фотонов. При тепловом равновесии эти группы вносят в давление одинаковый вклад.

Рассчитаем давление, которое испытывает стенка от испускаемых ею фотонов. Обозначим это давление через  $P_1$ . Давление равно импульсу, передаваемому излучением в секунду каждому квадратному сантиметру стенки. Импульс фотонов связан с их энергией соотношением

$$|\mathbf{p}| = E/c.$$

Для давления существенна только нормальная составляющая импульса, т. е. не  $|\mathbf{p}|$ , а  $|\mathbf{p}| \cos \vartheta$ . Мощность, которая уносится с единицы поверхности излучением, испускаемым под углом  $\vartheta$ , равна  $I_\vartheta d\Omega$ , где  $d\Omega$  — элемент телесного угла. Имеем поэтому

$$dP_1 = \frac{\cos \vartheta}{c} I_\vartheta d\Omega = \frac{\cos^2 \vartheta}{c} I_\perp d\Omega = \frac{2\pi}{c} I_\perp \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta.$$

При написании этого равенства мы воспользовались законом Ламберта и формулой  $d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta$ . Обозначение  $P_1$  напоминает, что мы рассматривали только ту часть давления, которая связана с *испусканием фотонов*. После интегрирования получим

$$P_1 = \frac{2\pi}{c} I_\perp \int_0^{\pi/2} \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta = \frac{2\pi}{3} \frac{1}{c} I_\perp.$$

<sup>1</sup>На существование такого давления обратил внимание еще Максвелл. В знаменитых опытах П. Н. Лебедева (1889 г.) это давление было впервые обнаружено и измерено.

Полное давление излучения на стенку в два раза больше. Подставляя в полученную формулу значение  $I_{\perp}$  из (9.16), найдем

$$P = \frac{1}{3}u. \quad (9.29)$$

Таким образом, плотность энергии излучения и его давление на стенку равны друг другу с точностью до постоянного коэффициента  $1/3$ .

Изменится ли выражение для давления света, если заменить абсолютно черные стенки какими-нибудь другими? Чтобы ответить на этот вопрос, изменим материал, из которого изготовлены стенки полости, не на всей ее поверхности, а только на какой-нибудь части, например на правой. Если бы давление на «новые» стенки оказалось меньше, чем на абсолютно черные, то сила, действующая на правую часть полости, оказалась бы меньше, чем сила, действующая на левую часть. Под действием внутренних сил — давления излучения — полость начала бы в этом случае перемещаться влево, что невозможно. Мы видим, таким образом, что выражение (9.29) имеет всеобщую применимость.

Сопоставим формулу (9.29) для давления фотонного газа с давлением, которое оказывает на стенку обычный газ. Для обычного газа справедливо уравнение Клапейрона

$$PV = \frac{m}{\mu}RT, \quad (9.30)$$

где  $P$  и  $V$  — давление и объем газа,  $m$  — масса газа,  $\mu$  — его молярная масса,  $T$  — температура,  $R$  — газовая постоянная. Заменяя  $R$  на  $N_A k$ , где  $N_A$  — постоянная Авогадро, найдем

$$PV = \left(\frac{N_A}{\mu}m\right)kT.$$

Выражение, взятое в скобки, равно числу молекул  $N$ . Вводя концентрацию молекул  $n = N/V$ , найдем

$$P = nkT. \quad (9.31)$$

Заметим теперь, что средняя энергия молекул одноатомного газа равна  $(3/2)kT$ , так что правая часть равенства равна  $(2/3)u$  ( $u$  — плотность энергии нашего газа). Итак, для обычного газа

$$P = \frac{2}{3}u. \quad (9.32)$$

Сравним полученное соотношение с (9.29). Почему при той же плотности энергии давление фотонного газа оказывается в два раза меньше, чем давление обычного газа? Исследование этого вопроса показывает, что указанное отличие связано с релятивистским в первом случае и нерелятивистским во втором случае законом связи между энергией и импульсом. Соотношение (9.29) характерно для любого, а не только фотонного релятивистского одноатомного газа.

Приведем в заключение еще одну формулу. Пусть на плоскую площадку перпендикулярно падает параллельный пучок света, испускаемого внешним источником. Как нетрудно понять, давление, которое оказывает свет на площадку, равно

$$P = u(1 + r) = \frac{E}{c}(1 + r), \quad (9.33)$$

где  $r$  — коэффициент отражения материала площадки, а  $E$  — энергия, падающая на единицу площади в единицу времени.

## ГЛАВА 10

# ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

### § 46. Спонтанное и индуцированное излучение

Рассмотрим полость с зеркальными стенками. Поместим в нее атом, способный поглощать и испускать электромагнитное излучение. Поглощая излучение, атом переходит из нижнего (первого) состояния во второе — возбужденное. Будем для простоты считать эти состояния невырожденными. Обозначим через  $E$  разность энергий атома в этих состояниях. При переходах с первого на второй уровень поглощаются, а при переходах со второго на первый испускаются кванты с энергией  $E$ .

Заполним полость монохроматическим электромагнитным излучением с частотой  $\omega = E/\hbar$ . Число квантов, заполняющих полость, зависит от состояния, в котором находится атом. Обозначим через  $n$  число квантов в те моменты времени, когда атом пребывает в состоянии 2. Когда атом находится в состоянии 1, к ним прибавляется испущенный атомом квант, так что их число становится равно  $n + 1$ .

Рассмотрим достаточно большой промежуток времени  $t$ . За это время атом много раз успеет побывать и в первом и во втором состояниях. Обозначим через  $t_1$  суммарное время, в течение которого атом находится в состоянии 1; тогда в течение времени  $t_2 = t - t_1$  он находится в состоянии 2. Число переходов атома из первого — невозбужденного — состояния во второе  $N_{1 \rightarrow 2}$  пропорционально числу «попаданий» квантов в невозбужденный атом, а значит, времени  $t_1$  и числу квантов  $n + 1$ :

$$N_{1 \rightarrow 2} = W_{1 \rightarrow 2}^{(1)}(n + 1)t_1. \quad (10.1)$$

Здесь  $W_{1 \rightarrow 2}^{(1)}$  — вероятность перехода из первого во второе состояние, отнесенная к одному атому, одному кванту и единице времени<sup>1</sup>. Индекс «(1)» над  $W$  напоминает, что вероятность отнесена к одному кванту.

---

<sup>1</sup>Величина  $W_{1 \rightarrow 2}^{(1)}$  имеет размерность, обратную времени, в то время как в математике вероятность является безразмерной величиной. Поэтому, строго говоря,  $W_{1 \rightarrow 2}^{(1)}$  является не вероятностью, а плотностью вероятности (по отношению ко времени). Для простоты мы в дальнейшем будем пользоваться более коротким термином «вероятность».

Выберем промежуток времени  $t$  достаточно большим, чтобы число переходов между состояниями было очень велико. В этом случае число переходов из первого состояния во второе можно считать равным числу обратных переходов (на самом деле они могут быть либо равны друг другу, либо отличаться на единицу, но при большом числе переходов это различие становится несущественным). Поэтому число возвратов в первое состояние  $N_{2 \rightarrow 1}$  равно  $N_{1 \rightarrow 2}$ :

$$N_{2 \rightarrow 1} = N_{1 \rightarrow 2} = W_{1 \rightarrow 2}^{(1)} t_1 + W_{1 \rightarrow 2}^{(1)} n t_1 \quad (10.2)$$

При написании этой формулы были раскрыты скобки в (10.1).

Мы выразили, таким образом, число переходов из верхнего состояния в нижнее через вероятность перехода из нижнего состояния в верхнее. Полученное соотношение чрезвычайно важно. Как мы видим, переходы из второго состояния в первое описываются суммой двух слагаемых. Первое из них не зависит от числа квантов  $n$ . Оно описывает число спонтанных, т. е. самопроизвольных, переходов  $N_{2 \rightarrow 1}^{\text{сп}}$ :

$$N_{2 \rightarrow 1}^{\text{сп}} = W_{1 \rightarrow 2}^{(1)} t_1. \quad (10.3)$$

Второе слагаемое пропорционально числу квантов  $n$ , имеющихся в полости в те моменты времени, когда атом находится в состоянии 2; значит, эти переходы стимулируются имеющимися квантами. Такие переходы называются вынужденными или индуцированными. Их число  $N_{2 \rightarrow 1}^{\text{вын}}$  равно

$$N_{2 \rightarrow 1}^{\text{вын}} = W_{1 \rightarrow 2}^{(1)} t_1 n. \quad (10.4)$$

Разделив (10.4) на (10.3), найдем

$$N_{2 \rightarrow 1}^{\text{вын}} / N_{2 \rightarrow 1}^{\text{сп}} = n. \quad (10.5)$$

Соотношение (10.5) справедливо и в том случае, когда в полость помещены не один, а много атомов, если только можно пренебречь взаимодействием между ними. Числа вынужденных и спонтанных переходов, конечно, в этом случае возрастут в  $N$  раз ( $N$  — число атомов), но соотношение (10.5) не изменится.

Входящее в (10.5) отношение числа вынужденных (в присутствии  $n$  квантов) и спонтанных переходов из второго в первое состояние равно, конечно, отношению вероятностей этих переходов. Обозначая эти вероятности через  $W_{2 \rightarrow 1}^{\text{вын}}$  и  $W_{2 \rightarrow 1}^{\text{сп}}$  найдем

$$\boxed{W_{2 \rightarrow 1}^{\text{вын}} / W_{2 \rightarrow 1}^{\text{сп}} = n.} \quad (10.6)$$

Полученная формула связывает вероятности вынужденного и спонтанного излучения при реально имеющемся числе квантов  $n$ .

Отношение вероятностей вынужденных и спонтанных переходов можно выразить не только через число квантов  $n$ , но и через спектральную плотность энергии электромагнитного излучения. При этом, конечно, предполагается, что в зеркальном ящике представлены кванты не одной, как мы до сих пор предполагали, а самых разных частот, в том числе и той резонансной частоты  $\omega = E/\hbar$ , которая стимулирует рассматриваемый переход.

Согласно (9.12),

$$u_\omega V d\omega = n g(E) E dE, \quad (10.7)$$

где  $u_\omega$  — спектральная плотность энергии излучения, отнесенная к единице изменения  $\omega$ ,  $V$  — объем ящика,  $E$  — энергия квантов, а  $g(E)$  — статистический вес. Подставляя в эту формулу  $g(E)$  из (8.10) и заменяя  $dE$  на  $\hbar d\omega$ , найдем

$$n = u_\omega \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3}. \quad (10.8)$$

Подставляя это значение в (10.6), можно выразить искомое отношение вероятностей через  $u_\omega$ . Следуя Эйнштейну, введем в (10.8) вместо  $u_\omega$  спектральную плотность энергии излучения  $u_\nu$ , отнесенную к единице изменения  $\nu$ . Количество энергии, заключенной в некотором интервале, не зависит от того, как его выражать, через  $d\nu$  или  $d\omega$ :  $u_\omega d\omega = u_\nu d\nu$ . Поэтому

$$u_\omega = u_\nu \frac{d\nu}{d\omega} = \frac{1}{2\pi} u_\nu, \quad (10.9)$$

так что

$$n = \frac{\pi c^3}{2\hbar \omega^3} u_\nu. \quad (10.10)$$

Из (10.6) при этом найдем

$$\boxed{\frac{W_{2 \rightarrow 1}^{\text{вын}}}{W_{2 \rightarrow 1}^{\text{сп}}} = \frac{\pi c^3}{2\hbar \omega^3} u_\nu.} \quad (10.11)$$

Полученное выражение применимо во всех случаях, когда взаимодействующие с электромагнитным излучением атомы находятся в поле излучения. Присутствие или отсутствие зеркального ящика в этом случае не играет никакой роли. Формула (10.11) очень удобна для применений, но имеет существенно более сложный вид, чем (10.6), и ее физический смысл менее ясен.

Сформулируем полученные результаты.

1. При возвращении атомов из более высоких в более низкие состояния происходят не только спонтанные (самопроизвольные), но и вынужденные переходы.

2. Вероятность вынужденных переходов в зеркальном ящике пропорциональна числу имеющихся в нем резонансных квантов, которое может быть выражено через спектральную плотность энергии излучения.

3. Рассчитанная на один квант вероятность вынужденного излучения равна вероятности спонтанного излучения.

В заключение отметим, что при вынужденном излучении испускаются кванты, имеющие не только ту же энергию, но и ту же поляризацию, что и кванты, стимулирующие вынужденное излучение (этот вывод следует из более подробного рассмотрения). Можно показать, что справедливо и более сильное утверждение: *вынужденное излучение когерентно с излучением, его вызвавшим: оно имеет ту же частоту, то же направление распространения, ту же поляризацию и ту же фазу.*

Из вывода соотношения (10.6) ясно, что оно справедливо для любых электромагнитных переходов в любых атомах. Его справедливость связана, следовательно, со свойствами не атомов, а электромагнитного поля. Наличие жестких соотношений между вероятностями вынужденных и спонтанных переходов заставляет думать, что эти переходы имеют одну и ту же природу. Исследование вопроса показывает, что это действительно так. Чтобы уяснить суть дела, рассмотрим излучение, «запертое» в зеркальный ящик прямоугольной формы. Рассмотрим колебания, распространяющиеся вдоль ящика. Мы уже показали (см. рис. 81 и следующий за ним текст), что в таком ящике могут возбуждаться не любые электромагнитные колебания, а только колебания, удовлетворяющие соотношению

$$L = m\lambda_m/2,$$

где  $L$  — длина ящика,  $\lambda_m$  — длина волны излучения,  $m$  — произвольное целое число. Каждое из таких колебаний называется *продольной модой* электромагнитных колебаний<sup>1</sup>. Моды, соответствующие разным  $\lambda_m$  независимы. Они могут иметь разную интенсивность. Теория показывает, что энергия колебаний, соответствующих каждой моде, описывается формулой для энергия квантового осциллятора:

$$E_m = \hbar\omega_m(n + 1/2),$$

где  $E_m$  — энергия, приходящаяся на моду  $m$ ,  $\omega_m$  — соответствующая частота,  $n$  — любое целое число. Мы знаем, что излучение состоит из фотонов, каждый из которых имеет энергию  $E = \hbar\omega$ . Ясно, что появление в нашей формуле слагаемого  $\hbar\omega_m n$  эквивалентно утверждению, что в ящике находится  $n$  фотонов.

<sup>1</sup>На самом деле указанное соотношение определяет две моды электромагнитных колебаний в соответствии с двумя возможными значениями поляризации.

Член  $(1/2)\hbar\omega_m$ , соответствующий нулевому их числу, определяет энергию нулевых колебаний электромагнитного поля. Спонтанные переходы можно рассматривать как взаимодействие возбужденных атомов с этими нулевыми колебаниями, в то время как вынужденное излучение происходит из-за их взаимодействия с реальными фотонами.

Приведенные рассуждения легко обобщаются на ящики любых размеров и форм. В таком ящике — в резонаторе электромагнитных колебаний — могут возбуждаться не любые колебания, а колебания, принадлежащие разрешенным модам. Энергия, приходящаяся на каждую такую моду, квантуется так же, как энергия осциллятора.

Рассмотрим теперь полость не с зеркальными, а с черными стенками, находящимися при некоторой температуре  $T$ . Поместим в нее атом (или множество таких атомов). Через некоторое время в полости установится тепловое равновесие между стенками и излучением, причем в состав излучения будут входить кванты самых разных энергий, в том числе и такие кванты, которые могут испускаться и поглощаться рассматриваемыми атомами.

Соотношение между вероятностями спонтанного и вынужденного излучения атомов, как и всегда, характеризуется формулой (10.6). Однако при установившемся тепловом равновесии можно продвинуться дальше, связав число квантов  $n$  с температурой стенок (и излучения). Подставляя в (10.6) значение  $n$  из (8.16), найдем

$$\frac{W^{\text{вын}}}{W^{\text{сп}}} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}. \quad (10.12)$$

В полученную формулу не входят размеры полости. Поэтому она справедлива для полости любых — в том числе и сколь угодно больших (бесконечных) — размеров. Эта формула определяет соотношение между вероятностями вынужденных и спонтанных переходов при тепловом равновесии.

Анализ состояния теплового равновесия между атомами и излучением позволяет сделать еще один важный шаг — установить соотношение между вероятностями поглощения и испускания электромагнитного излучения. Обозначим числа атомов в первом и во втором состояниях  $N_1$  и  $N_2$ . В квантовой электронике  $N_1$  и  $N_2$  принято называть населенностями и соответствующих уровней<sup>1</sup>. Число переходов  $N_{1 \rightarrow 2}$  из первого состояния во второе равно

$$N_{1 \rightarrow 2} = W_{1 \rightarrow 2}^{(1)} n N_1 t, \quad (10.13)$$

<sup>1</sup>Более строго населенностью уровня называется число атомов в единице объема, занимающих данный уровень, т.е. не  $N_1$  и  $N_2$ , а  $N_1/V$  и  $N_2/V$ .



где  $n$  — число резонансных квантов, а  $t$  — время наблюдения. Индекс «(1)», как и прежде, напоминает, что вероятность перехода рассчитана не только на один атом, но и на один квант.

Переходы из второго состояния в первое делятся на спонтанные и вынужденные. Их числа равны

$$N_{1 \rightarrow 2}^{\text{сп}} = W_{2 \rightarrow 1}^{\text{сп}} N_2 t, \quad (10.14)$$

$$N_{1 \rightarrow 2}^{\text{вын}} = W_{2 \rightarrow 1}^{(1)\text{вын}} n N_2 t \quad (10.15)$$

При тепловом равновесии число переходов из первого состояния во второе и из второго в первое равны друг другу:

$$W_{1 \rightarrow 2}^{(1)} n N_1 t = W_{2 \rightarrow 1}^{(1)\text{вын}} n N_2 t + W_{2 \rightarrow 1}^{(1)\text{сп}} N_2 t. \quad (10.16)$$

Населенности уровней  $N_1$  и  $N_2$  зависят от температуры, а величины  $W^{(1)}$ , характеризующие взаимодействие атомов с излучением, зависят только от свойств рассматриваемых атомов и с температурой не связаны.

Рассмотрим полученное соотношение при высоких температурах. При повышении температуры различие в населенностях уровней  $N_1$  и  $N_2$  уменьшается и при больших  $T$  исчезает; число квантов  $n$  при этом неограниченно возрастает. Соответственно возрастает величина левой части (10.16) и первого члена правой его части. Поэтому при высоких температурах вторым членом в правой части (10.16) можно пренебречь. Отбрасывая этот член и приравнявая  $N_1$  и  $N_2$ , получим

$$W_{1 \rightarrow 2}^{(1)} = W_{2 \rightarrow 1}^{(1)\text{вын}}.$$

Поскольку вероятности  $W$  от температуры не зависят, это равенство справедливо всегда. Оно было впервые установлено Эйнштейном<sup>1</sup>. Замечая, кроме того, что  $W_{2 \rightarrow 1}^{(1)\text{вын}} = W_{2 \rightarrow 1}^{(1)\text{сп}}$  (см. п. 3 результатов, сформулированных после формулы (10.11)), найдем окончательно

$$\boxed{W_{1 \rightarrow 2}^{(1)} = W_{2 \rightarrow 1}^{(1)\text{вын}} = W_{2 \rightarrow 1}^{\text{сп}}} \quad (10.17)$$

Полученное равенство позволяет получить соотношение между вероятностями поглощения и вынужденного излучения. Разделив (10.15)

<sup>1</sup>Указанное соотношение является частным случаем очень общего утверждения квантовой механики о том, что приведенные (рассчитанные на единицу статистического веса) вероятности прямого и обратного процессов равны друг другу. Это утверждение называется принципом детального равновесия.

на (10.13) и заметив, что соотношение  $N_{2 \rightarrow 1}^{\text{вын}}/N_{1 \rightarrow 2}$  равно искомому отношению вероятностей, получим

$$\frac{\text{Вер. вын. изл.}}{\text{Вер. погл.}} = \frac{N_2}{N_1}. \quad (10.18)$$

В обычных условиях населенность уровней падает с ростом их энергии, так что  $N_2 < N_1$ . Поэтому вынужденное излучение света оказывается слабее, чем поглощение. Более того, по сравнению с последним оно исчезающе мало. В самом деле, в оптическом диапазоне  $E = \hbar\omega$  по порядку величины равно 2 эВ, в то время как  $kT$  при нормальных температурах составляет 0,025 эВ и даже при 1000 К оказывается менее 0,1 эВ. Определяющий соотношение между  $N_2$  и  $N_1$  больцмановский множитель  $\exp(-\hbar\omega/kT)$  равен  $e^{-80}$  при нормальных температурах и  $e^{-20}$  при 1000 К. Вынужденное излучение света при этом во много раз меньше поглощения и на опыте не обнаруживается. Если, однако, создать условия, при которых  $N_2$  окажется больше  $N_1$ , то вынужденное излучение будет преобладать над поглощением, и среда начнет усиливать свет, вместо того чтобы его поглощать. Мы вернемся к этому вопросу в следующем параграфе.

Для полноты изложения выразим наши результаты в обозначениях Эйнштейна, которые часто используются в литературе. В этих обозначениях число переходов из первого состояния во второе  $N_{1 \rightarrow 2}$  записывается не через число квантов, как мы это делали в формуле (10.13), а через спектральную плотность  $u_\nu$ :

$$N_{1 \rightarrow 2} = B_{1 \rightarrow 2} N_1 u_\nu t. \quad (10.19)$$

Число переходов из второго состояния в первое записывается аналогичным образом:

$$N_{2 \rightarrow 1} = B_{2 \rightarrow 1} N_2 u_\nu t + A_{2 \rightarrow 1} N_2 t. \quad (10.20)$$

Коэффициент  $B_{1 \rightarrow 2}$  называется коэффициентом Эйнштейна для поглощения, а  $B_{2 \rightarrow 1}$  и  $A_{2 \rightarrow 1}$  — коэффициентами Эйнштейна для вынужденного и спонтанного излучения. Сравним эти выражения с (10.13), (10.14) и (10.15). Сравнение дает

$$B_{1 \rightarrow 2} u_\nu = W_{1 \rightarrow 2}^{(1)} n, \quad B_{2 \rightarrow 1} u_\nu = W_{2 \rightarrow 1}^{(1)\text{вын}} n, \quad A_{2 \rightarrow 1} = W_{2 \rightarrow 1}^{\text{сп}}.$$

Формула (10.17) позволяет получить соотношение между коэффициентами Эйнштейна. Связь между  $u_\nu$  и  $n$  была найдена в (10.10). В результате получаем

$$B_{2 \rightarrow 1} = B_{1 \rightarrow 2}, \quad A_{2 \rightarrow 1} = \frac{2}{\pi} \frac{\hbar\omega^3}{c^3} B_{2 \rightarrow 1}. \quad (10.21)$$

Сложный вид соотношения между коэффициентами Эйнштейна  $A_{2 \rightarrow 1}$  и  $B_{2 \rightarrow 1}$  связан с тем, что они имеют различные размерности и измеряются в разных единицах:  $A_{2 \rightarrow 1}$  в  $\text{с}^{-1}$ , а  $B_{2 \rightarrow 1}$  в  $\text{см}^2/\text{г}$ .

В заключение остановимся на электромагнитных переходах между двумя вырожденными уровнями. Наиболее важен для применений случай, когда уровни вырождены по магнитному квантовому числу  $m_J$ , определяющему ориентацию полного углового момента атома (или любой другой квантовой системы). В отсутствие электрического и магнитного полей энергия атома не зависит от того, какую ориентацию имеет угловой момент, а вместе с ним магнитный и электрический моменты (если они не равны нулю). Поэтому каждый из двух рассматриваемых уровней состоит из  $2J + 1$  подуровней ( $m_J$  в каждом состоянии свое), имеющих одинаковую энергию. Таким образом,  $2J + 1$  определяет кратность вырождения уровня по квантовому числу  $m_J$ .

Начнем с поглощения фотонов, имеющих определенную энергию (равную энергии перехода) и поляризацию. Переход из каждого исходного (в данном случае — каждого нижнего) состояния атома происходит во вполне определенное конечное (верхнее) состояние, которое определяется квантовыми числами исходного состояния (в том числе и их магнитными квантовыми числами) и фотона. Таким образом, из двух (нижней и верхней) систем слившихся по энергии уровней излучение «выбирает» пары, переходы между которыми разрешены по квантовым числам. Такой «выбор» происходит как при спонтанном, так и при вынужденном излучении. Таким образом, выведенные в настоящем параграфе формулы остаются справедливыми, если их применять не ко всем подуровням, которые входят в состав рассматриваемых уровней, а к соответствующим парам. Соответственно, *во все выведенные выше формулы нужно подставлять не полные населенности уровней, а населенность той пары подуровней, между которыми происходят исследуемые переходы.*

В тех случаях, когда населенности уровней создаются искусственно, следует, если это возможно, сразу заботиться об увеличении количества атомов на нужных подуровнях, поскольку населенности остальных подуровней роли не играют. При тепловом равновесии больцмановский множитель  $\exp(-\hbar\omega/kT)$  определяет населенность каждого из подуровней, т. е. сразу задает нужную нам величину. Полная населенность всего уровня  $(2J + 1) \exp(-\hbar\omega/kT)$  в рассматриваемом случае интереса не представляет.

## § 47. Квантовые усилители и генераторы

Квантовыми усилителями и квантовыми генераторами называются приборы, использующие вынужденное излу-

чение для усиления или генерации электромагнитных колебаний. Приборы, работающие в оптическом диапазоне, называются *лазерами* в отличие от *мазеров*, применяемых в СВЧ диапазоне (в диапазоне радиоволн сверхвысоких частот). Обычно к лазерам относят также квантовые генераторы и усилители ультрафиолетового и инфракрасного излучения. В отечественной литературе лазеры называются также *оптическими квантовыми генераторами* (ОКГ).

Пропустим через среду в направлении оси абсцисс электромагнитную волну, частота которой равна частоте перехода между двумя уровнями атомов, входящих в состав среды<sup>1</sup>. Найдем формулу, описывающую изменение интенсивности волны. Обозначим через  $j(x)$  поток квантов, доходящих до сечения с координатой  $x$ , а через  $n_1$  и  $n_2$  — концентрации атомов в основном и возбужденном состояниях, или, что то же самое, населенности уровней, соответствующих этим состояниям. Если состояния вырождены, то, как мы уже знаем, нужно рассматривать населенности соответствующих подуровней. Количество квантов, поглощаемых на пути  $dx$ , пропорционально потоку  $j(x)$ , длине пути  $dx$  и концентрации  $n_1$  атомов, способных поглощать падающие кванты. Обозначая коэффициент пропорциональности через  $\sigma$ , найдем

$$dj_{\text{погл}} = -\sigma n_1 j dx. \quad (10.22)$$

Рассуждая аналогичным образом, найдем, что увеличение потока, связанное с вынужденным излучением, равно

$$dj_{\text{вын}} = \sigma n_2 j dx. \quad (10.23)$$

Входящий в эти формулы коэффициент пропорциональности  $\sigma$  имеет размерность площади и называется сечением вынужденного перехода. Его величина зависит только от характеристик конкретного перехода. Как мы уже знаем, вероятности вынужденного излучения и поглощения равны друг другу (см., например, (10.17)), так что в (10.22) и (10.23) входит один и тот же коэффициент  $\sigma$ .

Складывая (10.22) и (10.23), найдем

$$dj = \sigma(n_2 - n_1)j dx. \quad (10.24)$$

Интегрируя это уравнение, найдем

$$j(x) = j(0)e^{\alpha x}, \quad (10.25)$$

---

<sup>1</sup>В квантовых усилителях и генераторах используются квантовые переходы не только в атомах. Для простоты мы в дальнейшем будем говорить об атомах, имея в виду и атомы, и ионы, и молекулы,

где

$$\alpha = \sigma(n_2 - n_1). \quad (10.26)$$

Таким образом, при прохождении через среду интенсивность электромагнитной волны меняется по экспоненциальному закону.

В обычных средах концентрации атомов описываются распределением Больцмана (рис. 90) и уменьшаются с энергией, так что

$$\frac{n_2}{n_1} = \exp\left(\frac{E_2 - E_1}{kT}\right), \quad (10.27)$$

где  $E_2$  и  $E_1$  — энергия атомов в верхнем и в нижнем состояниях. Формула (10.26) показывает, что при этом  $\alpha < 0$ , так что интенсивность электромагнитного излучения при прохождении через среду экспоненциально уменьшается. Экспоненциальный вид закона уменьшения интенсивности был установлен задолго до обнаружения вынужденного излучения и носит название закона Бугера, а коэффициент  $\alpha$  в этом случае называется коэффициентом экстинкции<sup>1</sup>.

В неравновесных средах населенности вышележащих уровней могут превосходить населенности уровней, лежащих ниже. При этом  $\alpha$  оказывается больше нуля и происходит экспоненциальное усиление электромагнитной волны. Коэффициент  $\alpha$  называется в этом случае квантовым коэффициентом усиления среды.

Часть усиленной волны с помощью зеркал или каким-нибудь другим образом можно вернуть в активную среду. Такой возврат аналогичен обратной связи в усилителях радиодиапазона. Если возвращенная волна совпадает с исходной по направлению распространения и по фазе, то обратная связь оказывается положительной и при достаточной ее величине квантовый усилитель превращается в квантовый генератор<sup>2</sup>.

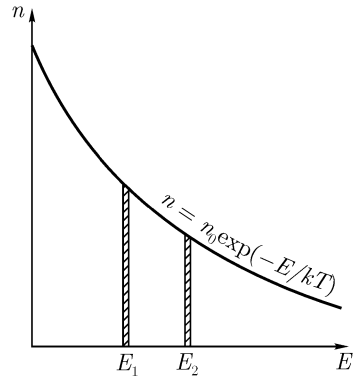


Рис. 90. Населенности уровней с разной энергией при термодинамическом равновесии.

<sup>1</sup>Строго говоря, в величину коэффициента экстинкции вносит вклад не только поглощение, но и рассеяние электромагнитных волн.

<sup>2</sup>Эффект квантового усиления волн впервые наблюдался в 1939 г. известным советским физиком В. А. Фабрикантом. В 1964 г. за создание квантовых генераторов Н. Г. Басов и А. М. Прохоров совместно с Ч. Таунсом были удостоены Нобелевской премии.

В тех случаях, когда населенность более высокого уровня (если уровень вырожден, то населенность соответствующего подуровня) превышает населенность нижележащего, говорят об инверсной населенности этих уровней; среду с инверсной населенностью уровней называют активной. Обращаясь к формуле Больцмана (10.27), нетрудно заметить, что инверсная населенность уровней ( $n_2 > n_1$  при  $E_2 > E_1$ ) формально соответствует отрицательным температурам. В технической литературе термин «отрицательные температуры» употребляется довольно часто. Это выражение нельзя считать удачным. В самом деле, температурой в физике принято характеризовать равновесное состояние вещества, при котором об инверсной населенности уровней говорить не приходится. При отсутствии равновесия каждой паре уровней  $k$  и  $l$  следует приписывать свою «температуру»  $T_{kl}$ :

$$kT_{kl} = (E_k - E_l) / \ln\left(\frac{n_l}{n_k}\right),$$

которая, конечно, не имеет ничего общего с обычной температурой, определяющей кинетическую энергию атомов.

## § 48. Методы создания инверсной населенности уровней

Одним из важнейших методов, применяемых для создания инверсной населенности уровней, является метод накачки: атомы «перекачиваются» из нижнего состояния в верхнее с помощью внешних источников энергии. В качестве таких источников часто используются источники электромагнитного излучения нужной частоты (излучение накачки). Существуют и другие методы, приводящие к увеличению населенности верхних уровней. Некоторые из них рассматриваются ниже.

Условия, в которых производится накачка, в оптических квантовых генераторах и в генераторах радиодиапазона существенно различны.

Расстояние между «рабочими» уровнями в лазерах составляет доли миллиэлектронвольта. Поэтому при нормальных температурах (и даже при охлаждении рабочего вещества) населенности этих уровней мало различаются или, во всяком случае, сравнимы друг с другом. В оптическом же диапазоне расстояние между уровнями даже в красной области спектра составляет около 1,5 эВ, так что верхний из рабочей пары уровней до накачки оказывается практически пустым. Для создания инверсной населенности в радиодиапазоне достаточно слегка уменьшить населенность нижнего уровня или увеличить населенность верхнего.

В оптическом диапазоне для той же цели нужно кардинально изменить населенности уровней.

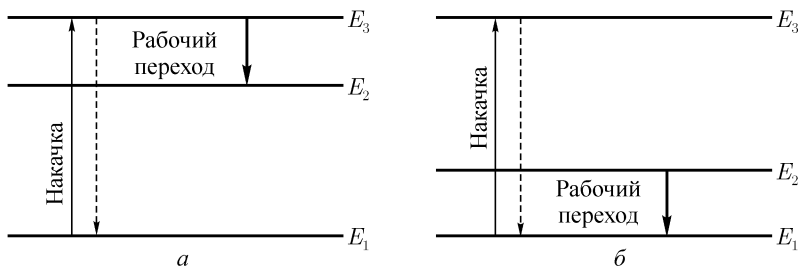


Рис. 91. Схема получения инверсной населенности в трехуровневой системе (мазеры): *a* — накачка частиц на уровень  $E_3$ , рабочий переход  $E_3 \rightarrow E_2$ ; *б* — опустошение уровня  $E_1$ , рабочий переход  $E_2 \rightarrow E_1$ .

Для создания инверсной населенности чаще всего применяются трех- и четырехуровневые системы. Схема трехуровневой системы изображена на рис. 91.

Рассмотрим накачку в радиодиапазоне. В исходном — равновесном — состоянии населенность уровней уменьшается с энергией. Поэтому до накачки  $n_1 > n_2 > n_3$ . Инверсная населенность создается с помощью электромагнитного излучения накачки, вызывающего переходы между уровнями. Пусть частота излучения накачки соответствует переходу  $E_3 \rightarrow E_1$ . Это излучение увеличивает населенность третьего уровня. Спонтанное и вынужденное излучения (и некоторые другие процессы) возвращают атомы в основное состояние. Даже при отсутствии таких процессов количество атомов, находящихся на третьем уровне, из-за вынужденного излучения не может превзойти их количества в основном состоянии. Инверсная населенность между первым и третьим уровнями, таким образом, достигнута быть не может. Однако населенность третьего уровня может превзойти населенность второго. Может также случиться, что на первом уровне останется меньше частиц, чем на втором. Первый из этих случаев реализуется, когда второй уровень близок к третьему (рис. 91 *a*). При этом населенности второго и третьего уровней близки уже при тепловом равновесии и добавление атомов на третий уровень приводит к их инверсной населенности (это добавление может быть довольно значительным, потому что на первом уровне находится много атомов). Вторая возможность может оказаться важной, если второй уровень близок к первому (рис. 91 *б*).

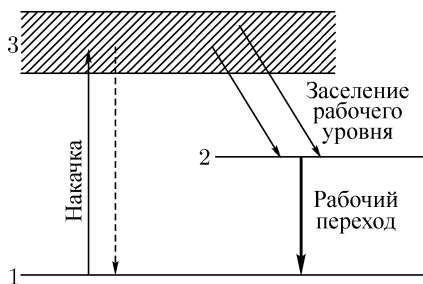


Рис. 92. Схема получения инверсной населенности в трехуровневой системе (лазеры).

Излучение накачки и в этом случае переводит атомы из состояния 1 в состояние 3. Из состояния 3 атомы могут либо вернуться в 1, либо перейти в 2. На втором уровне атомы накапливаются. Населенность этого уровня увеличивается и со временем начинает превышать населенность первого.

Для работы по трехуровневой схеме в оптическом диапазоне годятся далеко не любые тройки уровней. Прежде всего первый уровень должен быть плотно населен. Им обычно является основной уровень или уровень, очень близкий к основному. Необходимо, далее, чтобы уровень 2 был долгоживущим, метастабильным. Только при этом условии на втором уровне можно накопить достаточное количество атомов, превосходящее их число в основном состоянии. Вероятность переходов связана с шириной уровня соотношением неопределенностей  $\Delta E \tau \approx \hbar$ . Уровень 2 поэтому должен быть узким. Легко видеть, что уровень 3, наоборот, должен быть очень широким. Лишь в этом случае удастся полезно использовать заметную часть спектра оптического излучения накачки. Чаще всего роль уровня 3 играет широкая полоса. Ясно также, что переход  $3 \rightarrow 2$  должен происходить с большой вероятностью, желательно, большей, чем переход  $3 \rightarrow 1$ . Переход  $3 \rightarrow 2$  нередко является «безызлучательным»; в таких переходах излишняя энергия атома передается не кванту, а кристаллической решетке (твердые тела) или сталкивающимся атомам (газы).

Отметим важный недостаток трехуровневой схемы. Как уже отмечалось, при работе в оптическом диапазоне населенность уровня 2 до накачки исчезающе мала по сравнению с населенностью первого уровня. На предшествующее генерации выравнивание населенностей приходится тратить много энергии, которая пропадает бесполезно. Этому недостатку лишены четырехуровневые системы.

Описанная методика хорошо работает в радиодиапазоне, где существуют хорошо разработанные способы генерации колебаний с любой заданной частотой (в нашем случае с частотой, соответствующей переходу  $1 \rightarrow 3$ ). В оптическом диапазоне такие способы отсутствуют и метод становится малоэффективным.

Трехуровневые системы, предназначенные для использования в оптическом диапазоне, работают по другой схеме (рис. 92). Излучение накачки и в этом случае пере-



В четырехуровневой системе (рис. 93 *а*) рабочий переход происходит между уровнями 3 и 2, ни один из которых не совпадает с основным. Накачка переводит атомы из основного (первого) состояния в четвертое. Третий уровень заселяется с четвертого. Четырехуровневые системы применяются как в оптическом, так и в радиодиапазоне. В оптической области существенное отличие четырехуровневых систем от трехуровневых заключается в том, что нижний рабочий уровень (в нашем случае — второй) с самого начала оказывается пустым или почти пустым. Поэтому даже небольшое количество атомов, появившихся на третьем уровне, приводит к его инверсивной населенности по отношению ко второму.



Рис. 93. *а* — Схема четырехуровневой системы с рабочим переходом между уровнями  $3 \rightarrow 2$  (оптические лазеры); *б* — генерация колебаний с частотой, превосходящей частоту накачки (квантовые генераторы радиодиапазона).

В радиодиапазоне все уровни четырехуровневой системы (или, по крайней мере, нижние два) могут иметь сравнимую населенность. Тогда возникает возможность генерировать колебания более высокой частоты, чем частота накачки. Для этого нужно, например, чтобы накачка происходила со второго уровня на четвертый, а рабочий переход — с третьего на первый уровень (рис. 93 *б*).

Для перевода атомов на верхние уровни применяют не только накачку с помощью электромагнитного излучения. В газовых лазерах для возбуждения атомов (и молекул) часто используют электрический разряд. (В плазме разряда электроны приобретают энергию, достаточную не только для возбуждения, но и для ионизации атомов.)

Инверсная населенность уровней может быть получена и с помощью некоторых других методов. Атомы (и молекулы) в возбужденных состояниях могут получаться в результате химических реакций. Так работают химические лазеры. Преимуществом таких лазеров яв-

ляется высокий химический КПД<sup>1</sup>, достигающий 20%, а недостатком — необходимость непрерывной замены рабочего вещества.

Существуют лазеры, использующие газодинамические эффекты. При быстром охлаждении газа населенность уровней не сразу перестраивается от высоких температур к низким. Время установления теплового равновесия зависит от индивидуальных свойств уровней. Так, может случиться, что в трехуровневой схеме (рис. 91) при понижении температуры уровень 2 опустошается раньше, чем уровень 3. В этом случае между ними может возникнуть инверсная населенность. Газодинамические лазеры могут работать, конечно, лишь в том случае, когда при исходной температуре населенность третьего уровня достаточно высока.

В настоящее время широко используются лазеры на полупроводниках с  $p - n$ -переходами. При прохождении через  $p - n$ -переход электроны рекомбинируют с дырками, выделяя заметное количество энергии (по порядку величины равно ширине запрещенной зоны). В некоторых веществах (например, в арсениде галлия) эта энергия с большой вероятностью выделяется в виде света и может использоваться для создания лазера. Мы не будем далее обсуждать этот вопрос, поскольку свойства полупроводников в этой книге будут рассмотрены позднее.

## § 49. Устройство оптических квантовых генераторов

В качестве примера лазера, работающего по трехуровневой схеме, рассмотрим лазер на кристалле рубина. На рис. 94 изображена схема уровней ионов  $\text{Cr}^{3+}$ , входящих в состав рубина (рубином называется кристалл  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , в котором часть ионов алюминия заменена ионами хрома). В качестве рабочих переходов в рубиновом лазере используются переходы с уровней  $E_{2a}$  и  $E_{2b}$  на основной уровень. Уровни  $E_{2a}$  и  $E_{2b}$  метастабильны (их время жизни несколько миллисекунд, в то время как для обычных оптических переходов  $\tau \approx 10^{-8}$  с). В этом лазере, как и в других твердотельных лазерах, для получения инверсной населенности уровней применяется оптический накачка. Для накачки используются широкие полосы поглощения  $E_3$  и  $E_4$ , одна из которых расположена в зеленой, а другая — в синей части спектра. Ширины полос очень велики — около 1 мкм. Переходы с этих полос на уровни  $E_2$  происходят

<sup>1</sup>В химических лазерах следует различать два коэффициента полезного действия: химический и технический КПД. Химический КПД показывает, какая часть энергии, которая выделяется в реакциях, создающих инверсивную населенность уровней, преобразуется в энергию когерентного излучения. Техническим КПД химических лазеров называется отношение энергии лазерного излучения к потребляемой от электрической сети энергии; технический КПД может превышать 100 %.

без излучения — энергия переходит в колебания решетки. Указанные переходы намного вероятнее, чем спонтанный возврат атомов на уровень 1. Это способствует быстрому созданию инверсной населенности уровней рабочего перехода. Для лазеров применяют искусственно выращенные монокристаллы рубина с небольшим (0,05%) содержанием хрома (бледно-розовая окраска). Монокристаллам придается форма длинных стержней круглого сечения. В небольших лазерах рубиновые стержни имеют около 1 см в диаметре и 10 см в длину. На рис. 95 изображена схема одного из вариантов устройства рубинового лазера. Для накачки используется спиральная лампа-вспышка, окружающая рабочее тело лазера — цилиндрический рубиновый стержень. Для уменьшения световых потерь лампа заключена в зеркальный кожух. На оба торца рубинового стержня нанесен зеркальный слой<sup>1</sup>. После срабатывания лампы-вспышки кристалл рубина становится оптически активным. Генерация начинается самопроизвольно после того, как появится световой квант, спонтанно излученный вдоль оси рубинового стержня. Распространяясь по стержню, излучение усиливается — к исходному кванту присоединяются кванты вынужденного излучения. Обратную связь осуществляют зеркала. Выражаясь на радиотехническом языке, они возвращают ко входу системы (к рубиновому кристаллу) сигнал (свет), возникающий на его выходе (покидающий кристалл).

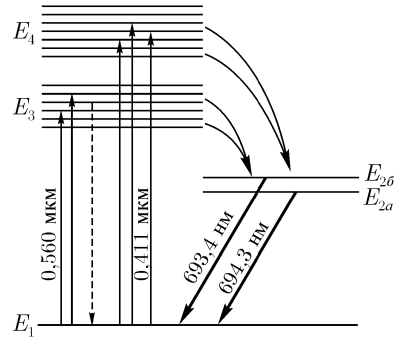


Рис. 94. Схема уровней  $\text{Cr}^{3+}$  в кристалле рубина.

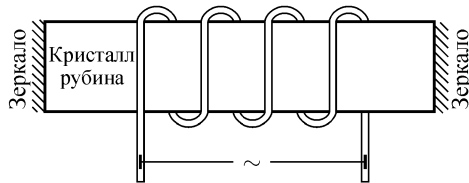


Рис. 95. Схема устройства лазера на рубине.

<sup>1</sup>Зеркала могут быть и отнесены от концов рубинового стержня.

Дважды отражаясь от зеркал (один раз от правого, а другой — от левого), световые кванты повторяют свой путь. Таким образом, зеркала «запирают» свет, образуя оптический резонатор, в нашем случае — интерферометр Фабри–Перо. Дважды отраженный свет усиливает исходный, если он совпадает с ним по фазе, т. е. если оптическая длина пути (удвоенная длина пути между зеркалами, умноженная на коэффициент преломления) равна целому числу длин волн. Поэтому генерация может возникнуть лишь при условии, если выполняется соотношение

$$nl = m\lambda/2, \quad (10.28)$$

где  $l$  — длина рубинового стержня,  $n$  — показатель преломления рубина, а  $m$  — любое целое число. Многократно проходя через рубиновый кристалл, световой поток экспоненциально усиливается (см. (10.25)). Одно (или оба) из зеркал, образующих оптический резонатор, делают частично прозрачным. Через него световые кванты выходят из установки, образуя лазерный луч. Световой импульс продолжается, пока количество атомов на верхнем уровне рабочего перехода не сравняется с их количеством на нижнем уровне. После этого излучение прекращается и возобновляется лишь после новой накачки.

Найдем условие возникновения генерации. Оно состоит в том, чтобы полный коэффициент усиления света  $k$  на замкнутом пути был больше единицы:

$$k = r_1 r_2 \exp(2\alpha l) > 1, \quad (10.29)$$

где  $r_1$  и  $r_2$  — коэффициенты отражения зеркал, а величина  $\alpha$  определена равенством (10.26). Приравняв левую часть (10.29) к единице, можно получить пороговое значение коэффициента усиления  $\alpha_{\text{пор}}$ , а затем — с помощью (10.26) — и необходимое для возникновения генерации соотношение между  $n_1$  и  $n_2$ . В коэффициент усиления входит усиление, возникающее при прохождении сквозь рубиновый стержень, и потери на отражение от зеркал (в том числе дифракционные потери, возникающие из-за конечного диаметра зеркал). В лазерах применяют зеркала очень высокого качества. Если потери света на пропускание являются неизбежными (в противном случае луч не сможет выйти из лазера), то потери на поглощение желательно уменьшать. По этой причине металлических зеркал стараются избегать и применяют зеркала с диэлектрическим покрытием.

Лампы-вспышки создают длинный световой импульс, продолжающийся около миллисекунды. Нарастание и прекращение лазерного импульса происходят намного быстрее. Поэтому за время работы лампы-вспышки успевает произойти множество быстро следующих друг за другом лазерных импульсов. Эти импульсы могут заметно отличаться

друг от друга не только по фазе, но и по амплитуде (из-за случайного характера начала импульса). На рис. 96 изображена осциллограмма части импульса рубинового лазера.

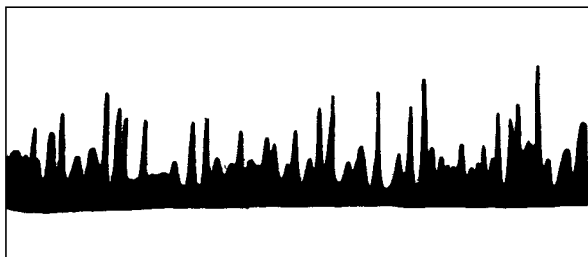


Рис. 96. Осциллограмма части импульса рубинового лазера.

В небольших рубиновых лазерах, имеющих объем несколько см<sup>3</sup>, за одно срабатывание лампы-вспышки в лазерное излучение преобразуется несколько джоулей. При полном времени импульса порядка 1 мс средняя световая мощность составляет поэтому несколько киловатт. В лазерах с более короткими импульсами она может быть существенно выше.

Рассмотрим теперь работу лазеров на неодимовом стекле (стекло, активированное ионами Nd<sup>3+</sup>). Эти лазеры — из твердотельных — являются самыми популярными. Они, в частности, применяются для создания мощных оптических систем, способных накапливать, а затем освобождать энергию в десятки и даже сотни килоджоулей. Схема уровней иона Nd<sup>3+</sup> приведена на рис. 97. Основным уровнем является уровень  ${}^4I_{9/2}$ . При оптической накачке ионы неодима переводятся в одно из состояний  $E_4$ . Из этих состояний они без излучения переходят на метастабильный уровень  $E_3({}^4F_{3/2})$  и накапливаются на нем. Переходы с уровня  $E_3$ , в нижние состояния очень мало вероятны из-за большого различия квантовых чисел  $L$  и  $J$ . Уровень  $E_2({}^4I_{11/2})$  близок к основному, но почти не населен, так как он отстоит от основного на  $10kT$  и связан с ним быстрым безызлучательным переходом, обеспечивающим установление больцмановского равновесия. Инверсия населенности между уровнями  $E_3$  и  $E_2$  достигается поэтому существенно раньше, чем между уровнями  $E_3$  и  $E_1$ , и рабочим переходом является переход  $E_3 \rightarrow E_2$  с  $\lambda = 1,06$  мкм. Таким образом, неодимовый лазер работает по четырехуровневой схеме.

Конструкция источника света, изображенного на рис. 95, очень проста, но не является наилучшей. Коэффициент полезного действия лазера

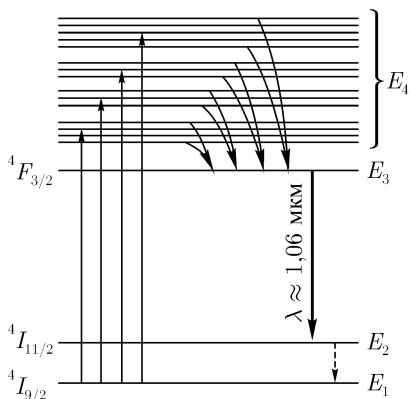


Рис. 97. Схема уровней  $\text{Nd}^{3+}$  в неодимовом стекле.

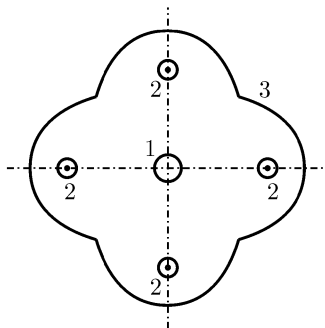


Рис. 98. Устройство лазера с несколькими источниками световой накачки: 1 — рубиновый или неодимовый стержень, 2 — лампы-вспышки, 3 — отражатель.

можно увеличить, помещая рубиновый стержень (или стержень из неодимового стекла) в один из фокусов эллиптического отражателя, а источник света — в другой фокус. Если источники света несколько, то применяют и более сложные конструкции (рис. 98).

Из-за быстро наступающего перегрева лазеры на неодимовом стекле, как и рубиновые лазеры, работают преимущественно в импульсном режиме. Однако неодимовый лазер на иттрий-алюминиевом гранате<sup>1</sup> (кристалл  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ , в котором часть ионов  $\text{Y}^{3+}$  замещена ионами  $\text{Nd}^{3+}$ ) на небольшой мощности может работать и непрерывно, так как его теплопроводность достаточно высока (на порядок выше, чем у стекла).

Рассмотрим один из газовых лазеров — лазер на смеси атомов гелия и неона. Такие лазеры хорошо освоены и выпускаются промышленностью. Рабочими переходами в гелий-неоновых лазерах являются переходы в Ne. Для накачки используется газовый разряд (возбуждение электронным ударом). При разряде в основном возбуждаются атомы гелия (их число на порядок превосходит число атомов неона). Один из двух его  $1s$ -электронов переходит в  $2s$ -состояние (рис. 99). В зависимо-

<sup>1</sup>Лазеры на кристаллах  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ , активированные ионами  $\text{Nd}^{3+}$ , в литературе по квантовой электронике сокращенно обозначаются  $\text{Nd} : \text{YAG}$ .

сти от направления спина возбужденного электрона атом оказывается в  $2^1S$ - или  $2^3S$ -состоянии. Оба эти состояния метастабильны.

В атоме неона имеются шесть  $2p$ -электронов, которые вместе с двумя  $2s$ -электронами образуют замкнутый  $L$ -слой. При соударении атомов неона с возбужденными атомами гелия один из  $2p$ -электронов неона переходит в возбужденное состояние (с наибольшей вероятностью — в состояние  $4s$  или  $5s$ , так как энергия этих состояний близка к энергиям  $2^1S$  и  $2^3S$  в возбужденных атомах гелия); возбужденные состояния атомов неона изображены прямоугольниками, чтобы отметить их сложную структуру: они содержат большое число подуровней.

На рис. 99 сплошными линиями обозначены переходы, использующиеся в He — Ne-лазерах. Эти переходы приводят к испусканию инфракрасного излучения с длинами волн 1,15 мкм ( $4S \rightarrow 3P$ ) и 3,39 мкм ( $5S \rightarrow 4P$ )

и красного излучения с  $\lambda = 0,63$  мкм ( $5S \rightarrow 3P$ ). В зависимости от длины оптического резонатора и устройства его зеркал удается выделить тот или другой переход. В трубке длиной около 1 м с диаметром 0,5 см можно получить красное излучение мощностью 0,1 Вт.

Пучки света, испускаемые оптическими квантовыми генераторами, нередко сами собой оказываются поляризованными. Поляризацией пучка можно управлять, меняя условия прохождения света для волн с разной поляризацией. Торцы газоразрядных трубок, содержащих гелий-неоновую смесь, обычно изготавливают из плоскопараллельных пластинок, расположенных под углом Брюстера к оси трубки. Зеркала располагают вне трубки (рис. 100). При этом условия генерации оказываются выполненными только для плоскополяризованного света с направлением электрического вектора, которое соответствует минимальным потерям на отражение от пластинок.

В последние годы все более широкое распространение получают импульсные лазеры на углекислом газе ( $\text{CO}_2$ ). С их помощью удается получать световые пучки, обладающие не только большой мощностью в импульсе, но и значительной средней мощностью. Такие пучки представляют большую ценность для промышленных и научных применений.

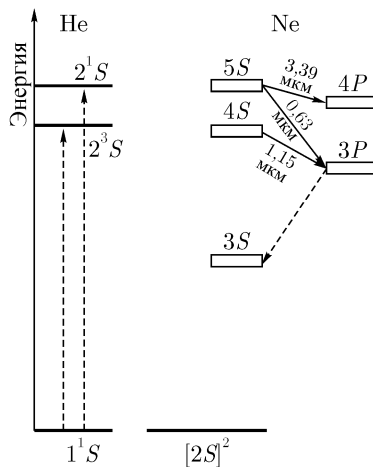


Рис. 99. Схема уровней гелия и неона.

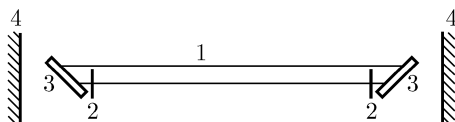


Рис. 100. Схема гелий-неонового лазера: 1 — стеклянная трубка, наполненная смесью He и Ne, 2 — электроды, служащие для поддержания разряда, 3 — плоскопараллельные пластинки, 4 — зеркала (одно из зеркал — полупрозрачное).

Твердотельные лазеры (рубин, неодимовое стекло) не позволяют получать большие средние мощности из-за перегрева, приводящего к разъюстировке установки и к порче рабочего кристалла. Газовые лазеры перегреть труднее. При необходимости газовая смесь прокачивается через лазер, охлаждается или заменяется.

Для генерации лазерного излучения в  $\text{CO}_2$ -лазерах используются переходы между колебательными уровнями молекул углекислого газа с  $\lambda = 10,6$  мкм и с  $\lambda = 9,6$  мкм (далекая инфракрасная область). Для возбуждения молекул используется газовый разряд, происходящий в смеси, содержащей  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$  и He.

На рис. 101 приведена схема расположения нижних колебательных уровней молекул  $\text{CO}_2$  и  $\text{N}_2$ . Колебательные уровни изображены не линиями, а прямоугольниками, напоминая, что каждый из них на самом деле представляет собой полосу, состоящую из большого количества близких вращательных уровней.

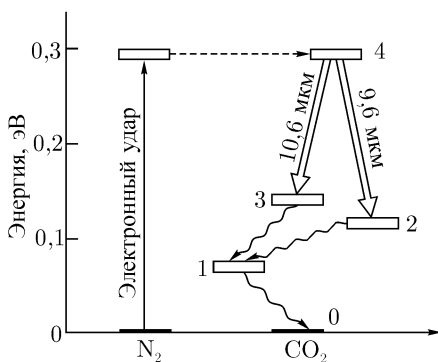


Рис. 101. Схема расположения нижних уровней в молекулах  $\text{CO}_2$  и  $\text{N}_2$ .



У двухатомной молекулы азота имеется всего одна колебательная степень свободы и соответственно одна система эквидистантных колебательных уровней. На рисунке изображены два уровня этой системы — основной и первый возбужденный.

Молекула  $\text{CO}_2$  состоит из трех атомов. Она имеет четыре колебательные степени свободы, две из которых совпадают по энергии. Колебательный спектр этой молекулы очень богат линиями. На рисунке изображен основной уровень молекулы  $\text{CO}_2$  и четыре возбужденных колебательных уровня.

При электрическом разряде на уровень 4 переводится часть молекул  $\text{CO}_2$ , но с еще большей вероятностью на нижний колебательный уровень возбуждаются молекулы азота. Их энергия в результате безызлучательных столкновений передается затем невозбужденным молекулам  $\text{CO}_2$ , в результате чего и эти молекулы также переходят на уровень 4. Уровни 2 и 3 быстро опустошаются благодаря переходам на уровень 1 (безызлучательные переходы). Опустошению этих уровней способствуют столкновения с атомами гелия, специально вводимыми в состав газовой смеси. Рабочие переходы происходят с четвертого на второй или на третий уровни. Переход с  $\lambda = 10,6$  мкм происходит быстрее и используется чаще. Мощные газовые лазеры должны накапливать значительную энергию, а значит, содержать большое количество газа. Большие лазерные установки наполняются углекислым газом при атмосферном или при повышенном давлении. Чтобы возбудить разряд в таком газе, необходимо приложить к нему достаточно высокое напряжение (сотни киловольт) и создать начальную ионизацию, без которой разряд в плотном газе не возникает. Такая ионизация производится с помощью ультрафиолетового света, испускаемого искровым или дуговым источником, или с помощью быстрых электронов, инжектируемых в газ (электроразрядные  $\text{CO}_2$ -лазеры).

Отметим, что газодинамический  $\text{CO}_2$ -лазер (§ 48) является одним из наиболее мощных ОКГ (достигнута мощность около 100 кВт в непрерывном режиме в течение нескольких секунд); в лазерах этого типа достигнут КПД 20 %.

Упомянем, наконец, об устройствах, позволяющих получать лазерные импульсы большой мощности в строго заданные моменты времени. В таких устройствах коэффициент усиления лазера уменьшается на время подготовки к импульсу и восстанавливается в нужный момент. Управлять прозрачностью оптического резонатора можно с помощью ряда физических эффектов, из которых чаще всего используются эффекты Погкельса (линейный электрический эффект) и Керра (квадратичный электрический эффект). Оба эти эффекта заключаются в том, что в электрическом поле у некоторых веществ появляется двойное лучепре-

ломление. «Затемнение» резонаторов на время подготовки к импульсу позволяет накапливать в них большие запасы энергии и получать после «просветления» гигантские импульсы.

## § 50. Структура лазерного излучения

Выпустим из лазера световой луч и поставим экран на его пути. На небольших расстояниях от лазера на экране видно одно световое пятно. При удалении на несколько метров становится заметно, что оно распадается на ряд отдельных пятен. Если продолжать увеличивать расстояние до экрана, число световых пятен не меняется. Каждое из них соответствует определенной поперечной моде колебаний. Эти моды принадлежат волнам, распространяющимся по близким, но не совпадающим направлениям<sup>1</sup>. Появление нескольких мод оказывается неизбежным, если условия генерации выполнены для нескольких направлений распространения. В реальных лазерах так почти всегда и бывает.

Кроме поперечных, лазерное излучение обычно содержит и несколько продольных мод. Это означает, что генерируются колебания не с одной, а с несколькими близкими частотами. Генерация на близких частотах оказывается возможной из-за того, что линии, соответствующие электромагнитным переходам, всегда имеют некоторую ширину.

Рассмотрим причины, влияющие на ширину линий оптического спектра. Даже в тех случаях, когда излучающая частица не движется и на нее не действуют никакие внешние силы, спектральная линия имеет ширину, называемую естественной шириной линии. Естественная ширина обусловлена конечной шириной энергетических уровней  $\Delta E$ . Величина  $\Delta E$  связана со временем жизни  $\tau$  соответствующего уровня соотношением неопределенностей  $\Delta E \cdot \tau \approx \hbar$ . В общем случае вклад в ширину линии вносят ширины как исходного, так и конечного уровней. Однако при переходах на основной уровень эта ширина целиком связана с шириной возбужденного уровня (время жизни в основном состоянии неограниченно велико, и ширина уровня равна нулю). В этом случае

$$\Delta\nu_{\text{ест}} = \frac{1}{2\pi} \Delta\omega = \frac{1}{2\pi\hbar} \Delta E \approx \frac{1}{2\pi\tau}. \quad (10.30)$$

Для обычных (дипольных) оптических переходов  $\tau \approx 10^{-8}$  с и естественная ширина линии  $\Delta\nu_{\text{ест}} \approx 10^7$  Гц. Для переходов с метастабильных уровней эта ширина, конечно, существенно меньше.

<sup>1</sup>Электромагнитные колебания, которые могут возбуждаться в объемном резонаторе, не исчерпываются плоскими волнами. Более сложные типы волн (которые мы здесь не рассматриваем) приводят к появлению на экране сразу нескольких световых пятен.

Реальная ширина спектральной линии  $\Delta\nu$  обычно значительно превосходит  $\Delta\nu_{\text{ест}}$ . Причинами уширения являются столкновения излучающих частиц с другими частицами (в газовых средах), эффект Доплера, а также влияние локальных электрических и магнитных полей, вызывающих сдвиги уровней (эффекты Штарка и Зеемана).

Если излучающее вещество находится в газообразном состоянии, то в процессе теплового хаотического движения частицы непрерывно сталкиваются между собой. При соударениях их энергетическое состояние может меняться (безызлучательные переходы). Такие столкновения сокращают время жизни частиц как в исходном, так и в конечном состояниях, что приводит к уширению спектральной линии. Столкновительная ширина, вносимая каждым уровнем, равна  $\Delta\nu_{\text{ест}} \approx 1/(2\pi\tau_{\text{ст}})$  ( $\tau_{\text{ст}}$  — среднее время между двумя столкновениями, приводящими к безызлучательным переходам) и зависит от давления и температуры газа. Она может оказаться как меньше, так и больше  $\Delta\nu_{\text{ест}}$ .

Доплеровская ширина спектральных линий  $\Delta\nu_D$  связана с движением излучающих частиц в направлении излучения<sup>1</sup>.

Как известно,  $\Delta\nu_D = \nu v/c$ . Полагая, что излучающие частицы находятся в тепловом равновесии со средой, имеющей температуру  $T$ , получаем

$$\Delta\nu_D = \nu \frac{v}{c} \approx \frac{\nu}{c} \sqrt{\frac{kT}{m}} = \nu \sqrt{\frac{kT}{mc^2}}. \quad (10.31)$$

Оценим доплеровскую ширину  $\Delta\nu_D$  при следующих значениях  $\nu$ ,  $T$  и  $m$ :  $\nu \approx 0,6 \cdot 10^{15}$  Гц,  $T \approx 300$  К,  $mc^2 \approx 10^{10}$  эВ:

$$\Delta\nu_D = (0,6 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}) \sqrt{0,025 \text{ эВ}/10^{10} \text{ эВ}} \approx 10^9 \text{ Гц}.$$

Из всех ширин, дающих вклад в полную ширину перехода, доплеровское уширение обычно оказывается наибольшим. Уширение, связанное с локальными полями, как правило, меньше доплеровского.

Перейдем теперь к рассмотрению структуры спектральной линии квантового генератора. Как мы уже знаем, частоты, на которых может генерироваться лазерное излучение, определяются длиной оптического резонатора и подчиняются условию (10.28). Соседние «разрешенные» колебания очень мало различаются по длине волны. На ширине линии излучения может уместиться несколько таких колебаний. В этом случае проявляется возможность генерации лазерного излучения на нескольких продольных модах.

<sup>1</sup> Поперечный эффект Доплера гораздо слабее, и его можно не учитывать.

Рассчитаем расстояние между соседними модами. Для этого разделим обе части равенства (10.28) на  $\lambda l$  и произведем дифференцирование (мы положили для простоты  $n = 1$ ):

$$\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right) = \frac{1}{2l}\Delta m.$$

Для соседних мод  $\Delta m = 1$ . Пренебрегая знаком минус, получим

$$\Delta\lambda = \lambda^2/2l, \quad (10.32)$$

или в частотах

$$\Delta\nu = c/2l. \quad (10.33)$$

Положим для оценки  $\lambda = 500$  нм,  $l = 1$  м. Тогда

$$\Delta\lambda = (500 \cdot 10^{-9})^2/(2 \cdot 1) \approx 10^{-14} \text{ нм}, \quad \Delta\nu \approx 1,5 \cdot 10^8 \text{ Гц}.$$

Мы видим, таким образом, что расстояние между соседними разрешенными модами, действительно, существенно меньше не только полной, но и доплеровской ширины линии.

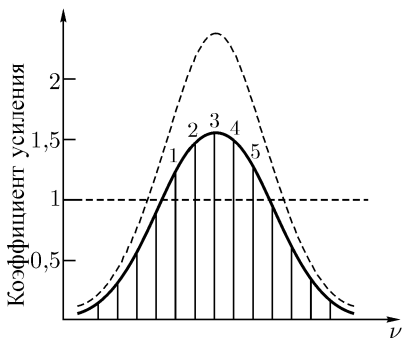


Рис. 102. Генерация продольных мод.

продольных мод, отмеченных номерами: для всех них коэффициент усиления превышает единицу. Если уменьшить коэффициент усиления (снизить энергию накачки или взять худшие зеркала), время развития лазерного импульса возрастет, а мощность соответственно уменьшится, но возбуждаться будет меньшее число мод, и наоборот, при увеличении коэффициента усиления (пунктирная кривая на рис. 102) число продольных мод возрастает.

Обратимся к рис. 102. Сплошная кривая изображает зависимость от частоты коэффициента усиления электромагнитной волны, прошедшей через лазер и вернувшейся к исходной точке (с учетом потерь на зеркалах). Усиление максимально в середине линии и падает к ее краям. Ширина изображенной на рисунке кривой является полной, т.е. включает как естественную ширину, так и все типы уширения. Вертикальные прямые указывают разрешенные частоты оптического резонатора. В случае, который изображен на рисунке, могут возбуждаться пять

Число мод, которые возбуждаются при работе лазера, можно ограничить и без уменьшения его мощности. Для этого нужно устранить возможность генерации на «лишних» частотах. Это можно сделать, например, помещая между зеркалами лазера интерферометр с высоким разрешением.

В мощных лазерных установках для получения одномодового режима используется другой метод. Такие установки состоят из малоомощного лазера-генератора и одного или нескольких каскадов усиления. Меры для создания одномодового режима принимаются только в малоомощном лазере, причем выделить луч, принадлежащий одной моде, можно и после выхода света из лазера. Мощные усиливающие каскады увеличивают затем мощность пучка только на этой единственной моде. Одна из трудностей, связанных с созданием мощных лазерных систем, состоит в том, что усилительные каскады, содержащие активную среду с большой запасенной энергией, нужно удерживать от генерации до прихода луча от лазера-генератора. Для этого применяются самопросветляющиеся оптические затворы, непрозрачные для слабого, но свободно пропускающие более мощные световые пучки. Установка такого затвора между зеркалами лазера-усилителя предохраняет его от самопроизвольного перехода в режим генерации (как мы уже знаем, генерация возникает при многократном усилении вначале очень слабого светового импульса, начавшегося с одного спонтанно испущенного кванта; такой импульс задерживается оптическим затвором).

Найдем ширину линии лазера, работающего в одномодовом режиме. Эту ширину  $\Delta\nu$  можно оценить по добротности  $Q$  оптического резонатора:

$$\nu/\Delta\nu \approx Q. \quad (10.34)$$

Примем для оценки, что генератор испускает зеленый свет ( $\lambda \approx 500$  нм), резонатор имеет длину  $l = 10$  см и содержит зеркала с коэффициентом отражения  $r = 0,95$ . Пусть световая волна начинает движение от середины резонатора и движется, например, направо. Она вернется к исходной точке (с тем же направлением движения), проделав путь  $2l$  и испытав два отражения от зеркал. При этом доля оставшейся энергии будет равна  $r^2$ , а доля потерь составит  $1 - r^2$ .

Как известно, добротностью называется обратная величина от доли энергии, теряемой колебательной системой за промежуток времени, в течение которого фаза колебаний изменяется на один радиан. Фаза световой волны меняется на  $2\pi$  на длине пути  $\lambda$ . На пути  $2l$  она изменяется на  $2\pi 2l/\lambda$  радиан. Имеем, следовательно,

$$\frac{1}{Q} = (1 - r^2) / \frac{4\pi l}{\lambda},$$

т. е.

$$Q = \frac{4\pi l}{\lambda(1 - r^2)}. \quad (10.35)$$

В нашем случае

$$Q = \frac{4\pi \cdot 10 \text{ см}}{500 \text{ нм} (1 - 0,95^2)} = 3 \cdot 10^7.$$

Это означает, что ширина резонансной кривой оптического резонатора, а вместе с ней и ширина линии лазера составляют  $3 \cdot 10^{-8}$  от рабочей частоты. При  $\nu \approx 0,6 \cdot 10^{15}$  Гц  $\Delta\nu_{\text{лаз}} \approx 2 \cdot 10^7$  Гц.

При улучшении качества зеркал и при увеличении расстояния между ними линии продолжают сужаться, так что их ширина может быть сделана много меньше не только доплеровской, но и естественной ширины оптического перехода. Таким образом, лазеры позволяют получать интенсивные пучки света с чрезвычайно высокой монохроматичностью, которая не может быть получена никакими другими методами.

Исследуем направленность лазерного излучения. Расходимость лазерных пучков, генерируемых твердотельными лазерами, обычно определяется оптическими неоднородностями рабочего вещества и по величине составляет около градуса. Газовые лазеры испускают световые пучки, расходимость которых определяется только дифракцией на выходном отверстии — на зеркале оптического резонатора. Угол дифракционной расходимости по порядку величины равен  $\lambda/d$ , где  $\lambda$  — длина волны света,  $d$  — диаметр отверстия. Подставляя для оценки  $\lambda = 0,5$  мкм,  $d = 1$  см, найдем

$$\theta = \lambda/d = (0,5 \cdot 10^{-4})/1 = 0,5 \cdot 10^{-4} \text{ рад.}$$

При больших зеркалах расходимость может быть сделана еще меньшей.

Подводя итоги, отметим, что появление лазеров ознаменовало подлинный переворот в оптике. Впервые получен метод, позволяющий с хорошим коэффициентом полезного действия (десять процентов) переводить другие виды энергии в электромагнитное излучение, обладающее малыми углами расходимости, высокой степенью монохроматичности, высокой временной и пространственной когерентностью. В последние годы лазеры широко используются для решения различных научных и технических задач. Область их применения, несомненно, будет продолжать увеличиваться.

## ГЛАВА 11

# МОЛЕКУЛЫ И КРИСТАЛЛЫ

### § 51. Химическая связь. Образование молекул

При обычных температурах газообразные и жидкие вещества состоят не из атомов, а из молекул. Исключение составляют только инертные газы. В твердых веществах образуются огромные системы, соединяющие в одну упорядоченную структуру (в кристалл) чрезвычайно большое число атомов. Строением кристаллов мы займемся позднее.

Силы, объединяющие атомы в молекулы (химическая связь), носят электрический характер. Некоторые свойства химических связей могут быть поняты с помощью рассуждений, основанных на представлениях классической физики, однако полную теорию можно построить только с помощью квантовой механики.

Проще всего понять, как образуются молекулы, состоящие из двух разнородных атомов, один из которых содержит электрон сверх заполненной оболочки, а в оболочке другого не хватает одного электрона. Примером такой молекулы является молекула поваренной соли NaCl. Единственный электрон в *M*-слое электронной оболочки атома натрия (*3s*-электрон) сравнительно слабо связан с «атомным остовом». Энергия его связи составляет всего 5,1 эВ (напомним, что энергия связи электрона в атоме водорода равна 13,6 эВ). В *3p*-оболочке атома хлора не хватает одного электрона. Поэтому атом хлора способен присоединять к себе еще один электрон (при этом он превращается в отрицательно заряженный ион). Энергия связи этого лишнего электрона (или, как говорят, энергия сродства атома хлора к электрону) сравнительно велика. Она составляет 3,8 эВ. Этой энергии почти достаточно, чтобы ионизовать атом натрия. Молекула NaCl может образоваться лишь в том случае, если ее энергия меньше энергии атомов Na и Cl, взятых порознь, так что при соединении атомов выделяется энергия.

Расчет энергии, выделяющейся при образовании молекулы поваренной соли, удобно вести в два этапа. Рассмотрим удаленные друг от друга атомы Na и Cl. Передадим электрон от натрия к хлору. На это придется

затратить  $5,1 - 3,8 = 1,3$  эВ. Но образовавшиеся ионы притягиваются друг к другу. При их сближении выделяется энергия. Если окажется, что эта энергия превосходит энергию, нужную для передачи электрона от атома к атому — в нашем случае 1,3 эВ, то образование молекулы сопровождается выделением энергии и молекула возникнет. Если энергии не хватит, молекула образоваться не может. Расчет и опыт показывают, что энергия электростатического притяжения ионов  $\text{Na}^+$  и  $\text{Cl}^-$  заметно превышает необходимую, и при соединении атомов Na и Cl в молекулу NaCl выделяется довольно большая энергия 4,2 эВ.

Химическая связь в молекуле NaCl (и в других подобных молекулах) носит название и о н н о й с в я з и. Происхождение этого названия ясно из сказанного выше и не требует пояснений. Как следует из нашего примера, ионная связь — ее называют также г е т е р о п о л я р н о й — характерна для молекул, состоящих из сильно различающихся атомов, один из которых легко отдает, а другой — охотно присоединяет электроны. Количество атомов, объединяющихся в молекулу под действием ионных связей, может быть и больше двух. Ионная связь не возникает при взаимодействии одинаковых атомов и не может, в частности, объяснить существование молекул водорода ( $\text{H}_2$ ), азота ( $\text{N}_2$ ) и многих других газов.

Перейдем к обсуждению г о м е о п о л я р н о й, или, что то же, к о в а л е н т н о й, связи, ответственной за образование молекул, состоящих из одинаковых атомов, а также очень многих других молекул.

При обсуждении гетерополярной связи нам не пришлось прибегать к квантовой механике<sup>1</sup>. Чтобы разобраться в основных чертах явления, оказалось достаточно использовать рассуждения, основанные на классической физике (количественно верные результаты можно получить, конечно, только с помощью квантовой механики). Попробуем пойти по этому пути и при обсуждении природы ковалентной связи.

Начнем с водорода. Будем постепенно приближать протон или электрон к атому водорода. Под действием электрического поля подносимой частицы атом поляризуется. Если приближающаяся частица является электроном, электронное облако атома им отталкивается, а если протоном — то притягивается. В обоих случаях у атома возникает дипольный электрический момент, и на подносимую частицу действует притягивающая сила, которая сохраняет свой знак до расстояний порядка размера атома.

Образующиеся трехчастичные системы хорошо известны. Это отрицательный ион водорода (один протон, два электрона) и ион молекулярного водорода (два протона, один электрон). Как уже ясно из сказанного, присоединение электрона или протона к атому водорода должно сопровождаться выделением энергии (хотя и не таким большим, как образование самого атома водорода). Энергия

---

<sup>1</sup>Приведенные рассуждения основываются на том, что радиус ионов задан



связи дополнительного протона в молекулярном ионе  $\text{H}_2^+$  равна 2,75 эВ, а энергия образования иона  $\text{H}^-$  составляет около 0,75 эВ.

Молекулярный ион водорода может присоединить к себе еще один электрон, образуя молекулу водорода. Этот процесс энергетически выгоден, поскольку отрицательно заряженный электрон, конечно, притягивается к положительно заряженному иону  $\text{H}_2^+$ . При этом образуется электрически нейтральная молекула водорода  $\text{H}_2$ . Наши рассуждения не позволяют, однако, понять, когда выделяется больше энергии: при образовании этой молекулы или при другом возможном процессе, при котором протон отрывается от иона  $\text{H}_2^+$  и присоединяется к электрону, образуя второй — независимый от первого — атом водорода.

Чтобы понять, какой из этих двух процессов приводит к большему выделению энергии, нужно проанализировать процесс сближения двух нейтральных атомов водорода и выяснить, притягиваются они или отталкиваются. Нетрудно понять, что при сближении нейтральных атомов должно наблюдаться слабо выраженное притяжение. В самом деле, центры тяжести положительных или отрицательных зарядов обоих атомов можно расположить так, чтобы притяжение разноименных зарядов оказалось больше отталкивания одноименных (такая ситуация, например, имеет место, если расположить эти центры тяжести по углам квадрата таким образом, чтобы одноименные заряды находились на одной диагонали). Поскольку такое расположение приводит к уменьшению энергии системы, она обязательно реализуется. Так возникают силы Ван-дер-Ваальса.

Приведенное объяснение оказывается, однако, недостаточным. Прежде всего, оно никак не выделяет двухатомные системы из более сложных, например трех- или четырехатомных, в то время как опыт показывает, что одинаковые атомы склонны образовывать именно двухатомные молекулы  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$  и т. д. Следует также иметь в виду, что вандерваальсово притяжение очень слабо, в то время как энергия образования двухатомных молекул отнюдь не мала. При образовании молекулы  $\text{H}_2$  выделяется 4,5 эВ, т. е. около 30% от энергии, освобождающейся при образовании атома водорода, и больше, чем при образовании молекулы поваренной соли.

Причина, которая приводит к столь сильной связи, заключается в том, что при объединении атомов в двухатомную молекулу возникает новое явление — обобществление атомных электронов, которые принадлежат теперь не отдельным атомам, а всей молекуле.

Попытаемся понять природу ковалентной связи с помощью качественных рассуждений, отложив количественное рассмотрение до следующего параграфа. Будем сближать два атома водорода, пока их электронные оболочки не начнут существенно перекрываться и каждый из электронов не окажется на приблизительно одинаковом расстоянии от обоих ядер. Энергия связи образовавшейся системы может быть найдена путем решения уравнения Шредингера для двух электронов, находящихся в поле двух протонов. Накопленный уже нами опыт позволяет предугадать результат, не решая и даже не выписывая этого уравнения. Так, сразу можно сказать, что возможные значения энергии долж-

ны квантоваться. Наибольший интерес представляет основное состояние двухатомной системы — состояние с наименьшей энергией. Каково бы ни было это состояние — если оно не вырождено, — в нем могут находиться два и только два электрона с противоположно направленными спинами, как раз столько, сколько их имеется у двух водородных атомов. В этом смысле система, содержащая два атома (и два «эквивалентных» электрона), является исключительной: принцип Паули не «выталкивает» ни одного из них в вышележащие состояния<sup>1</sup>. Ясно, кроме того, что основное состояние для двухатомной системы лежит ниже, чем в одиночных атомах: в двухатомной системе для движения электронов имеется больше места и энергия, связанная с принципом неопределенностей, уменьшается. Таким образом, объединение двух атомов водорода в двухатомную молекулу, безо всякого сомнения, энергетически выгодно. Но эта выгода возникает лишь в том случае, если спины электронов направлены в разные стороны. Что произойдет при одинаковой ориентации спинов, сказать не так просто, поскольку энергетический выигрыш, возникающий при расширении области движения, компенсируется проигрышем, связанным с тем, что в соответствии с принципом Паули один из электронов должен занимать не основной, а возбужденный уровень. Предугадать результат с помощью качественных рассуждений в этом случае не удастся. Опыт, а также строгая количественная теория показывают, что при одинаковых направлениях спина электронов молекула водорода не образуется.

Мы пришли, таким образом, к пониманию механизма ковалентной химической связи. Она имеет чисто квантовый характер и объединяет электроны попарно в системы с нулевым суммарным спином. Атомные электроны «обобществляются» и принадлежат не отдельным атомам, а молекуле в целом. Подобным же образом действует ковалентная связь между более сложными атомами, например атомами азота. В сложных атомах при образовании молекул обобществляются только слабо связанные с атомами внешние электроны, которые в химии называются валентными. Несколько электронных пар может образовывать такие бесспиновые системы. Например, у азота в химической связи участвуют все три  $2p$ -электрона, которые связываются попарно:



Сила связи при этом, конечно, увеличивается. Так, при образовании молекулы азота выделяется очень большая энергия — 9,8 эВ. Именно

<sup>1</sup>В молекуле  $\text{O}_2$  ковалентная связь возникает при отличном от нуля суммарном спине электронов. Вследствие этого молекулы  $\text{O}_2$  оказываются парамагнитными. Такая ситуация возможна, если участвующие в образовании химической связи электроны расположены на вырожденных уровнях.

поэтому молекулярный азот отличается хорошо известной химической инертностью. Сравнение энергий связи молекулы  $\text{NaCl}$  и молекул  $\text{H}_2$  и  $\text{N}_2$  показывает, что ковалентная связь оказывается не слабее ионной.

Ковалентные связи могут образовываться не только между одинаковыми, но и между разными атомами. В молекуле метана  $\text{CH}_4$  все четыре электрона  $L$ -слоя углерода попарно связываются с электронами четырех водородных атомов. Ковалентными силами связаны атомы сложных углеводородов и почти всех органических молекул.

На этом мы заканчиваем качественное рассмотрение химических связей, приводящих к образованию молекул. В заключение отметим, что ионная и ковалентная связи являются идеализированными предельными случаями и чаще всего действуют не порознь, а вместе. Валентные электроны, ответственные за химическую связь, при образовании молекул обобществляются (ковалентная связь), а плотность электронных облаков перераспределяется (ионная связь).

Квантовый характер уравнений, описывающих поведение электронов и атомов, приводит к появлению нового рода сил, которые получили название обменных. В системах, содержащих более одного электрона, вычисление электростатической энергии по правилам квантовой механики производится в соответствии с обычными формулами электростатики, но приводит к другому результату, чем «обычный» расчет. Это происходит потому, что при наличии нескольких электронов их волновые функции перед вычислением должны быть антисимметризованы (§ 31). Расчет с помощью «обычных» и с помощью антисимметризованных волновых функций приводит к разным результатам (только последний из них правилен). Изменение энергии, происходящее при переходе от «обычных» к антисимметризованным волновым функциям, носит название обменной энергии. Обменная энергия проявляется не только в химической связи. Она является причиной ферромагнетизма и антиферромагнетизма. В следующем параграфе для величины этой энергии будут получены явные выражения.

## § 52. Молекула водорода. Обменное взаимодействие

Рассмотрим два атома водорода. Пусть их ядра находятся в точках  $A$  и  $B$ . На рис. 103 изображены графики функции  $|\psi|^2$  электронов для случая, когда оба атома находятся в основных состояниях ( $1s$ ). Пока расстояние  $r_{AB}$  велико (рис. 103 а), так что волновые функции электронов почти не перекрываются, полная энергия системы равна сумме внутренних энергий атомов (т. е. удвоенной энергии основного состояния одного атома водорода). При сближении атомов (рис. 103 б) волновые функции электронов начинают перекрываться. Из опыта мы знаем, что существуют стабильные молекулы водорода. Следовательно, по

крайней мере при некоторых расстояниях между атомами энергия системы из двух атомов водорода меньше суммы энергий отдельных атомов. Наша задача — выяснить причину этого уменьшения.

Будем искать полную энергию системы, схематически изображенной на рис. 103.

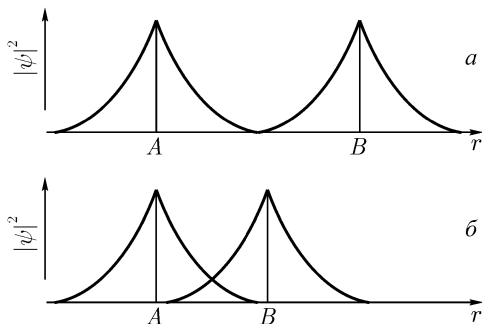


Рис. 103. Распределение электронов в системе, состоящей из двух атомов водорода: *a* — при большом расстоянии между ядрами; *б* — при уменьшении этого расстояния.

Чтобы решать задачу точно, следует найти решение уравнения Шредингера

$$\hat{E}\Psi = E\Psi. \quad (11.1)$$

Оператор энергии  $\hat{E}$  включает в себя кинетическую и потенциальную (электростатическую) энергию обоих электронов, а также потенциальную энергию ядер; их кинетической энергией можно пренебречь, поскольку ядра (протоны) во много раз тяжелее электронов:

$$\hat{E} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + U, \quad (11.2)$$

$$\hat{T}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right),$$

$$\hat{T}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right), \quad (11.3)$$

$$U = -\frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{2B}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{AB}},$$

где индекс 1 относится к первому электрону, индекс 2 — ко второму электрону, а индексы *A* и *B* — к первому и второму ядрам. Точное аналитическое решение уравнения (11.1) при таком значении оператора  $\hat{E}$  невозможно.

К вычислению энергии рассматриваемой системы можно подойти и другим путем. Согласно (2.17) среднее значение энергии (которое в нашем случае равно самой энергии) вычисляется по формуле

$$\langle E \rangle = \int \Psi^* \hat{E} \Psi dV. \quad (11.4)$$

Входящая в это уравнение функция  $\Psi$  зависит от координат обоих электронов и от расстояния между ядрами атомов. Строго говоря, это та самая функция  $\Psi$ , которая является решением (11.1), так что вычисление энергии требует предварительного решения уравнения Шредингера. Казалось бы, написав (11.4), мы не приблизились к решению задачи. И действительно, при желании решить задачу точно никаких упрощений от применения этой формулы не возникает.

Дело существенно меняется, если речь идет о приближенном вычислении энергии. В этом случае в уравнение (11.4) можно подставлять разумно выбранные приближенные значения  $\Psi$  функции<sup>1</sup>.

Рассмотрим электростатическую энергию  $U$ , определяемую (11.3). Первые два члена в этой формуле описывают энергию притяжения электронов к «своим» ядрам, а вторые два — энергию их притяжения к «чужим» ядрам. Из распределения волновой функции, изображенного на рис. 103, видно, что энергия связи электрона со «своим» ядром намного больше, чем с «чужим». Вторая пара членов, следовательно, мала по сравнению с первой. Пятый и шестой члены формулы не превосходят третьего и четвертого. Кроме того, следует иметь в виду, что вторая и третья пары членов имеют разные знаки и частично компенсируют друг друга. Таким образом, при сближении атомов главную роль продолжает играть взаимодействие электронов со «своими» ядрами и волновые функции изменяются не очень сильно. В выражении для потенциальной энергии все члены, начиная с третьего, играют роль поправки. Формулы (11.2) и (11.3) поэтому удобно переписать, отделив главные члены от поправочных:

$$\hat{E} = \hat{E}_1 + \hat{E}_2 + U_0, \quad (11.5)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{E}_1 &= \hat{T}_1 + U_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) - \frac{e^2}{r_{1A}}, \\ \hat{E}_2 &= \hat{T}_2 + U_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) - \frac{e^2}{r_{2B}}, \\ U_0 &= -\frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{AB}}. \end{aligned} \quad (11.6)$$

<sup>1</sup>Общая теория таких расчетов, так называемая теория возмущений, в этой книге не излагается.

Рассмотрим теперь волновую функцию  $\Psi$ , входящую в (11.4). Как уже было отмечено, взаимодействие атомов слабо сказывается на волновых функциях электронов. В § 31 мы выяснили, как следует записывать волновую функцию тождественных частиц. Там было показано, что волновая функция двух таких частиц представляет собой симметричную или антисимметричную комбинацию, составленную из волновых функций отдельных частиц, причем для электронов должна быть выбрана антисимметричная комбинация

$$\Psi = \alpha [\psi_A(1)\psi_B(2) - \psi_B(1)\psi_A(2)]. \quad (11.7)$$

Здесь  $\psi_A(1)$  — волновая функция, описывающая распределение первого электрона в атоме  $A$ ,  $\psi_B(2)$  — волновая функция второго электрона в атоме  $B$ , а волновые функции  $\psi_A(2)$  и  $\psi_B(1)$  описывают атомы с переставленными электронами. Буквой  $\alpha$  обозначена нормировочная константа. Ее мы вычислим позднее.

Волновые функции  $\psi_A(1)$  и т. д., входящие в (11.7), являются полными волновыми функциями и описывают как пространственное, так и спиновое состояние электронов. В дальнейших вычислениях нам потребуются только пространственные части волновых функций. Спины электронов могут быть параллельны или антипараллельны друг другу. При перестановке электронов нужно ставить первый электрон в то пространственное и спиновое состояние, которое до перестановки имел второй электрон, и наоборот. Рассмотрим вначале случай, когда спины электронов параллельны. Перестановка электронов при этом не меняет их спиновых состояний, поскольку эти состояния тождественны. Следовательно, спиновая часть волновой функции при перестановке электронов не меняется и в обеих слагаемых формулы (11.7) одинакова. Вынося ее за скобку и объединяя с нормировочным множителем, мы получим, что формула (11.7) в этом случае справедлива не только для полных, но и для пространственных составляющих волновой функции. Имеем поэтому

$$\Psi_I = \alpha_- [\varphi_A(1)\varphi_B(2) - \varphi_B(1)\varphi_A(2)]. \quad (11.8)$$

$\Psi_I$  — волновая функция системы при параллельных спинах электронов (суммарный спин двух электронов равен единице). В (11.8) пространственные части волновых функций, в отличие от полных, обозначены буквой  $\varphi$ .

Обратимся теперь к случаю, когда спины электронов антипараллельны. Естественно ожидать, что спиновые части волновых функций в этом случае при перестановке электронов изменяют знак. Более подробное исследование вопроса показывает, что это действительно так. Спиновая часть, входящая в слагаемые формулы (11.7), имеет поэтому для первого и второго членов разные знаки. Вынося ее за скобку и объединяя с нормировочным множителем, получим

$$\Psi_{II} = \alpha_+ [\varphi_A(1)\varphi_B(2) + \varphi_B(1)\varphi_A(2)]. \quad (11.9)$$

$\Psi_{II}$  — волновая функция системы, состоящей из двух атомов водорода при антипараллельных спинах электронов (их суммарный спин равен нулю). Подставим (11.5) и (11.8) или (11.9) (знак  $\pm$ ) в (11.4) и заметим, что интегрирование

следует производить по координатам обоих электронов. Получаем

$$E_{\pm} = \int (\alpha_{\pm})^2 [\varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2) \pm \varphi_B^*(1)\varphi_A^*(2)] (\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + U_0) \times \\ \times [\varphi_A(1)\varphi_B(2) \pm \varphi_B(1)\varphi_A(2)] dV_1 dV_2 = (\alpha_{\pm})^2 [I_1 + I_2 \pm I_3 \pm I_4], \quad (11.10)$$

где

$$I_1 = \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)(\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + U_0)\varphi_A(1)\varphi_B(2) dV_1 dV_2, \\ I_2 = \int \varphi_B^*(1)\varphi_A^*(2)(\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + U_0)\varphi_B(1)\varphi_A(2) dV_1 dV_2, \quad (11.11) \\ I_3 = \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)(\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + U_0)\varphi_B(1)\varphi_A(2) dV_1 dV_2, \\ I_4 = \int \varphi_B^*(1)\varphi_A^*(2)(\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + U_0)\varphi_A(1)\varphi_B(2) dV_1 dV_2.$$

Рассмотрим интеграл  $I_1$ . Функции  $\varphi_A(1)$  и  $\varphi_B(2)$  являются собственными функциями операторов  $\hat{E}_1$  и  $\hat{E}_2$ . Поэтому

$$\hat{E}_1\varphi_A(1) = E_1\varphi_A(1), \quad \hat{E}_2\varphi_B(2) = E_2\varphi_B(2).$$

Имеем, следовательно,

$$I_1 = \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)(\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + U_0)\varphi_A(1)\varphi_B(2) dV_1 dV_2 = \\ = (E_1 + E_2) \int \varphi_A^*(1)\varphi_A(1) dV_1 \int \varphi_B^*(2)\varphi_B(2) dV_2 + \\ + \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)U_0\varphi_A(1)\varphi_B(2) dV_1 dV_2.$$

Обозначим последний из интегралов в этой формуле буквой  $A$ :

$$A = \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)U_0\varphi_A(1)\varphi_B(2) dV_1 dV_2. \quad (11.12)$$

Заметим, что в силу нормировки исходных функций<sup>1</sup>  $\varphi_A(1)$  и  $\varphi_B(2)$

$$\int \varphi_A^*(1)\varphi_A(1) dV_1 = \int \varphi_B^*(2)\varphi_B(2) dV_2 = 1.$$

---

<sup>1</sup>Строго говоря, нормированы должны быть полные функции, являющиеся произведениями координатных и спиновых функций. Удобно, однако, отдельно нормировать на единицу спиновые и пространственные функции, что мы здесь и делаем. Другие способы нормировки приводят к тому же результату.

Поэтому

$$I_1 = E_1 + E_2 + A. \quad (11.13)$$

Обратимся к интегралу  $I_2$ . Переименовав у координат  $x, y, z$  индекс 1 на 2, а индекс 2 на 1 (как известно, переменную интегрирования можно обозначать как угодно), найдем, что

$$I_2 = I_1 = E_1 + E_2 + A. \quad (11.14)$$

Обратимся теперь к интегралу  $I_3$ :

$$\begin{aligned} I_3 &= \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)(\widehat{E}_1 + \widehat{E}_2 + U_0)\varphi_B(1)\varphi_A(2) dV_1 dV_2 = \\ &= (E_1 + E_2) \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)\varphi_B(1)\varphi_A(2) dV_1 dV_2 + \\ &\quad + \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)U_0\varphi_B(1)\varphi_A(2) dV_1 dV_2. \end{aligned}$$

Введем обозначения

$$\begin{aligned} \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)\varphi_B(1)\varphi_A(2) dV_1 dV_2 &= C, \\ \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)U_0\varphi_B(1)\varphi_A(2) dV_1 dV_2 &= D. \end{aligned} \quad (11.15)$$

Подставляя (11.15) в выражение для  $I_3$ , найдем

$$I_3 = (E_1 + E_2)C + D.$$

При вычислении  $I_4$  переменим индексы у координат аналогично тому, как это было сделано при вычислении  $I_2$ :

$$I_4 = (E_1 + E_2)C + D.$$

Вычислим, наконец, нормировочные константы  $\alpha_+$  и  $\alpha_-$  исходя из условия

$$\int \Psi^* \Psi dV_1 dV_2 = 1. \quad (11.16)$$

Вычисление дает

$$\begin{aligned} &(\alpha_{\pm})^2 \int [\varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2) \pm \varphi_B^*(1)\varphi_A^*(2)] [\varphi_A(1)\varphi_B(2) \pm \\ &\quad \pm \varphi_B(1)\varphi_A(2)] dV_1 dV_2 = (\alpha_{\pm})^2 \left[ \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)\varphi_A(1)\varphi_B(2) dV_1 dV_2 + \right. \\ &\quad + \int \varphi_B^*(1)\varphi_A^*(2)\varphi_B(1)\varphi_A(2) dV_1 dV_2 \pm \int \varphi_A^*(1)\varphi_B^*(2)\varphi_B(1)\varphi_A(2) dV_1 dV_2 \pm \\ &\quad \left. \pm \int \varphi_B^*(1)\varphi_A^*(2)\varphi_A(1)\varphi_B(2) dV_1 dV_2 \right] = (\alpha_{\pm})^2 [1 + 1 \pm C \pm C] = 2(\alpha_{\pm})^2 (1 \pm C) = 1, \end{aligned}$$



или

$$\alpha_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1+C}}, \quad \alpha_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1-C}}. \quad (11.17)$$

Величина нормировочных констант зависит от степени перекрытия волновых функций электронов (от интеграла  $C$ ).

Подставим значения интегралов  $I_1, I_2, I_3, I_4$  и нормировочных констант  $\alpha_+$  и  $\alpha_-$  в (11.10):

$$E = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{(1 \pm C)} [2(E_1 + E_2 + A) \pm 2(E_1 + E_2)C \pm 2D],$$

или

$$E = E_1 + E_2 + \Delta E, \quad (11.18)$$

где  $\Delta E = (A \pm D)/(1 \pm C)$  может быть представлено в виде суммы<sup>1</sup>

$$\Delta E = \Delta E_1 \mp \Delta E_2 = \frac{A - CD}{1 - C^2} \mp \frac{AC - D}{1 - C^2}. \quad (11.19)$$

Формула (11.18) является окончательной. Кроме тривиального слагаемого  $E_1 + E_2$ , представляющего собой сумму энергий отдельных атомов, она содержит член  $\Delta E$ , величина и знак которого зависит от взаимной ориентации спинов обоих электронов.

Поправка  $A$ , определяемая (11.12), имеет обычный смысл. Это энергия электростатического взаимодействия ядер и энергия взаимодействия «размазанных» электронных облаков друг с другом и с чужими атомными ядрами.

Обратимся теперь к интегралам  $C$  и  $D$ , определенным равенствами (11.15). Эти интегралы не обращаются в нуль только тогда, когда существуют области, в которых входящие в них подынтегральные функции одновременно отличны от нуля. В интегралы  $C$  и  $D$  входят  $\varphi_A(1)$  и  $\varphi_B(1)$ , а также  $\varphi_A(2)$  и  $\varphi_B(2)$ . Функция  $\varphi_A(1)$  отлична от нуля лишь в том случае, если первый электрон находится вблизи ядра  $A$ , а  $\varphi_B(1)$  — когда тот же электрон находится вблизи ядра  $B$ . Для удаленных друг от друга атомов хотя бы одна из этих двух функций всегда оканчивается малой, и интегралы  $C$  и  $D$  сколько-нибудь заметного вклада в энергию системы не вносят. Все то же самое относится и к паре функций  $\varphi_A(2)$  и  $\varphi_B(2)$ . Если же атомы находятся близко один к другому и волновые функции их перекрываются, то вклад  $C$  и  $D$  в энергию системы оказывается значительным. Часть энергии, зависящая от  $C$  и  $D$ , называется обменной энергией. Она возникла потому, что электроны неразличимы и должны описываться волновыми функциями типа (11.7). Существование обменной энергии вытекает из квантовой механики и не может быть объяснено на основе классической физики. Обменная энергия в с е г д а появляется у близко расположенных тождественных систем.

<sup>1</sup>Знаки выбраны так, чтобы  $\Delta E_1$  и  $\Delta E_2$  были положительными. Верхний знак соответствует симметричной пространственной волновой функции, т. е. антипараллельным спинам

Итак, мы выяснили, что при сближении двух атомов водорода в энергии системы возникает обменный член. Вычисление интегралов показывает, что для случая параллельных спинов  $\Delta E > 0$ , а для случая антипараллельных спинов  $\Delta E < 0$ . Поэтому два атома водорода отталкиваются, если спины электронов параллельны, и притягиваются, если спины антипараллельны. При совсем малых расстояниях между атомами они всегда отталкиваются из-за кулоновского взаимодействия ядер (протонов).

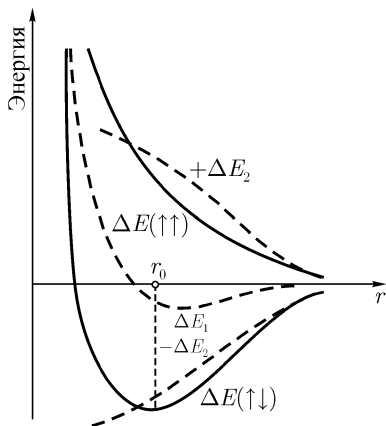


Рис. 104. Зависимость энергии связи и отдельных ее составляющих от межатомного расстояния в молекуле водорода.

На рис. 104 графически изображена зависимость  $\Delta E_1$ ,  $\Delta E_2$  и  $\Delta E$  (обозначения даны в (11.19)) от расстояния между атомами.  $\Delta E_1$  одинаково для атомов с параллельными и антипараллельными спинами. Член  $\Delta E_2$  в этих случаях входит в формулы с разными знаками.

Поэтому зависимость  $\Delta E$  от  $r$  оказывается существенно различной в зависимости от того, параллельны или антипараллельны спины электронов. При параллельных спинах, как это видно из рис. 104, энергия системы монотонно возрастает при сближении атомов, поэтому состояние такой системы не может быть связанным. При антипараллельных спинах система имеет связанное состояние, так как энергия взаимодействия в этом случае имеет минимум; наибольший вклад в энергию притяжения вносит  $\Delta E_2$ . Равновесное значение расстояния между атомами  $r_0$  может быть оценено теоретически. Вычисленное значение согласуется с экспериментальным значением, равным 0,14 нм.

Связанное состояние атомов водорода называется молекулой водорода. При образовании молекулы водорода, как и всегда при ковалентных связях, спины двух участвующих в связи электронов направлены в противоположные стороны, так как обменные силы приводят к притяжению лишь при антипараллельных спинах. (Этот вывод справедлив, если уровни вырождены только по спиновому квантовому числу.)

### § 53. Связь атомов в твердых телах (кристаллах)

Прежде чем приступить к рассмотрению типов связи атомов в твердых телах, подведем некоторые итоги.

Рассматривая структуру атомов, мы выяснили, что образование нейтральных атомов приводит к существенному уменьшению электроста-

тической энергии системы, состоящей из электронов и положительных частиц (протонов, атомных ядер). Так, при образовании атома водорода из электрона и протона освобождается энергия 13,6 эВ (энергия связи электрона в атоме водорода). В более сложных атомах энергия связи внешних (валентных) электронов составляет около 10 эВ, а энергия связи электронов, находящихся на внутренних оболочках, существенно выше (в наиболее тяжелых атомах она достигает 100–120 кэВ).

Дальнейшее понижение энергии происходит при образовании молекул из атомов; при образовании одной двухатомной молекулы выделяется энергия, по порядку величины равная нескольким электронвольтам.

По мере расширения Вселенной после «Большого взрыва» ее температура падала, и когда она достигла  $10^5$  К (этой температуре соответствует энергия  $kT \approx 9$  эВ) процесс образования нейтральных атомов водорода из протонов и электронов стал преобладать над обратным процессом — процессом ионизации. Образование атомов основного элемента Вселенной — водорода — произошло через 700 тысяч лет после Большого взрыва.

При температуре  $10^4$  К происходит дальнейшее понижение электростатической энергии, связанное с образованием молекул.

И, наконец, при температурах порядка тысячи градусов происходит конденсация веществ — образование жидких, а затем и твердых тел.

Рассмотрим причины, которые приводят к тому, что при объединении молекул в кристаллы возникает уменьшение энергии вещества. Мы уже говорили о вандерваальсовых силах притяжения нейтральных молекул. Под действием этих сил образуются так называемые молекулярные кристаллы, к числу которых относятся почти все кристаллы органических веществ. Вандерваальсовы силы являются единственной причиной, приводящей к образованию кристаллов у охлажденных инертных газов. Молекулярные кристаллы характеризуются слабой связью, небольшой теплотой плавления, низкой температурой плавления и возгонки.

К более сильной связи приводят уже знакомые нам гетерополярные (ионная связь) и гомеополярные силы (ковалентная связь).

Типичными представителями кристаллов с ионной связью являются кристаллы, содержащие атомы щелочных металлов и галогенов (NaCl, KI и т. д.). Электронные оболочки ионов в этих кристаллах, как и в соответствующих молекулах, аналогичны оболочкам инертных газов. Природа ионной связи в кристаллах и молекулах одинакова: и в том и в другом случаях связь осуществляется благодаря кулоновскому притяжению ионов.

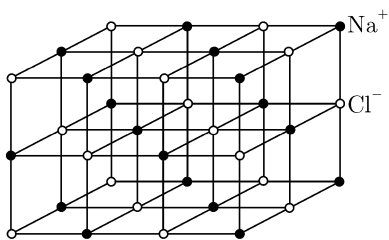


Рис. 105. Структура кристалла NaCl.

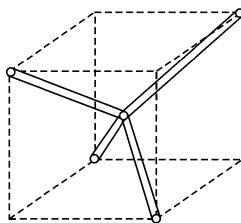


Рис. 106. Расположение атомов в решетке, имеющей структуру алмаза.

Структура кристалла NaCl изображена на рис. 105. Ионы натрия расположены в вершинах и центрах граней системы кубов. Ионы хлора также образуют гранецентрированную кубическую решетку. Таким образом, решетка NaCl представляет собой две вложенные одна в другую кубические гранецентрированные решетки. Каждый ион  $\text{Na}^+$  окружен шестью ближайшими соседями — ионами  $\text{Cl}^-$  — и сильно притягивается к ним. Двенадцать положительных ионов  $\text{Na}^+$  находятся несколько дальше от рассматриваемого иона; между ними осуществляется отталкивание. Каждый из этих двенадцати ионов  $\text{Na}^+$  в свою очередь притягивается ближайшими ионами  $\text{Cl}^-$ . Таким образом, весь кристалл представляет собой как бы единую гигантскую молекулу. Удаление ионов друг от друга определяется их радиусами. Энергия связи кристалла NaCl (в расчете на пару ионов) в 1,5 раза превышает энергию связи отдельной молекулы NaCl.<sup>1</sup>

В кристаллах с ковалентной связью, как и в молекулах, каждые два атома связаны парой электронов. Интересную группу ковалентных кристаллов образуют алмаз, кремний, германий и серое олово. Вес эти кристаллы имеют «структуру алмаза», изображенную на рис. 106. Структура алмаза характеризуется тем, что каждый атом в решетке связан с четырьмя ближайшими соседями. На каждую связь рассматриваемый атом «выделяет» один из четырех валентных электронов. Каждый из соседних атомов также «выделяет» по одному электрону на каждую связь. Таким образом, все валентные электроны участвуют в связи, и атомы оказываются связанными не менее прочно, чем в ионных кристаллах.

<sup>1</sup>Под энергией связи мы здесь имеем в виду работу, которую нужно затратить, чтобы разделить молекулу или кристалл на атомы. В последнем случае речь идет о работе, отнесенной к набору атомов, способных образовать одну молекулу (один атом Na и один атом Cl).

Кристаллы с ковалентной связью обладают высокой твердостью и малой электропроводностью при низких температурах.

Интересно отметить, что ковалентная связь, приводящая к объединению атомов водорода в молекулу (§ 52), не играет никакой роли в образовании кристаллов твердого водорода. Его кристаллы являются молекулярными.

В образовании кристаллов важную роль играет еще один, пока не рассмотренный вид связи — металлическая связь. Выясним особенности этой связи. Как известно, у атомов первых групп таблицы Менделеева (левая часть таблицы) на последней оболочке заполнено лишь небольшое количество мест. Волновые функции тех электронов, которые находятся на этой оболочке, гораздо сильнее «размазаны» в пространстве, чем волновые функции электронов предпоследней, полностью занятой оболочки. На рис. 107 изображены графики зависимости  $|\psi|^2 r^2$  для электронов лития в  $1s$ - и  $2s$ -состояниях. Видно, что  $2s$ -электроны в среднем находятся от ядра примерно в пять раз дальше, чем  $1s$ -электроны. При сильном сближении атомов (до «соприкосновения»  $1s$ -оболочек) среднее расстояние  $2s$ -электронов до «чужих» ядер оказывается меньшим, чем до «своего» ядра.

Приближение внешних электронов к положительно заряженному атомному ядру, «своему» или «чужому», вызывает уменьшение энергии системы. В § 12 указывалась причина, мешающая электронам упасть на «свое» ядро: при уменьшении области, в которой движутся электроны, быстро возрастает (из-за принципа неопределенности) кинетическая энергия движения, и уменьшение полной энергии прекращается. Сближение электронов с соседними ядрами так же понижает потенциальную энергию, как и сближение со «своим» ядром. Кинетическая энергия электронов при этом не увеличивается, так как область распространения электронов не сужается. Поэтому полная энергия системы при сближении атомов уменьшается. Уменьшение энергии системы при более плотной «упаковке» атомов означает появление сил притяжения между атомами. При таком сближении атомов потенциальные ямы поверху сливаются (рис. 108). Если в «области слияния» имеются занятые электронные уровни, то соответствующие электроны «обобществляются» и принадлежат всему кристаллу. Так возникает м е т а л л и ч е с к а я с в я з ь. Как

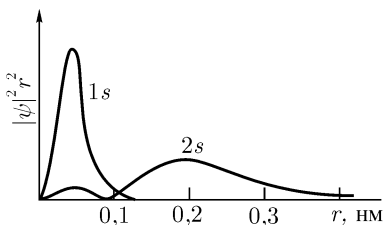


Рис. 107. Радиальное распределение плотности электронов в атоме лития.

мы видим, для появления такой связи нужно, чтобы в атоме присутствовали слабо связанные электроны. Свободно передвигающиеся в металлических кристаллах электроны ведут себя подобно газу и в физической литературе часто так и называются — электронным газом. (Движение электронов, конечно, носит квантовый характер.)

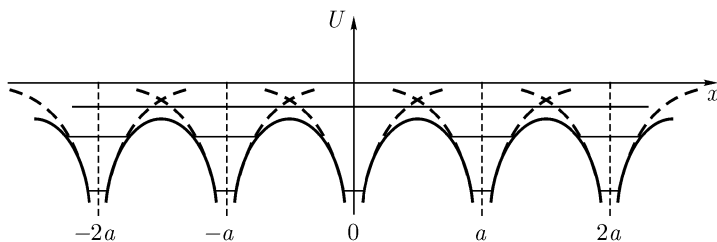


Рис. 108. Обобществление электронов в кристаллах.

Сближение атомов при образовании кристалла почти не сказывается на внутренних электронах, энергия которых недостаточна для перехода через «перевал» кривой потенциальной энергии.

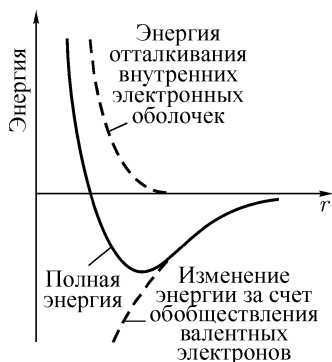


Рис. 109. Зависимость энергии связи от расстояния между атомами.

Выигрыш в энергии, получаемый при металлической связи, оказывается тем заметнее, чем большее число соседей имеет атом (напомним, что при ковалентной связи существенны расстояния только до тех соседей, с которыми образуется связь). Предел сближению атомов кладет обуславливающее выше отталкивание заполненных оболочек, связанное с принципом Паули. На рис. 109 сплошной кривой изображена зависимость энергии системы атомов металла от расстояния между ними. При уменьшении расстояния энергия сначала падает (обобществление внешних электронов), а затем быстро возрастает (отталкивание атомных остовов)<sup>1</sup>. Таким образом, кривая проходит через минимум. Положение этого минимума и определяет равновесное расстояние между атомами.

<sup>1</sup>Некоторый вклад в силы отталкивания вносит также «давление» электронного газа.

## § 54. Симметрия кристаллов

Подробное описание симметрии кристаллов не входит в план этой книги. Читатель может найти соответствующие сведения в курсах кристаллографии. В этой проблеме нас будут интересовать лишь самые существенные факты.

Начнем с кристаллов, обладающих наиболее высокой симметрией, — с кристаллов кубической системы. Атомы (или их группы) в таком кристалле расположены в вершинах куба (рис. 110). На рисунке показаны также основные элементы симметрии этого кристалла: три поворотные оси четвертого порядка, обозначенные цифрами 4, и четыре оси третьего порядка, обозначенные цифрами 3 (ось симметрии  $n$ -го порядка называется осью, обладающая тем свойством, что при повороте вокруг нее на  $360^\circ$  кристалл совмещается сам с собой  $n$  раз). Все эти оси пересекаются в центре симметрии кубического кристалла. Любая прямая, проходящая через центр симметрии, пересекает поверхность кристаллической ячейки на равных расстояниях от него. Через центр симметрии проходят также параллельные граням кристалла плоскости симметрии. Расположенные по обе стороны этих плоскостей части ячейки являются зеркальными отражениями друг друга.

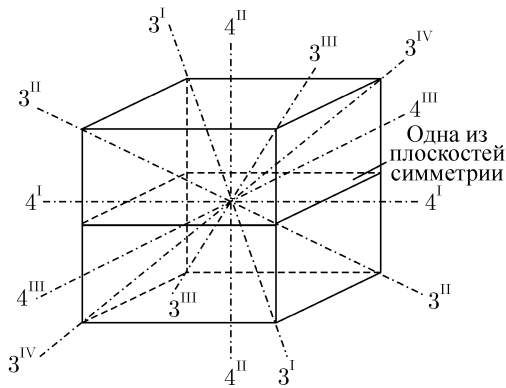


Рис. 110. Элементы симметрии кристаллов кубической системы.

Симметрия кристаллов часто проявляется не только в расположении атомов в кристаллической решетке, но и в огранке. Правильная форма кристаллов, имеющих иногда довольно большие размеры, гово-

рит о замечательном свойстве, отличающем кристаллическое состояние от всех других, — о наличии в его структуре дальнего порядка, т. е. о четкой корреляции в расположении атомов, удаленных друг от друга на миллионы или даже сотни миллионов межатомных расстояний. Наличие дальнего порядка в расположении атомов отличает кристаллы от других конденсированных сред — от жидкостей и аморфных тел, в которых имеется только ближний порядок: корреляция в расположении ближайших атомов.

Замечательным свойством кристаллических тел является наличие не только точечных групп симметрии (поворот, отражение и т. д.), но и трансляционной симметрии: кристалл переходит сам в себя при смещении на некоторый отрезок.

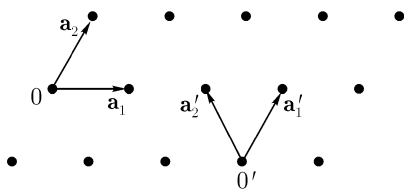


Рис. 111. Выбор базисных векторов.

Выбор базисных векторов неоднозначен. С помощью векторов  $\mathbf{a}'_1$  и  $\mathbf{a}'_2$ , изображенных в правой части рисунка, также можно попасть из любого начального узла в любой конечный. В реальном трехмерном кристалле имеются три базисных вектора. В простой кубической решетке эти векторы можно выбрать так, что они оказываются взаимно перпендикулярными и равными по длине. В других решетках расположение и соотношение длин базисных векторов оказывается более сложным.

На рис. 111 изображена не реальная, а схематическая структура кристалла. Каждая его ячейка может быть устроена как угодно сложно. Кружочки, расположенные на рисунке, могут изображать не только одиночные ионы, но и их группы. Рисунок поясняет, таким образом, не реальное устройство кристалла, а его трансляционные свойства, или, как принято говорить, соответствующую реальному кристаллу решетку Браве. Говоря о симметрии кристалла, мы всегда имеем в виду именно его решетку Браве, а не реальную структуру кристалла.

Через узлы кристаллической решетки (решетки Браве) можно проводить различные системы параллельных плоскостей (рис. 112). Кроме плоскостей, изображенных сплошными линиями, можно провести множество других систем параллельных плоскостей; одна из таких возможных систем представлена плоскостями, изображенными пунктиром.

Трансляционная симметрия кристалла поясняется рис. 111, на котором для упрощения чертежа изображена плоская модель кристаллической решетки. Из любого узла решетки, например из узла  $O$ , можно перейти в любой другой узел, смещаясь на целое число шагов (в ту или другую сторону) вдоль базисных векторов  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$ .



Каждая система плоскостей охватывает все узлы решетки. Чем плотнее расположены узлы решетки на плоскостях, тем больше расстояние между плоскостями. Наибольший интерес представляют кристаллические плоскости с большой плотностью узлов.

Расположение кристаллических плоскостей принято характеризовать индексами Миллера, состоящими из трех целых чисел. Чтобы получить индексы Миллера, нужно провести нормаль к исследуемым плоскостям и спроектировать ее на базисные векторы решетки. Полученные проекции следует умножить на некоторое число, подобранное так, чтобы все три проекции выразались наименьшими целыми числами. Более нагляден другой способ нахождения индексов Миллера, который мы поясним с помощью примера (рис. 113). Найдем расположение семейства плоскостей с индексами  $(2\ 3\ 2)$ . Преобразуем тройку индексов Миллера в обратную:  $1/2, 1/3, 1/2$ , и приведем ее к целым числам, умножив на общее наименьшее кратное знаменателей, в нашем случае на 6. При этом получим числа 3, 2, 3. Отложим эти числа на осях координат, как это показано на рисунке, и проведем через полученные точки плоскость. Эта плоскость и принадлежит к искомому семейству.

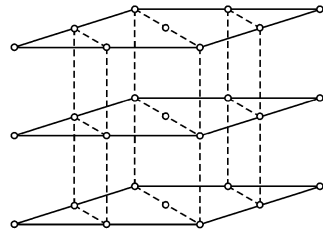


Рис. 112. Две системы параллельных плоскостей, проходящих через узлы кристаллической решетки.

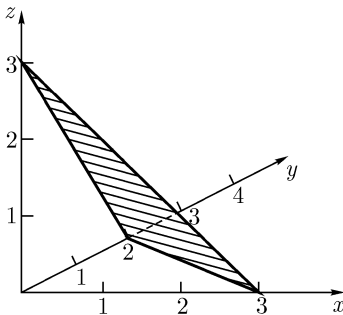


Рис. 113. Плоскость  $(2\ 3\ 2)$ .

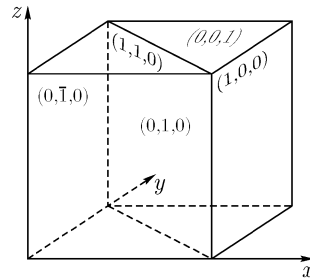


Рис. 114. Обозначения основных плоскостей в кристалле.

Нетрудно убедиться, что боковые плоскости ячейки кубической системы имеют индексы  $(0\ 0\ 1)$ ,  $(0\ 1\ 0)$  и  $(1\ 0\ 0)$ , диагональные плоскости имеют индексы  $(1\ 1\ 0)$ ,  $(1\ 0\ 1)$  и  $(0\ 1\ 1)$  и т. д. (рис. 114).

Мы уже выяснили в предыдущем параграфе, что наиболее выгодны с энергетической точки зрения плотные упаковки атомов (или ионов).

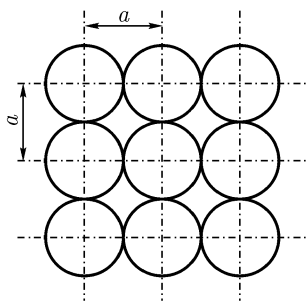


Рис. 115. К расчету объема, приходящегося на каждый ион в кристалле простой кубической системы.

Легко показать, что с этой точки зрения простая кубическая решетка явно неоптимальна. Рассчитаем для этого объем, приходящийся на каждый ион в кубической решетке, и сравним его с соответствующими объемами в других кристаллических структурах.

В кубическом кристалле каждой элементарной ячейке принадлежат восемь ионов, расположенных по ее углам. С другой стороны, каждый ион одновременно принадлежит восьми разным ячейкам. (В этом нетрудно убедиться, рассматривая, например, рис. 115. Каждый узел решетки принадлежит четырем ячейкам под плоскостью бумаги и четырем — над ней.) Поэтому в среднем на ячейку приходится один ион. Заменяя для простоты ионы твердыми шарами, заметим, что сторона ячейки  $a$  (расстояние между центрами шаров) равна диаметру шара  $d$ . Объем, приходящийся на каждый ион, равен, следовательно,  $d^3$ .

Рассмотрим теперь объемноцентрированную кубическую решетку, получающуюся из простой кубической решетки при установке дополнительного шара в центр куба. На каждую ячейку приходится теперь 2 шара — один угловой (как в обычной решетке) и один центральный. Выразим объем решетки через диаметр шаров. В объемноцентрированной решетке соприкасаются друг с другом шары, стоящие на главной диагонали куба. Длина диагонали равна  $a\sqrt{3}$ . Эта длина, с другой стороны, равна  $d/2 + d + d/2 = 2d$ . Приравняв эти значения, найдем  $a = 2d\sqrt{3}$ . Полный объем ячейки равен, следовательно,  $8d^3/3\sqrt{3}$ , а на каждый ион приходится объем  $4d^3/3\sqrt{3} \approx 0,77d^3$ . Мы видим, таким образом, что в объемноцентрированной решетке ионы упакованы существенно более плотно, чем в простой кубической.

Еще плотнее расположены атомы в гранецентрированной кубической решетке (в центре каждой грани кубического кристалла находится еще один ион). На каждый ион в такой решетке приходится объем  $d^3/\sqrt{2}$  (вывод этого соотношения мы предлагаем читателям в качестве полезного упражнения).

Кристаллы некубических систем в этой книге не рассматриваются.

## § 55. Колебания кристаллических решеток. Звуковые волны. Тепловое расширение

Изображенные на предыдущих рисунках, например на рис. 111, узлы кристаллической решетки определяют не фактические, а средние положения ионов (точнее говоря, атомных ядер). В реальных кристаллах ионы колеблются вокруг этих положений из-за теплового движения и под действием проходящих через кристалл звуковых волн. (Под звуковыми волнами в этой книге мы будем понимать упругие волны любой частоты, от самых низких до самых высоких, не воспринимаемых человеческим ухом.) Тепловые колебания атомов путем разложения в трехмерный ряд (или интеграл) Фурье могут быть сведены к системе плоских волн, т. е. к звуковым волнам, так что рассмотрение звуковых волн включает в себя проблему тепловых колебаний. Мы изучим колебания кристалла на одномерной модели: на линейной цепочке, состоящей из одинаковых атомов.

Заменяем действующие между атомами реальные силы условными «пружинками», обладающими коэффициентами упругости  $\kappa$  (рис. 116). Обозначим через  $x_n$  равновесное положение  $n$ -го атома, а через  $u_n$  — смещение атома от его положения равновесия ( $x_n$  и  $u_n$  откладываются по одной и той же оси, совпадающей с направлением цепочки).

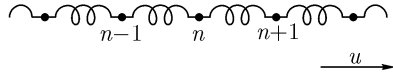


Рис. 116. Линейная модель кристалла.

Запишем второй закон Ньютона для  $n$ -го атома:

$$m\ddot{u}_n = F_n.$$

Сила  $F_n$ ,двигающая атом  $n$  вправо, складывается из силы растяжения правой и силы сжатия левой пружинок. Так как  $(n-1)$ -й и  $(n+1)$ -й атомы тоже смещены, то одна из этих сил равна  $\kappa(u_{n+1} - u_n)$ , а другая —  $\kappa(u_{n-1} - u_n)$ . В результате имеем

$$m\ddot{u}_n = \kappa(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \quad (11.20)$$

Уравнения (11.20) должны быть написаны для всех атомов, образующих цепочку, и составляют систему огромного числа связанных между собой (зацепляющихся) линейных дифференциальных уравнений. Решить такую систему прямыми методами невозможно.

Попробуем найти решение системы (11.20) в виде бегущей волны

$$u_k(x, t) = A_k \exp[i(kx - \omega t)], \quad (11.21)$$

где  $k$  — волновое число,  $\omega$  — частота волны, а  $A_k$  — некоторая константа. Мы снабдили решение одним индексом  $k$ , а не двумя  $(k, \omega)$ , потому что  $k$  и  $\omega$  не являются независимыми величинами. Вскоре мы получим связывающую их формулу.

В нашем случае бегущая волна описывает смещения дискретно расположенных узлов решетки<sup>1</sup> и имеет смысл только при  $x = n \cdot a$ , где  $a$  — базисный вектор линейной цепочки, а  $n$  — любое целое число. Уравнение бегущей волны следует поэтому записывать не в виде (11.21), а в виде

$$u_k(n, t) = A_k \exp[i(kan - \omega t)]. \quad (11.22)$$

Подстановка (11.22) в (11.20) дает

$$A_k m(-\omega^2) \exp(ikan - i\omega t) = \varkappa A_k \exp(-i\omega t) \{ \exp[ika(n+1)] - 2 \exp(ikan) + \exp[ika(n-1)] \}.$$

Сократим левую и правую части этого равенства на  $A_k \exp(ikan - i\omega t)$ :

$$-m\omega^2 = \varkappa [\exp(ika) - 2 + \exp(-ika)].$$

Заменив сумму экспонент через косинус и выразив затем косинус через синус половинного угла, получим

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\varkappa}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|. \quad (11.23)$$

При написании (11.23) мы приняли во внимание, что частота  $\omega$  по своему физическому смыслу является положительной величиной.

Проанализируем полученный результат. Вместо того чтобы решать бесконечную систему зацепляющихся дифференциальных уравнений (11.20), мы попытались угадать ответ и нашли, что решением системы являются волны (11.22) при любых  $k$  и  $A_k$  при условии, что волновое число и частота удовлетворяют соотношению (11.23). Полное решение системы (11.20) может быть представлено в виде интеграла от решений (11.22):

$$u(n, t) = \int A(k) \exp(inka - i\omega t) dk. \quad (11.24)$$

---

<sup>1</sup> Движение атомов, случайно попавших в пространство между узлами (дефекты), или движение дополнительных атомов, принадлежащих той же ячейке, не описывается ни системой (11.20), ни волной (11.21). Об этих движениях мы скажем несколько слов в конце этого параграфа.

Колебательное движение кристалла может быть представлено в виде системы бегущих волн, амплитуды которых произвольным образом зависят от волнового числа, а частота жестко связана с волновым числом. В трехмерном случае следует рассматривать не волновое число, а волновой вектор  $\mathbf{k}$  и интегрирование должно производиться в трехмерном пространстве, по осям которого отложены составляющие вектора  $\mathbf{k}$ .

Переход от рассмотрения колебаний атомов, составляющих кристалл, к системе звуковых волн приводит к фундаментальному упрощению задачи. Движение каждого атома приводит в движение соседние атомы. Попытка математически описать это движение, как мы видели, приводит к появлению системы из огромного, в пределе — бесконечного числа зацепляющихся уравнений. Движение звуковых волн неизмеримо проще. При небольших амплитудах, когда движение является гармоническим, распространение каждой волны не зависит от присутствия остальных. На математическом языке переход к звуковым волнам является переходом от координат отдельных атомов к нормальным координатам системы.

График зависимости  $\omega$  от  $k$  изображен на рис. 117. Частота оказывается периодической функцией волнового числа: при замене  $k$  на  $k + 2\pi/a$  она возвращается к прежнему значению. Постараемся понять, является ли совпадение частот у разных волн случайным результатом, зависящим от выбранной модели решетки, или имеет более глубокую причину.

Исследуем движение двух звуковых волн, одна из которых характеризуется волновым числом  $k_1 = k$ , а другая — волновым числом  $k_2 = k + 2\pi/a$ . При записи с помощью (11.21) эти волны описываются выражениями

$$u_{k_1} = A \exp(ikx - i\omega t),$$

$$u_{k_2} = A \exp\left(ikx + i\frac{2\pi}{a}x - i\omega t\right),$$

которые кажутся различными. Совпадение частот  $\omega$  при этом оказывается непонятным. Запишем теперь формулы волн в форме (11.22):

$$u_{k_1} = A \exp(ikan - i\omega t),$$

$$u_{k_2} = A \exp(ikan + i2\pi n - i\omega t) \equiv u_{k_1}.$$

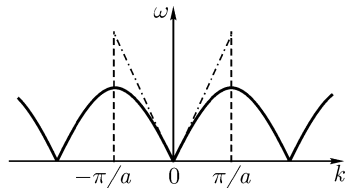


Рис. 117. Зависимость частоты от волнового числа в одномерной модели кристалла.

Мы видим теперь, что в узлах кристаллической решетки волны с волновыми числами, отличающимися на  $2\pi/a$ , неразличимы. Но наши уравнения только для узлов и пригодны. Волны  $k_1$  и  $k_2$ , таким образом, попросту тождественны. Все их характеристики, включая частоту, полностью совпадают.

Из сказанного ясно, что область физически различных значений волнового числа имеет ширину  $2\pi/a$ . Все остальные значения могут быть приведены к значениям, лежащим в указанной области. Эту область принято выбирать так, чтобы точка  $k = 0$  лежала в ее центре. Она носит название *первой зоны Бриллюэна*.

Главный физический вывод, который должен быть сделан из сказанного, заключается в том, что *периодичность по волновому числу (и по волновому вектору) является следствием пространственной периодичности кристаллической решетки*.

Обратимся к скорости звуковых волн. При небольших волновых числах (и соответственно низких частотах) синус в (11.23) может быть заменен своим аргументом, так что

$$\frac{\omega}{k} = a\sqrt{\frac{\chi}{m}}.$$

Это равенство определяет фазовую скорость волны  $v_\phi$ :

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = a\sqrt{\frac{\chi}{m}} \quad (\text{низкие частоты}).$$

Мы видим, что при низких частотах скорость звуковых волн не зависит от частоты, т. е. не обладает дисперсией. Групповая скорость звуковой волны при этом равна фазовой. Эта общая скорость называется скоростью звука  $s$ :

$$s = v_{\text{гр}} = v_\phi = a\sqrt{\frac{\chi}{m}} \quad (\text{низкие частоты}). \quad (11.25)$$

Направление скорости определяется знаком волнового числа.

При увеличении частоты (и волнового числа) замена синуса его аргументом становится неправомерной. Фазовая скорость волны

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = a\sqrt{\frac{\chi}{m}} \frac{\sin(ka/2)}{ka/2} \quad (11.26)$$

несколько падает с частотой и на границе зоны Бриллюэна уменьшается до значения

$$v_{\phi \min} = \frac{2a}{\pi} \sqrt{\frac{\kappa}{m}},$$

которое в полтора раза меньше максимального. Таким образом, при увеличении частоты звуковых волн становится заметна их дисперсия.

Групповая скорость волн определяется обычной формулой

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk}. \quad (11.27)$$

Используя соотношение (11.23), получаем

$$v_{\text{гр}} = a \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left| \cos \frac{ka}{2} \right|.$$

У границы зоны Бриллюэна эта скорость обращается в нуль (рис. 118).

Конкретная форма равенства (11.23) и следующих из нее формул для фазовой и групповой скорости волн не имеет серьезного научного значения, так как они определяются особенностями выбранной модели (линейная цепочка шариков, связанных пружинками). В то же время выводы о периодичности волнового числа, о наличии дисперсии у звуковых волн и т. д. имеют общую применимость.

В заключение приведем формулы для реальных трехмерных кристаллов. Бегущие звуковые волны в пространственном случае характеризуются волновым вектором  $\mathbf{k}$ . Формула бегущей волны аналогична (11.21):

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = A_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t).$$

Выражение, аналогичное (11.22), имеет вид

$$u_{\mathbf{k}}(l, m, n, t) = A_{k_x, k_y, k_z} \exp(ik_x la + ik_y ma + ik_z na - i\omega t). \quad (11.28)$$

Последняя формула описывает смещение узлов решетки в зависимости от времени  $t$  и координат  $(l, m, n)$  в кубическом кристалле при прохождении волны, у которой волновой вектор  $\mathbf{k}$  имеет проекции  $k_x, k_y, k_z$  на базисные векторы решетки.

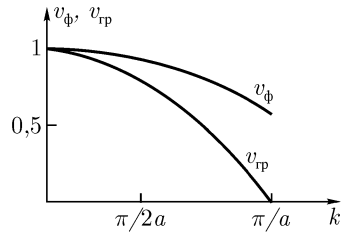


Рис. 118. Изменение фазовой и групповой скорости звуковой волны с волновым числом.

Пространственные звуковые волны периодичны по волновому вектору. Их всегда можно привести в первую зону Бриллюэна, которая в этом случае, конечно, является трехмерной.

При длинных волнах ( $ka \ll 1$ ) в твердых телах могут распространяться звуковые волны двух типов — продольные и поперечные. В поперечных волнах смещение атомов перпендикулярно к волновому вектору, а в продольных — совпадает с ним по направлению. Скорости поперечных волн  $s_{\perp}$  меньше, чем скорости продольных  $s_{\parallel}$ . Так, в алюминии  $s_{\perp} = 3130$  м/с, а  $s_{\parallel} = 6400$  м/с.

Скажем несколько слов о веществе, расположенном между узлами кристаллической решетки (электронные оболочки атомов, свободные электроны). При движении звуковой волны это вещество, конечно, испытывает смещения. Его смещения, однако, не описываются волной (11.21) и требуют специального рассмотрения. Электронные оболочки (или, по крайней мере, внутренние оболочки атомов) обладают малой массой и сильно связаны со своими ядрами. Они смещаются вместе с ними. Свободные электроны с ядрами связаны очень слабо и движутся по совсем другим законам. Все изложенное выше относилось к узлам кристаллической решетки и только к ним.

Важные новые черты в описанной картине появляются в тех случаях, когда в элементарной ячейке кристалла находится несколько ядер. Среди возможных типов колебаний решетки можно выделить колебания этих ядер друг относительно друга. Такие движения образуют новые типы колебаний, носящие название *оптических ветвей* (в отличие от звуковых, *акустических ветвей*, о которых шла речь до сих пор). Законы дисперсии для оптических ветвей резко отличны от рассмотренных; в частности, при  $k \rightarrow 0$  их частота не стремится к нулю. На рис. 119 приведен пример такого закона для ячейки, содержащей два атома.

Сделаем еще одно замечание. Во всем предыдущем рассмотрении мы либо ограничивались одномерным случаем, либо считали среду изотропной. Кристаллические среды, вообще говоря, анизотропны, а базисные векторы решеток не ортогональны и не равны друг другу. Мы не будем рассматривать анизотропные кристаллы из-за сильного усложнения математического аппарата. Мы не делаем этого также потому, что наиболее интересные результаты в физике твердого тела связаны не столько с анизотропией кристаллов, сколько с их периодичностью, а также с тем обстоятельством, что кристаллы представляют собой сильно вырожденные системы, для которых нужны квантовые, а не классические методы рассмотрения (см. следующий параграф).

В заключение рассмотрим природу теплового расширения. Покажем, как оно связано с ангармоничностью колебаний. Мы не будем



рассматривать тепловое расширение кристалла, потому что эта задача слишком сложна, а покажем, как возникает тепловое расширение на примере двухатомной молекулы, связанной силами, имеющими ангармоническую составляющую.

В отсутствие колебаний расстояние между центрами атомов определяется размерами их электронных оболочек и равно

$$a \sim 10^{-8} \text{ см.}$$

Обозначим удаление от положения равновесия буквой  $x$ . При наличии квадратичной ангармонической составляющей сила, действующая между атомами, может быть записана в виде

$$F = -\kappa x + \kappa_1 x^2.$$

О величине коэффициентов  $\kappa$  и  $\kappa_1$  мы поговорим позднее. Уравнения Ньютона для нашей молекулы имеют вид

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + \kappa x - \kappa_1 x^2 = 0.$$

Тепловым расширением называется изменение среднего значения расстояния между атомами (удлинения) с температурой. Возьмем поэтому среднее от написанного уравнения. Будем обозначать средние значения фигурными скобками

$$m \left\{ \frac{d^2 x}{dt^2} \right\} + \kappa \{x\} - \kappa_1 \{x^2\} = 0.$$

Найдем среднее значение  $d^2 x / dt^2$ . По определению среднего значения

$$\left\{ \frac{d^2 x}{dt^2} \right\} = \frac{1}{T} \int_0^T \frac{d^2 x}{dt^2} dt = \frac{1}{T} \left[ \frac{dx}{dt}(T) - \frac{dx}{dt}(0) \right] = 0,$$

где  $T$  — период колебаний. Это выражение равно нулю из-за периодического характера движения. Наше уравнение принимает теперь вид

$$\kappa \{x\} - \kappa_1 \{x^2\} = 0,$$

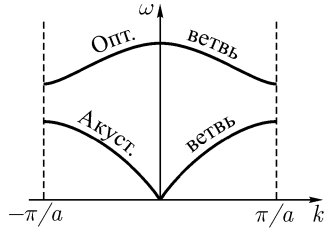


Рис. 119. Акустическая и оптическая ветви колебаний.

откуда

$$\{x\} = \frac{\varkappa_1}{\varkappa} \{x^2\}.$$

Мы получили важнейший результат. Среднее значение увеличения расстояния между атомами (удлинения молекулы) пропорционально коэффициенту ангармоничности  $\varkappa_1$  и зависит от среднего размаха колебаний  $x^2$ , а последний, как мы знаем, определяется температурой. Осталось довести вычисления до конца. При расчете будем считать, что колебания носят, в основной, гармонический характер, а ангармоничность играет роль поправки. Среднее значение потенциальной энергии при гармонических колебаниях равно

$$\{U_{\text{гарм.}}\} = \frac{1}{2} \varkappa \{x^2\} = \frac{1}{2} kT.$$

В правой части этого равенства стоит обычное больцмановское выражение для энергии колебаний. Заменяя в формуле для  $\{x\}$  величину  $\{x^2\}$  значением, полученным из этой формулы, найдем

$$\{x\} = \frac{\varkappa_1}{\varkappa^2} kT.$$

Коэффициентом линейного расширения называется отнесенное к единице объема (в нашем случае — длины) увеличение размера, отнесенное к изменению температуры на 1 градус

$$\alpha = \frac{\varkappa_1}{a\varkappa^2} k.$$

Мы получили еще один важный результат: коэффициент температурного расширения не зависит от температуры. Для твердых тел это не совсем так. В области комнатных температур этот коэффициент, действительно, мало зависит от температуры, а в области низких температур зависит очень сильно, но в этой области наши вычисления, основанные на классической физике, мало пригодны.

Численные оценки содержат много произвола, поскольку структура нашей модели далека от реальной структуры кристалла. Посмотрим все-таки, чего следует ожидать. Положим для оценки, что ангармонический член в формуле для силы составляет 20% от гармонического. Это дает

$$\varkappa_1 a = (1/5)\varkappa,$$

так что

$$\alpha = (1/5)(1/a^2\varkappa)k.$$

Труднее всего оценить величину  $\varkappa$ . Примем для оценки, что гармоническая часть потенциальной энергии колебаний, при  $x = a$  равная  $(1/2)\varkappa a^2$ , по порядку величины равна энергии связи молекулы  $\sim 10$  эВ. Постоянная Больцмана  $k$  равна  $8,6 \cdot 10^{-5}$  эВ/К,

$$\alpha = (1/5)(1/20 \text{ эВ})8,6 \cdot 10^{-5} \text{ эВ/К} \sim 10^{-6} \text{ 1/К.}$$

Коэффициенты линейного расширения кристаллов по порядку величины равны обычно  $\sim 10^{-5}$  1/К. Если учесть грубость сделанных предположений, совпадение следует признать не таким уж плохим.

## § 56. Фононы

Энергия звуковых волн, как и энергия всяких колебаний, квантуется в соответствии с формулой

$$E = \hbar\omega(n + 1/2). \quad (11.29)$$

Нулевая энергия колебаний  $E_0 = \hbar\omega/2$  нас сейчас интересоваться не будет. Избыток энергии

$$E - E_0 = \hbar\omega n \quad (11.30)$$

следует представлять себе в виде совокупности  $n$  квантов, каждый из которых несет энергию  $\hbar\omega$ . По аналогии с квантами светового излучения кванты акустических колебаний получили название **фононов**<sup>1</sup>. Звуковые волны — с точностью до нормировки — являются волновыми функциями фононов<sup>2</sup>. Энергия и импульс фононов связаны с частотой и волновым вектором звуковой волны обычными соотношениями

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \quad (11.31)$$

Система звуковых волн, проходящих через кристалл, при квантовом подходе эквивалентна фононному газу, заполняющему кристалл. Система независимых гармонических волн соответствует идеальному газу не взаимодействующих друг с другом фононов. Тепловые свойства кристалла рассчитываются путем изучения термических свойств этого идеального газа. Такая картина, конечно, неизмеримо проще исходной картины,

<sup>1</sup>Термин «фонон» был предложен Я. И. Френкелем.

<sup>2</sup>Ситуация с фононами и звуковыми волнами полностью аналогична ситуации, которая имеется в случае фотонов и световых волн. Звуковая волна содержит в себе сведения об интенсивности звука (нормируется на полное число фононов), в то время как волновая функция нормируется на один фонон.

в которой огромное количество атомов совершает тепловые колебания, и может быть несравненно лучше рассчитана. При больших амплитудах звуковые колебания приобретают ангармонический характер. Звуковые волны перестают быть независимыми друг от друга. На квантовом языке при этом говорят о столкновении фононов — при увеличении плотности фононный газ перестает быть идеальным.

Рассмотрим основные особенности фононов. Как мы уже знаем, частота звуковой волны является периодической функцией ее волнового вектора. Это означает, что энергия фонона является периодической функцией его импульса. Чтобы подчеркнуть это обстоятельство, часто говорят, что фонон обладает не импульсом, а квазиимпульсом. Надлежащим образом выбранная область физически различных значений импульса носит название первой зоны Бриллюэна. В одномерном случае ее положения определяются условием

$$|p| \leq \pi \hbar / a. \quad (11.32)$$

Как мы уже выяснили в предыдущем параграфе, периодические свойства волнового числа (и волнового вектора) объясняются тем, что соответствующие волны в узлах кристаллической решетки неразличимы. Это означает, что к импульсу фонона можно добавить величину

$$\Delta p = 2\pi \hbar n / a, \quad (11.33)$$

где  $n$  — любое целое число.

Из сказанного ясно, что в процессах, в которых участвует кристаллическая решетка, закон сохранения импульса верен с точностью до слагаемого

$$\Delta p = 2\pi \hbar n / a.$$

Более точно следует писать

$$\Delta \mathbf{p} = 2\pi \hbar \mathbf{b}, \quad (11.34)$$

где  $\mathbf{b}$  — вектор обратной решетки. В простейшем случае прямоугольной решетки его значение определяется путем очевидного обобщения множителя  $n/a$ . В более сложных случаях базисные векторы обратной решетки определяются формулами

$$\mathbf{b}_1 = \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]}{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)}$$

(в числителе этих формул стоят векторные, а в знаменателе — смешанное произведение). Вектор обратной решетки равен

$$\mathbf{b} = k\mathbf{b}_1 + l\mathbf{b}_2 + m\mathbf{b}_3,$$

где  $k, l, m$  — любые целые числа.

Процессы, происходящие с добавлением  $\Delta p$ , называются процессами переброса. Величину  $\Delta p$  следует выбирать так, чтобы все фононы лежали в области первой зоны Бриллюэна. (При небольших импульсах это происходит само собой.)

Обратим внимание на еще одно важное обстоятельство. При изучении фононов мы сталкиваемся с динамикой частиц, не обладающих определенной массой. У обычных медленно движущихся частиц энергия связана с импульсом квадратичным законом

$$p^2 = 2mE. \quad (11.35)$$

Массой частицы называется деленный на два коэффициент связи между квадратом импульса и ее энергией.

У релятивистских частиц энергия и импульс не связаны параболическим законом. Ясный физический смысл имеет в этом случае только масса покоя частицы.

У частиц, движущихся с постоянной скоростью (фотоны, акустические фононы и, по-видимому, нейтрино), энергия пропорциональна импульсу и масса покоя равна нулю<sup>1</sup>. У фононов закон связи между энергией и импульсом может иметь самый разный вид. Формула (11.23), которую можно переписать через энергию и импульс:

$$E = 2\hbar\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin\left(\frac{pa}{2\hbar}\right), \quad (11.36)$$

является одним из примеров таких законов. Мы увидим далее, что связь между энергией и импульсом у электронов, проходящих через кристалл, также имеет необычную, непараболическую форму. Понятие массы становится в этом случае бесполезным. Динамика частиц, движущихся в кристалле, должна непосредственно извлекаться из закона дисперсии этих частиц, т.е. из уравнения, связывающего их энергию и импульс. Мы отложим исследование этого вопроса до следующей главы.

Остается выяснить, чему равен спин фонона. Как мы знаем, спин частицы определяет число ее возможных внутренних состояний, т.е. состояний, не зависящих от импульса. Мы установили в свое время, что спин фотона равен единице, а из трех, вообще говоря, возможных при таком спине состояний осуществляются только два — они соответствуют двум возможным поляризациям электромагнитной волны.

<sup>1</sup>Из уравнения Эйнштейна

$$E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2$$

следует, что линейная связь между энергией и импульсом возникает только при  $m_0 = 0$ .

В твердых телах звуковая волна может иметь три поляризации: звуковые волны могут быть продольными и поперечными, причем имеются две независимые поперечные поляризации. Таким образом, *спин фонона равен единице. Фонон принадлежит к числу бозонов и описывается статистикой Бозе – Эйнштейна* (гл. 8).

## § 57. Теплоемкость кристаллических решеток

Тепловые колебания кристаллических решеток сводятся к звуковым волнам и, следовательно, к движению фононов. Задача о теплоемкости решетки сводится поэтому к расчету суммарной энергии фононов, подобно тому как энергия и теплоемкость теплового излучения рассчитываются через энергию фотонов. Как мы уже знаем, спин фононов равен единице, а их число не сохраняется. Они подчиняются, следовательно, статистике Бозе – Эйнштейна с переменным числом частиц, т. е. описываются той же формулой (8.16), что и фотоны теплового излучения.

Имеются, однако, и отличия. Световые волны поперечны и обладают двумя возможными значениями поляризации, в то время как у акустических волн их три. Скорости распространения световых волн от поляризации не зависят, а звуковых — зависят: поперечные акустические волны распространяются медленнее продольных. Наконец, вместо «настоящего» импульса фотонов мы должны научиться работать с квазиимпульсом фононов.

Как мы уже знаем, в единице объема в интервале импульсов от  $|p|$  до  $|p| + |dp|$  помещается

$$3 \cdot \frac{4\pi|p|^2 d|p|}{(2\pi\hbar)^3} \quad (11.37)$$

состояний. Стоящее в этой формуле число 3 равно числу возможных поляризаций (числу проекций спина, равного единице). Согласно (8.16), каждое из этих состояний заполняют

$$\frac{1}{\exp(E/kT) - 1} \quad (11.38)$$

фононов с энергией (на один фонон)  $E$ .

Полная энергия звуковых колебаний решетки равна, следовательно,

$$E = E_0 + \int_0^{p|\max} \frac{E}{\exp(E/kT) - 1} 3 \cdot 4\pi \frac{|p|^2 d|p|}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (11.39)$$

Член  $E_0$  характеризует энергию нулевых колебаний, которая в данном случае не представляет интереса, так как не вносит вклада в теплоемкость.

Рассчитывая энергию теплового излучения, мы получали очень похожую формулу. Отличие состояло в том, что в ней стоял множитель 2 вместо 3, а интегрирование производилось не до  $|p|_{\max}$ , а до бесконечности, поскольку импульс фотонов может быть сколь угодно большим<sup>1</sup>.

Наиболее просто производится расчет при низких температурах. В этом случае возрастание стоящего в знаменателе экспоненциального множителя  $\exp(E/kT)$  делает несущественным вклад, который вносит в интеграл область больших  $|p|$ , так что интеграл можно распространить до бесконечности. Связь  $\omega$  и  $|p|$  у звуковых волн не так проста, как у световых, но при малых  $|p|$ , как мы видели, скорость звука постоянна, что существенно упрощает расчеты. Пренебрежем, наконец, различием скоростей продольных и поперечных волн. Обозначая скорость звука через  $s$ , найдем

$$s = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{|p|}. \quad (11.40)$$

Формула (11.39) в этом случае дает

$$E - E_0 \approx \frac{3}{2\pi^2 \hbar^3 s^3} \int_0^{\infty} \frac{E}{\exp(E/kT) - 1} E^2 dE. \quad (11.41)$$

Вводя вместо  $E$  безразмерную переменную  $x$ :

$$E/kT = x,$$

найдем

$$E - E_0 = \frac{3k^4 T^4}{2\pi^2 \hbar^3 s^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Как мы уже знаем, входящий в эту формулу интеграл равен  $\pi^4/15$ . Следовательно,

$$E - E_0 = \frac{\pi^2}{10} \frac{k^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \quad (\text{низкие } T). \quad (11.42)$$

<sup>1</sup> $p_{\max}$  определяется из условия, что  $4/3\pi p_{\max}^3$  равно объему зоны Бриллюэна.

Соответственно теплоемкость кристалла, точнее его решеточная теплоемкость<sup>2</sup>, равна

$$c = \frac{2}{5} \pi^2 \frac{k^4 T^3}{\hbar^3 s^3} \quad (\text{низкие } T). \quad (11.43)$$

Последние две формулы очень похожи на формулы для теплового излучения и получаются из них путем замены скорости света  $c$  на скорость звука  $s$  и умножения на  $3/2$  (отношение числа возможных поляризаций). Как следует из вывода, они определяют тепловую энергию и теплоемкость кристаллической решетки, отнесенные к единице объема.

Если учесть различие скоростей поперечной  $s_{\perp}$  и продольной  $s_{\parallel}$  звуковой волны, формула (11.43) переходит в несколько более точную:

$$c = \frac{2}{15} \pi^2 \frac{k^4 T^3}{\hbar^3} \left( \frac{2}{s_{\perp}^3} + \frac{1}{s_{\parallel}^3} \right) \quad (\text{низкие } T). \quad (11.44)$$

Перейдем теперь к теплоемкости при высоких температурах. Естественно ожидать, что при повышении температуры должны становиться справедливыми классические формулы и на каждую колебательную степень свободы должна приходиться энергия  $kT$  (по  $kT/2$  на кинетическую и на потенциальную энергии). Число степеней свободы решетки равно  $3N$ , где  $N$  — число атомов в единице объема. Отнесенные к единице объема внутренняя энергия и теплоемкость твердого тела должны поэтому стремиться к значениям

$$\begin{aligned} E &\rightarrow 3NkT \quad (\text{высокие } T), \\ c &\rightarrow 3Nk \quad (\text{высокие } T). \end{aligned} \quad (11.45)$$

Эти классические формулы носят название закона Дюлонга и Пти. Опыт показывает, что они выполняются не слишком хорошо, хотя при оценках ими вполне можно пользоваться. Основная причина неточного соответствия с экспериментом заключается в том, что температуры, при которых сохраняется кристаллическое состояние, «недостаточно высоки», так что многие кристаллы плавятся до того, как наступает область хорошей применимости классических формул. Рассчитанные по формуле (11.45) и измеренные значения теплоемкости приведены в таблице.

<sup>2</sup>Оптические ветви колебаний, в особенности при низких температурах, почти ничего не вносят в теплоемкость кристалла. У металлов вклад в теплоемкость создают свободные электроны. Этот вклад мы рассмотрим в гл. 12.



Таблица 6. Теплоемкость некоторых элементов

Элемент	Расчетное значение теплоемкости, Дж/(г·К)	Результаты измерений	
		температура	теплоемкость Дж/(г·К)
Углерод	2,07	10°C	0,67
		280°C	0,97
		827°C	1,83
Алюминий	0,92	0°C	0,87
		600°C	1,18
Железо	0,44	0°C	0,43
		100°C	0,47
Медь	0.39	0°C	0,38
		100°C	0,40

Справедливая при всех температурах формула для теплоемкости должна основываться на (11.39). При этом следует правильно выбирать  $|p|_{\max}$  и, более того, правильно учитывать анизотропию кристалла, что приводит к изменению структуры подинтегрального выражения (оно записано для изотропной среды) и к появлению своего верхнего предела для каждого направления вектора  $\mathbf{p}$ . Такое рассмотрение должно проводиться заново для каждого кристалла. Точное вычисление теплоемкости представляет собой поэтому крайне неблагоприятную задачу.

Существенное упрощение проблемы было найдено Дебаем. Он предложил не учитывать анизотропию и не рассчитывать  $|p|_{\max}$ , а выбирать верхний предел интегрирования в (11.39) таким образом, чтобы получать правильное значение теплоемкости (11.45) при высоких температурах. Получаемая при этом формула нестрога, но приводит к правильному результату как при низких, так и при высоких температурах. Она позволяет получать вполне приемлемые количественные оценки и в промежуточной области температур, где формулу Дебая можно рассматривать как интерполяционную.

Вычисление интеграла (11.39) можно произвести только после установления закона связи между  $|p|$  и  $E$ . Для этого мы снова воспользуемся (11.40), которая при невысоких температурах хорошо выполняется. Погрешности, возникающие при высоких температурах, мы учтем автоматически, когда потребуем, чтобы полученная формула при повышении температуры переходила в (11.45).

Действуя указанным образом, мы снова придем к (11.41), но верхний предел интегрирования должен быть теперь разумно выбран. Решение этой задачи потребует некоторых усилий. Переходя в (11.41) от энергии

к частоте, получим

$$E - E_0 = \frac{3}{2\pi^2 s^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \omega^2 d\omega. \quad (1.46)$$

Здесь  $\hbar\omega$  определяет энергию фонона, а множитель  $[\exp(\hbar\omega/kT) - 1]^{-1}$  — число фононов в одном состоянии. Остальные члены этой формулы определяют, следовательно, число состояний. Это число равно

$$N_{\text{сост}} = \frac{3}{2\pi^2 s^3} \int_0^{\omega_{\max}} \omega^2 d\omega = \frac{\omega_{\max}^3}{2\pi^2 s^3}.$$

Полученное число нужно приравнять числу степеней свободы  $3N$ . Поэтому

$$\omega_{\max} = s(6\pi^2 N)^{1/3}, \quad (1.47)$$

где  $N$  — число атомов в единице объема.

Выразив  $s$  через  $\omega_{\max}$  и, введя его в (1.46), получим

$$E = \frac{9N}{\omega_{\max}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \omega^2 d\omega. \quad (1.48)$$

Входящий в эту формулу интеграл в элементарных функциях не выражается. Чтобы его упростить, введем уже знакомую нам безразмерную переменную  $x$ :

$$x = \frac{\hbar\omega}{kT}. \quad (1.49)$$

Заменяя  $\omega$  на  $x$ , получим

$$E = 9N \frac{(kT)^4}{(\hbar\omega_{\max})^3} \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (1.50)$$

Вместо  $\omega_{\max}$  в формулу для энергии обычно вводят температуру Дебая, определяемую формулой

$$\hbar\omega_{\max} = k\Theta_D. \quad (1.51)$$

Нетрудно видеть, что вместо  $x_{\max}$  можно писать

$$x_{\max} = \hbar\omega_{\max}/kT = \Theta_D/T.$$

Формула для энергии тепловых колебаний принимает при этом вид

$$E = 9N \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3 kT f \left( \frac{T}{\Theta_D} \right), \quad (11.52)$$

где функция  $f(T/\Theta_D)$  определяется выражением

$$f \left( \frac{T}{\Theta_D} \right) = \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (11.53)$$

Эта формула является окончательной. При желании из нее можно получить формулу для теплоемкости кристаллической решетки. График теплоемкости, рассчитанной по Дебаю, приведен на рис. 120. При высоких температурах отношение  $T/\Theta_D$  велико, а  $\Theta_D/T$  мало, так что

$$f \left( \frac{T}{\Theta_D} \right) = \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \approx \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3 dx}{x} = \frac{1}{3} \left( \frac{\Theta_D}{T} \right)^3.$$

В этом случае формула (11.52), как и следует ожидать, переходит в (11.45).

График, представленный на рис. 120 показывает, что классическая формула для теплоемкости применима не только при  $T/\Theta_D \gg 1$ , но и при  $T/\Theta_D \approx 1$  (при  $T = \Theta_D$  теплоемкость кристалла всего на 5% отличается от классического значения).

При низких температурах интеграл (11.53) может быть распространен до бесконечности. Как мы знаем, он равен  $\pi^4/15$ . Подставляя это значение в (11.52), найдем

$$E = \frac{3}{5} N \cdot \pi^4 \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3 kT.$$

Подстановка в эту формулу значений  $\Theta_D$  из (11.51) и  $\omega_{\max}$  из (11.47) приводит к (11.43). Мы убедились, таким образом, в том, что формула Дебая (11.52) правильно описывает энергию (и теплоемкость) кристаллической решетки как при низких, так и при высоких температурах.

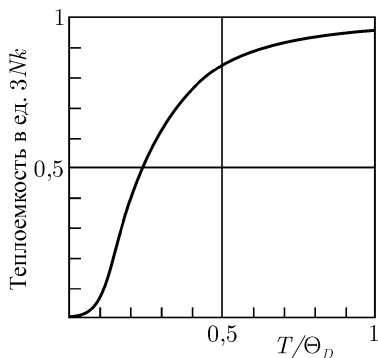


Рис. 120. Зависимость теплоемкости кристалла от температуры по Дебаю.

Скажем несколько слов о выборе  $\omega_{\max}$ . Мы произвели его из формальных соображений. Покажем, что к близким значениям  $\omega_{\max}$  приводят соображения, основанные на представлениях о зонах Бриллюэна. Как мы знаем, предельное волновое число, соответствующее краю этой зоны, для линейной цепочки равно

$$k_{\max} = \pi/a.$$

При кубической решетке это значение применимо и для трехмерного случая, а для кристаллов других симметрий справедливо по порядку величины. Мы вправе поэтому ожидать, что должны выполняться следующие оценочные формулы:

$$\omega_{\max} \approx s|k_{\max}| = s\frac{\pi}{a} \approx s\pi N^{1/3}. \quad (11.54)$$

Сравнивая это выражение с (11.47), мы, действительно, наблюдаем их близкое согласие. Формула (11.51) позволяет перейти от оценочных формул для  $\omega_{\max}$  к соответствующим формулам для температуры Дебая.

В табл. 7 приведены дебаевские температуры некоторых веществ.

Таблица 7. Дебаевские температуры некоторых кристаллических веществ

Вещество	$\Theta_D$ , К	Вещество	$\Theta_D$ , К
Алмаз	1850	Кремний	650
Алюминий	375	Медь	340
Железо	360	Свинец	95

## § 58. Решеточная теплопроводность

При наличии градиента температуры в кристаллах, как и во всех других телах, возникают тепловые потоки. Материальными носителями этих потоков являются фононы. При полуколичественных оценках для фононной (решеточной) теплопроводности можно применять обычную формулу для теплопроводности газов

$$\kappa = cs\lambda/3, \quad (11.55)$$

где  $\kappa$  — теплопроводность,  $c$  — теплоемкость, отнесенная к единице объема газа,  $s$  — скорость фононов, а  $\lambda$  — средняя длина их свободного пробега. Теплоемкость решетки мы научились рассчитывать в предыдущем параграфе. Скорость звука следует считать известной.

Обсудим причины, ограничивающие длину свободного пробега фононов.

При низких температурах, когда тепловые колебания невелики и ангармоничность сил, связывающих атомы в решетке, еще можно не принимать во внимание, длина свободного пробега  $\lambda$  очень велика. При низких температурах ее величину ограничивают примеси, дефекты кристалла и размеры самих кристаллов. Длина свободного пробега фононов может равняться при этом нескольким миллиметрам.

Рассеяние фононов на дефектах кристалла схематически изображено на рис. 121. При рассеянии фонон меняет направление движения, не изменяя своей энергии.

При повышении температуры на распространении звуковых волн все больше начинает сказываться ангармоничность колебаний. Соответствующие процессы изображены на рис. 122. При разделении, слиянии и столкновении фононов выполняется закон сохранения энергии, а закон сохранения импульса верен с точностью до  $\Delta p = 2\pi\hbar n/a$  (см. (11.33) и следующий за ней текст).

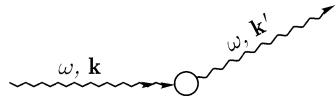


Рис. 121. Схема рассеяния фононов на дефекте решетки.

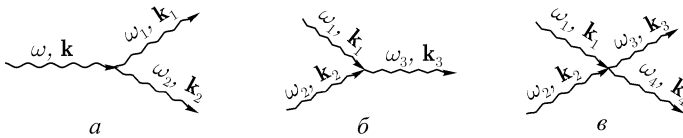


Рис. 122. *а* — Распад одного фонона на два; *б* — слияние двух фононов в один; *в* — столкновение двух фононов, приводящее к их рассеянию.

Формула (11.55) позволяет оценивать теплопроводность кристаллов, если известна длина свободного пробега фононов, и может служить для определения этой длины, если сведения о ней отсутствуют. При температурах, близких к абсолютному нулю, теплопроводность кристаллов возрастает с температурой вместе с его теплоемкостью, а затем быстро падает из-за уменьшения длины свободного пробега фононов.

## ГЛАВА 12

# ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

### § 59. Связанные колебательные системы. Разрешенные и запрещенные зоны

В твердых телах атомы близко подходят друг к другу и не могут рассматриваться как независимые. Задача о положении уровней взаимодействующих атомов очень сложна и не может быть исследована простыми методами. Основные эффекты, которые возникают при таком взаимодействии, близки к эффектам, происходящим при взаимодействии классических колебательных систем.

Рассмотрим две одинаковые классические колебательные системы  $X$  и  $Y$ , например, два маятника или два колебательных контура. В отсутствие взаимодействия их движение описывается обычными уравнениями

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0, \quad \ddot{y} + \omega^2 y = 0. \quad (12.1)$$

Переменные  $x$  и  $y$  в этих уравнениях определяют характерные для системы изменяющиеся величины — отклонение маятников или напряжение в электрических контурах и т. д. Частота колебаний  $\omega$  у обеих колебательных систем одинакова.

«Включим» взаимодействие между системами (например, свяжем маятники слабой пружинкой или сблизим колебательные контуры). Сила, действующая на первую систему, начнет после этого зависеть не только от координаты  $x$  этой системы, но и от координаты  $y$  другой системы. В силу одинаковости систем влияние системы  $Y$  на систему  $X$  равно влиянию системы  $X$  на систему  $Y$ . В присутствии взаимодействия уравнения движения примут поэтому вид<sup>1,2</sup>

$$\ddot{x} + \omega^2 x + \alpha y = 0, \quad \ddot{y} + \omega^2 y + \alpha x = 0. \quad (12.2)$$

---

<sup>1</sup>Равенство коэффициентов при перекрестных членах доказывается в Приложении III.

<sup>2</sup>При написании (12.2) предполагалось, что  $|\alpha| \ll \omega^2$ .

Чтобы решить эту систему, следует перейти к координатам  $u$  и  $v$ :

$$\begin{aligned} u &= x + y, & x &= (u + v)/2, \\ v &= x - y, & y &= (u - v)/2. \end{aligned} \quad (12.3)$$

Складывая и вычитая уравнения (12.2), с учетом (12.3) найдем

$$\ddot{u} + (\omega^2 + \alpha)u = 0, \quad \ddot{v} + (\omega^2 - \alpha)v = 0. \quad (12.4)$$

Вводя обозначения

$$\omega_1^2 = \omega^2 + \alpha, \quad \omega_2^2 = \omega^2 - \alpha, \quad (12.5)$$

найдем

$$u = A_1 \sin(\omega_1 t + \varphi_1), \quad v = A_2 \sin(\omega_2 t + \varphi_2). \quad (12.6)$$

$A_1$  и  $A_2$  — амплитуды колебаний,  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  — их начальные фазы.

Возвращаясь с помощью (12.3) к переменным  $x$  и  $y$ , найдем, что колебания наших систем складываются из двух гармонических колебаний  $u$  и  $v$ , несколько различающихся по частоте<sup>1</sup>.

Константы  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  зависят от начальных условий. Рассмотрим, например, случай, когда в момент  $t = 0$  колебалась только система  $X$ . Нетрудно убедиться, что в этом случае  $A_1 = A_2 = A$  и  $\varphi_1 = \varphi_2 = \pi/2$ . Тогда

$$x = \frac{A}{2}(\cos \omega_1 t + \cos \omega_2 t), \quad y = \frac{A}{2}(\cos \omega_1 t - \cos \omega_2 t).$$

С течением времени различие между  $\omega_1 t$  и  $\omega_2 t$  постепенно увеличивается. При  $\omega_1 t - \omega_2 t = \pi$  колебания в системе  $X$  затухают, а в системе  $Y$  доходят до максимума. Затем снова вся энергия колебаний сосредотачивается в системе  $X$  и т. д.

Главный результат, который следует отметить, заключается в том, что две одинаковые системы с равными собственными частотами после «включения» взаимодействия характеризуются двумя коллективными колебаниями  $u$  и  $v$  со слегка «расщепившимися» частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$ .

В квантовой механике уровни энергии осциллятора квантуются, причем расстояние между уровнями равно энергии перехода  $\hbar\omega$ . Изменение частоты колебаний  $\omega$  приводит к изменению расстояния между уровнями. Расщепленные уровни энергии, соответствующие колебаниям  $u$  и  $v$ , являются коллективными уровнями и характеризуют не атомы порознь, а систему из двух взаимодействующих атомов.

<sup>1</sup>В теоретической механике гармонические составляющие  $u$  и  $v$  носят название нормальных колебаний.

Подобное «расщепление» частот происходит и в кристаллах, состоящих не из двух, а из большого числа взаимодействующих между собой одинаковых атомов. Наиболее сильно выражено расщепление «верхних» уровней, связанных с движением электронов, слабее всего связанных со «своими» атомами и ближе всего подходящих к «чужим» атомам<sup>1</sup>. Рассмотрим для примера кристалл, содержащий грамм-атом вещества. Каждый из уровней в этом случае расщепляется на  $6 \cdot 10^{23}$  подуровней. При этом величина расщепления зависит не от числа атомов в кристалле, а от силы их связи. Поэтому все подуровни, на которые расщепляется один атомный уровень, находятся внутри некоторой полосы  $\Delta E$ , ширина которой при не очень сильной связи оказывается существенно меньшей, чем расстояние между соседними невозмущенными уровнями. Ясно, что распределение расщепленных уровней в полосе  $\Delta E$  оказывается непрерывным<sup>2</sup>. Уровни, образовавшиеся при расщеплении каждого атомного уровня, образуют свою разрешенную зону. Разрешенные зоны разделены между собой свободными от уровней энергетическими промежутками, которые называют запрещенными зонами. Зону, возникшую при расщеплении какого-либо уровня, принято обозначать также, как и сам уровень.

На рис. 123 изображено образование энергетических зон из атомных уровней  $1s$  и  $2s$  в кристалле лития. На рисунке видно, что зона  $2s$  существенно шире зоны  $1s$ , так как радиальная протяженность волновых функций, соответствующих уровню  $2s$ , гораздо больше (рис. 107), чем их протяженность для  $1s$ -уровня, и взаимодействие  $2s$ -уровней проявляется существенно сильнее. Рассмотренная картина расщепления характерна для всех твердых тел. В зависимости от свойств конкретного тела меняется число, ширина и распределение зон, но общий характер картины не изменяется.

Низко расположенные атомные уровни переходят в твердом теле в очень узкие зоны, а высоко расположенные уровни образуют зоны большой ширины. Если в твердом теле имеется несколько сортов атомов (например, в случае  $\text{NaCl}$ ), то возникают зоны из уровней энергии всех компонент. Самыми широкими оказываются зоны, соответствующие уровням валентных электронов. Именно поэтому у твердых источников излучения не обнаруживаются линейчатые оптические спектры, характерные для атомов, входящих в их состав. При нагревании твердых тел до высоких температур появляется лишь непрерывный спектр «черного

---

<sup>1</sup>Расщепление нижних уровней крайне незначительно (волновые функции внутренних электронов практически не перекрываются!) и не приводит к каким-либо новым физическим явлениям

<sup>2</sup>Следует иметь в виду, что уровни имеют конечную ширину и что расстояние между уровнями оказывается меньше их ширины.



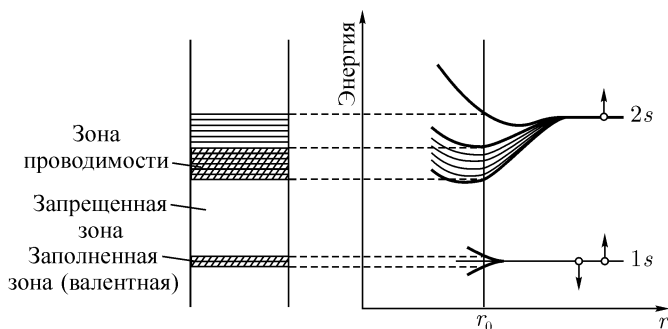


Рис. 123. Образование разрешенных зон из одиночных уровней (литий). Горизонтальными линиями условно изображены квантовые состояния разрешенных зон. Косая штриховка отмечает уровни, занятые электронами.

тела» (гл. 9). В то же время характеристические рентгеновские спектры, возникающие при переходах между очень узкими внутренними зонами, превосходно наблюдаются при использовании твердых тел в качестве анодов в рентгеновских трубках. Связь атомов в кристалле на характеристических рентгеновских спектрах практически не сказывается.

Следует подчеркнуть, что образование зон из атомных уровней происходит во всех кристаллах, независимо от их типа. Различие между кристаллами состоит не в наличии или отсутствии зон, а в расположении зон и в характере их заполнения.

Вопрос о заполнении энергетических уровней обобщенными электронами кристалла принадлежит к числу кардинальных. Как мы уже знаем, электроны являются фермионами и подчиняются принципу Паули. Число электронов в зоне не может превзойти числа имеющихся в ней квантовых состояний — «числа мест». Поэтому важно понять, сколько «мест» имеется в той или иной зоне.

Начнем с двух сближающихся колебательных систем, которые только что рассматривались. Мы выяснили, что одинаковые до сближения частоты после «включения» взаимодействия начинают расходиться. Однако число степеней свободы при этом не изменяется. До сближения имелись две тождественные степени свободы. При сближении систем частоты колебаний перестают совпадать, но число степеней свободы остается равно двум. Постоянство числа степеней свободы нетрудно понять, заметив, что это число дискретно. Непрерывно производимое сближение приводит к столь же непрерывному изменению энергии уровней, но не ведет к изменению числа «мест», которое может меняться толь-

ко скачками. Этот вывод справедлив и для атомов в кристалле. Уровни в разрешенных зонах многократно перекрываются и образуют сплошной разрешенный энергетический интервал — зону. Однако число уровней — число электронов, которые могут поместиться в зоне, от взаимодействия не зависит и точно известно: оно равно числу атомов в кристалле, умноженному на число мест на том уровне, из которого — или из которых — образовалась зона.

## § 60. Проводники и изоляторы

Применим представление о зонах к объяснению электропроводности твердых тел и для выяснения причин, приводящих к тому, что одни из них являются проводниками, а другие — изоляторами.

Мы уже знаем, что энергия электронов в твердых телах может принимать значения, заключенные в разрешенных энергетических зонах. Мы отмечали, далее, что соединение атомов в твердое тело не меняет числа квантовых состояний. Так, в любом атоме есть два  $1s$ -состояния; после объединения  $N$  таких атомов в твердое тело зона  $1s$  содержит  $2N$ -состояний. В атоме лития (рис. 123) оба состояния  $1s$  заняты,  $1s$ -зона в кристалле лития поэтому полностью заполнена. В других твердых телах заполнена не одна, а несколько нижних зон.

Электроны нижних зон не участвуют в проводимости по двум причинам, из которых каждая является достаточной. Первая из них заключается в том, что электроны, находящиеся в этих зонах, «привязаны» к своим атомам (их волновая функция мала в промежутке между атомами), вторая — в том, что эти зоны **з а п о л н е н ы**. Электроны заполненных зон не могут участвовать в электропроводности, даже если эти зоны лежат высоко и электроны обобществлены.

Чтобы разобраться в этом важном вопросе, рассмотрим, как квантуются уровни в обобществленных зонах. В изолированных атомах уровни квантуются по энергии, угловому моменту и его проекции. Такое квантование уровней естественным образом следует из сохранения вектора углового момента в центральном электрическом поле атома. Потенциальная энергия электрона в кристалле сложным образом зависит от координат (рис. 108). Электрическое поле в кристалле нецентрально; угловой момент обобществленных электронов при движении не сохраняется и, конечно, не может служить основой для квантования. Применяя для зон обозначения  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$  и т. д., следует помнить, что буквы  $s$  и  $p$  здесь служат указанием на соответствие между положением зон и уровнями изолированных атомов и не характеризуют угло-

вой момент электронов (если не говорить о самых внутренних электронах, на поведении которых объединение атомов в кристалл сказывается очень мало).

Рассмотрим верхнюю из нарисованных на рис. 108 энергетических линий. Электрон, энергия которого лежит выше максимумов потенциальной энергии, свободно перемещается по кристаллу, отражаясь от его краев. Движение электрона в этом случае очень напоминает обычное движение в потенциальной яме (§ 9). Роль краев ямы играют границы кристалла. В отличие от простого случая, рассмотренного в § 9, дно ямы имеет сложный рельеф, наличие которого вносит в явление некоторые новые черты. На первых порах отвлечемся от наличия этого рельефа, т. е. перейдем к приближению свободных электронов.

Мы видели (§ 9), что энергия электрона в потенциальной яме квантуется. Волновая функция электрона имеет вид (3.10):

$$\psi = \psi_1 = A \sin kx.$$

Заменяя в этом выражении  $\sin kx$  с помощью мнимых экспонент, представим  $\psi$ -функцию в виде

$$\psi = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}.$$

Таким образом, волновые функции электрона в рассматриваемом приближении представляют собой совокупность двух волн, движущихся налево и направо<sup>1</sup>. Их волновые числа служат основой для квантования движения обобществленных электронов.

Вернемся к электропроводности твердых тел. Наличие электрического тока означает, что число электронов, движущихся, например, направо, превышает число электронов, движущихся налево. Но количества квантовых состояний, отвечающих движению направо и налево, всегда равны друг другу. Если все квантовые состояния заняты, не может возникнуть никакого преимущественного направления движения, не может быть, следовательно, и электрического тока. Иначе обстоит дело в частично заполненной зоне, где состояния с разными направлениями движения могут заполняться одинаково или по-разному. В качестве примера вернемся к кристаллу лития (рис. 123). Зона  $2s$  в твердом литии заполнена лишь наполовину: в зоне существует  $2N$ -состояний  $2s$ , а у каждого из  $N$  атомов лития имеется всего один  $2s$ -электрон; их полное число равно поэтому  $N$ .

<sup>1</sup>Напоминаем читателям, что мы, как обычно, опускаем множитель  $e^{-i\omega t}$ , так что полная запись имеет вид

$$\psi = C_1 \exp[i(kx - \omega t)] + C_2 \exp[-i(kx + \omega t)].$$

В отсутствие электрического поля количество электронов, находящихся в состояниях, отвечающих движению в противоположные стороны, одинаково, и тока нет. Если приложить электрическое поле, то движение электронов в частично заполненной зоне меняется: состояния, отвечающие движению по полю, становятся энергетически более выгодными и потому более плотно заполняются. Кристалл проводит электрический ток. Поэтому частично заполненные зоны называются *зонами проводимости*.

Отличие проводников от непроводников, таким образом, сводится к наличию или отсутствию частично заполненной энергетической зоны. Из сказанного выше ясно, почему все твердые тела, состоящие из одновалентных атомов (Li, Na, K, Cu и др.), являются проводниками.

Обратимся теперь к двухвалентным атомам (Be, Mg и др.), у которых оба *s*-состояния заняты. Рассмотрим в качестве примера энергетические зоны бериллия, изображенные на рис. 124. Зона *1s* у бериллия очень узка и полностью занята. Зона *2s* также заполнена, так как оба состояния *2s* в атоме бериллия заняты. На уровне *2p* у атома бериллия нет электронов (в основном состоянии). Можно было бы поэтому ожидать, что твердый бериллий окажется изолятором. Но из рисунка видно, что у бериллия зона *2p* (с  $6N$  свободными состояниями) перекрывается с зоной *2s* и, таким образом, из двух зон *2s* и *2p* образуется одна общая зона с  $8N$ -состояниями, из которых занято только  $2N$ -состояний. Поэтому бериллий оказывается проводником. Анализ расположения зон в твердых телах показывает, что все атомы с одним, двумя и тремя валентными электронами (сверх оболочки инертного газа) образуют твердые тела с хорошей проводимостью, характерной для металлов.

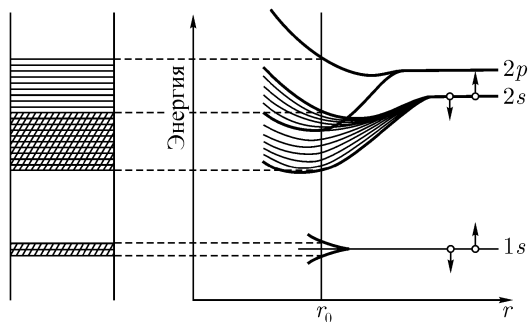


Рис. 124. Энергетические зоны бериллия. Косой штриховкой указаны заполненные электронами уровни.

Рассмотрим теперь структуру зон у изоляторов. У изоляторов последняя из занятых зон — валентная зона — полностью занята, а зона проводимости совершенно пуста. Схема расположения зон у изоляторов изображена на рис. 125.

В качестве примера рассмотрим структуру зон у NaCl. На рис. 126 изображены зоны кристалла NaCl, получающиеся при расщеплении уровня  $3s$  натрия и уровня  $3p$  хлора. Более низкие зоны не представляют интереса, так как они заполнены.

Кристалл NaCl состоит из ионов  $\text{Na}^+$  и  $\text{Cl}^-$ . При образовании ионов энергия  $3s$ -уровня натрия повышается (затрачивается энергия на отрыв электрона), а энергия  $3p$ -уровня хлора понижается (выделяется энергия при присоединении электрона). Поэтому уровни  $3s$  и  $3p$  пересекаются и электроны уходят из зоны  $3s$  натрия в зону  $3p$  хлора, где есть  $6N$  свободных мест. Зона  $3p$  оказывается до конца заполненной, а зона  $3s$  — совсем пустой. Расстояние между зонами велико (10 эВ), и спонтанный переход электронов с нижней зоны в верхнюю при обычных температурах очень мало вероятен. Поэтому NaCl оказывается хорошим изолятором.

Изоляторы представляют собой системы, у которых число электронов в точности равно числу квантовых состояний в заполненных зонах. На примере NaCl было показано, что такое равенство автоматически выполняется в некоторых кристаллах.

На электропроводность кристаллов сильно влияют примеси. Атомы примесей могут отдавать свои электроны в незаполненную зону или поглощать их из заполненной. В обоих случаях возникает проводимость. Таким образом, хорошими изоляторами оказываются лишь достаточно чистые кристаллы.



Рис. 125. Расположение энергетических зон у изолятора.

## § 61. Волны Блоха

Исследуем движение обобществленных электронов в кристалле более внимательно. Энергетические уровни электронов определяются из уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (12.7)$$

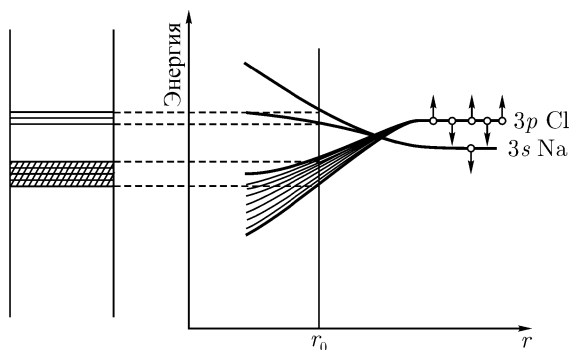


Рис. 126. Картина расположения верхних энергетических зон в кристалле NaCl.

где  $\psi$  — волновая функция электрона,  $V(\mathbf{r})$  — его потенциальная энергия в электрическом поле решетки, а  $E$  — его полная энергия. Рассмотрим свойства этого уравнения в декартовой системе координат.

Оператор Лапласа, стоящий в первом члене формулы, является дифференциальным оператором и от выбора начала координат не зависит. Потенциальная энергия, входящая во второй член левой части уравнения, представляет собой периодическую функцию координат, поскольку

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = V(\mathbf{r}), \quad (12.8)$$

где  $\mathbf{a}$  — любой целочисленный вектор трансляции.

Введем новую систему координат, смещенную относительно старой на  $-\mathbf{a}$ . Векторы  $\boldsymbol{\rho}$  (с проекциями  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ ) в новой системе координат получаются из старых векторов  $\mathbf{r}$  с помощью очевидной формулы

$$\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} + \mathbf{a}. \quad (12.9)$$

$\psi$  — функция электрона в новой системе координат может быть получена с помощью уравнения Шредингера, записанного в этой системе координат:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\boldsymbol{\rho}) + V(\boldsymbol{\rho})\psi(\boldsymbol{\rho}) = E\psi(\boldsymbol{\rho}). \quad (12.10)$$

Легко видеть, что уравнения (12.8) и (12.10) не отличаются одно от другого, поскольку

$$\Delta_r = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} = \Delta_\rho,$$

$$V(\boldsymbol{\rho}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = V(\mathbf{r}).$$

Уравнения (12.8) и (12.10), таким образом, идентичны. Это означает, что их решения можно выбрать так, чтобы они отличались только числовым множителем. Обозначим его  $C_{\mathbf{a}}$  (величина множителя, вообще говоря, зависит от вектора трансляции  $\mathbf{a}$ ). Имеем, следовательно,

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = C_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}). \quad (12.11)$$

Самый общий вид функции, удовлетворяющей (12.11), имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (12.12)$$

где  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  — периодическая (с периодом решетки) функция  $\mathbf{r}$ .

Убедимся в том, что функция (12.12) действительно удовлетворяет уравнению (12.11). При замене  $\mathbf{r}$  на  $\mathbf{r} + \mathbf{a}$  функция  $u_{\mathbf{k}}$  не меняется, а функция  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  приобретает множитель  $C_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}$ , который является числом, зависящим от  $\mathbf{a}$ . Если повторить трансляцию  $m$  раз, то уравнение (12.12) приобретает множитель  $(e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}})^m$ , как и должно быть. Наше утверждение, таким образом, доказано.

Функции (12.12) носят название функций Блоха. Экспоненциальный множитель функции Блоха соответствует обычной плоской волне.

Эта волна модулирована периодической функцией  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , которая зависит от структуры кристаллической решетки, от волнового вектора  $\mathbf{k}$  и, вообще говоря, от некоторых других параметров (например, от поляризации волны).

Появление периодической функции  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  в (12.12) является вполне естественным, так как электроны кристалла распространяются не в однородной среде, а в среде с периодически изменяющейся потенциальной энергией. К одним областям они притягиваются, а от других отталкиваются. Поэтому плотность электронной волны в кристалле периодически меняется (пропорционально  $|u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2$ ). Она велика в «ямах» и мала «на холмах» потенциальной энергии.

Как мы уже знаем, в кристаллах все физические величины являются периодическими функциями волнового вектора (и импульса). Значения  $\mathbf{k}$  принято приводить к первой зоне Бриллюэна. В этой зоне следует выбирать как значение волнового числа, так и импульса — точнее говоря, квазиимпульса — электрона.

Как показывает более подробное рассмотрение (см., например, ниже текст, набранный петитом), решения уравнения (12.7), удовлетворяющие всем необходимым требованиям (однозначности, непрерывности, гладкости и конечности), могут быть найдены не при всех значениях  $E$ . Те значения  $E$ , при которых уравнение Шредингера имеет такие решения,

образуют области, называемые разрешенными зонами, а области, в которых решений нет, называются запрещенными зонами энергии. К этому результату мы уже приходили с другой точки зрения.

Исследуем функции Блоха более подробно. Рассмотрим уравнение Шредингера (12.7). Для простоты ограничимся одномерным случаем. Как обычно, умножим уравнение на  $2m/\hbar^2$  и введем обозначение

$$\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] = k^2(x). \quad (12.13)$$

Уравнение Шредингера примет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2(x)\psi = 0. \quad (12.14)$$

Входящая в это уравнение функция  $k^2(x)$  может, вообще говоря, сложным образом зависеть от  $x$ . Важно, однако, что в силу периодичности кристалла

$$k^2(x + a) = k^2(x) \quad (12.15)$$

для всех  $x$ . Здесь  $a$  — период кристаллической решетки.

Линейные дифференциальные уравнения второго порядка с периодическими коэффициентами носят название уравнений Матье и, вообще говоря, аналитически не решаются. Некоторые важные их свойства, однако, легко могут быть установлены.

Покажем прежде всего, что среди решений (12.14) всегда имеются два независимых решения  $\Phi_1(x)$  и  $\Phi_2(x)$ , которые при смещении на  $x = a$  не меняют своего вида, а просто умножаются на некоторое число. Так как при замене  $x$  на  $x + a$  уравнение (12.14) не изменяется, для доказательства достаточно показать, что существуют два решения, у которых начальные условия, т. е. значения самой функции и ее первой производной, одновременно умножаются на некоторое число.

При доказательстве будем вначале исходить из двух произвольных независимых решений этого уравнения  $\psi_1(x)$  и  $\psi_2(x)$ , которые, вообще говоря, указанным свойством не обладают. Искомые решения, как и всякие решения нашего уравнения, могут быть представлены в виде линейной комбинации этих двух решений. Опуская индекс при искомом решении, запишем поэтому

$$\Phi(x) = b_1\psi_1(x) + b_2\psi_2(x). \quad (12.16)$$

Для упрощения расчетов выберем в качестве  $\psi_1(x)$  и  $\psi_2(x)$  решения, обладающие тем свойством, что в начальной точке  $x_0$

$$\psi_1(x_0) = 1, \quad \psi_1'(x_0) = 0, \quad \psi_2(x_0) = 0, \quad \psi_2'(x_0) = 1. \quad (12.17)$$



Здесь и ниже штрихами обозначены производные по  $x$ . Подставляя эти значения в (12.16), найдем начальные значения  $\Phi(x)$ :

$$\Phi(x_0) = b_1, \quad \Phi'(x_0) = b_2. \quad (12.18)$$

При переходе через период функция  $\Phi$  и ее производная равны

$$\begin{aligned} \Phi(x_0 + a) &= b_1\psi_1(x_0 + a) + b_2\psi_2(x_0 + a), \\ \Phi'(x_0 + a) &= b_1\psi_1'(x_0 + a) + b_2\psi_2'(x_0 + a). \end{aligned} \quad (12.19)$$

Функция  $\Phi$  будет обладать необходимым свойством, если

$$\Phi(x_0 + a) = \lambda\Phi(x_0), \quad \Phi'(x_0 + a) = \lambda\Phi'(x_0), \quad (12.20)$$

где  $\lambda$  — некоторое число (в общем случае комплексное).

Подставляя (12.18) и (12.19) в (12.20), найдем

$$\begin{aligned} b_1\psi_1(x_0 + a) + b_2\psi_2(x_0 + a) &= \lambda b_1, \\ b_1\psi_1'(x_0 + a) + b_2\psi_2'(x_0 + a) &= \lambda b_2. \end{aligned} \quad (12.21)$$

Система (12.21) однородна относительно неизвестных коэффициентов  $b_1$  и  $b_2$  и имеет решение в том и только в том случае, если ее детерминант равен нулю:

$$\begin{vmatrix} \psi_1(x_0 + a) - \lambda & \psi_2(x_0 + a) \\ \psi_1'(x_0 + a) & \psi_2'(x_0 + a) - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (12.22)$$

Уравнение (12.22) является квадратным уравнением относительно  $\lambda$  и определяет два решения  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ . Для каждого из них система (12.21) может быть разрешена и определяет (с точностью до постоянного множителя) два набора решений  $b_1'$ ,  $b_2'$  и  $b_1''$ ,  $b_2''$ . Подставляя эти значения в (12.16), получим функции  $\Phi_1(x)$  и  $\Phi_2(x)$ , определенные с точностью до постоянного множителя. Это и есть искомые функции, существование которых мы, таким образом, доказали.

Исследуем уравнение (12.22). Раскрывая детерминант, найдем

$$\begin{aligned} \lambda^2 - \lambda[\psi_1(x_0 + a) + \psi_2'(x_0 + a)] + \\ + [\psi_1(x_0 + a)\psi_2'(x_0 + a) - \psi_1'(x_0 + a)\psi_2(x_0 + a)] = 0. \end{aligned} \quad (12.23)$$

Покажем прежде всего, что стоящее во второй квадратной скобке выражение равно единице. Это выражение равно значению, которое принимает в точке  $x_0 + a$  функция

$$f(x) = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_1'(x)\psi_2(x).$$

Вычислим производную этой функции. Дифференцируя  $f(x)$ , найдем

$$f'(x) = \psi_1(x)\psi_2''(x) - \psi_1''(x)\psi_2(x) = \psi_1(x)k^2(x)\psi_2(x) - k^2(x)\psi_1(x)\psi_2(x) = 0.$$

При вычислениях мы воспользовались тем, что функции  $\psi_1(x)$  и  $\psi_2(x)$  являются решениями уравнения (12.14).

Таким образом, функция  $f(x)$  просто является константой. С помощью (12.7) нетрудно убедиться, что в начальный момент, а следовательно, и всегда она равна единице.

Уравнение (12.23) принимает теперь окончательный вид

$$\lambda^2 - \lambda[\psi_1(x_0 + a) + \psi_2'(x_0 + a)] + 1 = 0. \quad (12.24)$$

Введем обозначение

$$\psi_1(x_0 + a) + \psi_2'(x_0 + a) = 2C. \quad (12.25)$$

Корни (12.24) равны

$$\lambda_{1,2} = C \pm \sqrt{C^2 - 1}. \quad (12.26)$$

Рассмотрим прежде всего случай, когда  $|C| > 1$ . При этом оба значения  $\lambda$  действительны, причем ни одно из них не равно единице. В этом случае решения  $\Phi_1(x)$  и  $\Phi_2(x)$  при переходе через каждый период решетки умножаются на действительное число, не равное единице, т. е. либо неограниченно убывают, либо неограниченно возрастают (что соответствует движению навстречу затухающей волне). Общее решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде линейной комбинации  $\Phi_1(x)$  и  $\Phi_2(x)$  и обладает тем же свойством. В этом случае электронная волна не может беспрепятственно распространяться по кристаллу, что соответствует запрещенной зоне.

При  $|C| \leq 1$  удобно положить

$$C = \cos \nu, \quad (12.27)$$

где  $\nu$  — новая константа. Имеем при этом

$$\lambda_{1,2} = e^{\pm i\nu}. \quad (12.28)$$

В этом случае решения  $\Phi_1(x)$  и  $\Phi_2(x)$  при смещении на период решетки не изменяют своей величины и просто умножаются на фазовый множитель (12.28). Случай  $|C| \leq 1$  соответствует разрешенной зоне.

Функции  $\Phi_1$  и  $\Phi_2$  при переходе через период решетки умножаются соответственно на множители  $\exp(\pm i\nu)$ . Запишем эти решения в виде

$$\Phi_{1,2} = u_{k\pm}(x)e^{\pm ikx}, \quad (12.29)$$

где  $k$  выбрано так, что

$$k = \nu/a. \quad (12.30)$$

Найденные решения совпадают по форме с функциями Блоха (12.12) (в одномерной записи).

Множитель  $\exp(\pm ikx)$  обеспечивает нужное изменение  $\Phi$  при смещении на период. Функция  $u_k(x)$  должна поэтому возвращаться к своему исходному значению, т. е. быть периодической. Как уже отмечалось, эта функция (вернее,

квадрат ее модуля) определяет изменение электронной плотности внутри ячейки кристалла. Она модулирует по амплитуде и по фазе<sup>1</sup> плоскую волну, которая описывается экспоненциальным множителем в (12.29). Определенная формулой (12.30) величина  $k$  является средним волновым числом электронной волны.

Произвольное решение уравнения (12.14) является линейной комбинацией волн Блоха  $\Phi_1$  и  $\Phi_2$ , движущихся в разные стороны (в трехмерном случае — наложением волн, распространяющихся во всевозможных направлениях).

Полученный нами результат содержит, таким образом, два утверждения. Первое из них состоит в том, что электронная волна, распространяющаяся в кристалле, описывается не простой плоской волной, а волной, модулированной по амплитуде (и по фазе). Этот результат является вполне естественным, и его можно было предугадать заранее. Второе утверждение состоит в том, что энергия электронов, распространяющихся в кристалле, может принимать не любые значения, а лишь значения, лежащие в области разрешенных зон.

Исследуем границу между разрешенными и запрещенными зонами. Как ясно из (12.26), такие переходы происходят в точках  $C^2 = 1$ . Это означает, что при движении через разрешенную зону  $C$  меняется от  $-1$  до  $+1$  или от  $+1$  до  $-1$ , а  $\nu$ , в соответствии с (12.27), от  $-\pi$  до  $+\pi$  или от  $\pi$  до  $-\pi$ . Сопоставляя этот результат с (12.30), мы приходим к еще одному важному выводу.

Переходы между запрещенными и разрешенными зонами происходят на границах зон Бриллюэна, т. е. при волновом числе, соответствующем границе зон Бриллюэна, волны перестают распространяться в кристалле<sup>2</sup>. Аналогичная ситуация имеет место при отражении рентгеновских лучей. В самом деле, из оптики рентгеновских лучей известно, что электромагнитные волны плохо проходят через кристалл (отражаются от него) при выполнении условия Брэгга — Вульфа

$$2d \sin \theta = n\lambda. \quad (12.31)$$

В одномерном случае каждая кристаллическая плоскость изображается точкой и распространяющаяся вдоль линии точек волна движется вдоль этой линии, так что  $\theta = \pi/2$ . Заменяя  $d$  на  $a$  и  $\lambda$  на  $2\pi/k$ , найдем, что отражение волн наступает при

$$k = \frac{\pi}{a}n, \quad p = \frac{\pi\hbar}{a}n, \quad (12.32)$$

т. е. как раз на границах зон Бриллюэна.

<sup>1</sup>Периодические функции  $u_{k\pm}$ , вообще говоря, комплексны. Их амплитуда определяет изменение электронной плотности, а фаза — отклонение реальной фазы электронной волны от равномерно меняющейся фазы плоской волны. Содержащееся в  $u_{k\pm}$  периодическое изменение фазы нас в дальнейшем интересовать не будет.

<sup>2</sup>Все сказанное полностью применимо только к одномерному случаю. В трехмерном случае картина усложняется.

Полученные соотношения справедливы не только для электромагнитных, но и для любых волн. В самом деле, из (12.32) следует, что

$$a = n\lambda/2.$$

Разность хода между волнами, отраженными от соседних кристаллических плоскостей, равна  $2a = n\lambda$ . Иначе говоря, все отраженные волны находятся в фазе и усиливают друг друга. Ясно, что это условие является вполне общим и не предполагает, что рассматриваемая волна является именно электромагнитной. При сильном отражении волна не может распространяться в кристалле, что характерно для запрещенной зоны. Каждая запрещенная зона соответствует некоторому диапазону изменения энергии и одному — брэгговскому — значению импульса.

Проследим связь между импульсом электрона и его энергией.

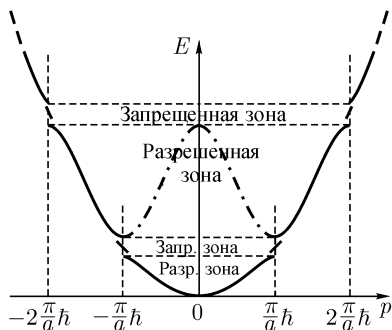


Рис. 127. Энергия и импульс почти свободного электрона в кристалле.

На рис. 127 изображена обычная параболическая зависимость энергии от импульса, характерная для свободного электрона. При наличии периодического поля в точках, удовлетворяющих соотношению (12.32), возникают запрещенные полосы (рис. 127 характеризует случай очень слабого периодического поля, когда изменяется не вся кривая  $E = E(p)$ , а только участки, прилегающие к границам зон Бриллюэна). Зависимость энергии от импульса в этих точках искажается (разрывы в сплошной кривой), причем никаких запрещенных областей импульса не возникает, а запрещенные энергетические зоны соответствуют границам зон Бриллюэна.

Участки параболической кривой, соответствующие второй зоне Бриллюэна, можно сместить в первую зону (как мы уже знаем, закон сохранения импульса в кристалле выполняется с точностью до  $2\pi\hbar n/2$ ).

Такая процедура проделана на рисунке (штрихпунктирная кривая). Та же операция может быть проведена и с участками кривой, расположенными в следующих разрешенных зонах. Кривая зависимости энергии от импульса при этом целиком уместается в первой зоне Бриллюэна, но содержит несколько ветвей. Мы видим, таким образом, что два совершенно разных подхода — теория, основанная на исследовании поведения электронов, которые сильно связаны в своих атомах (§ 60), и теория «почти» свободных электронов, движущихся в периодическом поле (настоящий параграф), — приводят к одинаковым выводам. Это совпадение заставляет думать, что полученные результаты имеют очень общий характер и должны выполняться в любых кристаллах. В частности, формулы, связывающие энергию и импульс электронов, и вся динамика электронов в кристалле совершенно не похожи на соответствующие формулы — и динамику — свободных электронов. Опыт хорошо подтверждает эти выводы.

## § 62. Динамика электронов в кристалле. Электропроводность кристаллов

Как мы уже могли убедиться, энергия и импульс электронов в кристаллах, вообще говоря, связаны между собой сложным законом дисперсии, а не привычным соотношением  $E = p^2/2m$ , характерным для классической физики. При расчете движения электронов нужно исходить непосредственно из закона дисперсии.

Основной закон движения электрона, записанный в ньютоновской форме, имеет вид

$$\boxed{\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}.} \quad (12.33)$$

Это уравнение позволяет находить импульс (вернее — квазиимпульс) электрона, если известны действующие на него силы (магнитные и электрические). Вычисление импульса является первым шагом в решении задачи о движении электрона. Следующий шаг состоит в том, чтобы по найденному импульсу рассчитать скорость и координату. Знание координат позволяет найти силы и, таким образом, замкнуть решение.

Скорость электрона равна групповой скорости соответствующей волны Блоха. Переходя от  $\omega$  и  $\mathbf{k}$  к  $E$  и  $\mathbf{p}$ , найдем

$$\boxed{\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} = \frac{dE}{d\mathbf{p}}.} \quad (12.34)$$

Формулу (12.34), содержащую дифференцирование по вектору, нужно понимать как сокращенную запись формул  $v_x = \partial E / \partial p_x$ , и т. д. Координаты электрона находятся путем интегрирования (12.34). Формулы (12.33) и (12.34) возвращают нас от кристалла с его сложным устройством и волн Блоха к динамике одиночных электронов.

Разберем некоторые простые примеры.

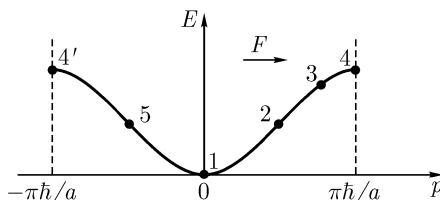


Рис. 128. Модельный закон дисперсии для электрона в кристалле.

Пусть закон дисперсии электрона (т. е. зависимость его энергии от импульса) имеет вид, изображенный на рис. 128 (одномерная задача), и электрон находится в точке 1. В этой точке его импульс и энергия равны нулю и скорость  $v = dE/dp$  также равна нулю. Подействуем на электрон постоянной силой  $\mathbf{F}$ , направленной, например, вправо. Формула (12.33) показывает, что его импульс будет монотонно увеличиваться, а значит, электрон начнет смещаться вправо по кривой на рис. 128. Его энергия вначале возрастает. Вместе с ней увеличивается скорость. В точке 2 скорость (наклон кривой  $E = E(p)$ ) достигает максимума. При дальнейшем действии силы электрон начнет приближаться к точке 3. Его импульс и энергия продолжают расти, а скорость (наклон кривой  $dE/dp$ ) падает. На границе зоны Бриллюэна (точка 4) электрон останавливается. Фазовая скорость волны при этом остается положительной.

Продолжим воздействовать на электрон той же силой. У правой границы зоны Бриллюэна происходит процесс переброса, и электрон «перескакивает» к левой его границе — из точки 4 в эквивалентную ей точку 4' (напомним, что из импульса частицы всегда можно вычесть  $2\pi\hbar/a$ ). При дальнейшем движении скорость меняет знак (движение направлено сменением движением налево), а энергия уменьшается. Электрон начинает все быстрее двигаться влево. В точке 5 он замедляет свое движение и, дойдя до точки 1, останавливается. При изображенном на рис. 128 законе дисперсии движение электрона под действием постоянной силы носит неравноускоренный, а колебательный характер.

На приведенном примере мы старались показать, какие кардинальные изменения вносит в динамику частиц кристаллическая решетка. Остановимся на их причинах. Переход от обычных уравнений Ньютона к уравнениям (12.33), (12.34) связан, конечно, не с тем, что кристаллическая решетка видоизменяет законы механики. Дело заключается в другом. Привычный метод решения сводится к тому, чтобы рассматривать движение электрона в суммарном поле, созданном как внешними силами, так и зарядами электронов и ионов, входящих в состав кристалла. Такой подход труден или даже невозможен. Однако оказывается возможным переписать уравнения Ньютона, оставив в их правой части одни только внешние силы. За это приходится расплачиваться изменением уравнений — переходом к уравнению (12.34). При таком подходе свойства кристаллической решетки включаются в уравнения движения. Это делается с помощью закона дисперсии  $E = E(p)$ , форма которого, в принципе, может быть рассчитана, но, как правило, определяется экспериментально<sup>1</sup>.

В окрестности точек  $E = E_{\min}$  (точка 1) и  $E = E_{\max}$  (точки 4 и 4' на рис. 128) зависимость энергии от импульса в первом приближении носит квадратичный характер. В окрестности точки 1 она может быть изображена в виде

$$E = p^2/2m^* \quad (12.35)$$

(коэффициент параболы  $1/2m^* > 0$ ), а в окрестности точек 4 и 4'

$$E = E_4 + \frac{(p - p_4)^2}{2m^*}, \quad E = E_{4'} + \frac{(p - p_{4'})^2}{2m^*} \quad (12.35')$$

(коэффициент параболы  $1/2m^* < 0$ ).

В обоих случаях формула (12.34) приобретает привычный вид

$$\mathbf{v} = \mathbf{p}/m^*, \quad (12.36)$$

если отсчитывать импульс от вершины параболы. При таком отсчете импульса формулы (12.35), (12.35') и (12.36) совпадают с обычными формулами классической механики. Однако вместо массы свободного электрона  $m_e$ , в них стоит его эффективная масса  $m^*$ , которая в центре зоны положительна, а у краев — отрицательна. При слабой связи, изображенной на рис. 127, эффективная масса электрона в центре зоны близка к массе свободного электрона. В реальных случаях связь не слаба, и эти массы могут отличаться в десятки и даже сотни раз.

<sup>1</sup>Мы отвлечлись сейчас от квантового характера движения электрона (дифракция электронной волны и т. д.)

Формула (12.35) описывает зависимость энергии от импульса вблизи минимума потенциальной энергии лишь в изотропном случае. Если кристалл не изотропен (не обладает кубической симметрией), то эта зависимость имеет более сложный вид:

$$E = \frac{p_x^2}{2m_x^*} + \frac{p_y^2}{2m_y^*} + \frac{p_z^2}{2m_z^*}. \quad (12.35'')$$

Эффективная масса электрона при этом зависит от направления. Вместо (12.36) имеем

$$p_x = m_x^* v_x, \quad p_y = m_y^* v_y, \quad p_z = m_z^* v_z. \quad (12.36')$$

В качестве второго примера рассмотрим циклотронный резонанс. Исследуем движение электронов кристалла в постоянном однородном магнитном поле. Направим ось  $Z$  вдоль вектора магнитной индукции  $\mathbf{B}$ . Будем считать, что электроны описываются приведенной массой  $m^*$ . (Это заведомо так, если кристалл принадлежит к кубической системе и число электронов в зоне невелико, так что все они умещаются вблизи дна зоны.) Вместо уравнения (12.34) можно в этом случае применять (12.36). При этом уравнение (12.33) приобретает вид

$$m^* \dot{\mathbf{v}} = \frac{e}{c} [\mathbf{vB}]. \quad (12.37)$$

Для компонент  $\dot{\mathbf{v}}$  имеем  $\dot{v}_x = \omega_c v_y$ ,  $\dot{v}_y = -\omega_c v_x$ ,  $\dot{v}_z = 0$ , где

$$\omega_c = \frac{eB}{m^* c}. \quad (12.38)$$

Решение этих уравнений имеет вид

$$v_x = v_0 \sin \omega_c t, \quad v_y = v_0 \cos \omega_c t, \quad v_z = \text{const}. \quad (12.39)$$

Электроны движутся по спирали, ось которой совпадает с направлением вектора  $\mathbf{B}$ . Направление вращения определяется знаками  $e$  и  $m^*$ . Частота (12.38) называется *циклотронной частотой*. Электронный циклотронный резонанс можно наблюдать на электронах, располагающихся как у нижнего, так и у верхнего краев зоны.

Величину  $m^*$  и знак  $e/m^*$  можно определить с помощью простого эксперимента. Для этого достаточно вдоль вектора  $\mathbf{B}$  направить на кристалл циркулярно поляризованную электромагнитную волну. При частоте, равной  $\omega_c$ , наступает сильное поглощение вследствие циклотронного резонанса. Поглощение наблюдается лишь при одном из двух возможных направлений циркулярной поляризации. По найденной частоте из (12.38) можно определить эффективную массу электронов.



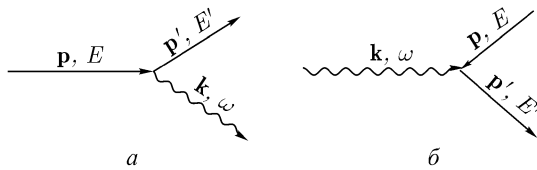


Рис. 129. Схемы рассеяния электронов на фононах.

На динамику электронов в кристалле оказывают существенное влияние дефекты кристалла и примесные атомы, на которых может рассеиваться электронная волна. Не меньшее значение имеет рассеяние на фононах. Особенно сильно оно проявляется при высоких температурах, когда фононов много.

Характерные графики рассеяния приведены на рис. 129. На рис. 129а изображено рассеяние электрона, приводящее к возникновению фонона. Возможен и обратный процесс — поглощение фонона электроном. На рис. 129б приведена схема рассеяния фонона на электроне. Во всех этих процессах сохраняются энергия и импульс (с учетом явлений переброса).

Как всегда, процессы рассеяния характеризуются длиной  $\lambda$  и временем  $\tau$  свободного пробега (это время часто называют временем релаксации). С их помощью можно рассчитать электропроводность и электронную теплопроводность кристаллов. Расчеты особенно просты в тех случаях, когда электронов мало и их движение рассчитывается с помощью эффективной массы.

Рассчитаем для примера электропроводность металлов. Под действием электрического поля  $E$  электроны, находящиеся в зоне проводимости, приобретают ускорение  $eE/m^*$  и скорость  $eEt/m^*$ . Производя усреднение по всем электронам, найдем

$$v_{\text{ср}} = \frac{eE}{m^*} \tau, \quad (12.40)$$

где  $\tau$  — среднее время свободного пробега.

Среднюю скорость электронов  $v_{\text{ср}}$  обычно называют скоростью дрейфа. Как мы видим, скорость дрейфа пропорциональна напряженности поля  $E$ . Их отношение называется подвижностью электрона<sup>1</sup>  $u$ :

$$u = \frac{e\tau}{m^*}. \quad (12.41)$$

<sup>1</sup>Термином «подвижность» в литературе называют две разные по размерностям величины: коэффициент пропорциональности между скоростью дрейфа частиц и действующей на них силой и между скоростью дрейфа и напряженностью электрического поля. Мы здесь применяем этот термин во втором смысле.

Используя (12.40), можно получить формулу для электропроводности металлов. В соответствии с законом Ома удельная проводимость  $\sigma$  связана с плотностью тока  $j$  соотношением  $\sigma = j/E = nev_{\text{ср}}/E$ , где  $n$  — концентрация электронов. С помощью (12.40) и (12.41) найдем

$$\sigma = \frac{nev_{\text{ср}}}{E} = \frac{e^2}{m^*} n\tau = en\mu. \quad (12.42)$$

Как мы видим, столкновения электронов приводят к тому, что под действием постоянной силы электроны приобретают некоторую постоянную среднюю скорость. В этом смысле поведение электронного газа в кристалле не отличается от поведения обычного газа и описывается привычными формулами кинетической теории. Различие состоит только в том, что в формулы входит не обычная, а эффективная масса электрона (если концентрация свободных электронов невелика и можно вообще пользоваться понятием массы).

В заключение рассмотрим влияние температуры на электропроводность. Это влияние может проявляться через изменение  $n$  и изменение  $\tau$ . В металлах проводимость связана с присутствием электронов в зоне проводимости. Их плотность  $n$  мало зависит от температуры. Основную роль играет уменьшение  $\tau$  при нагревании. Время релаксации  $\tau$  с температурой уменьшается из-за увеличения числа фононов. Приведем таблицу с экспериментальными данными, иллюстрирующими зависимость электрического сопротивления от температуры, для двух металлов — алюминия и меди.

Таблица 8. Удельное электрическое сопротивление ( $10^{-6}$  Ом·см) для Al и Cu при разных температурах

$T, ^\circ\text{C}$	Al	Cu
−200	0,6	0,16
−100	1,5	0,9
0	2,5	1,5
100	3,9	2,3
400	8,0	4,0

В полупроводниках, т. е. в кристаллах, бедных электронами, решающую роль играет увеличение  $n$  (свойствам полупроводников посвящена гл. 13).

## § 63. Электроны в металлах

До сих пор мы исследовали явления, которые могут быть поняты путем анализа движения «одиночных» электронов, не оказывающих существенного влияния друг на друга. Во многих практически важных случаях такое влияние, однако, играет важную или даже определяющую роль. Взаимное влияние электронов прежде всего сказывается через принцип Паули.

Начнем с оценки. Электроны подчиняются статистике Ферми. Распределение Ферми изображено на рис. 84 и описывается формулой (8.19):

$$n_e = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/kT] + 1}. \quad (12.43)$$

Здесь  $n_e$  — среднее число электронов в одном состоянии,  $E$  — энергия состояния,  $\mu$  — константа (на самом деле — слабая функция температуры), носящая название энергии Ферми. Число разрешенных состояний  $g(E) dE$  в объеме  $V$  в интервале энергии  $dE$  можно найти с помощью формулы (8.9):

$$g(E) dE = 2V \frac{4\pi p^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp}{dE} dE. \quad (12.44)$$

Число 2 заменяет для электронов множитель  $(2J + 1)$ , определяющий число спиновых состояний.

Найдем энергию Ферми при  $T = 0$  для металла, у которого в зоне проводимости имеется один электрон на атом. Приходящееся на единицу объема число атомов, а следовательно, и число электронов в зоне проводимости для всех металлов по порядку величины равно  $N \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$ . Из (12.43) следует, что при низких температурах заняты ( $n_e = 1$ ) все уровни с  $E < \mu$  и свободны ( $n_e = 0$ ) все уровни с  $E > \mu$ . Примем для оценки, что электроны в металле свободны (что их энергия и импульс связаны между собой обычной формулой  $E = p^2/2m$ , где  $m$  — масса электрона). Интегрируя (12.44) от нулевой энергии до энергии Ферми, найдем, что концентрация электронов  $(1/V) \int_0^\mu g(E) dE$  равна

$$N = 2 \cdot \frac{4}{3} \frac{\pi p_F^3}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{8}{3} \frac{\pi}{(2\pi\hbar)^3} (2m\mu)^{3/2}. \quad (12.45)$$

Разрешим полученное выражение относительно  $\mu$ , и подставим в него

принятое значение  $N$ :

$$\mu = \frac{1}{2m} (3\pi^2 \hbar^3 N)^{2/3} \approx 5 \text{ эВ}. \quad (12.46)$$

Напомним, что энергии 5 эВ соответствует температура около 50 тысяч градусов Кельвина. Таким образом, энергия Ферми во много раз превышает температуры, при которых существуют твердые тела. Наша оценка показывает, что сделанное в начале расчета предположение о том, что  $T \approx 0$ , на самом деле является лишним, так как  $\mu$  всегда много больше  $kT$ . Таким образом, при любых температурах, при которых металлы существуют в твердом виде, электронный газ в металлах сильно вырожден: все нижние состояния зоны проводимости, вплоть до  $\mu$ , заняты, все более высокие — свободны, а между ними находится узкая область шириной порядка  $kT$ , в которой имеются частично занятые состояния. Электроны, занимающие эту область, — и только они — перераспределяются при различных физических процессах.

Из сказанного ясно, что в физике металлов важнейшую роль играют электроны, энергия которых близка к энергии Ферми. Эти электроны располагаются вблизи поверхности Ферми — поверхности  $E = \mu$  в  $\mathbf{k}$ - (или  $\mathbf{p}$ -) пространстве.

Поверхность Ферми сохраняет периодичность по волновому числу (или квазиимпульсу) и состоит из повторяющихся геометрических фигур, которые могут иметь самые разные формы. На рис. 130 изображена поверхность Ферми для меди. Элементы поверхности имеют почти сферическую форму. Намного более сложный вид имеет поверхность Ферми у свинца (рис. 131). Большая или меньшая сложность поверхности Ферми зависит от симметрии кристаллической решетки и от плотности электронов.

Высокая концентрация электронов в зоне проводимости существенно сказывается на большинстве физических свойств металлов. Однако она почти не влияет на теплоемкость металлических кристаллов. При достаточно высоких температурах теплоемкость как диэлектриков, так и металлов неплохо описывается формулой Дюлонга и Пти (11.45), в которой учтены только те степени свободы, которые связаны с движением атомов, и не принимаются во внимание электроны. По классическим представлениям их присутствие должно было бы, грубо говоря, удваивать теплоемкость, чего на самом деле не происходит.

Причина, мешающая электронам проводимости вносить вклад в теплоемкость, заключается в их вырождении. Подавляющая часть электронов никак не реагирует на нагрев или охлаждение кристалла, потому что их движение измениться не может. Повышение температуры

сказывается только на той части электронов, энергия которых близка к энергии Ферми. При повышении температуры эта область «размывается», а при понижении — сужается. Доля этих электронов, грубо говоря, равна отношению «приповерхностного» объема к полному, т. е.

$$\frac{4\pi p_F^2 dp_F}{(4/3)\pi p_F^3} \approx 3 \frac{dp_F}{p_F},$$

где  $dp_F$  — «область размытия» поверхности Ферми. Полагая для оценки  $E = p^2/2m$ ,  $dE_F \approx 2kT$ , найдем

$$\frac{dp_F}{p_F} = \frac{1}{2} \frac{dE_F}{\mu} \approx \frac{kT}{\mu}.$$

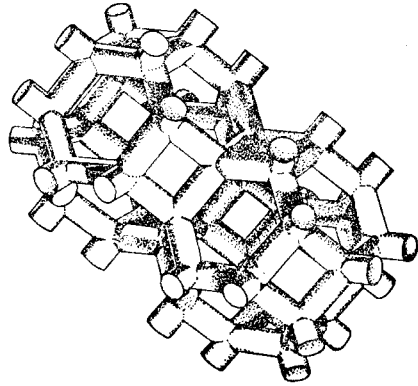
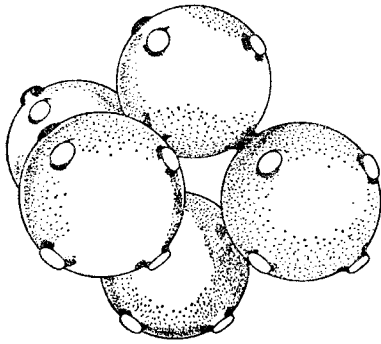


Рис. 130. Поверхность Ферми для меди. Рис. 131. Поверхность Ферми для свинца.

Таким образом, доля электронов, участвующих в тепловом движении по порядку величины равна  $3kT/\mu$ , т. е. при  $T \approx 300$  К составляет менее 1% от полного числа электронов. Именно поэтому при нормальных температурах электроны почти не вносят вклада в теплоемкость.

Ситуация кардинально меняется при низких температурах, когда теплоемкость решетки резко уменьшается. Произведем простые оценки. Теплоемкость, приходящаяся на один «полноправный» электрон, равна  $(3/2)k$ . Доля таких электронов, как мы выяснили, составляет  $\sim 3kT/\mu$ . Концентрация электронов была обозначена через  $N$ . Таким образом, связанная с электронами теплоемкость, грубо говоря,

равна  $c_э \approx \frac{3}{2}kN\frac{3kT}{\mu}$ , а электронная теплоемкость, рассчитанная на 1 моль ( $N = N_A$ ), равна

$$c_{э, \text{ моль}} = \frac{9}{2}k\frac{RT}{\mu}.$$

В литературе обычно приводится более точная формула для молярной теплоемкости электронного газа:

$$c_{э, \text{ моль}} = \frac{\pi^2}{2}k\frac{RT}{\mu}. \quad (12.47)$$

Эта формула совпадает с полученной выше с точностью до незначительного множителя  $\pi^2/9$ . Таким образом, теплоемкость электронного газа в металлах линейно зависит от температуры, в то время как теплоемкость решетки (теплоемкость фононного газа) пропорциональна  $T^3$ . Поэтому при достаточно низких температурах (порядка 1 К) электронная теплоемкость превышает решеточную.

Вернемся к электропроводности металлов. Формула (12.42) была выведена в предположении, что все электроны, находящиеся в зоне проводимости, принимают участие в электропроводности. Не следует ли в эту формулу внести поправочный фактор  $3kT/\mu$ , подобно тому как это делалось при расчете теплоемкости? Покажем, что в этом нет необходимости. На рис. 132 изображены две сферические поверхности Ферми — до и после включения электрического поля. Четкие границы сфер характерны для низких температур. Результат включения поля можно рассматривать двумя способами. Можно считать, что сфера перемещается как целое (наша «старая» точка зрения), а можно говорить, что сфера осталась на месте и только левая заштрихованная лунка заменилась на правую, так что ток переносят только электроны, расположенные в лунках, т. е. вблизи поверхности Ферми («новая» точка зрения). Из рисунка ясно, что обе точки зрения в данном случае приводят к одному и тому же (по крайней мере, качественно) результату, так что формула (12.42) не нуждается в пересмотре.

В заключение скажем несколько слов о роли столкновений в сильно вырожденном газе. Легко видеть, что такие столкновения в большинстве случаев «заканчиваются безрезультатно». Подавляющая часть состояний, в которые мог бы перейти электрон после столкновения, уже

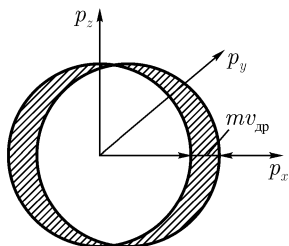


Рис. 132. К электропроводности металлов.

занята, так что электрон может либо перейти в какое-либо из свободных состояний с энергией, большей  $\mu$ , что случается редко, либо остаться в своем первоначальном состоянии. В этом случае говорить о столкновении не имеет смысла.

# ГЛАВА 13

## ПОЛУПРОВОДНИКИ

### § 64. Чистые и примесные полупроводники

Полупроводниками называются кристаллы, которые при нормальных температурах проводят электрический ток, а при низких температурах являются изоляторами. Это означает, что у них при низких температурах самая верхняя из заселенных зон — валентная зона — до конца заполнена, а следующая за ней зона — зона проводимости — не содержит электронов. Между этими зонами расположена запрещенная зона, ширина которой часто называется шириной щели. В отличие от изоляторов, ширина запрещенной зоны у полупроводников невелика. Так при комнатных температурах у германия ширина щели составляет всего 0,67 эВ, а у кремния — 1,11 эВ. Поэтому при нормальных температурах тепловое движение перебрасывает часть электронов из валентной зоны в зону проводимости и в обеих зонах появляется электропроводность<sup>1</sup>.

Кроме германия, кремния и некоторых других элементов, к полупроводникам относится большое число химических соединений. Среди них важную роль играют бинарные соединения, составленные из двух атомов, принадлежащих разным группам периодической системы: GaAs, AlSb, InSb и многие другие.

Четкой границы между полупроводниками и изоляторами нет. Обычно к полупроводникам относят вещества с шириной щели меньше 3 эВ. Энергетическая схема расположения зон в полупроводниках приведена на рис. 133. На этом рисунке изображено положение зон и расположение энергии Ферми<sup>2</sup> у чистых, или, как еще говорят, собственных, полупроводников, т. е. полупроводников, практически не содержащих примесей. Направление вверх соответствует возрастанию потенциальной энергии электрона. Электрический потенциал возрастает в обратном направлении. Как будет пояснено ниже (§ 66), энергия

<sup>1</sup>Большую роль в проводимости играют примеси.

<sup>2</sup>В физике твердого тела энергию Ферми обычно обозначают  $E_F$ , а не  $\mu$ .



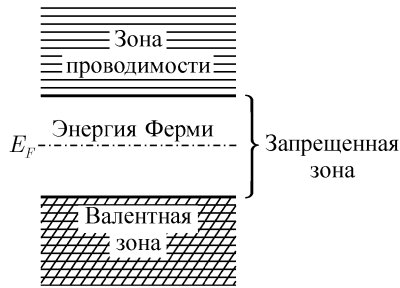


Рис. 133. Схема расположения энергетических зон у чистых полупроводников.

Ферми у собственных полупроводников лежит вблизи середины: запрещенной зоны. Количество электронов в зоне проводимости (и свободных мест в валентной зоне) составляет у собственных полупроводников ничтожную долю  $< 10^{-10}$  от числа атомов. Поэтому даже очень небольшие концентрации примесей, способных увеличивать или уменьшать количество электронов проводимости, существенно влияют на электрические свойства полупроводников. Полупроводниковая техника стала интенсивно развиваться лишь после того, как были найдены методы получения веществ исключительной чистоты.

Оценим энергию связи электронов в полупроводниках. В водородоподобных атомах энергия связи электронов выражается формулой

$$E = Z^2 \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}.$$

В атомах, не принадлежащих к числу водородоподобных, эта формула может быть использована в качестве оценочной. При определении  $Z$  следует учитывать экранировку ядра внутренними электронами электронной оболочки атома. При оценках можно полагать  $Z = 1$ .

Радиус боровской орбиты у водородоподобных атомов определяется выражением

$$a = \frac{\hbar^2}{Zm_e e^2}.$$

При оценках и в этом случае можно полагать  $Z = 1$ .

Для кристаллов вместо массы электрона  $m_e$ , следует подставлять эффективную массу  $m^*$ , которая у полупроводников в несколько или даже во много раз меньше  $m_e$ . Рассчитанный по приведенной форму-

ле радиус орбиты внешних электронов оказывается существенно больше расстояния между атомами. Поэтому свойства среды для внешних электронов усредняются и в формулы должна быть введена электрическая проницаемость  $\varepsilon$ , которая у германия равна 16, а у кремния 12.

С учетом  $\varepsilon$  формулы для оценки энергии и радиуса внешних электронных орбит в кристалле полупроводника приобретают вид

$$E \approx \frac{m^* e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2} = 13,6 \frac{m^*}{m_e} \frac{1}{\varepsilon^2} \text{ эВ}, \quad (13.1)$$

$$r \approx \frac{\varepsilon \hbar^2}{m^* e^2} = 0,5 \cdot 10^{-8} \varepsilon \frac{m_e}{m^*} \text{ см.} \quad (13.2)$$

Мы приходим, таким образом, к очень большому — по сравнению с атомными — расстояниям между внешними электронами и «своими» ионами и к очень малым энергиям связи. Обе эти причины приводят к тому, что внешние электроны в полупроводниках обобществляются<sup>1</sup>.

Кристаллы германия и кремния связаны ковалентными силами и имеют структуру алмаза (рис. 106). Для управления электрическими свойствами этих полупроводников в них вводят атомы донорных и акцепторных примесей. Донорными являются атомы V группы таблицы Менделеева (P, As, Sb), имеющие 5 валентных электронов. Замещая в решетке четырехвалентные атомы германия или кремния, донорные атомы легко отщепляют от себя пятые электроны. Этим электронам не находится места в валентной зоне, и при нормальных температурах они населяют зону проводимости. Атомы элементов III группы (акцепторные атомы) отщепляют от себя три электрона вместо четырех. В валентной зоне остаются пустые места (дырки, см. § 65).

При введении примесных атомов распределение электронов по энергии меняется (рис. 134). В области запрещенной зоны появляются так называемые л о к а л ь н ы е у р о в н и. Донорные локальные уровни располагаются вблизи дна зоны проводимости: чтобы отнять лишний электрон у донорного атома, требуется очень мало энергии, обычно несколько сотых долей электронвольта. Акцепторные уровни находятся вблизи верхнего края валентной зоны. Чтобы освободить место в валентной зоне, переведя электрон на акцепторный уровень, нужна энергия, в десятки раз меньшая, чем для переброса в зону проводимости. На рис. 134 изображено также положение энергии Ферми в примесных полупроводниках. Соответствующие пояснения приводятся в § 66.

<sup>1</sup>Особенно легко ионизируются атомы примесей.

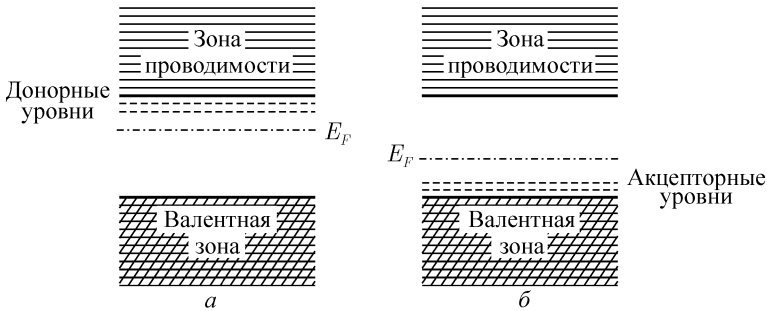


Рис. 134. Зонная диаграмма примесных полупроводников: *а* — с донорными примесями; *б* — с акцепторными примесями.

При очень низких температурах примесные атомы ведут себя как основные: они отдают в валентную зону столько же электронов, сколько вносят в нее свободных мест. Заполнение зон остается таким же, как у собственных полупроводников. Однако уже при очень небольшом повышении температуры — до нескольких десятков градусов Кельвина — донорные атомы отдают электроны в зону проводимости, а акцепторные — забирают электроны из валентной зоны.

## § 65. Электроны и дырки

Как уже отмечалось, в зоне проводимости полупроводниковых кристаллов имеется мало электронов. Они расположены вблизи дна зоны, где кривая зависимости потенциальной энергии от импульса с хорошей точностью может быть заменена параболой. Мы уже выяснили (§ 62), что в этих условиях электроны ведут себя как обычные «ньютоновские» частицы с некоторой эффективной массой.

Обратимся к движению электронов в почти заполненной валентной зоне. Пусть для простоты в зоне не хватает всего одного электрона, т. е., как принято говорить, в ней имеется одна дырка. Будем отсчитывать суммарную энергию и импульс всех находящихся в валентной зоне электронов от значения, достигаемого при полном их комплексе. (При расчете импульса это условие не вносит в расчет никаких изменений, так как суммарный импульс электронов в заполненной зоне равен нулю.) Найденные таким образом значения суммарной энергии и импульса всех электронов в зоне будем приписывать новой частице или, лучше сказать, квазичастице — дырке. Величи-

ны, относящиеся к дырке, мы будем обозначать подстрочным индексом  $p$ .

Пусть из валентной зоны удален электрон, обладающий импульсом  $\mathbf{p}_1$  и энергией  $E_1$ . Тогда

$$\mathbf{p}_p = \sum_{i \neq 1} \mathbf{p}_i - \sum_i \mathbf{p}_i = -\mathbf{p}_1, \quad (13.3)$$

$$E_p = \sum_{i \neq 1} E_i - \sum_i E_i = -E_1. \quad (13.4)$$

Энергия и импульс дырки равны и противоположны по знаку энергии и импульсу недостающего электрона.

Рассматривая движение электронов в кристалле, мы практически должны считаться только с электрическими и магнитными полями, поскольку силы тяжести исчезающе малы по сравнению с ними. Противоположные значения энергии и импульса в электрических и магнитных полях приобретают частицы, обладающие обратным по сравнению с электроном электрическим зарядом. Следовательно, дырке следует приписывать положительный электрический заряд, равный заряду электрона. После всего сказанного правила обращения с дырками становятся тривиальными: дырка ведет себя, как обычная частица с положительным зарядом и некоторой эффективной массой, которую мы вскоре найдем.

В электрическом поле потенциальная энергия электронов возрастает при уменьшении, а энергия дырок — при увеличении электрического потенциала. Поэтому эти энергии отсчитываются в разные стороны. Легче всего образовать дырку, перебросив в зону проводимости электрон, находящийся у потолка валентной зоны: для такого переброса нужна наименьшая энергия. Чем ближе к дну валентной зоны расположена дырка, тем больше энергии нужно для ее образования. Значит, энергия дырки возрастает при ее перемещении от потолка ко дну валентной зоны, т. е. в направлении обратном направлению роста энергии для электронов.

Определим, какую эффективную массу следует приписать дырке. Для этого рассчитаем величину электрического тока, связанного с движением дырки:

$$\mathbf{j}_p = \sum_{i \neq 1} (-e\mathbf{v}_i) = -e \left( \sum_i \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_1 \right) = e\mathbf{v}_1. \quad (13.5)$$

При написании этой цепочки равенств мы снова предполагали, что в зоне не хватает одного электрона — электрона, движущегося со скоростью  $v_1$ . Буквой  $e$  обозначена абсолютная величина заряда электрона, его заряд равен  $-e$ .

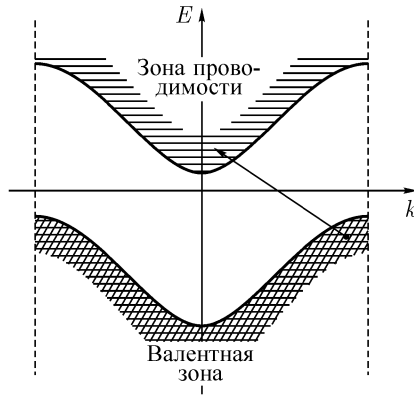


Рис. 135. Образование дырки при переходе электрона из валентной зоны в зону проводимости. Пунктиром обозначены границы зоны Бриллюэна.

Как мы уже знаем, дырке следует приписывать заряд  $+e$ . Из (13.5) следует, что в электрическом поле дырка приобретает ту же скорость  $v_1$ , что и недостающий электрон. Проанализируем полученный результат. При удалении электронов из валентной зоны первыми освобождаются высоко расположенные уровни. Эти уровни находятся вблизи границы зоны Бриллюэна (рис. 135), где кривая потенциальной энергии электрона имеет форму «перевернутой параболы», ветви которой уходят вниз. Движение электронов в этой области происходит так, как если бы их масса была отрицательной. Электрон, обладающий отрицательным зарядом и отрицательной эффективной массой, движется по направлению электрического поля, т. е.  $v_1$  направлено по  $\mathbf{E}$ . Значит, и дырка движется по направлению поля, так что ей следует приписать положительную эффективную массу, равную по модулю отрицательной эффективной массе недостающего (!) электрона.

Полученный результат заключается, таким образом, в том, что движение ансамбля электронов, почти заполняющих зону, можно представить как движение квазичастиц — дырок, несущих заряд  $+e$  и имеющих положительную эффективную массу.

При переходе от рассмотрения совместного движения огромного

числа электронов в почти заполненной зоне к исследованию движения немногочисленных дырок возникает, конечно, колоссальное упрощение — как качественное, так и количественное.

В полупроводниках электрический ток переносят электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне. И те и другие принято называть носителями электрического тока или просто носителями. Величины, связанные с электронами, снабжают индексом  $n$  (от английского слова negative — отрицательный); величины, связанные с дырками, снабжают индексом  $p$  (от английского слова positive — положительный). Эти индексы применяют и в названиях примесных полупроводников: полупроводники с электронной проводимостью относятся к  $n$ -типу, а полупроводники с дырочной проводимостью — к  $p$ -типу<sup>1</sup>.

Имея в виду, что электрический ток создается как электронами, так и дырками, нетрудно понять, почему при изучении эффекта Холла в полупроводниках и в металлах измеряемая экспериментально разность потенциалов может иметь как «правильный» (соответствующий движению свободных электронов в электрических и магнитных полях), так и обратный знак. Обратный знак эффекта Холла (наблюдаемый, например, в цинке и кадмии) долгое время представлял большие трудности для теории. Мы видим теперь, что его появление вполне естественно. В настоящее время эффект Холла широко применяется для изучения концентрации и динамических свойств носителей электрического тока — электронов и дырок. Знак эффекта позволяет определить, какие из носителей являются основными.

## § 66. Концентрация электронов и дырок. Энергия Ферми

Электроны и дырки в полупроводниках в большинстве случаев ведут себя как обычные классические частицы. Их концентрации в соответствующих зонах невелики, так что нет необходимости учитывать ограничения, налагаемые принципом Паули. Динамические свойства электронов и дырок описываются постоянными положительными массами. Наконец, ширина запрещенной зоны  $\Delta$  настолько превосходит тепловую энергию (1 эВ по сравнению 0,025 эВ), что в распределении Ферми  $\{\exp[(E - \mu)/kT] + 1\}^{-1}$  можно пренебречь единицей по сравнению с экспонентой, после чего это распределение переходит в обычное распределение Больцмана. В результате этого возникают огромные

<sup>1</sup>Величины, связанные с дырками, нередко отмечают индексом  $h$ , а не  $p$ . Это обозначение взято от слова hole — дырка.

упрощения, позволяющие решать большинство задач с помощью обычных методов и формул кинетической теории.

Начнем с вычисления концентрации электронов в зоне проводимости. Принятые ниже обозначения пояснены на рис. 136. Пренебрегая единицей в знаменателе формулы Ферми, имеем

$$N_n = 2 \int \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} e^{-(\xi+E_n)/kT} = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \int 4\pi p_n^2 dp_n e^{-(\xi+E_n)/kT}.$$

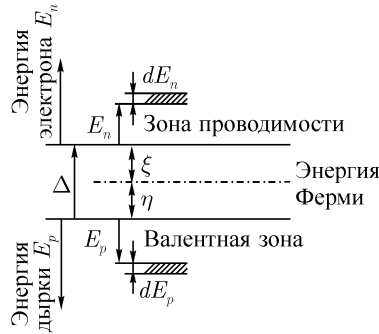


Рис. 136. К расчету плотности электронов и дырок в полупроводнике.

Переходя от импульса к энергии с помощью формулы

$$p_n = \sqrt{2m_n^* E_n}$$

и от числа электронов  $N_n$  к их концентрации  $n_n = N_n/V$ , найдем

$$n_n = \frac{(2m_n^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} e^{-\xi/kT} \int_0^\infty E_n^{1/2} e^{-E_n/kT} dE_n. \quad (13.6)$$

Интегрирование в (13.6), строго говоря, следует производить от дна до потолка зоны проводимости. Однако при увеличении  $E_n$  экспоненциальный множитель в подынтегральном выражении настолько уменьшается, что верхний предел можно заменить бесконечностью, что и было сделано в (13.6).

Произведя интегрирование, найдем

$$n_n = Q_n e^{-\xi/kT}, \quad (13.7)$$

$$Q_n = \frac{2}{\hbar^3} \left( \frac{m_n^* kT}{2\pi} \right)^{3/2} = 2,5 \cdot 10^{19} \left( \frac{m_n^*}{m_e} \right)^{3/2} \left( \frac{T}{293} \right)^{3/2} \text{ см}^{-3}. \quad (13.8)$$

Множитель  $Q_n$  в (13.7) играет роль эффективного числа уровней в зоне проводимости. Правая часть равенства (13.8) приведена в виде, удобном для численных оценок. Температура 293 К соответствует комнатной. Формула (13.8) показывает, что эффективная плотность уровней у полупроводников существенно меньше плотности ионов в решетке, тогда как у металлов эти плотности близки друг к другу. Причина различия заключается в том, что у полупроводников существенны только электронные уровни, расположенные в области дна зоны проводимости, где мал фазовый объем  $4\pi p^2 dp$ .

Рассуждая аналогичным образом (смысл величины  $\eta$  ясен из рис. 136), найдем

$$n_p = Q_p e^{-\eta/kT}, \quad (13.9)$$

$$Q_p = 2,5 \cdot 10^{19} \left( \frac{m_p^*}{m_e} \right)^{3/2} \left( \frac{T}{293} \right)^{3/2} \text{ см}^{-3}. \quad (13.10)$$

В выражения для  $Q_n$  и  $Q_p$  входят эффективные массы электронов и дырок. У германия и кремния значения масс зависят от направления движения электронов относительно осей кристалла (см. (12.35'')). Наибольшие значения эффективных масс (продольные массы) составляют для электронов  $1,6m_e$  в германии и  $0,98m_e$  в кремнии. Массы дырок соответственно равны  $0,34m_e$ , и  $0,52m_e$ . Минимальные значения масс (поперечные массы) существенно меньше. Они составляют для электронов  $0,08m_e$  у германия и  $0,2m_e$  у кремния. Соответствующие массы для дырок равны  $0,04$  и  $0,16$  масс электрона<sup>1</sup>.

Остановимся сначала на собственных полупроводниках. У таких полупроводников концентрации электронов и дырок равны друг другу. Приравнивая правые части (13.7) и (13.9), найдем

$$\eta - \xi = kT \ln \frac{Q_p}{Q_n} = \frac{3}{2} kT \ln \frac{m_p^*}{m_n^*}. \quad (13.11)$$

Естественным масштабом для величины  $\eta - \xi$  является ширина щели (запрещенной зоны)  $\Delta$ . Как мы видели,  $kT \ll \Delta$ . Приведенные массы

<sup>1</sup>На самом деле существует два типа дырок — легкие и тяжелые.



электронов и дырок близки друг к другу, так что  $\ln(m_p^*/m_n^*)$  обычно не превышает единицы. Поэтому с хорошей точностью можно считать

$$\eta = \xi. \quad (13.12)$$

Уровень Ферми в собственных полупроводниках лежит вблизи середины запрещенной зоны (практически совпадает с ней).

В полупроводниках  $n$ -типа концентрация электронов существенно превышает концентрацию дырок, а в полупроводниках  $p$ -типа преобладает концентрация дырок. Уровень Ферми в полупроводниках  $n$ -типа смещен от середины запрещенной зоны вверх (к зоне проводимости), а в полупроводниках  $p$ -типа — вниз, к валентной зоне.

Перемножим формулы (13.7) и (13.9):

$$n_n n_p = Q_n Q_p e^{-\Delta/kT}. \quad (13.13)$$

При написании (13.13) сумма  $\xi + \eta$  была заменена шириной щели  $\Delta$ . Эта формула показывает, что произведение концентраций электронов и дырок не зависит от положения уровня Ферми, т. е. от количества примесей в полупроводнике. При внесении в полупроводник донорных атомов концентрация электронов увеличивается, а, следовательно, концентрация дырок уменьшается, а при увеличении числа акцепторных атомов концентрация дырок увеличивается за счет уменьшения концентрации электронов.

Из (13.12) следует, что в собственном полупроводнике концентрации электронов и дырок равны друг другу. Обозначая эти концентрации  $n_i$ , найдем

$$n_i = n_n = n_p = \sqrt{Q_n Q_p} e^{-\Delta/2kT}, \quad (13.14)$$

и формула (13.13) может быть записана в более простом виде

$$n_n n_p = n_i^2. \quad (13.15)$$

Обратим внимание на показатель экспоненты в (13.14). Он равен  $-\Delta/2kT$ , а не  $-\Delta/kT$ , как могло бы на первый взгляд показаться. Эта особенность формулы связана с распределением энергии перехода между электроном и дыркой. Половина энергии перехода приходится на долю электрона, а половина — на долю дырки.

## § 67. Электропроводность полупроводников

Электропроводность полупроводников, как и любых других тел, определяется концентрацией носителей тока и их подвижностью. При переходе к полупроводникам формула (12.42) приобретает следующий вид:

$$\sigma = e^2 \left( \frac{n_n \tau_n}{m_n^*} + \frac{n_p \tau_p}{m_p^*} \right) = n_n |e u_n| + n_p |e u_p|. \quad (13.16)$$

В собственных полупроводниках электроны и дырки вносят сравнимый вклад в электропроводность. В полупроводниках  $n$ -типа основной вклад вносят электроны, а в полупроводниках  $p$ -типа — дырки. В соответствии с величиной вклада в электропроводность электроны в полупроводниках  $n$ -типа и дырки в полупроводниках  $p$ -типа называются основными носителями в отличие от неосновных носителей, вносящих в электропроводность меньший вклад.

Рассмотрим зависимость электропроводности от температуры. При изменении температуры электропроводность меняется из-за изменения как концентрации носителей, так и времени релаксации. В металлах основную роль играет уменьшение времени релаксации с ростом температуры (с увеличением числа фононов, на которых, как мы знаем, рассеиваются электроны). В собственных полупроводниках этот эффект также присутствует, но перекрывается быстрым увеличением концентрации носителей, которая экспоненциально возрастает с увеличением  $T$ . Поэтому с ростом температуры электропроводность чистых полупроводников резко увеличивается.

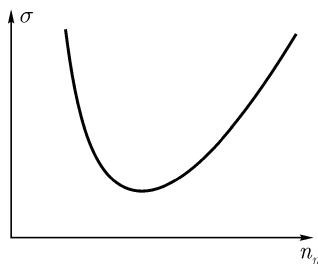


Рис. 137. Зависимость удельной проводимости примесного полупроводника от концентрации электронов.

Сложнее зависит от температуры концентрация носителей в примесных полупроводниках. Кривая зависимости концентрации от темпе-

ратуры состоит у них из двух участков. Увеличение концентрации в области низких температур связано с опустошением донорных уровней (или с заполнением акцепторных). Этот процесс в большинстве примесных полупроводников заканчивается при температурах несколько десятков градусов Кельвина, т. е. задолго до комнатных температур. Быстрое опустошение донорных уровней (и заполнение акцепторных) связано не только со сравнительно малой энергией, необходимой для перехода, но и с тем обстоятельством, что эффективная плотность уровней в зоне проводимости и в валентной зоне на несколько порядков величины превосходит плотность примесных атомов. После того как опустошение донорных и заполнение акцепторных уровней заканчивается, дальнейшее увеличение температуры приводит к росту собственной проводимости, происходящему из-за теплового переброса электронов из валентной зоны в зону проводимости (второй участок кривой). Этот процесс происходит в примесных полупроводниках так же, как и в чистых, и определяется множителем  $\exp(-\Delta/2kT)$ .

Исследуем, как зависит электропроводность полупроводника от концентрации примесей. Для этого продифференцируем (13.16) по  $n_n$ . При дифференцировании  $n_p$  следует заменить через  $n_n$  с помощью (13.15). Вычисление дает

$$\frac{d\sigma}{dn_n} = e^2 \left( \frac{\tau_n}{m_n^*} - \frac{n_i^2}{n_n^2} \frac{\tau_p}{m_p^*} \right), \quad \frac{d^2\sigma}{dn_n^2} = 2e^2 \frac{n_i^2 \tau_p}{n_n^3 m_p^*}. \quad (13.17)$$

Вторая из полученных формул показывает, что кривизна кривой  $\sigma = \sigma(n_n)$  является существенно положительной величиной, так что зависимость  $\sigma = \sigma(n_n)$  имеет один минимум, подобно тому, как это изображено на рис. 137. Положение минимума можно найти, приравнявая нулю производную  $d\sigma/dn_n$ , определенную выражением (13.17):

$$\frac{\tau_n}{m_n^*} - \frac{n_i^2 \tau_p}{n_n^2 m_p^*} = 0.$$

Заменяя в этом соотношении  $n_i^2/n_n$  через  $n_p$ , найдем

$$\frac{n_n}{n_p} = \frac{\tau_n m_p^*}{\tau_p m_n^*}. \quad (13.18)$$

Сравнивая выражение, стоящее в правой части полученной формулы, с соотношением (12.41), найдем, что оно равно отношению подвижностей электронов и дырок и обычно отличается от единицы не более

чем в несколько раз, так что в минимуме электропроводности  $n_n \approx n_p$ . В то же время в примесных полупроводниках, представляющих практический интерес,  $n_n$  и  $n_p$  отличаются на много порядков. Таким образом, минимум электропроводности соответствует чистым или почти чистым полупроводникам.

## § 68. $n - p$ -переход

Приведем в соприкосновение два полупроводника, один из которых относится к  $n$ -, а другой — к  $p$ -типу. Область их контакта носит название  $n - p$ -перехода. Зона проводимости полупроводника  $n$ -типа богата электронами, а зона проводимости полупроводника  $p$ -типа ими бедна. Вследствие этого происходит утечка электронов из  $n$ -полупроводника. Аналогичным образом в валентной зоне наблюдается утечка дырок из полупроводника  $p$ -типа. Эти процессы приводят к тому, что между соприкасающимися образцами появляется разность потенциалов, которая сначала замедляет, а потом и прекращает дальнейший переток зарядов — наступает состояние подвижного равновесия. Образующаяся при этом разность потенциалов носит название контактной. Следует отметить, что перераспределение электронов и дырок между полупроводниками  $n$  и  $p$ -типов, вызывающее появление контактной разности потенциалов, столь незначительно, что не меняет или почти не меняет в них плотности электронов и дырок.



Рис. 138. Положение зон и энергий Ферми в полупроводниках  $n$ - и  $p$ -типа (до соприкосновения).

На рис. 138 изображено положение зон и энергий Ферми в полупроводниках  $n$ - и  $p$ -типа, изготовленных из одного и того же материала

(например, Ge или Si) и отличающихся только количеством донорных или акцепторных примесей. Расстояние между зонами проводимости и валентными зонами, а также эффективное количество уровней в этих зонах, определяется зонной структурой основного материала; от количества и типа примесей оно не зависит.

Покажем, что равновесие наступает в том случае, когда энергии Ферми слева и справа от  $n - p$ -перехода устанавливаются на одном уровне (рис. 139). Концентрации электронов в зоне проводимости слева и справа от  $n - p$ -перехода согласно (13.7) равны

$$n_{n,n} = Q_n \exp(-\xi_n/kT), \quad (13.19)$$

$$n_{n,p} = Q_n \exp(-\xi_p/kT). \quad (13.20)$$

Здесь  $n_{n,n}$  — концентрация электронов (первый индекс  $n$ ) в образце  $n$ -типа (второй индекс  $n$ );  $n_{n,p}$  — концентрация электронов в образце  $p$ -типа. Энергии  $\xi_n$  и  $\xi_p$  обозначены на рисунке.

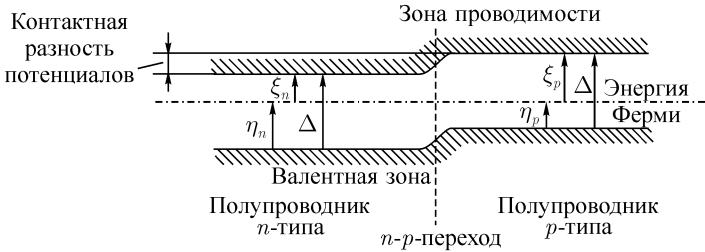


Рис. 139. Взаимное положение зон в полупроводниках  $n$ - и  $p$ -типа после установления равновесия.

Электроны, подходящие к  $n - p$ -переходу справа, со стороны полупроводника  $p$ -типа, пересекают его беспрепятственно, так как электрическое поле способствует их движению. То же самое справедливо для дырок, подходящих к  $n - p$ -переходу слева. Таким образом,  $n - p$ -переход беспрепятственно преодолевают основные носители тока. Количество электронов, подходящих к границе раздела справа, при максвелловском распределении по скоростям равно  $n_{n,n} \langle v \rangle / 4$ , где  $\langle v \rangle$  — средняя скорость электронов. Заменив его значением (13.20), найдем, что число электронов, пересекающих границу раздела образцов справа налево, равно

$$\frac{n_{n,p} \langle v \rangle}{4} = \frac{\langle v \rangle}{4} Q_n e^{-\xi_p/kT}.$$

Рассмотрим теперь переходы основных носителей тока. Начнем с электронов. Они являются основными носителями в полупроводнике  $n$ -типа. Число электронов, подходящих к области перехода, равно  $n_{n,n} \langle v \rangle / 4$ . Не все они пройдут через барьер, созданный контактной разностью потенциалов. По Больцману, доля электронов, энергия которых превосходит контактную разность потенциалов, составляет  $\exp[(\xi_n - \xi_p)/kT]$ . Таким образом, число электронов, переходящих из  $n$ -полупроводника в  $p$ -полупроводник, равно

$$\frac{n_{n,n} \langle v \rangle}{4} e^{-(\xi_p - \xi_n)/kT} = \frac{\langle v \rangle}{4} Q_n e^{-\xi_n/kT} e^{-(\xi_p - \xi_n)/kT}.$$

Это число равно предыдущему. Те же рассуждения можно повторить для дырок. Таким образом, при одинаковом положении энергии Ферми в  $n$ - и  $p$ -образцах, действительно, обеспечивается динамическое равновесие.

Как видно из рис. 139, в области  $n-p$ -перехода энергия Ферми лежит вблизи середины запрещенной зоны. Такая ситуация характерна и для собственных полупроводников, которые, как мы знаем, обладают существенно меньшей электропроводностью, чем примесные. Таким образом, подавляющая часть электрического сопротивления сосредоточена в области  $n-p$ -перехода.

Здесь следует отметить, что на самом деле  $n-p$ -переход хорошего качества нельзя получить, просто приводя в соприкосновение полупроводники разных типов. Один из способов получения кристалла с  $n-p$ -переходом заключается в изменении концентрации и типа примесей, добавляемых в расплав в процессе роста монокристалла<sup>1</sup>.

Вернемся к контактной разности потенциалов. Как уже было выяснено выше, контактная разность потенциалов возникает из-за перераспределения зарядов между  $n$ - и  $p$ -участками полупроводника. Для ее создания необходим пространственный заряд, образующий двойной электрический слой (см. ниже текст, набранный петитом). Распределение зарядов в слое схематически изображено на рис. 140. Ширина этого слоя очень невелика — она по порядку величины составляет  $10^{-5}$  см.

Рассчитаем распределение объемного электрического заряда в области  $n-p$ -перехода. Исследуем сначала область, расположенную со стороны полупроводника  $n$ -типа. В этой области, как мы знаем, концентрация электронов существенно превосходит концентрацию дырок. Поэтому при расчете объемного заряда вкладом дырок можно пренебречь.

Согласно уравнениям Максвелла дивергенция вектора  $\mathbf{D}$  связана с плотностью электрических зарядов  $\rho$  формулой

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi\rho. \quad (13.21)$$

<sup>1</sup>Существуют также диффузионный и другие способы получения  $n-p$ -переходов.

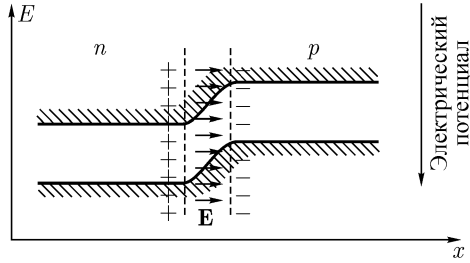


Рис. 140. Двойной электрический слой в области  $n - p$ -перехода.

Плотность заряда  $\rho$  в нашем случае равна

$$\rho = -e(n_n - n_{\text{ион}}), \quad (13.22)$$

где  $n_{\text{ион}}$  — концентрация ионов в решетке, умноженная на среднее зарядовое число одного иона. Заменяя  $\mathbf{D}$  через  $\varepsilon E$ , подставляя  $d/dx$  вместо дивергенции (мы исследуем одномерную задачу) и переходя от напряженности поля  $E$  к электрическому потенциалу  $\varphi$ , найдем

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{4\pi e}{\varepsilon}(n_n - n_{\text{ион}}). \quad (13.23)$$

Плотность электронов в полупроводнике связана с электрическим потенциалом формулой Больцмана

$$n_n = n_{n,n} e^{e\varphi/kT}, \quad (13.34)$$

где  $n_{n,n}$  — плотность электронов вдали от  $n - p$ -перехода. Плотность ионов  $n_{\text{ион}}$  от потенциала не зависит, поскольку они закреплены в решетке. Заметим, наконец, что полупроводник вдали от области  $n - p$ -перехода не заряжен, так что

$$n_{n,n} = n_{\text{ион}}. \quad (13.25)$$

Подставляя (13.24) и (13.25) в (13.23), найдем

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{4\pi e}{\varepsilon} n_{n,n} (e^{e\varphi/kT} - 1). \quad (13.26)$$

Мы пришли, таким образом, к нелинейному дифференциальному уравнению, которое аналитического решения не имеет. Приближенное решение можно найти, разложив экспоненту в ряд и ограничиваясь первым членом разложения:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{4\pi e^2 n_{n,n}}{\varepsilon kT} \varphi. \quad (13.27)$$

Убывающее в направлении  $n - p$ -перехода решение имеет вид

$$\varphi = \varphi_1 e^{-x/r_D}, \quad (13.28)$$

где

$$r_D = \sqrt{\frac{\epsilon k T}{4\pi e^2 n_{n,n}}}. \quad (13.29)$$

Характерная длина убывания потенциала (и объемного заряда)  $r_D$  носит название дебаевского радиуса экранирования. Оценку величину дебаевского радиуса:

$$r_D = \sqrt{\frac{\epsilon k T}{4\pi e^2 n_{n,n}}} = \sqrt{\frac{15 \cdot (1,4 \cdot 10^{-16}) \cdot 300}{4\pi \cdot (4,8 \cdot 10^{-10})^2 \cdot 10^{15}}} \approx 10^{-5} \text{ см.}$$

Распределение объемного заряда дырок со стороны полупроводника  $p$ -типа находится аналогичным образом. Оно выражается через  $n_{p,p}$ -плотность дырок в полупроводнике  $p$ -типа. Объемные заряды дырок и электронов образуют упоминавшийся выше двойной слой, вызывающий скачок потенциала на  $p - n$ -переходе. Его ширина, грубо говоря, равна двум дебаевским радиусам, т.е. около  $10^{-5}$  см.

## § 69. Прохождение тока через $n - p$ -переход

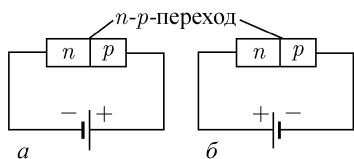


Рис. 141. Включение полупроводника с  $n - p$ -переходом в цепь постоянного тока:  $a$  — включение «прямого» напряжения;  $b$  — включение «обратного» напряжения.

череская схема изображена на рис. 141.

Исследуем вольт-амперную характеристику полупроводникового диода. Установим прежде всего, как расположены валентные зоны и зоны проводимости в присутствии внешней ЭДС.

Мы уже отмечали, что электрическое сопротивление составного полупроводника сосредоточено в основном в области  $n - p$ -перехода. На эту

Как мы уже выяснили, при «соприкосновении» полупроводников  $n$ - и  $p$ -типа происходит перераспределение зарядов, приводящее к возникновению контактной разности потенциалов, после установления которой ток в полупроводнике прекращается. Положение меняется, если приложить к концам полупроводника внешнюю разность потенциалов. Включенный таким образом полупроводник называется полупроводниковым диодом. Соответствующая электри-



область приходится почти все падение напряжения, создаваемое внешним источником. На рис. 142 *а* изображено положение энергии Ферми и границ зон до подключения внешнего источника, а на рис. 142 *б, в* — после его подключения. (Еще раз обращаем внимание читателей на то, что на диаграммах энергетических зон потенциальная энергия электронов возрастает снизу вверх, а электрический потенциал направлен вниз.) Будем считать, что приложенная ЭДС меньше ширины энергетической щели полупроводника.

Найдем ток, создаваемый электронами, пересекающими  $n - p$ -переход. Для электронов, подходящих к переходу справа (неосновные носители), от включения внешней ЭДС ничего не меняется. Все электроны, доходящие до перехода, беспрепятственно его пересекают. Обозначим их ток через  $I_{n,p}$ . Обратимся теперь к основным носителям — к электронам, подходящим слева. Потенциальный барьер для них изменился (уменьшился или увеличился). Если раньше его величина была равна  $\xi_p - \xi_n$  (рис. 139), то теперь она изменяется до  $\xi_p - \xi_n - V$  так что идущий слева направо диффузионный ток изменяется в  $\exp(eV/kT)$  раз<sup>1</sup>. При отсутствии внешней ЭДС электронный ток, проходящий слева направо, был равен току, идущему справа налево, т.е.  $I_{n,p}$ . Таким образом, слева направо проходит теперь ток  $I_{n,p} \exp(eV/kT)$ . Суммарный электронный ток, проходящий через переход, равен, следовательно,

$$I_n = I_{n,p}(e^{eV/kT} - 1). \quad (13.30)$$

Аналогичное соотношение справедливо для тока дырок:

$$I_p = I_{p,n}(e^{eV/kT} - 1). \quad (13.31)$$

Складывая эти формулы и вводя обозначение  $I_0 = I_{n,p} + I_{p,n}$ , найдем

$$I = I_0(e^{eV/kT} - 1). \quad (13.32)$$

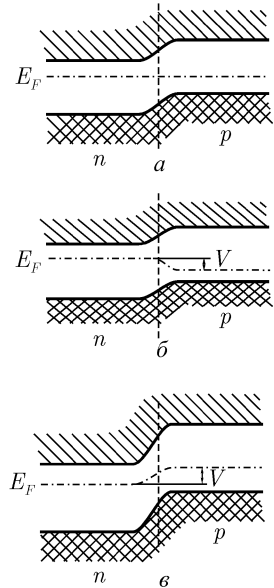


Рис. 142. Положение зон в области  $n - p$ -перехода при наложении внешней ЭДС.

<sup>1</sup>Величина  $V$  положительна при прямом (положительном) включении напряжения (рис. 141 *а* и 142 *б*) и отрицательна при обратном (отрицательном) включении (рис. 141 *б* и 142 *в*).

Эта формула определяет вольт-амперную характеристику  $n-p$ -перехода. Она изображена на рис. 143. Обсудим ее особенности.

При положительных внешних напряжениях (рис. 142 б) показатель экспоненты положителен и ток, проходящий через диод, быстро (экспоненциально) возрастает. В этом случае облегчаются условия прохождения через  $n-p$ -переход для основных носителей тока: для электронов из  $n$ -полупроводника и для дырок из  $p$ -полупроводника.

При изменении знака ЭДС положение меняется (рис. 142 в). Переходы основных носителей затрудняются. При увеличении отрицательного смещения экспоненциальный член перестает вносить вклад в ток  $I$  и он стремится к пределу  $-I_0$  (к т о к у н а с ы щ е н и я), соответствующему случаю, когда весь ток сводится к току неосновных носителей  $I_s$ . Поскольку концентрация неосновных носителей экспоненциально зависит от  $T^{-1}$ , обратный ток и ток насыщения быстро увеличиваются при нагревании полупроводника.

Из формулы (13.32) и рис. 143 видно, что полупроводниковый диод обладает резко нелинейной (неомической) вольт-амперной характеристикой. Ток насыщения полупроводниковых диодов составляет несколько миллиампер на квадратный сантиметр, допустимый прямой ток на четыре порядка больше. Обратное напряжение, которое выдерживает диод, довольно велико — 100 В и более. При превышении допустимого напряжения наступает пробой и диод выходит из строя.

Интересно проследить судьбу прошедших через  $n-p$ -переход электронов, попадающих в полупроводник  $p$ -типа, и дырок в полупроводнике  $n$ -типа. Внешнее напряжение производит и н ж е к ц и ю неосновных носителей в соответствующие участки полупроводника — электронов в  $p$ -полупроводник и дырок в полупроводник  $n$ -типа. Инжектированные — неравновесные — носители, конечно, рекомбинируют с основными носителями.

Инжектированные в полупроводник неосновные носители диффундируют в нем, постепенно рекомбинируя. На начальном участке полупроводника их концентрация оказывается повышенной. Длина этого участка по порядку величины равна д л и н е д и ф ф у з и и, т. е. длине, на которую (в среднем) проникают диффундирующие частицы, число которых постепенно уменьшается из-за рекомбинации. Из кинетической теории газов известно, что длина диффузии определяется формулой

$$L_g = \sqrt{D\tau}, \quad (13.33)$$

где  $D$  — коэффициент диффузии, а  $\tau$  — среднее время жизни частиц. В германии при комнатных температурах  $D \sim 50 \text{ см}^2/\text{с}$ , а время жизни для рекомбинации при обычных концентрациях примесей составляет

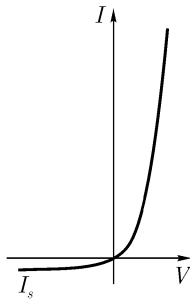


Рис. 143. Вольт-амперная характеристика полупроводникового диода.

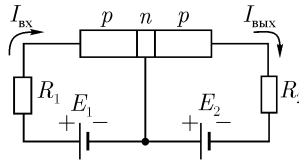


Рис. 144. Схема включения  $p - n - p$ -транзистора.

примерно  $10^{-4}$  с. Длина диффузии при этом равна

$$L_g \approx \sqrt{D\tau} = \sqrt{50 \cdot 10^{-4}} = 0,7 \text{ мм.}$$

Эта длина отнюдь не мала и должна приниматься во внимание при изготовлении транзисторов (см. следующий параграф).

## § 70. Транзисторы

Транзисторами называются полупроводниковые устройства, содержащие два или более  $n - p$ -переходов. На рис. 144 изображена схема устройства и включения  $p - n - p$ -транзистора по схеме с общей базой. Такой транзистор представляет собой полупроводник  $p$ -типа с узкой вставкой полупроводника  $n$ -типа. К левой части схемы приложено прямое, а к правой — обратное напряжение. Левая часть транзистора носит название источника, или эмиттера, средняя — базы, а правая — коллектора. При включении батареи  $E_1$  через  $p - n$ -переход эмиттер — база начинает течь ток. Инжектированные в базу дырки резко увеличивают в ней количество неосновных носителей. Для них правый  $n - p$ -переход является ускоряющим, так что они беспрепятственно сквозь него проходят. Таким образом, ток, проходящий через левую часть транзистора (по цепи эмиттер — база), управляет током, проходящим через его правую часть (по цепи база — коллектор). В хороших транзисторах большая часть тока, протекающего через эмиттер, доходит до коллектора.

Произведем простой расчет. Управляющий ток  $I_{\text{вх}}$  создает на входном сопротивлении  $R_1$  падение напряжения

$$V_{\text{вх}} = I_{\text{вх}} R_1. \quad (13.34)$$

Выходящий ток  $I_{\text{вых}}$  вызывает на сопротивлении  $R_2$  появление выходного напряжения

$$V_{\text{вых}} = I_{\text{вых}} R_2. \quad (13.35)$$

Отношение выходного ко входному напряжению при  $I_{\text{вых}} = I_{\text{вх}}$  равно

$$\frac{I_{\text{вых}}}{I_{\text{вх}}} = \frac{R_2}{R_1}. \quad (13.36)$$

В транзисторных усилительных каскадах выбирают  $R_2 \gg R_1$ .

Транзисторный усилительный каскад во многом напоминает ламповый. Небольшой входной ток  $I_{\text{вх}}$  управляет большим выходным током  $I_{\text{вых}}$ . Источником мощности служит внешняя батарея  $E_2$ , обладающая сравнительно большой ЭДС. Эта батарея создает на переходе коллектор — база обратное напряжение, и в отсутствие управляющего тока отбираемый от нее электрический ток невелик.

## § 71. Квазичастицы

На протяжении последних глав нам неоднократно приходилось прибегать к введению квазичастиц. В первый раз это было сделано при изучении акустических колебаний (и теплоемкости) кристаллов.

Мы выяснили тогда, что безнадежная на первый взгляд задача о движении сильно взаимодействующих друг с другом ионов, входящих в состав кристаллической решетки, может быть сведена к движению не столь многочисленных слабо взаимодействующих между собой квазичастиц — фононов. Система из огромного числа зацепляющихся дифференциальных уравнений движения ионов превратилась при этом в систему несвязанных или слабо связанных уравнений, описывающих движение слабо связанных друг с другом фононов. Резкое упрощение системы уравнений сопровождалось появлением необычных динамических свойств у введенных квазичастиц. Мы обнаружили, что фононы характеризуются не массой, а законом дисперсии, не импульсом, а квазиимпульсом, что энергия фононов периодически зависит от их импульса (или волнового числа) и т. д. При всем этом очевидном усложнении динамических уравнений введение фононов позволило взяться за решение задачи, которая без этого была крайне трудной.

Аналогичным образом мы поступили при изучении движения электронов в почти заполненной зоне. Решение задачи кардинально упростилось, когда огромное число связанных между собой — из-за принципа Паули — электронов удалось заменить немногочисленными, почти не взаимодействующими между собой квазичастицами — дырками. Нам снова потребовались некоторые усилия, чтобы выяснить динамические характеристики введенных квазичастиц — их заряды и эффективную массу. Эти усилия, однако, вполне окупились благодаря резкому упрощению как рассуждений, так и выкладок.

Если внимательнее вдуматься в смысл наших действий, то и электроны в зоне проводимости тоже были заменены некоторыми квазичастицами, которые в этом случае сохранили то же название, что и исходные частицы, — название электронов. Электроны-квазичастицы не реагируют на быстро меняющееся в пространстве электрическое поле кристаллической решетки. Они взаимодействуют только с дефектами решетки, с фононами и друг с другом. За упрощение уравнений движения и на этот раз приходится расплачиваться введением новых динамических характеристик — закона дисперсии, положительных и отрицательных эффективных масс и т. д.

Вообще, метод квазичастиц в последние годы очень широко применяется в теоретической физике, в особенности в физике твердого тела. Приведенные примеры можно умножить. Так электрон и дырка — до рекомбинации — образуют связанные состояния — квазичастицы, носящие название экситонов. (Представление об экситонах введено Я. И. Френкелем.) Их динамика сейчас хорошо изучена. Вихревые движения в квантовых жидкостях (в жидком гелии) удобно рассматривать с помощью квазичастиц — ротоннов и т. д. Возникает естественный вопрос, не являются ли привычные нам частицы — электроны, протоны, фотоны и т. д. — тоже некоторыми квазичастицами, введя которые мы упростили задачу о взаимодействии исходных квантовых полей и динамические свойства которых кажутся нам естественными просто в силу привычки. Мы ограничимся здесь постановкой этого вопроса.

## ГЛАВА 14

# АТОМНОЕ ЯДРО, ЕГО ХАРАКТЕРИСТИКИ И СВОЙСТВА

Существование ядер в атомах было открыто Резерфордом в 1911 г. в опытах по рассеянию  $\alpha$ -частиц ( $q_\alpha = +2e$ ) при их прохождении через металлические фольги. Альфа-частицы проходят через тонкие фольги (это указывает на «прозрачность» атомов по отношению к  $\alpha$ -частицам), но при этом рассеиваются. Результаты рассеяния хорошо описываются формулой Резерфорда, полученной в предположении, что рассеяние происходит из-за кулоновского взаимодействия  $\alpha$ -частиц с частицами, обладающими зарядом  $+Ze$ , т.е., как мы сейчас понимаем, с ядрами атомов. Среди рассеянных частиц встречаются частицы, рассеянные на очень большие углы. Это может произойти только в том случае, если ядра атомов являются массивными компактными образованиями, при столкновениях с которыми может происходить рассеяние  $\alpha$ -частиц «назад». Из опытов Резерфорда можно было оценить размер атомных ядер. Их радиус оказался равным  $\sim 10^{-12}$  см., тогда как для размеров атомов характерна величина  $10^{-8}$  см. Огромное различие в размерах ядер и атомов ( $r_{\text{ат}}/R_{\text{яд}} \approx 10^4!$ ) и определяет прозрачность атомов. Разумеется, при прохождении  $\alpha$ -частиц через толстые слои вещества, состоящие из миллионов атомных слоев, они могут «запутаться», потерять на ионизацию всю или часть своей энергии и даже превратиться в другие частицы, если происходит ядерная реакция (Резерфорд, 1919 г.). В последнем случае в ядрах атомов происходят изменения. Изучение этих изменений дает информацию о свойствах ядер и о свойствах сил, действующих между частицами и ядрами и внутри самих ядер. (Ядерные реакции будут рассмотрены в гл. 15.)

Важную информацию о свойствах ядер дает изучение спонтанных процессов, характерных для многих ядер (мы рассмотрим их во второй части этой главы).

Изменение заряда атомного ядра, произошедшее спонтанно или в результате столкновения с частицей или с другим ядром, влечет за собой перестройку электронной оболочки атома.

## § 72. Основные характеристики атомного ядра

**Нуклоны и их характеристики.** В состав атомных ядер входят протоны  $p$ , открытые Резерфордом в 1914 г. при облучении водорода электронами, и нейтроны  $n$ , открытые Чадвиком в 1932 г. при исследовании излучений, возникающих при облучении бериллиевой мишени  $\alpha$ -частицами. Эти частицы имеют общее название — нуклоны (от лат. *nucleus* — ядро). Нуклоны удерживаются внутри ядер ядрами сильными, с которыми мы до сих пор не встречались.

Электроны в состав ядер входить не могут. Невозможность этого ясна уже из того, что это противоречило бы основным принципам квантовой механики. Электрон, положение которого определено с точностью  $\Delta x \approx R_{\text{яд}}$ , должен был бы иметь слишком большие импульс и энергию.

Рассмотрим основные характеристики нуклонов. Протон  $p$  имеет заряд  $q = +1e$  и массу  $m_p = 1836,15 m_e$ . Заряд нейтрона равен нулю, а масса немного больше массы протона:  $m_n = 1838,68 m_e$ . И протон и нейтрон обладают собственным угловым моментом — спином. Спиновые квантовые числа нуклонов совпадают со спиновым квантовым числом электрона:  $s_p = s_n = 1/2$ . Таким образом, проекция спина нуклонов может иметь два значения:  $\pm 1/2 \hbar$ . Как и все частицы с полуцелым спином,  $p$  и  $n$  подчиняются статистике Ферми – Дирака, и на них распространяется принцип Паули.

Протон, как и всякая заряженная частица с ненулевым спином, обладает собственным магнитным моментом  $\mu_p^s$ . Магнитный момент протона, как и магнитные моменты ядер, удобно измерять в единицах  $e\hbar/2m_p c$ . Эта единица называется ядерным магнетоном:

$$\mu_N = e\hbar/2m_p c = 0,505 \cdot 10^{-23} \text{ эрг/Гс.}$$

Ядерный магнетон  $\mu_N$  в  $\sim 2 \cdot 10^3$  раз меньше магнетона Бора, равного  $\mu_B = e\hbar/2m_e c$ , и являющегося единицей измерения магнитных моментов электронов и атомов. Магнитные моменты нуклонов и ядер во много раз меньше магнитных моментов электрона и атомов и для их измерения нужно создавать установки с гораздо более сильными полями, чем в опытах Штерна и Герлаха (§ 23). На одной из таких установок были измерены спин и магнитный момент протона. Вопреки ожиданию, максимальная проекция магнитного момента протона оказалась равной не  $1\mu_N$ , а  $2,79\mu_N$  (у электрона она равна  $1\mu_B$ ). Неожиданным оказалось и не равное нулю значение магнитного момента нейтрона: опыты по рассеянию нейтронных пучков в ферромагнетиках показали, что нейтроны обладают магнитным моментом. Дальнейшее усовершенствование опытов (использование высокочастотного электромагнитного поля, как это

делается в ЭПР, § 38) позволило измерить магнитный момент нейтрона. Оказалось, что он направлен противоположно спину, а его максимальная проекция равна  $1,91\mu_N$ . Значения магнитных моментов нуклонов свидетельствуют о сложности внутренней структуры этих частиц, к которой мы вернемся в гл. 16. Магнитные моменты нуклонов и их максимальные проекции имеют следующие значения:

$$\begin{aligned}\mu_s^p &= 5,58\mu_N s_p, & \mu_{sz}^p &= 2,79\mu_N, \\ \mu_s^n &= -3,83\mu_N s_n, & \mu_{sz}^n &= 1,91\mu_N.\end{aligned}$$

Некоторые другие важные характеристики нуклонов будут рассмотрены позже. Перейдем к атомным ядрам.

**Заряд  $q_{\text{яд}}$  и массовое число ядра  $A$ .**  $q_{\text{яд}} = +Ze$ , где  $Z$  — зарядовое число. Оно равно числу протонов в ядре и совпадает с порядковым номером элемента в таблице Менделеева. Прямым методом измерения зарядов ядер является рассеяние заряженных частиц на ядрах. Информацию о зарядах ядер можно получить и из анализа ядерных реакций, в которых они участвуют. Этот же метод можно использовать и для нахождения массового числа  $A$ , равного числу нуклонов в ядре.

В ядрах различных атомов одного и того же элемента ( $Z = \text{const}$ ) число нейтронов может быть различным. Такие атомы называются изотопами данного элемента. В обозначении изотопа, кроме порядкового номера элемента, указывается также и массовое число данного изотопа. Например, естественный углерод состоит из изотопов  ${}^{12}_6\text{C}_{(6)}$  (98,89%) и  ${}^{13}_6\text{C}_{(7)}$  (1,11%); массовые числа изотопов указываются в индексах слева вверху (в скобках снизу справа иногда указывается число нейтронов в ядре, равное  $A-Z$ ). Большая часть элементов, существующих в природе, состоит из нескольких (в среднем — трех) изотопов. Кроме этого, искусственным путем могут быть получены изотопы, отсутствующие в природе. Такие изотопы, как правило, являются нестабильными. Нестабильный изотоп углерода  ${}^{14}_6\text{C}_{(8)}$  присутствует в небольшом количестве в природе, т. к. получается при взаимодействии космических нейтронов с ядрами атомов азота, находящимися в атмосфере Земли. (При испытаниях термоядерных зарядов в атмосфере концентрация изотопа  ${}^{14}_6\text{C}$  заметно возростала). Естественный водород содержит изотоп  ${}^1_1\text{H}$  (99,985%) и небольшое количество изотопа  ${}^2_1\text{H}$ . Изотоп  ${}^1_1\text{H}$ , ядром которого является протон, называется протием (его чаще всего называют просто водородом) в отличие от изотопа дейтерия  ${}^2_1\text{H}_{(1)}$  (наиболее распространенное обозначение этого изотопа —  ${}^2\text{D}$ ). Нестабильный изотоп водорода  ${}^3_1\text{H}_{(2)}$  называется тритием (другое обозначение —  ${}^3\text{T}$ ); очень



небольшое количество трития также присутствует в атмосфере Земли. У урана  ${}_{92}\text{U}$  — самого тяжелого из существующих в природе элементов — все три изотопа ( ${}_{92}^{234}\text{U}$ ,  ${}_{92}^{235}\text{U}$ ,  ${}_{92}^{238}\text{U}$ ) нестабильны. Всего же различных изотопов с учетом полученных искусственно, более 1000. У легких стабильных изотопов, существующих в природе, отношение  $A/Z = 2$  (вплоть до  ${}_{20}^{40}\text{Ca}$ ), затем оно возрастает с ростом  $A$ , и у тяжелых изотопов достигает  $\sim 2,5$ . Изотопы, у которых это отношение нарушено, как правило, радиоактивны.

Различные изотопы одного и того же элемента обладают совершенно разными ядерными свойствами. Поэтому в ядерной физике рассматриваются не элементы, а конкретные изотопы.

**Радиус ядра  $R_{\text{яд}}$ .** Размеры ядер принято описывать с помощью радиуса ядра  $R_{\text{яд}}$  даже в тех случаях, когда ядра не имеют сферической формы. Рассеяние  $\alpha$ -частиц, электронов, протонов и др. частиц на ядрах приводит к одной и той же зависимости:  $R_{\text{яд}} \sim A^{1/3}$ . Поэтому выражение для  $R_{\text{яд}}$  можно записать в следующем виде:

$$R_{\text{яд}} = R_0 A^{1/3}, \quad (14.1)$$

где среднее из разных опытов значение  $R_0 \sim 1,3 \cdot 10^{-13}$  см.

**Масса ядра.** Единицей измерения масс атомов и атомных ядер является атомная единица массы (а.е.м.), равная  $1/12$  массы нейтрального атома изотопа  ${}_{6}^{12}\text{C}$ :

$$1 \text{ а.е.м.} = 1/12 M^{\text{ат}}({}_{6}^{12}\text{C}) = \dots = 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ г.}$$

Таким образом,  $M^{\text{ат}}({}_{6}^{12}\text{C}) = 12,00000$  а.е.м. Массы остальных атомов, выраженные в а.е.м., не являются целыми числами, хотя и близки к ним. Например,  $M^{\text{ат}}({}_{6}^{13}\text{C}) = 13,00335$  а.е.м., и т. д.

Массы атомов измеряются с помощью масс-спектрометров. В масс-спектрометрах атомы предварительно ионизируются (их заряд становится равным  $+1e$  или реже  $+2e$ ). Затем пучки ионов пропускаются через системы электрических и магнитных полей. Поля подбираются таким образом, чтобы ионы с разными значениями  $q/M$  двигались по различным траекториям. При этом на детектор попадают ионы только с одним из возможных значений  $q/M$ . В прецизионных спектрометрах с двойной пространственной фокусировкой удается измерять массу с точностью лучшей, чем  $10^{-4}$  %. Измеренные массы заносятся в таблицы. Массы нуклонов и электрона, выраженные в а.е.м., имеют следующие значения:

$$m_p = 1,00728 \text{ а.е.м.},$$

$$m_n = 1,00867 \text{ а.е.м.},$$

$$m_e = 0,00055 \text{ а.е.м.}$$

Из этих данных для массы атома водорода, состоящего из протона и электрона, пренебрегая энергией связи электрона в атоме (13,6 эВ), получаем:  $M^{\text{ат.}}(\frac{1}{2}\text{H}) = = 1,00728 + 0,00055 = 1,00783$  а.е.м. Именно это значение массы атома  $\frac{1}{2}\text{H}$  приводится в таблице масс атомов.

Как мы увидим позже, в процессах, происходящих с участием ядер (радиоактивный распад, ядерные реакции), как правило, выделяется (или поглощается) довольно большая энергия; ее принято выражать в мегаэлектронвольтах (МэВ). В соответствии с *законом эквивалентности массы и энергии* с изменением энергии связано изменение массы. Найдем энергетический эквивалент для 1 а.е.м. в МэВ. Для этого воспользуемся соотношением Эйнштейна:  $E = Mc^2$ . Если масса выражена в граммах, а скорость света в см/с ( $c = 3 \cdot 10^{10}$  см/с), то соответствующая массе  $M$  энергия  $E$  получится в эргах. Если же масса выражена в а.е.м., то эквивалентная ей энергия в МэВ будет равна:

$$E(\text{МэВ}) = [M(\text{а.е.м.}) \cdot 1,66 \cdot 10^{-24} (\text{г/а.е.м.}) \cdot (3 \cdot 10^{10} \text{ см/с})^2] / 1,6 \cdot 10^{-6} (\text{эрг/МэВ})$$

$$\text{Или: } E(\text{МэВ}) = 931,5 (\text{МэВ/а.е.м.}) \cdot M(\text{а.е.м.}) \quad (14.2)$$

Коэффициент 931,5 МэВ/а.е.м. заменяет  $c^2$  в формулах, в которых масса используется в а. е. м. Его следует запомнить<sup>1</sup>. Заметим, что в физике элементарных частиц массу частиц принято выражать в МэВ/ $c^2$ . Воспользовавшись приведенными выше массами в а.е.м. нуклонов и электрона, легко получаем:

$$m_p c^2 = 1,00728 (\text{а.е.м.}) \cdot 931,5 (\text{МэВ/а.е.м.}) = 938,3 \text{ МэВ.}$$

$$\text{Отсюда: } m_p = 938,3 \text{ МэВ}/c^2.$$

$$\text{Аналогично: } m_n = 939,6 \text{ МэВ}/c^2,$$

$$m_e = 0,511 \text{ МэВ}/c^2. \quad (14.3)$$

**Спин ядра  $\mathbf{I}$  и магнитный момент ядра  $\mu_{\text{яд}}$ .** Спином ядра  $\mathbf{I}$  называется полный угловой момент ядра. Для ядра с массовым числом  $A$

$$\mathbf{I} = \sum_{i=1}^A \mathbf{s}_i + \sum_{i=1}^A \mathbf{l}_i.$$

В этом выражении первый член справа равен суммарному спиновому моменту нуклонов, а второй — суммарному орбитальному моменту нуклонов в ядре. Значения  $\mathbf{s}_i$  и  $\mathbf{l}_i$  определяются значениями соответствующих

<sup>1</sup>Для этого коэффициента в ядерной физике нет специального обозначения.

квантовых чисел:  $s_p = s_n = 1/2$  и  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ . При различных взаимных ориентациях угловых моментов нуклонов спин ядра принимает различные дискретные значения (см. правила сложения моментов, § 21). Спин ядра  $\mathbf{I}$  связан с результирующим квантовым числом  $I$  (которое тоже иногда называют спином ядра) общим правилом квантовой механики:  $|\mathbf{I}| = \hbar\sqrt{I(I+1)}$ . Его возможные проекции (которые и проявляются в опытах) определяются квантовым числом  $m_I$ :  $I_z = \hbar m_I$ . Магнитное квантовое число  $m_I$  принимает значения:  $m_I = I, (I-1), (I-2), \dots, -I$ . Максимальная проекция  $(I_z)_{\text{макс}}$  равна  $\hbar I$ . Квантовое число  $I$  определяется экспериментально.

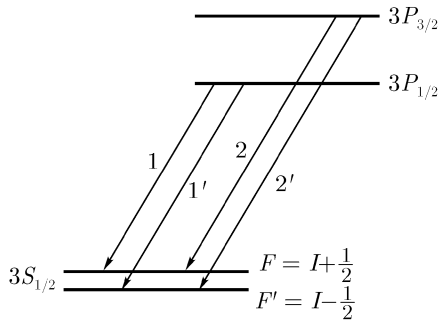


Рис. 145. Влияние спина ядра на структуру «желтого дублета» в спектре  $^{11}\text{Na}$ .

Главным методом определения  $I$  является изучение сверхтонкой структуры оптических спектров атомов. В §§ 27, 29 и 34 мы рассмотрели тонкую структуру линий в оптических спектрах атомов, связанную с взаимодействием магнитных спиновых и орбитальных моментов валентных электронов. На рис. 62 изображена тонкая структура резонансной линии в спектре  $^{11}\text{Na}$  («желтый дублет»). При изучении этого дублета спектрометром с высокой разрешающей способностью выяснилось, что каждая из линий дублета состоит из двух компонент с  $\Delta\lambda \approx 0,002 \text{ нм}$  (рис. 145). Сверхтонкая структура линий в спектре  $^{11}\text{Na}$  и явилась первым указанием на существование спина у ядер. Ядро, имеющее спин  $I \neq 0$ , должно обладать магнитным моментом  $\mu_I$  и создавать вокруг себя магнитное поле. При взаимодействии магнитных моментов валентных электронов с магнитным моментом ядра энергия атомов принимает различные значения в зависимости от взаимной ориентации этих моментов, так что энергетические уровни расщепляются. Если  $F$  — квантовое число, соответствующее полному угловому моменту атома  $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$ , то в основном состоянии атома  $^{11}\text{Na}$ , для которого  $J = 1/2$ ,  $F$  должно иметь два значения:  $F = I + 1/2$  и  $F' = I - 1/2$ . Величина расщепления уровня  $3S_{1/2}$  невелика из-за малости

магнитного момента ядра, а расщепление уровней  $3P_{1/2}$  и  $3P_{3/2}$  еще меньше и не указано на рисунке. Для расчета  $I$  можно воспользоваться отношением интенсивностей линий. Они пропорциональны кратностям вырождения уровней, на которые происходят переходы.

Из опыта:  $i_1/i'_1 = i_2/i'_2 = 1,7$ .

Следовательно:

$$(2F + 1)/(2F' + 1) = [2(I + 1/2) + 1]/[2(I - 1/2) + 1] = (I + 1)/I = 1,7.$$

Отсюда:  $I = 3/2$ .

В заключение заметим, что для определения  $I$  могут использоваться и другие методы анализа сверхтонкой структуры, например, подсчет полного числа линий и др.

Экспериментальные значения  $I$  заносятся в таблицы изотопов наряду с другими их характеристиками. При анализе значений  $I$  для разных изотопов можно заметить, что: 1) у ядер с нечетными  $A$  значения  $I$  — полуцелые, причем у нечетных тяжелых ядер с большими  $A$  величина  $I$  в невозбужденных состояниях не превышает  $9/2$ ; 2) у ядер с четными  $A$   $I$  — целые, а у четно-четных ядер в невозбужденных состояниях  $I = 0$ . Все это свидетельствует о том, что в ядрах так же, как и у электронов в электронных оболочках атомов, происходит взаимная компенсация угловых (и магнитных) моментов нуклонов.

Магнитный момент ядра  $\mu_{\text{яд}}$  складывается из собственных магнитных моментов протонов и нейтронов и орбитальных магнитных моментов протонов (нейтрон обладает нулевым орбитальным магнитным моментом при любом  $l$ ). Для ядер с  $I = 0$  магнитный момент равен нулю. Для ядер с  $I \neq 0$  магнитный момент зависит не только от величины  $I$ , но и от взаимной ориентации спиновой и орбитальной составляющих полного момента. Связь между  $\mu_{\text{яд}}$  и  $\mathbf{I}$ , между  $|\mu_{\text{яд}}|$  и квантовым числом  $I$ , а также между проекцией магнитного момента  $\mu_{z\text{яд}}$  и магнитным квантовым числом  $m_I$ , может быть выражена формулами, аналогичными формулам атомной физики, связывающими полный магнитный и полный угловой моменты электронной оболочки атома:

$$\begin{aligned} \mu_{\text{яд}} &= g_I \mu_N \mathbf{I}, \\ |\mu_{\text{яд}}| &= g_I \mu_N \sqrt{I(I+1)}, \\ \mu_{z\text{яд}} &= g_I \mu_N m_I. \end{aligned} \quad (14.4)$$

Во все три формулы входит  $g_I$  — «же-фактор» ядра. Его происхождение аналогично происхождению фактора Ланде (см. § 26). Но теория ядра лишь в редких случаях позволяет рассчитать  $g_I$ .

Основным методом измерения  $g_I$  является метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР), рассмотренный в § 38. Мы уже знаем, что спин ядра атома

${}_{11}^{23}\text{Na}$  равен  $3/2$ . Воспользуемся результатами, полученными для натрия в одном из опытов на установке, типа изображенной на рис. 80. При индукции магнитного поля  $B = 10^3$  Гс значение резонансной частоты оказалось равным  $1,125$  МГц. Преобразуем условие резонанса (формула (7.21)) к нужному нам виду, заменив, разумеется,  $\mu_B$  на  $\mu_N$ : Тогда получим, что  $g_I = 2\pi\hbar\nu_{\text{рез}}/\mu_N B = 6,28 \cdot 1,05 \cdot 10^{-27} \cdot 1,125 \cdot 10^6 / 0,505 \cdot 10^{-23} \cdot 10^3 = 1,47$ . Магнитный момент ядра атома  ${}_{11}^{23}\text{Na}$  (точнее — его максимальная проекция), следовательно, равен  $1,47\mu_N \cdot 3/2 = 2,2\mu_N$ .

В заключение рассмотрим одно из проявлений взаимодействия магнитных моментов электронов и ядер. В радиоизлучении Галактики обнаружено излучение атомов «холодного» (невозбужденного) водорода с длиной волны  $\lambda = 21$  см. Рассмотрим происхождение этого излучения. Атомы водорода состоят из протона и электрона, спины и магнитные моменты которых могут быть направлены как в одну и ту же, так и в противоположные стороны. Этим двум ориентациям с  $F = I + J = 1/2 + 1/2 = 1$  и  $F = I - J = 1/2 - 1/2 = 0$  соответствуют разные энергии магнитного взаимодействия. Разность этих энергий невелика и составляет  $E = 5,85 \cdot 10^{-6}$  эВ. Спонтанные переходы из состояния с большей энергией ( $F = 1$ ) в состояние с меньшей энергией ( $F = 0$ ) запрещены, т.к. связаны с поворотом спина, но с небольшой вероятностью все же происходят. Изучение излучения межзвездного водорода с  $\hbar\omega = 5,85 \cdot 10^{-6}$  эВ ( $\lambda = 21$  см) позволило определить распределение нейтрального водорода в Галактике.

**Квадрупольный электрический момент ядра  $Q$**  входит в качестве поправки в расчет энергии электронных уровней в атомах, а следовательно, влияет и на структуру атомных спектров. Величина квадрупольного момента  $Q$  определяется как интеграл по объему ядра:

$$Q = \int \rho(r)(3z^2 - r^2) dV, \quad (14.5)$$

где  $\rho(\mathbf{r})$  — плотность электрического заряда внутри ядра в точке  $\mathbf{r}$ , а ось  $z$  выбирается так, чтобы величина  $Q$  была максимальна по абсолютной величине.

Так как  $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ , то при сферически симметричном распределении заряда  $\langle 3z^2 \rangle = \langle r^2 \rangle$ , и у таких ядер  $Q = 0$ ; при распределении заряда, вытянутом вдоль оси  $Z$ ,  $\langle 3z^2 \rangle > \langle r^2 \rangle$  и квадрупольный момент ядра  $Q > 0$ ; для сплющенного относительно оси  $Z$  распределения ( $\langle 3z^2 \rangle < \langle r^2 \rangle$ ) и  $Q < 0$ . Таким образом, квадрупольный момент ядра — мера отклонения распределения заряда в ядре от сферически симметричного. Для измерения квадрупольных моментов используются те же методы, что и для измерения спинов и магнитных моментов, т.е.

изучение сверхтонкой структуры оптических спектров и радиочастотные резонансные методы. Величина  $Q$  (отнесенная к единичному заряду) измеряется в  $\text{см}^2$  или барнах ( $1 \text{ барн} = 10^{-24} \text{ см}^2$ ). Эксперименты показывают большой разброс в значениях  $Q$ : для большинства ядер  $Q \neq 0$ , причем у одних ядер  $Q > 0$ , а у других  $Q < 0$ . К оценке этих результатов мы вернемся при обсуждении обобщенной модели ядра.

### § 73. Энергия связи ядер. Свойства ядерных сил

**Энергия связи атомных ядер.** Рассмотрим стабильное ядро, в состав которого входит  $Z$  протонов и  $(A - Z)$  нейтронов. Нуклоны прочно связаны в ядре ядерными силами. Мысленно «расташим» ядро на отдельные нуклоны. Та энергия, которую придется при этом затратить, называется энергией связи ядра. Таким образом: *энергия связи — мера прочности ядра.*

Суммарная масса нуклонов, «вытащенных» из ядра, всегда больше массы исходного ядра:  $[Zm_p + (A - Z)m_n] > M^{\text{яд}}(Z, A)$ . Это неравенство справедливо для всех ядер. Разность масс  $\Delta M = \{[Zm_p + (A - Z)m_n] - M^{\text{яд}}(Z, A)\}$  называется дефектом массы ядра. Дефект массы ядра, выраженный в энергетических единицах и определяет энергию связи ядра:

$$E_{\text{св}}(\text{МэВ}) = 931,5(\text{МэВ} / \text{а.е.м.}) \cdot \Delta M(\text{а.е.м.}) \quad (14.6)$$

Отметим, что дефект массы ядра может быть вычислен не по массе ядра и нуклонов, а по массам соответствующих атомов:

$$\Delta M = \{[ZM^{\text{ат}}(\frac{1}{1}\text{H}) + (A - Z)m_n] - M^{\text{ат}}(Z, A)\}. \quad (14.7)$$

В этом выражении в квадратной скобке кроме масс протонов, входящих в состав ядра, содержится  $Z$  масс электронов (по одному на каждый протон), и столько же электронных масс содержится в массе исходного атома. Энергия связи электронов в атомах невелика, и в формуле (14.7) не принята во внимание.

Применим полученные формулы для расчета энергии связи ядра  ${}^4_2\text{He}$ . Табличное значение массы атома  ${}^4_2\text{He}$ :  $M^{\text{ат}}({}^4_2\text{He}) = 4,00260 \text{ а.е.м.}$  Для дефекта массы получаем:  $\Delta M({}^4_2\text{He}) = \{[2M^{\text{ат}}(\frac{1}{1}\text{H}) + 2m_n] - M^{\text{ат}}({}^4_2\text{He})\} = 2 \cdot 1,00783 + 2 \cdot 1,00867 - 4,00260 = 0,03040 \text{ а.е.м.}$  Энергия связи  $E_{\text{св}}({}^4_2\text{He}) = 931,5 \text{ МэВ} / \text{а.е.м.} = 0,03040 \text{ а.е.м.} = 28,3 \text{ МэВ}$ . Как видим, эта энергия на много порядков превышает энергию связи электронов в атоме  ${}^4_2\text{He}$ .

Если рассчитать энергию связи более тяжелых ядер, то получим вполне ожидаемый результат: энергия связи ядер растет с ростом

массового числа ядра. Расчет по формулам (14.7) и (14.6) дает:

$$E_{\text{св}}(^{12}_6\text{C}) = 92,2 \text{ МэВ}, \dots, E_{\text{св}}(^{85}_{37}\text{Rb}) = 732,3 \text{ МэВ}, \dots,$$

$$E_{\text{св}}(^{238}_{92}\text{U}) = 1801,7 \text{ МэВ}.$$

Однако, если мы введем удельную энергию связи ядра

$$\varepsilon_{\text{св}} = E_{\text{св}}/A, \quad (14.8)$$

т. е. среднюю энергию связи, приходящуюся в ядре на один нуклон, то увидим, что удельная энергия связи в среднем весьма незначительно различается при переходе от ядра к ядру.

Для ядер, рассмотренных выше, получаем:

$$\varepsilon_{\text{св}}(^4_2\text{He}) = 28,3/4 \approx 7,1 \text{ МэВ/нукл}, \quad \varepsilon_{\text{св}}(^{12}_6\text{C}) = 92,2/12 \approx 7,7 \text{ МэВ/нукл},$$

$$\varepsilon_{\text{св}}(^{85}_{37}\text{Rb}) = 732,3/85 \approx 8,6 \text{ МэВ/нукл}, \quad \varepsilon_{\text{св}}(^{238}_{92}\text{U}) = 1801,7/238 \approx 7,6 \text{ МэВ/нукл}.$$

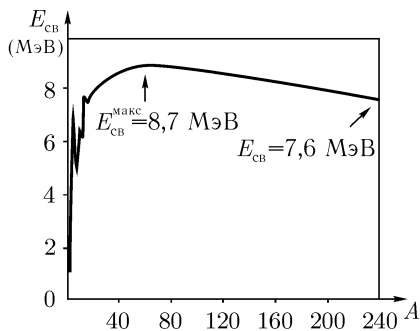


Рис. 146. Зависимость удельной энергии связи ядра  $\varepsilon_{\text{св}}$  от массового числа  $A$ .

Итак, для всех ядер (кроме самых легких) наблюдается примерно постоянное значение удельной энергии связи. Однако, при внимательном изучении зависимости  $\varepsilon_{\text{св}}$  от  $A$ , выясняется, что с ростом  $A$  (при  $A > 12$ )  $\varepsilon_{\text{св}}$  сначала медленно растет, достигая максимума  $\varepsilon_{\text{св}} \approx 8,7 \text{ МэВ/нукл}$  при  $A \approx 60$ , а затем еще более медленно падает, приближаясь к  $\varepsilon_{\text{св}} \approx 7,6 \text{ МэВ/нукл}$  для самых тяжелых ядер. Зависимость  $\varepsilon_{\text{св}}$  от  $A$  изображена на рис. 146. Из характера зависимости  $\varepsilon_{\text{св}}$  от  $A$  вытекают важнейшие следствия: при делении тяжелых ядер и при

синтезе (слиянии) легких ядер должна выделяться энергия. Процессы деления и синтеза ядер будут подробно рассмотрены ниже в гл. 15.

Полезными характеристиками ядра являются энергии связи в нем нейтрона  $E_{\text{св}}^n$  и протона  $E_{\text{св}}^p$ . Если мы хотим «вытащить» нейтрон из ядра  $(Z, A)$ , то мы должны затратить на этот процесс энергию. Поэтому:  $[m_n + M^{\text{яд}}(Z, A - 1)] > M^{\text{яд}}(Z, A)$ . Очевидно, что разность масс, стоящих в левой и правой частях неравенства, переведенная в энергетические единицы, и будет равна энергии связи нейтронов в ядре  $(Z, A)$ . Очевидным является и то, что вместо масс ядер можно использовать массы нейтральных атомов:

$$E_{\text{св}}^n (\text{МэВ}) = 931,5 (\text{МэВ} / \text{а.е.м}) \cdot \{[m_n + M^{\text{ат}}(Z, A - 1)] - M^{\text{ат}}(Z, A)\} (\text{а.е.м}) \quad (14.9)$$

Аналогично

$$\begin{aligned} E_{\text{св}}^p (\text{МэВ}) &= \\ &= 931,5 (\text{МэВ} / \text{а.е.м}) \cdot \{[M^{\text{ат}}({}_1^1\text{H}) + M^{\text{ат}}(Z-1, A-1)] - M^{\text{ат}}(Z, A)\} (\text{а.е.м}). \end{aligned} \quad (14.10)$$

В заключение заметим, что в одном и том же ядре  $E_{\text{св}}^n \neq E_{\text{св}}^p$ , причем различие может оказаться довольно заметным.

**Свойства ядерных сил.** Свойства ядерных сил начали изучаться сразу после того, как была установлена нуклонная структура ядра (30-е годы), и продолжают изучаться. Сформулируем основные, наиболее важные, свойства ядерных сил.

1. Ядерные силы являются силами притяжения. Это свойство ядерных сил очевидно: ведь именно они ответственны за существование атомных ядер.

2. Ядерные силы являются короткодействующими силами. Верхняя граница радиуса действия ядерных сил составляет около  $\sim 2 \cdot 10^{-13}$  см. Такими же, по порядку величины являются размеры легких ядер (см. § 72)

3. Ядерные силы — очень большие. По величине они превосходят все известные нам силы. Так, они в  $\sim 100$  раз больше действующих в ядрах сил электромагнитного взаимодействия.

Сравним энергию ядерного взаимодействия нуклонов в ядре  ${}^4_2\text{He}$  и энергию кулоновского взаимодействия протонов, входящих в это же ядро. Мерой энергии ядерного взаимодействия можно считать энергию связи ядра  $E_{\text{св}}({}^4_2\text{He}) = 28,3 \text{ МэВ}$ . Рассчитаем энергию кулоновского взаимодействия протонов, считая, что расстояние между ними равно радиусу ядра:

$$\begin{aligned} U_{\text{кул}} &= e^2 / R_{\text{яд}}({}^4_2\text{He}) = e^2 / R_0 A^{1/3} = \\ &= [(4,8 \cdot 10^{-10} \text{ qCGCE})^2 / (1,3 \cdot 10^{-13} \text{ см} \cdot 4^{1/3})] \cdot (1/1,6 \cdot 10^{-6} \text{ эрг/МэВ}) \approx \\ &\approx 0,70 \text{ МэВ} \ll E_{\text{св}}. \end{aligned}$$



4. Ядерные силы не зависят от электрического заряда нуклонов.

Проиллюстрируем это свойство, известное как свойство «зарядовой независимости» ядерных сил, сравнив энергии связи нейтрона  $E_{\text{св}}^n$  и протона  $E_{\text{св}}^p$  в ядре  ${}^4_2\text{He}$ , с и м м е т р и ч н о м по отношению к протонам и нейтронам. По формулам (14.8) и (14.9) получаем:  $E_{\text{св}}^n({}^4_2\text{He}) = 20,5$  МэВ и  $E_{\text{св}}^p = 19,8$  МэВ. Энергии связи оказались для нейтрона и протона различными, но разность в их значениях практически полностью объясняется энергией кулоновского отталкивания протонов, уменьшающей энергию связи  $E_{\text{св}}^p$  по сравнению с энергией связи  $E_{\text{св}}^n$ . Следовательно, ядерные силы, действующие на нейтрон и протон в ядре, практически о д и н а к о в ы. Это дает возможность рассматривать нейтрон и протон как два различных зарядовых состояния одной и той же частицы — нуклона (подробнее об этом см. гл. 16).

5. Ядерные силы обладают н а с ы щ е н и е м. Одним из выражений этого свойства является независимость удельной энергии связи ядра от его массового числа. Мы уже знаем, что  $\varepsilon_{\text{св}} \approx \text{const}$ , и  $E_{\text{св}} \sim A$ . Если бы насыщения не существовало, то  $E_{\text{св}}$  была бы пропорциональна  $A^2$ .

6. Ядерные силы зависят от взаимной ориентации спинов взаимодействующих частиц. Так, связанное состояние системы  $n - p$  существует только при параллельной ориентации спинов нуклонов, и у ядра дейтерия, в состав которого входят один протон и один нейтрон, спиновое квантовое число  $I = 1$ . Перечисленные свойства ядерных сил позволяют построить ряд моделей ядра, с некоторыми из которых мы познакомимся в § 74. Но сначала полезно рассмотреть дейтрон  $d$  — ядро атома дейтерия  ${}^2_1\text{D}$ .

**Элементарная теория дейтрона.** Связанных состояний у систем  $n - n$  и  $p - p$  нет. У системы  $p - n$  существует одно связанное состояние. Это — дейтрон  $d$ .

Как известно, простейшим атомом является атом водорода  ${}^1_1\text{H}$ , в состав которого входят всего две частицы: протон  $p$ , являющийся ядром атома, и электрон  $e^-$ . Квантовомеханическая теория этого атома позволила полностью описать все его особенности: структуру энергетических уровней, спектр излучения, поведение этих атомов в электрических и магнитных полях и т. д.

Построить законченную квантовую теорию дейтрона пока не удается, так как неизвестен вид потенциальной функции  $U$ , определяющей форму потенциальной ямы.

Попробуем воспользоваться короткодействием ядерных сил и применим к дейтрону модель сферически симметричной потенциальной ямы:  $U = U(r)$  (рис. 147). Изображенная на этом рисунке потенциальная яма имеет следующие особенности: при  $r > r_d$   $U(r) = 0$ ; при  $r_d > r > b$  потенциал постоянен и равен  $U_0$ ; в области  $I$ , где  $0 < r < b$ , будем считать  $U(r) \rightarrow \infty$  (на это ука-

зывает сильное отталкивание между нуклонами, проявляющееся в опытах по рассеянию быстрых нуклонов при очень малых расстояниях между ними).

Опыты по изучению реакции  $n + p \rightarrow d + \gamma$ , в которых  $E_\gamma$  может быть измерена очень точно, дают для энергии связи дейтрона значение  $E_{св} = 2,224$  МэВ. Это означает, что на расстоянии, равном  $-2,224$  МэВ от края ямы, есть уровень, который соответствует связанному состоянию  $n-p$  системы. Других связанных состояний у дейтрона нет. Для системы, обладающей сферической симметрией, решение уравнения Шредингера, не зависящее от углов  $\theta$  и  $\varphi$ , определяется волновой функцией, зависящей только от  $r$ :  $u(r)$ . Им мы и займемся. Для случая, когда орбитальный момент системы равен нулю, уравнение для  $u(r)$  имеет простой вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + U(r)u = Eu,$$

где  $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  — приведенная масса системы, равная в нашем случае  $m_{\text{нукл}}/2$ .

В область I, где  $U(r) = \infty$ , нуклоны попасть не могут. В области II  $U(r) = -U_0$  и  $E = -E_{св}$ . В области III  $U(r) = 0$ .

Рассмотрим область II: В этой области уравнение Шредингера приобретает вид:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{II}}{dr^2} + (U_0 - E_{св})u_{II} = 0.$$

Решением этого уравнения является функция  $u_{II}(r) = A \sin kr + B \cos kr$ , где волновое число  $k_{II} = \sqrt{2m(U_0 - E_{св})}/\hbar$ . Из условия непрерывности волновой функции на левой границе области (при  $r = b$   $u_{II} = 0$ ) получаем, что  $B = 0$ , так что

$$u_{II} = A \sin k_{II}(r - b). \quad (14.11')$$

Уравнение Шредингера в области III:  $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{III}}{dr^2} - E_{св} u_{III} = 0$ . Его решением является функция  $u_{III} = C \exp(-k_{III}r) + D \exp(k_{III}r)$ , где  $k_{III} = \sqrt{2mE_{св}}/\hbar$ . Т. к.  $D \exp(k_{III}r) \rightarrow \infty$  при  $r \rightarrow \infty$ , то  $D = 0$  и

$$u_{III} = C \exp(-k_{III}r) \quad (14.11'')$$

В равенствах (14.11') и (14.11'')  $A$  и  $C$  — нормировочные константы. Из условий шивки следует, что при  $r = r_d$  равны и функции  $u_{II}$  и  $u_{III}$ , и их первые производные. Применим эти условия, получаем два уравнения:

$$\begin{aligned} A \sin k_{II}(r_d - b) &= C \exp(-k_{III}r_d), \\ A k_{II} \cos k_{II}(r_d - b) &= -C k_{III} \exp(-k_{III}r_d). \end{aligned}$$

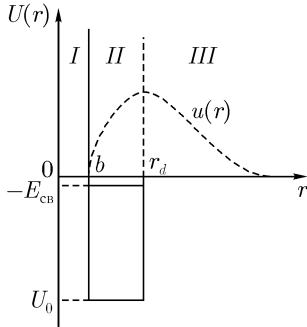


Рис. 147. Потенциальная яма дейтрона.

Разделив первое уравнение на второе, получаем:

$$\operatorname{tg} k_{\Pi}(r_d - b) = -\frac{k_{\Pi}}{k_{\text{III}}} = -\left(\frac{U_0 - E_{\text{св}}}{E_{\text{св}}}\right)^{1/2}. \quad (14.12)$$

Мы получили уравнение, связывающее  $E_{\text{св}} = 2,224 \text{ МэВ}$  с  $U_0$ ,  $r_d$  и  $b$ . Величины  $U_0$ ,  $r_d$  и  $b$  можно считать *подгоночными параметрами*. Из опытов известно, что  $b = (0,3 \div 0,4)10^{-13} \text{ см}$ ,  $r_d^{\text{расч}} \approx 1,3 \cdot 2^{1/3} \cdot 10^{-13} \approx 1,6 \cdot 10^{-13} \text{ см}$ , а  $r_d^{\text{эксп}} \approx 2,15 \cdot 10^{-13} \text{ см}$ . Меняя эти параметры в уравнении (14.12) можно подобрать оптимальные значения радиуса ямы и ее глубины. Они оказываются следующими:  $r_d \approx 2 \cdot 10^{-13} \text{ см}$  и  $U_0 \approx 40 \text{ МэВ}$ . Обсудим эти результаты. На первый взгляд, расчет нас никуда не продвинул, так как для объяснения одного параметра ( $E_{\text{св}}$ ) нам потребовалось несколько. На самом деле это не так. Радиус дейтрона, как этого и следовало ожидать, совпадает с уже приведенным ранее радиусом действия ядерных сил. Глубина потенциальной ямы  $U_0$ , полученная в этом расчете, хорошо описывает не только дейтрон, но и другие ядра.

Магнитный момент дейтрона определен методом магнитного резонанса очень точно:  $\mu_d = (0,85741 \pm 0,00002)\mu_N$ . Сумма магнитных моментов протона и нейтрона равна:  $\mu_p + \mu_n = 2,79284\mu_N - 1,91315\mu_N = 0,87969\mu_N$ . Таким образом, магнитный момент  $\mu_d$  не равен сумме магнитных моментов нуклонов, причем различие (на 2,5%) выходит за пределы возможной экспериментальной ошибки. По-видимому, для дейтрона состояние  ${}^3S_1$  является преимущественным, но не единственно возможным. Дейтрон обладает и небольшим положительным квадрупольным моментом, что указывает на некоторую вытянутость его формы по сравнению со сферической.

## § 74. Модели атомного ядра

Модели атомного ядра стали создаваться сразу же после того, как были получены первые экспериментальные данные о свойствах ядерных сил.

**Капельная модель ядра**, предложенная Н. Бором в 30-е годы, была одной из первых. К этому времени были известны следующие свойства ядерной материи: 1) плотность ядерного вещества  $\rho = M_{\text{яд}}/V_{\text{яд}}$  не зависит от числа нуклонов в ядре, что свидетельствует о ее несжимаемости; 2) средняя энергия отделения нуклона от ядра (удельная энергия связи  $\varepsilon_{\text{св}}$ ) почти постоянна. Этими же свойствами обладает и жидкость: она несжимаема и теплота испарения молекул не зависит от объема жидкости. Это сходство и позволило создать капельную модель ядра, согласно которой атомное ядро представляет собой электрически заряженную каплю «ядерной жидкости». Полная энергия связи ядра с зарядовым числом  $Z$  и массовым числом  $A$  описывается полуэмпирической

формулой Вайцзеккера:

$$E_{\text{св}}(Z, A) = a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 Z^2/A^{1/3} - a_4(A - 2Z)^2/A + a_5 A^{-3/4} \delta. \quad (14.13)$$

Первый член в этой формуле  $a_1 A$  является основным. Если бы удельная энергия связи ядра совсем не зависела от  $A$ , им можно было бы и ограничиться. Все остальные члены являются поправочными. Первый из них  $-a_2 A^{2/3}$  учитывает поверхностный эффект: на поверхности ядра-капли нуклоны имеют меньшую, чем внутри ядра энергию связи; поэтому этот член отрицателен и пропорционален поверхности ядра ( $S \sim R_{\text{яд}}^2 \sim A^{2/3}$ ). Второй поправочный член учитывает энергию кулоновского отталкивания протонов, уменьшающую энергию связи ядра; этот член  $\sim Z^2/R_{\text{яд}} \sim Z^2/A^{1/3}$ . Два последних члена в формуле не объясняются капельной моделью ядра. Первый из них учитывает существующую в природе тенденцию ядер к равенству числа протонов и нейтронов в ядре. Для легких ядер, у которых  $N_p = N_n$ , этот член равен нулю. Для ядер, у которых  $N_p > N_n$  или  $N_p < N_n$ , этот член вносит заметную поправку в значение полной энергии связи. Последний поправочный член был введен для учета особой прочности четно-четных ядер по сравнению с ядрами, имеющими нечетное число протонов или нейтронов, и связан со спиновой зависимостью ядерных сил. Коэффициент  $\delta$  в последнем поправочном члене имеет следующие значения:

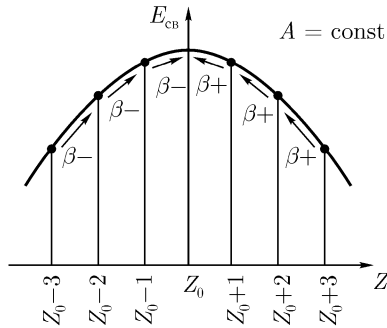
$$\begin{aligned} \delta &= +1 && \text{для ядер с четными } A \text{ и } Z, \\ \delta &= 0 && \text{для ядер с нечетными } A, \\ \delta &= -1 && \text{для ядер с четными } A \text{ и нечетными } Z. \end{aligned}$$

Для того, чтобы формулой (14.13) можно было пользоваться, нужно знать значения коэффициентов  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$ ,  $a_4$  и  $a_5$ . Коэффициент  $a_3$  может быть рассчитан теоретически, остальные коэффициенты подбирают, сравнивая результаты расчета с опытом. Хорошие результаты получаются при следующих значениях  $a_i$ :

$$\begin{aligned} a_1 &= 14,0 \text{ МэВ}, & a_3 &= 0,584 \text{ МэВ}, & a_5 &= 33,5 \text{ МэВ}. \\ a_2 &= 13,0 \text{ МэВ}, & a_4 &= 19,3 \text{ МэВ} \end{aligned}$$

Полученную по формуле (14.13)  $E_{\text{св}}$  для ядра  $(Z, A)$  можно использовать для получения расчетного значения его массы

$$M_{\text{яд}}(Z, A) = Zm_p + (A - Z)m_n - E_{\text{св}}(Z, A)/931,5 \text{ МэВ/а.е.м.} \quad (14.14)$$

Рис. 148. Энергия связи ядер-изобар с нечетным  $A$ .

Рассмотрим еще одно следствие из формулы (14.13). Остановимся сначала на изотопах с нечетными  $A$ , для которых  $\delta = 0$ . Квадратичная зависимость  $E_{св}(Z, A)$  от  $Z$  указывает на то, что значение  $E_{св}(Z)$  для ядер с  $A = \text{const}$  (такие ядра называются и з о б а р а м и) должны укладываться на параболу (рис. 148). Для ядра с  $Z = Z_0$  значение  $E_{св}$  максимально; именно это ядро является стабильным (очевидно, что у таких ядер масса — минимальна). У ядер с  $Z = Z_0 \pm 1$  есть возможность путем  $\beta$ -распада (см. § 75) превратиться в стабильное ядро с  $Z = Z_0$ ; эти ядра и являются обычно  $\beta^-$ - или  $\beta^+$ -активными. Получить выражение, связывающее  $Z_0$  с  $A$  стабильного при этом значении  $A$  изотопа, можно, взяв производную от  $E_{св}(Z, A)$  по  $Z$  и приравняв ее нулю. Тогда получим:  $-a_3 2Z_0 A^{-1/3} + a_4 2(A - 2Z_0) 2A^{-1} = 0$ . Отсюда:

$$Z_0 = \frac{A}{2 + 0,015A^{2/3}}. \quad (14.15)$$

Эта формула описывает также отмеченное ранее изменение отношения  $A/Z$  у существующих в природе ядер: с ростом  $A$  отношение  $A/Z$  растет.

Мы рассмотрели одно из следствий формулы (14.13) для изотопов с нечетными  $A$ , наиболее распространенными в природе (более половины естественных изотопов имеют нечетные значения  $A$ ). Анализ формулы (14.13) для четно-четных изотопов, т.е. изотопов с четными  $A$  и  $Z$  (мы предлагаем читателям провести его самостоятельно) показывает, что среди таких изотопов встречаются стабильные изобарные пары, т.е. пары стабильных изотопов с одним и тем же значением  $A$ , но с разными  $Z$ , причем  $\Delta Z = 2$ . Примеры таких стабильных изобарных пар:  ${}^{40}_{18}\text{Ar} - {}^{40}_{20}\text{Ca}$  и  ${}^{54}_{24}\text{Cr} - {}^{54}_{26}\text{Fe}$ .

С капельной моделью ядра мы встретимся снова в теории с о с т а в - н о г о ядра, предложенной Н. Бором для объяснения особенностей ядерных реакций при небольших энергиях взаимодействующих частиц и ядер, а также при рассмотрении деления тяжелых ядер. В заключение заметим, что капельная модель ядра, как и любая другая модель, не может объяснить всех свойств атомных ядер.

**Оболочечная модель ядра.** Многочисленные экспериментальные данные, полученные в различных областях ядерной физики, указывают на периодическую зависимость свойств ядер от числа содержащихся в них нуклонов. При этом выяснилось, что ядра, содержащие 2, 8, 20, 50, 82 или 126 протонов или нейтронов, оказываются особенно прочными. Эти числа были названы ма г и ч е с к и м и числами, а ядра, содержащие магические числа нуклонов, — ма г и ч е с к и м и ядрами. Наиболее прочными являются д в а ж д ы ма г и ч е с к и е ядра:  ${}^4_2\text{He}_{(2)}$ ,  ${}^{16}_8\text{O}_{(8)}$ ,  ${}^{40}_{20}\text{Ca}_{(20)}$  и  ${}^{208}_{82}\text{Pb}_{(126)}$ . У этих ядер и удельная энергия связи, и энергия связи протонов и нейтронов заметно превышают значения соответствующих величин в соседних ядрах. Ядра, в которых число протонов или нейтронов на  $1 \div 2$  единицы больше магического числа — нестабильны. В частности, изотопов с массовым числом  $A = 5$  ( ${}^5_2\text{He}_{(3)}$  или  ${}^5_3\text{Li}_{(2)}$ ) в природе вообще нет, т. к. энергия связи пятого нуклона в этих ядрах оказывается отрицательной. Распространенность стабильных изотопов в природе также связана с магическими числами. Например, у элемента  ${}_{50}\text{Sn}$  имеется десять стабильных изотопов. Изо всех стабильных изотопов кислорода и кальция на долю изотопа  ${}^{16}_8\text{O}$  приходится 99,8%, а на долю  ${}^{40}_{20}\text{Ca}$  — 97,0%. У свинца три стабильных изотопа, причем на долю изотопа  ${}^{208}_{82}\text{Pb}$  приходится свыше 50%, а у соседних элементов  ${}_{81}\text{Tl}$  и  ${}_{83}\text{Bi}$  имеется всего по одному стабильному изотопу. Существование магических чисел проявляется и при распаде радиоактивных ядер. При распаде магических ядер энергия распада оказывается меньшей, чем у ближайших немагических ядер, а при распаде ядер с образованием магических дочерних ядер выделяется аномально большая энергия. На существование магических чисел указывают и значения электрических квадрупольных моментов ядер: у ядер с магическим числом нуклонов квадрупольный момент равен нулю.

Существование магических ядер заставляет предположить, что нуклоны в ядрах, как и электроны в атомах, последовательно заполняют оболочки; ядра с заполненными оболочками и являются особо прочными, т. е. магическими. Это предположение легло в основу оболочечной модели ядра.

С точки зрения капельной модели ядра образование нуклонных оболочек в ядре-капле, состоящей из сильно взаимодействующих частиц,

невозможно. Ведь в атоме, где такие оболочки существуют, электроны находятся в кулоновском поле ядра (силовом центре), слабо взаимодействуя друг с другом. В ядре выделенного силового центра нет. Однако можно считать, что каждый нуклон движется в усредненном самосогласованном потенциальном поле, создаваемом всеми остальными нуклонами ядра. Это означает, что нуклоны имеют достаточно большую длину свободного пробега и, оставаясь в ядре, являются в то же время «квазинезависимыми». Состояния таких частиц могут быть рассчитаны по законам квантовой механики. Потенциал поля должен подбираться эмпирически. Решая уравнение Шредингера, мы получим систему возможных состояний нуклонов, и соответствующую ей систему энергетических уровней. Нуклоны последовательно заполняют уровни, начиная с самого нижнего. Числа протонов и нейтронов, которые могут находиться на каждом уровне, определяются квантовыми числами, описывающими состояние, и принципом Паули.

Положим, что потенциальная яма, соответствующая полю в ядре, сферически симметрична, имеет радиус, равный радиусу ядра  $R_{\text{яд}} = R_0 A^{1/3}$ , и постоянную глубину  $V_0$ .

Примем  $R_0 = 1,3 \cdot 10^{-13}$  см, а за глубину ямы примем значение  $V_0$ , найденное при анализе потенциальной ямы дейтрона:  $V_0 = -40$  МэВ. При решении уравнения Шредингера при таком потенциале получается спектр состояний, описывающихся теми же квантовыми числами, что и квантовые числа электронов в атоме:  $n, n_r, l, m_l, j, m_j, m_s$ . Но в этом простейшем случае все уровни оказываются почти равноудаленными один от другого, и никаких указаний на существование оболочек не получается. При изменении формы потенциальной ямы (например, при «закруглении» краев ямы) уровни смещаются вдоль шкалы энергий и группируются таким образом, что группы уровней отстоят одна от другой на расстояния, значительно большие, чем уровни в пределах одной группы. Эти группы и соответствуют оболочкам. Числа нуклонов в полностью заполненных оболочках должны быть равны экспериментальным значениям магических чисел. Структура нижних уровней для одной из таких ям показана на рис. 149. В обозначениях уровней указаны квантовые числа  $n_r$ , буквы, указывающие на значения квантового числа  $l$ , и значения квантового числа  $j$ . На каждом уровне может находиться  $(2j+1)$  протонов и столько

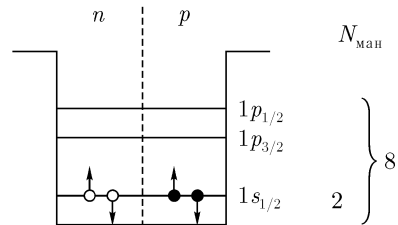


Рис. 149. Структура нижних уровней в потенциальной яме легкого ядра.

же нейтронов (энергии протонных и нейтронных уровней не различаются, так на взаимодействие нуклонов в легких ядрах кулоновские силы почти не оказывают влияния), так что магические числа 2 и 8 получают полное объяснение. Но совпадение с экспериментальными значениями *всех* магических чисел получено только в модели М. Гепперт–Майер и Дж. Иенсена, которые учли «спин – орбитальное» взаимодействие», т. е. зависимость энергии нуклонов от взаимной ориентации векторов  $\mathbf{s}$  и  $\mathbf{l}$ .

Последовательность энергетических уровней, полученная в этой модели и объясняющая все магические числа, изображена на рис. 150.

Оболочечная модель ядра хорошо объясняет свойства магических и близких к магическим ядер в основных и слабо возбужденных состояниях. Рассмотрим, например, вопрос о спине ядра. Так как нуклоны на каждом из уровней объединяются в пары с нулевым суммарным угловым моментом, то ядра с четным числом протонов и четным числом нейтронов (четно–четные ядра) должны иметь спин равный нулю. Это подтверждается опытными данными. Ядра с одним нуклоном сверх заполненной оболочки должны иметь спин этого нуклона. Например, у изотопа  ${}^{17}_8\text{O}_{(9)}$  последний нейтрон, а у изотопа  ${}^{41}_{21}\text{Sc}_{(20)}$  последний протон, находятся на уровнях с  $j = 7/2$ . Такое же значение имеют спины этих ядер:  $I = 7/2$ . Спины возбужденных состояний таких ядер, если они известны из опыта, также во многих случаях имеют значения, предсказываемые оболочечной моделью ядер. Так, у изотопа  ${}^{41}_{20}\text{Ca}$  последний нейтрон (как и последний протон у изотопа  ${}^{41}_{21}\text{Sc}$ ), находится в состоянии  $f_{7/2}$  и спин этого ядра в основном состоянии равен  $7/2$ . При возбуждении ядра нейтрон должен перейти на один из выше расположенных уровней. Самым нижним из них является уровень  $p_{3/2}$ . На этот уровень и переходит нейтрон при возбуждении. Приведем характеристики ядра  ${}^{41}_{20}\text{Ca}$  в нижнем возбужденном состоянии:  $E_{\text{возб}} = 1,95 \text{ МэВ}$ ,  $I = 3/2$ .

Как и следует из модели, магнитные моменты магических ядер равны нулю, а магнитные моменты легких ядер, близких к магическим, при расчетах получаются близкими к экспериментальным. Например, для изотопа  ${}^{15}_7\text{N}_{(8)}$  оболочечная модель ядра предсказывает:  $I = 1/2$  и  $\mu_{\text{яд}} = -0,28\mu_N$ . Экспериментальные значения:  $I = 1/2$  и  $\mu_{\text{яд}} = -0,24\mu_N$ .

Очень важным независимым (не использованным при построении модели) следствием оболочечной модели является возможность предсказать существование ядер-и з о м е р о в у тех или иных изотопов. Изомерами называются слабо возбужденные метастабильные (с  $\tau > 10^{-10}$  с) состояния изотопов. Существование таких состояний возможно только в тех случаях, когда спин ядра возбужденного состояния сильно отличается от спина ядра в основном состоянии ( $\Delta I \geq 4$ ). Из схемы уровней (рис. 150) следует, что сильное различие в величине  $j$  существует у соседних уровней  $3s_{1/2}$  и  $1h_{11/2}$ ,  $3p_{1/2}$  и  $1i_{13/2}$ . Поэтому ядра с числом протонов или нейтронов примерно равным 70 или 122 при возбуждении могут оказаться в состояниях со спинами  $11/2$  или  $13/2$ , тогда как в основных состояниях спин может быть равным  $1/2$ . Такие состояния и ока-



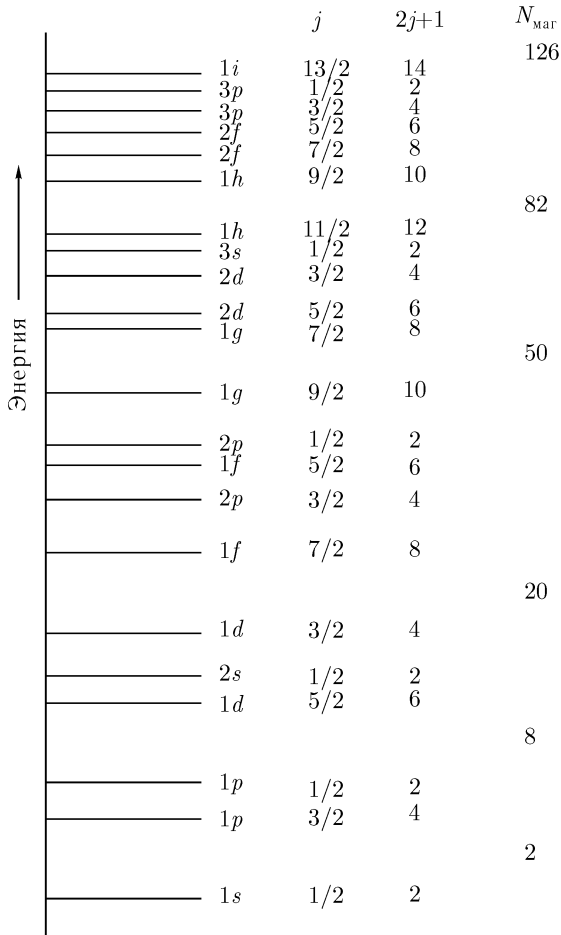


Рис. 150. Схема уровней в модели оболочек.

зываются метастабильными. Примеры ядер-изомеров:  ${}_{50}^{117}\text{Sn}_{(67)}^*$  ( $E_{\text{возб}} = 315$  кэВ;  $\Delta I = 11/2 - 1/2 = 5$ ;  $\tau = 14$  дн.);  ${}_{80}^{197}\text{Hg}_{(117)}^*$  ( $E_{\text{возб}} = 293$  кэВ;  $\Delta I = 13/2 - 1/2 = 6$ ;  $\tau = 24$  ч). Один из короткоживущих изомеров тантала —  ${}_{73}^{181}\text{Ta}_{(108)}^*$  ( $E_{\text{возб}} = 6,3$  кэВ;  $\tau = 10^{-6}$  с) — использовался в квантовом генераторе гамма-лучей.

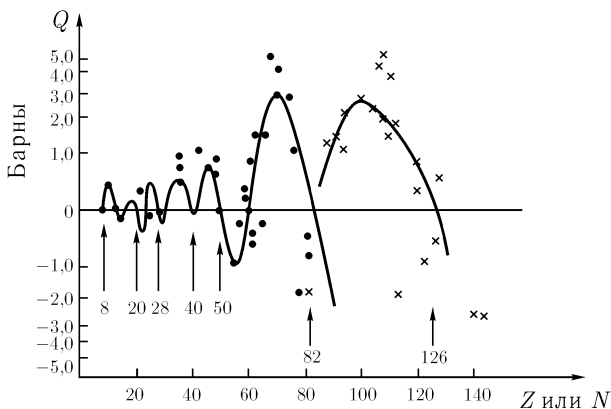


Рис. 151. Электрические квадрупольные моменты ядер с четным числом протонов (●) или нейтронов (×).

**Обобщенная модель ядра.** При обсуждении основных характеристик атомного ядра (§ 72) мы познакомились с квадрупольным моментом ядра  $Q$  и показали, что он связан с формой ядра. В капельной модели ядра невозбужденные ядра считаются сферическими. В оболочечной модели ядра с заполненными нуклонными оболочками также полагаются сферически симметричными. Опытные данные, однако, указывают на то, что большая часть существующих в природе ядер имеет  $Q \neq 0$  и, следовательно, эти ядра не являются сферическими. Принято считать, что ядра с  $Q \neq 0$  являются эллипсоидами вращения, вытянутыми вдоль оси симметрии (при  $Q > 0$ ), или сплюснутыми (при  $Q < 0$ ). Значения квадрупольных моментов для наиболее стабильных четно-четных ядер в зависимости от числа нуклонов ( $n$  или  $p$ ) в ядре представлены на рис. 151. Из рисунка видно, что в области тяжелых ядер  $Q = 0$  только у магических ядер. Значения квадрупольных моментов свидетельствуют о том, что большая часть тяжелых ядер имеет форму сильно вытянутых эллипсоидов вращения. Оболочечная модель ядра не объясняет этих результатов. В о б о б щ е н н о й м о д е л и ядра (О. Бор, Б. Моттельсон и др.) считается, что такая форма ядра связана с взаимодействием остатка ядра с нуклонами, не входящими в оболочки. Несферические ядра в отличие от сферических могут вращаться как целое. При вращении изменение ориентации ядра происходит без изменения его объема. Рассмотрим вращение вокруг оси, перпендикулярной оси симметрии и проходящей через центр тяжести ядра. Энергия вращения в классической

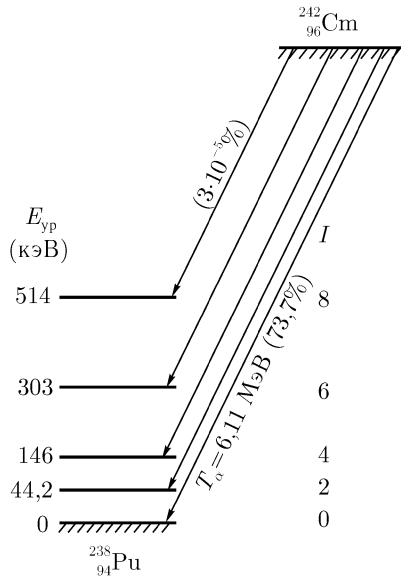


Рис. 152. Схема  $\alpha$ -распада изотопа  $^{242}_{96}\text{Cm}$ .

физике описывается известной формулой:

$$E^{\text{вп}} = M^2/2\eta,$$

где  $M$  — момент импульса вращающейся частицы, а  $\eta$  — ее момент инерции.

В квантовой механике для вращающегося ядра вместо этой формулы имеем:

$$E^{\text{вп}} = \hbar^2 J(J + 1)/2\eta,$$

где  $J$  — квантовое число, соответствующее угловому моменту ядра; момент инерции ядра  $\eta$  не может быть рассчитан так просто, как для твердого тела, но может быть получен экспериментальным путем (по одному из экспериментальных значений  $E^{\text{вп}}$ ).

Остановимся на тяжелых четно-четных ядрах. В основных состояниях их спины равны нулю. При вращательных возбуждениях ядер, находящихся в таких состояниях, должны проявляться вращательные уровни с  $I = J = 2, 4, 6, 8, \dots$ . Энергии этих уровней пропорциональны  $J(J + 1)$ :  $E_1^{\text{вп}} : E_2^{\text{вп}} : E_3^{\text{вп}} : E_4^{\text{вп}} \dots = 2(2 + 1) : 4(4 + 1) : 6(6 + 1) : 8(8 + 1) \dots = 1 : 3,33 : 7 : 12 \dots$ . Такие уровни, действительно,

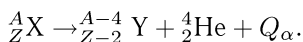
проявляются и при кулоновском возбуждении ядер (при рассеянии электронов или других заряженных частиц на ядрах), и при радиоактивном распаде ядер. В качестве примера на рис. 152 приведен спектр экспериментальных значений энергии нижних уровней изотопа плутония  ${}_{94}^{238}\text{Pu}$ , проявляющихся при  $\alpha$ -распаде изотопа  ${}_{96}^{242}\text{Cm}$ . То, что для этих уровней  $I$  проставлены на схеме правильно, следует из хорошего совпадения отношений экспериментальных энергий уровней с отношениями энергий для вращательных уровней:  $E_1 : E_2 : E_3 : E_4 = 44,2 : 146 : 303 : 514 = 1 : 3,3 : 6,85 : 11,6$ . Правильность найденных характеристик уровней, проставленных на схеме, подтверждается и при исследовании излучения, испускающегося возбужденными ядрами. Вращательные спектры могут возбуждаться и в ядрах, находящихся в «одночастичных» возбужденных состояниях, т.е. в состояниях, определяемых возбуждением одного из нуклонов, не входящих в остов ядра. Таким образом, свойства тяжелых ядер, далеких от магических, в обобщенной модели ядра описываются гораздо полнее, чем в капельной или оболочечной моделях.

## § 75. Спонтанные превращения атомных ядер

В этом параграфе мы рассмотрим процессы радиоактивного распада, излучение возбужденных ядер и спонтанное деление тяжелых ядер. Эти процессы происходят самопроизвольно. Их исследование дает обширную информацию о свойствах ядер и ядерных взаимодействиях и позволяет развивать методы их практического использования.

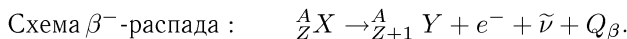
**Типы радиоактивного распада.** Явление радиоактивности — самопроизвольного испускания излучений солями урана и металлическим ураном, — было открыто А. Беккерелем в 1896 году. Уже в 1898 году М. Кюри и П. Кюри открыли два новых радиоактивных элемента: полоний  ${}_{84}\text{Po}$  и радий  ${}_{88}\text{Ra}$ . В последующие годы выяснилось, что в природе существует  $\sim 50$  естественных радиоактивных изотопов. Выяснилось также, что в состав излучений могут входить  $\alpha$ -частицы (ядра  ${}^4_2\text{He}$ ),  $\beta$ -частицы (электроны) и электромагнитное излучение ( $\gamma$ -лучи), а испускание излучений связано со спонтанными превращениями атомных ядер. Явление радиоактивности получило название **радиоактивного распада ядер**.

При  $\alpha$ -распаде превращения ядер происходят по схеме:



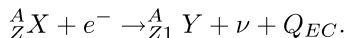
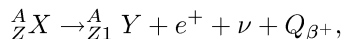
Здесь X и Y — материнское и дочернее ядра, а  $Q_\alpha$  — энергия, выделяющаяся при распаде. При распаде сохраняется суммарный элек-

трический заряд  $Z$  и суммарное массовое число  $A$ .



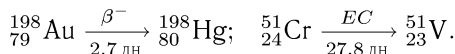
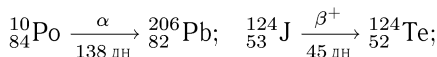
В 30-е годы были открыты процессы позитронного распада ( $\beta^+$ -распада) и электронного захвата ( $EC$ ) — захвата ядром электрона из электронной оболочки атома.

Схемы этих процессов:



Участие в трех последних процессах частиц  $\nu$  (нейтрино) и  $\tilde{\nu}$  (антинейтрино) было предсказано вскоре после открытия  $\beta$ -распада, т. к. без их участия не выполнялись бы законы сохранения энергии и импульса.

Примеры распадов разных типов (под стрелками указаны периоды полураспада):



Во всех приведенных процессах дочерние ядра могут оказаться как в основных, так и в возбужденных состояниях. Возбужденные ядра затем спонтанно переходят в основные состояния, теряя при этом энергию возбуждения. Прежде, чем перейти к обзору основных особенностей спонтанных процессов разных типов, рассмотрим некоторые общие для всех типов закономерности.

Обозначим через  $\lambda$  — вероятность распада 1 ядра в 1 сек. Тогда в образце, содержащем  $N$  радиоактивных ядер в момент времени  $t$ , число ядер, распавшихся за время  $dt$ , определится выражением:

$$-dN = \lambda N(t) dt. \quad (14.16)$$

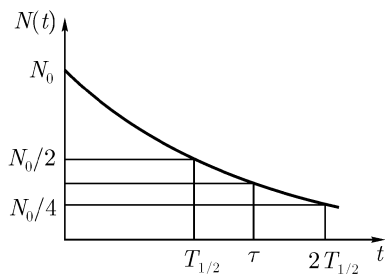
Константа  $\lambda$  называется постоянной распада. Она определяется свойствами материнского и дочернего ядер и практически не зависит ни от каких внешних причин (температура, давление, магнитное поле и др.). Формула (14.16) называется законом радиоактивного распада в дифференциальной форме. После интегрирования получается закон радиоактивного распада в интегральной форме:

$$N(t) = N_0 \exp(-\lambda t), \quad (14.17)$$

где  $N_0$  — число радиоактивных ядер в начальный момент времени, а  $N(t)$  — их число к моменту времени  $t$ .

Скорость распада  $A = dN(t)/dt = \lambda N(t)$  называется активностью образца. Единицами активности являются беккерель (Бк) и кюри (Ки). 1 Бк = 1 расп/с, 1 Ки =  $3,7 \cdot 10^{10}$  Бк (активностью  $A = 1$  Ки обладает 1 г очищенного от примесей изотопа радия  ${}^{226}_{88}\text{Ra}$ ).

Введем еще две характеристики радиоактивных ядер: среднее время жизни ядра  $\tau$  и период полураспада  $T_{1/2}$ . В соответствии с определением математического ожидания, среднее время жизни ядра вычисляется по формуле:



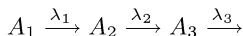
$$\tau = \int_0^{\infty} t \exp(-\lambda t) dt = 1/\lambda. \quad (14.18)$$

Рис. 153. Зависимость  $N(t)$  от  $t$ .

Из формул (14.17) и (14.18) следует, что  $\tau$  — это время, за которое число радиоактивных ядер уменьшается в  $e$  раз. Периодом полураспада  $T_{1/2}$  называется время, в течение которого распадается половина исходных ядер (рис. 153). Из формулы (14.17) получаем:

$$N/2 = N_0 \exp(-\lambda T_{1/2}), \quad \text{откуда} \quad T_{1/2} = \ln 2/\lambda = \ln 2 \cdot \tau. \quad (14.19)$$

Дочерние ядра часто сами оказываются радиоактивными. В этих случаях мы имеем дело с радиоактивными рядами, связывающими большое число ядер, или с радиоактивными цепочками из небольшого числа звеньев:



Закон радиоактивного распада (14.17) во всех таких случаях пригоден только для расчета количества ядер первого сорта в цепочке. Число ядер второго сорта  $N_2(t)$  зависит и от скорости образования этих ядер, и от скорости их распада. Поэтому для получения формулы для расчета  $N_2(t)$  нужно составить систему из двух дифференциальных уравнений:

$$dN_1/dt = -\lambda_1 N_1, \quad (14.16')$$

$$dN_2/dt = +\lambda_1 N_1 - \lambda_2 N_2. \quad (14.20)$$

В результате интегрирования системы (при условии, что в начальный момент времени  $N_1 = N_{01}$ , а  $N_2 = 0$ ) для  $N_2(t)$  получаем выражение:

$$N_2(t) = \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} N_{01} \left( e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t} \right). \quad (14.21)$$

Активности каждого из изотопов равны:

$$A_1(t) = \lambda_1 N_1(t) = \lambda_1 N_{01} e^{-\lambda_1 t}. \quad (14.22)$$

$$A_2(t) = \lambda_2 N_2(t) = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} N_{01} \left( e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t} \right). \quad (14.23)$$

Очевидно, что цепочки из двух звеньев могут долго существовать только в тех случаях, когда период полураспада первого изотопа  $(T_{1/2})_1$  достаточно велик и  $\lambda_1 \ll \lambda_2$ . В этих случаях между активностями первого и второго изотопов наступает равновесие. Покажем это. При  $\lambda_1 \ll \lambda_2$  для  $N_2(t)$  получаем:

$$N_2(t) = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} N_{01} \left( e^{-\lambda_1 t} - 0 \right), \text{ откуда } \lambda_2 N_2(t) = \lambda_1 N_{01} e^{-\lambda_1 t}, \text{ или } A_2(t) = A_1(t). \quad (14.24)$$

Состояние равновесия наступает через некоторое время  $t_{\text{макс}}$ , в течение которого идет накопление ядер  $N_2(t)$  и активности  $A_2(t)$  в образце (рис. 154). Оно сохраняется во все последующие моменты времени.

Для получения формулы для расчета  $N_3(t)$  к системе уравнений (14.16') и (14.20) необходимо добавить третье уравнение для скорости изменения числа ядер сорта  $A_3$ , и т. д.

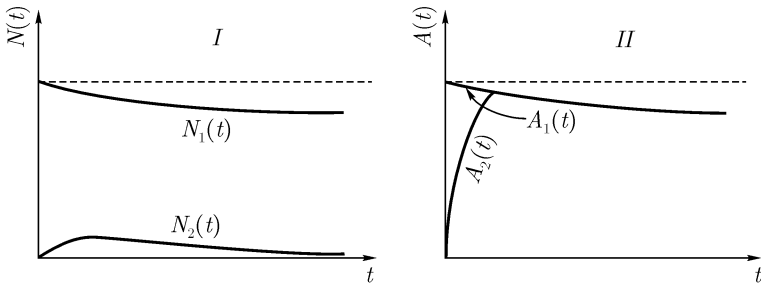


Рис. 154. I — Зависимость  $N_1$  и  $N_2$  от  $t$ . II — Зависимость  $A_1$  и  $A_2$  от  $t$ .

**Альфа-распад.** Схема  $\alpha$ -распада была приведена в начале параграфа. Воспользуемся законом сохранения полной энергии и составим

формулу для расчета энергии распада  $Q_\alpha$ :

$$Q_\alpha (\text{МэВ}) = 931,5 (\text{МэВ/а.е.м.}) \{M^{\text{ат}}(\frac{A}{Z}X) - [M^{\text{ат}}(\frac{A-4}{Z-2}Y) + M^{\text{ат}}(\frac{4}{2}\text{He})]\} (\text{а.е.м.}). \quad (14.25)$$

(Вместо масс ядер в формулу введены табличные значения масс атомов; массы атомных электронов, как это видно из формулы, не оказывают влияния на значение  $Q_\alpha$ ).

Энергия распада выделяется в виде кинетической энергии  $\alpha$ -частицы и дочернего ядра:

$$Q_\alpha = T_\alpha + T_{\text{д.я.}}$$

Из закона сохранения импульса следует, что большая часть энергии приходится на долю  $\alpha$ -частиц. Если  $A$  — массовое число материнского ядра, то:

$$T_\alpha = Q_\alpha \frac{A}{A+4}. \quad (14.26)$$

Расчеты показывают, что для тяжелых ядер с массовыми числами  $A > 130$   $Q_\alpha > 0$  и, казалось бы, все изотопы с  $A > 130$  должны испытывать  $\alpha$ -распад. Из опыта известно, однако, что в области ядер с  $A \approx 140 \div 150$  есть только небольшая группа  $\alpha$ -активных изотопов:  ${}_{60}^{144}\text{Nd}_{(84)}$ ,  ${}_{62}^{147}\text{Sm}_{(85)}$  и др. У всех этих изотопов число нейтронов в ядре превышает магическое число 82 всего на несколько единиц. Энергия  $\alpha$ -частиц, образующихся при распаде этих ядер, невелика ( $2,5 \div 3,5$  МэВ), а при энергии распада  $< 2,5$  МэВ  $\alpha$ -распад, практически, не наблюдается.

Остановимся более подробно на основной группе  $\alpha$ -активных изотопов, у которых  $Z \geq 84$  и  $A \geq 210$ . У этих изотопов  $T_\alpha \approx 4 \div 10$  МэВ, т. е. диапазон энергий невелик, тогда как периоды полураспада, варьируются в огромном диапазоне: от  $T_{1/2} = 3 \cdot 10^{-7}$  с (для  ${}_{84}^{212}\text{Po}$ ) до  $T_{1/2} = 1,4 \cdot 10^{10}$  л (для  ${}_{90}^{232}\text{Th}$ ). Между  $T_\alpha$  и  $T_{1/2}$  существует очень сильная зависимость: при увеличении  $T_\alpha$  в 2 раза  $T_{1/2}$  уменьшается на 20 порядков. Например, при распаде ядер  ${}_{84}^{212}\text{Po}$   $T_\alpha \approx 8,8$  МэВ, а при распаде ядер  ${}_{90}^{232}\text{Th}$   $T_\alpha \approx 4,0$  МэВ, т. е. энергии  $\alpha$ -частиц различаются в  $8,8/4 =$

$$= 2,2 \text{ раза. Отношение же их периодов полураспада равно: } \frac{T_{1/2}({}_{90}^{232}\text{Th})}{T_{1/2}({}_{84}^{212}\text{Po})} =$$

$$= \frac{1,4 \cdot 10^{10} \cdot 3,15 \cdot 10^7 \text{ с}}{3 \cdot 10^{-7} \text{ с}} = 1,5 \cdot 10^{24}. \text{ Такая сильная зависимость вероятности}$$

распада от энергии  $\alpha$ -частиц, обнаруженная экспериментально в первые же годы изучения  $\alpha$ -распада, требовала объяснения. Гейгер и Нэттол установили эмпирическую зависимость (закон Гейгера — Нэттола):

$$\lg \lambda = A - B/\sqrt{T_\alpha}. \quad (14.27)$$



Закон (14.27) правильно отражает зависимость  $\lambda$  (а следовательно, и  $T_{1/2}$ ) от  $T_\alpha$ , но не объясняет физических причин этой зависимости. Теоретическое объяснение этой зависимости было получено только после создания квантовой механики. Построение теории  $\alpha$ -распада явилось ее первым успешным применением. Основные положения теории  $\alpha$ -распада:

1. В ядрах могут образовываться  $\alpha$ -частицы;
2.  $\alpha$ -частицам, находящимся в ядрах с  $A > 130$ , энергетически выгодно покинуть ядро ( $Q_\alpha > 0$ ), однако, вылету  $\alpha$ -частиц мешает потенциальный барьер.

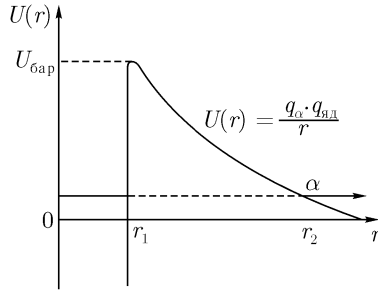


Рис. 155. Потенциальный барьер при  $\alpha$ -распаде тяжелых ядер.

Рассмотрим график зависимости энергии взаимодействия  $\alpha$ -частицы и дочернего ядра от расстояния  $r$  между ними (рис. 155). При достаточно больших  $r$  энергия взаимодействия  $U(r)$  равна нулю. При сближении  $\alpha$ -частицы и ядра сначала начинают действовать только дальнедействующие кулоновские силы отталкивания, и  $U(r)$  растет с уменьшением  $r$ :  $U(r) = q_\alpha q_{\text{яд}}/r$ . При сближении  $\alpha$ -частицы и ядра «до соприкосновения» ( $r_1 \approx R_{\text{яд}} + R_\alpha$ ) начинают действовать большие, короткодействующие ядерные силы притяжения, и кривая  $U(r)$  резко идет вниз, образуя потенциальную яму, окруженную потенциальным барьером. Оценим высоту барьера, положив  $q_{\text{яд}} = 90e$  и  $r_1 \approx 10^{-12}$  см:

$$U = 2 \cdot 90e^2/r = 2 \cdot 90(4,8 \cdot 10^{-10} \text{ ед. } q_{\text{СГСЭ}})^2/10^{-12} \text{ см} \cdot 1,6 \cdot 10^{-6} \text{ эрг} / \text{МэВ} \approx 25 \text{ МэВ}.$$

Однако, из ядер, окруженных таким высоким потенциальным барьером, могут «просто вылетать»  $\alpha$ -частицы с энергией  $> 25$  МэВ; для частиц с меньшей энергией это может происходить только вследствие туннельного эффекта. Проницаемость потенциального барьера  $D$  описывается известной из квантовой механики формулой, которая

в нашем случае имеет следующий вид:

$$D = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m_\alpha(U(r) - T_\alpha)} dr \right\} \quad (14.28)$$

Вероятность пройти под барьером вследствие туннельного эффекта возникает у  $\alpha$ -частицы, имеющей скорость  $\nu$ , всякий раз, когда она сталкивается со стенками потенциальной ямы. Поэтому для постоянной распада  $\lambda$  имеем:

$$\begin{aligned} \lambda &= (\nu_\alpha/2R_{\text{яд}}) \cdot D = \\ &= (\sqrt{2T_\alpha/m_\alpha}/2R_{\text{яд}}) \cdot \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m_\alpha(U(r) - T_\alpha)} dr \right\}. \end{aligned} \quad (14.29)$$

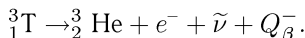
Здесь  $r_1 = R_{\text{яд}} + r_\alpha$ , а  $r_2$  находится из равенства  $T_\alpha = q_\alpha q_{\text{яд}}/r_2$  (см. рис. 155).

Выражение (14.29) приводит к формуле, совпадающей с законом Гейгера – Нэттола (14.27). Теория показывает, что значения  $A$  и  $B$  являются константами для  $\alpha$ -активных изотопов одного и того же элемента ( $A \approx 50$  и  $B \approx 140$ ); при переходах от элемента к элементу они несколько различаются. Из (14.27) следует также, что при  $T_\alpha < 4$  МэВ  $\lambda$  очень малы, а периоды полураспада соответственно велики; при  $T_\alpha < 2,5$  МэВ  $\alpha$ -распад практически не наблюдается.

**Бета-распад.** В процессах  $\beta$ -распада принимают участие  $e^-$  и  $e^+$ , а также  $\nu$  и  $\bar{\nu}$ . Если  $\alpha$ -распад полностью объясняется ядерным и кулоновским взаимодействиями, то  $\beta$ -распад происходит благодаря еще одному типу взаимодействия, с которым мы пока не встречались. Оно называется слабым взаимодействием. Название правильно отражает суть дела. Это взаимодействие, действительно, существенно слабее и электромагнитного и, тем более, ядерного. Основные его особенности будут рассмотрены в гл. 16. А здесь мы ограничимся изложением наиболее важных экспериментальных данных о  $\beta$ -активных ядрах, которые и позволили в дальнейшем создать теорию слабого взаимодействия.

Еще при рассмотрении капельной модели ядра мы выяснили, что среди изотопов с одним и тем же нечетным массовым числом  $A$  существует только один стабильный изотоп. Его масса меньше масс всех других изотопов с таким же  $A$ . ( $\gamma$  ядер-изобар с четными  $A$  могут существовать стабильные изобарные пары и даже триады, но их число невелико).

В качестве примера рассмотрим изотопы  ${}^3_1\text{T}$  ( $M^{\text{яд}} = 3,01550$  а.е.м.) и  ${}^3_2\text{He}$  ( $M^{\text{яд}} = 3,01493$  а.е.м.). Более тяжелое ядро  ${}^3_1\text{T}$   $\beta^-$ -активно и распадается по схеме:



Закон сохранения заряда в этом процессе выполняется, т. к. заряд антинейтрино (как и заряд нейтрино) равен нулю. Воспользовавшись законом сохранения энергии, и пренебрегая массой антинейтрино (она равна нулю или очень мала), рассчитаем энергию, выделяющуюся при распаде:

$$\begin{aligned} Q_{\beta}^- &= 931,5 \text{ МэВ/ а.е.м.} \{M^{\text{яд}}({}^3_1\text{T}) - [M^{\text{яд}}({}^3_2\text{He}) + m_e]\} \text{ а.е.м.} = \\ &= 931,5 \text{ МэВ/ а.е.м.} \{M^{\text{ат}}({}^3_1\text{T}) - M^{\text{ат}}({}^3_2\text{He})\} \text{ а.е.м.} = \\ &= 931,5 \cdot 0,00002 \text{ МэВ} = 18 \text{ кэВ}. \end{aligned}$$

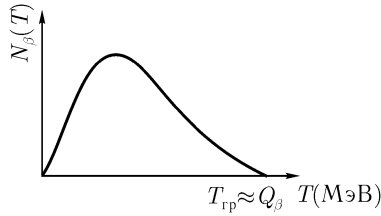
При распаде эта энергия выделяется в виде кинетической энергии электрона, дочернего ядра и энергии антинейтрино:

$$Q_{\beta}^- = T_{\beta^-} + T_{\text{яд}} + E_{\tilde{\nu}}.$$

Антинейтрино (и нейтрино) зарегистрировать чрезвычайно трудно. На долю дочернего ядра с  $M_{\text{яд}} \gg m_e$  приходится очень малая энергия. Поэтому при исследовании  $\beta$ -распада измеряют энергию  $\beta$ -частиц. Бета-спектр  ${}^3_1\text{T}$  (зависимость числа  $\beta$ -частиц от их энергии) изображен на рис. 156. Спектр — сплошной, с границей  $T_{\text{гр}} = T_{\text{макс}} \approx Q_{\beta}$ . У других  $\beta$ -активных ядер  $\beta$ -спектр может иметь несколько другую форму, но он всегда — сплошной, т. к. в  $\beta$ -распаде участвуют *три* частицы, и энергия каждой из них зависит от их углового распределения. Небольшое влияние на форму левой части спектра оказывает кулоновское взаимодействие дочернего ядра с электронами при  $\beta$ -распаде или с позитронами при  $\beta^+$ -распаде: доля частиц с малыми энергиями в первом случае оказывается меньшей, чем во втором.

Для исследования формы  $\beta$ -спектров используются  $\beta$ -спектрометры — приборы, в которых электрические и магнитные поля служат для пространственного разделения траекторий  $\beta$ -частиц с разными импульсами (и энергиями).

В 1934 г. Ферми показал, что электрон и нейтрино появляются при  $\beta$ -распаде в результате очень слабого взаимодействия нуклона с электронно-нейтринным полем. В построенной им теории  $\beta$ -распада использовался аппарат квантовой теории поля, успешно применяемый при описании электромагнитных явлений. Мы не будем рассматривать варианты этой теории, т. к. в последующие и, особенно, в последние годы теория слабого взаимодействия получила дальнейшее развитие

Рис. 156.  $\beta$ -спектр  ${}^3_1\text{T}$ .

(см. гл. 16). Остановимся только на получении формулы, описывающей форму  $\beta$ -спектров для разрешенных переходов, при которых  $I_{\text{доч. яд.}} = I_{\text{мат. яд.}}$  (такие переходы были названы фермиевскими).

Рассмотрим  $\beta$ -распад с  $T_{\text{гр}} = T_{\text{макс}}$ . (Сейчас нам не важно, будет это  $\beta^-$ -распад или  $\beta^+$ -распад.) Вероятность  $d\omega$  распада, при котором электрон имеет  $T_e \leq T_{\text{макс}}$ , равна произведению вероятностей вылета электрона с энергией  $T_e$  и нейтрино с энергией  $E_\nu = T_{\text{макс}} - T_e$  (энергией ядра отдачи пренебрегаем ввиду его малости). Эти вероятности пропорциональны фазовым объемам в импульсных пространствах электрона ( $4\pi p_e^2 dp_e$ ) и нейтрино ( $4\pi p_\nu^2 dp_\nu$ ).

Импульсы электрона и нейтрино квантуются, и для получения статистических весов, т. е. чисел возможных состояний  $e$  и  $\nu$  в соответствующих фазовых объемах, последние должны быть разделены на постоянный множитель  $(2\pi\hbar)^3$ , равный величине фазового объема, приходящегося на 1 состояние. (Подробнее о фазовом объеме и статистическом весе см. § 39.)

При очень большом числе распадов, равном  $N_0$ , число распадов с вылетом электронов с импульсом  $p_e$  и нейтрино с импульсом  $p_\nu$  равно  $dN = N_0 d\omega$ . Следовательно,

$$dN \sim p_e^2 dp_e \cdot p_\nu^2 dp_\nu. \quad (14.30)$$

Для получения выражения, описывающего энергетический спектр электронов (рис. 156) перейдем от распределения по импульсам к распределению по энергиям. При этом воспользуемся очевидными соотношениями:

— для нейтрино (полагаем  $m_\nu = 0$ ):  $p_\nu = E_\nu/c$ , причем  $E_\nu = T_{\text{макс}} - T_e$ ;

— для релятивистских электронов:  $T_e = (p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4)^{1/2} - m_e c^2$ .

Проделав все необходимые преобразования, т. е. выразив через  $T_e$  все

множители, входящие в (14.30), получаем для  $N(T_e) = dN/dT_e$ :

$$N(T_e) \sim [T_e(T_e + 2m_e c^2)]^{1/2} \cdot (T_e + m_e c^2) \cdot (T_{\text{макс}} - T_e)^2. \quad (14.31)$$

Формула (14.31), как указывалось выше, описывает форму спектров разрешенных переходов. При  $T_e = 0$  и при  $T_e = T_{\text{макс}}$   $N(T_e)$  обращается в нуль (рис. 156). В области малых энергий ( $T_e \ll T_{\text{макс}}$  и, следовательно,  $T_e \ll m_e c^2$ )  $N(T_e) \sim T_e^{1/2}$ . Однако эта зависимость искажается кулоновским взаимодействием ядер с электронами (при  $\beta^-$ -распаде), или с позитронами (при  $\beta^+$ -распаде). Поэтому участки спектров при малых  $T$  при  $\beta^-$ -распадах оказываются обогащенными электронами, а при  $\beta^+$ -распаде — обедненными позитронами. Искажение спектров тем сильнее, чем больше  $Z$  ядер.

Вероятность  $\beta$ -распада определяется выражением:

$$\lambda = \frac{1}{N_0} \int_0^{T_{\text{макс}}} N(T_e) dT_e.$$

Функция  $N(T_e)$  является довольно сложной, но в релятивистском приближении ( $T_{\text{макс}} \gg m_e c^2$ ) интегрирование оказывается не слишком громоздким. Для этого случая получаем:

$$\begin{aligned} N(T_e) &\sim T_e^2 (T_{\text{макс}} - T_e)^2, \\ \text{и } \lambda &\sim (T_{\text{макс}})^5 \sim Q_\beta^5. \end{aligned} \quad (14.32)$$

Из (14.32) следует, что  $\lambda$  и  $T_{1/2} = \ln 2 / \lambda$  у  $\beta$ -активных ядер зависят от энергии  $\beta$ -распада хоть и сильно, но не настолько сильно, как при  $\alpha$ -распаде (см. формулу (14.27)).

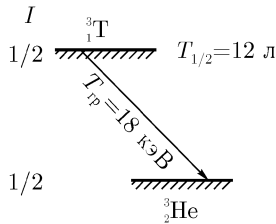


Рис. 157. Схема распада  ${}^3_1\text{T}$ .

Вернемся к распаду  ${}^3_1\text{T}$ . Период полураспада  ${}^3_1\text{T}$  равен 12,3 л. Спины ядер  ${}^3_1\text{T}$  и  ${}^3_2\text{He}$  одинаковы и равны  $1/2$  (рис. 157). Изменение структуры ядра в этом случае невелико, распад должен быть разрешенным и совершаться быстро. Однако, энергия распада в рассматриваемом случае мала, и  $T_{1/2}$  оказывается большим. При  $\beta$ -распаде других ядер разность спинов материнского и дочернего ядер может оказаться большой ( $\Delta I > 2$ ), и тогда распад оказывается «запрещенным» и даже при больших  $Q_\beta$  происходит с малыми  $\lambda$  и большими  $T_{1/2}$ .

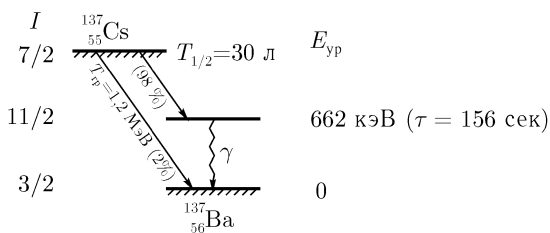
**Распад свободного нейтрона.** В процессе  ${}^3_1\text{T} > {}^3_2\text{He}$  происходит превращение связанного в ядре  ${}^3_1\text{T}$  нейтрона в протон, также связанный, но уже в ядре  ${}^3_2\text{He}$ :  $n^* \rightarrow p^*$ . При позитронном распаде и электронном захвате происходит обратный процесс:  $p^* \rightarrow n^*$ . У протона и у нейтрона массовое число  $A = 1$ . Т.к.  $m_n > m_p$ , то свободный нейтрон должен быть  $\beta^-$ -активным. Распад нейтрона был обнаружен в 1950 году. Анализ этого процесса будет проведен в гл. 16.

**Электронный захват.** Среди  $\beta$ -активных изотопов есть такие, которые могут испытывать все три типа  $\beta$ -распада (разумеется, с разными вероятностями и разными энергиями распада). При распаде нейтрондефицитных ядер ( ${}^{106}_{47}\text{Ag}$  и др.)  $\beta^+$ -распад и электронный захват являются конкурирующими процессами. При  $\beta^+$ -распаде форма  $\beta$ -спектра, как и при  $\beta^-$ -распаде, является сплошной и имеет те же характерные особенности. При электронном захвате продуктами распада являются всего две частицы: дочернее ядро и нейтрино. Поэтому энергия, выделяющаяся при электронном захвате, распределяется между продуктами распада всегда одинаково. Самым легким изотопом, испытывающим электронный захват, является изотоп  ${}^7_4\text{Be}$ :



Законы сохранения энергии и импульса позволяют найти и полную энергию, выделяющуюся при распаде, и кинетическую энергию дочернего ядра. Расчетное и экспериментальное значения этой энергии ( $T_{\text{яд}} = 57,3 \text{ эВ}$ ) совпадают. Это совпадение явилось одним из первых доказательств существования нейтрино.

**Излучение возбужденных ядер.** И при  $\alpha$ -распаде, и в процессах  $\beta$ -распада дочерние ядра могут получаться не только в основных, но и в возбужденных состояниях. На рис. 158 изображена схема распада изотопа  ${}^{137}_{55}\text{Cs}$ , который в числе многих других радиоактивных изотопов образуется при делении тяжелых ядер. Рядом с уровнями дочернего ядра, получающегося при распаде, проставлены их энергии и спины.

Рис. 158. Схема распада  $^{137}_{55}\text{Cs}$ .

Характеристики уровней таковы, что распад с образованием дочернего ядра  $^{137}_{56}\text{Ba}$  в основном состоянии оказывается еще более запрещенным, чем распад в состояние с энергией возбуждения  $E = 0,662$  МэВ, и общий период полураспада оказывается большим:  $\sim 30$  лет.

В тех случаях, когда ядра, образующиеся при радиоактивном распаде оказываются в возбужденных состояниях, избыток энергии передается квантам электромагнитного излучения. В случае, изображенном на рис. 158, возбужденное ядро  $^{137}\text{Ba}^*$  распадается с  $\tau = 156$  с. Это — огромное время для электромагнитного перехода, указывающее на его сильную «запрещенность», связанную с большим различием спинов возбужденного и основного состояний ( $\Delta I = 4$ ). Возбужденные ядра с  $\tau > 10^{-10}$  с, как уже упоминалось выше, принято называть *изомерами* и основными состояний.

Изотоп  $^{137}_{55}\text{Cs}$  является удобным источником  $\gamma$ -лучей с  $E_\gamma = 0,662$  МэВ и широко используется как в научных, так и в практических целях (например, для выявления дефектов внутри металлических изделий в металлообрабатывающей промышленности, или для стерилизации продуктов в пищевой промышленности).

С испусканием  $\gamma$ -квантов конкурирует процесс испускания электронов внутренней конверсии. При этом возбужденное ядро взаимодействует с электронной оболочкой атома таким образом, что вся избыточная энергия ядра передается одному из электронов (чаще всего, из К- или L-слоев электронной оболочки), и он покидает атом (атомный остаток приобретает при этом небольшую энергию отдачи). В атоме, испустившем электрон внутренней конверсии, происходит перестройка электронной оболочки: свободное место занимает электрон с меньшей энергией связи (при этом испускается квант характеристического рентгенового излучения), его место занимает другим электроном и т. д. Вместо рентгеновских квантов при перестройке электронной оболочки могут испускаться электроны Оже. Так называются элек-

троны, получившие энергию не от ядра, а от возбужденной электронной оболочки. (Вероятности всех процессов, происходящих при перестройке электронной оболочки, как всегда, зависят от «правил отбора», разрешающих, или запрещающих тот или процесс.)

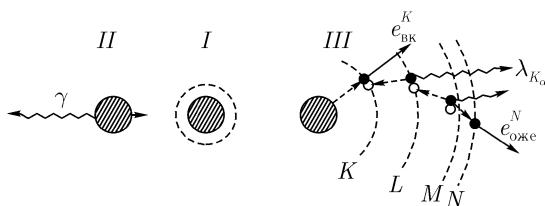


Рис. 159. Схема процессов, происходящих при «высвечивании» возбужденных ядер (I): II — испускание  $\gamma$  — кванта; III — образование электронов внутренней конверсии и электронов Оже.

Схема всех рассмотренных выше процессов изображена на рис. 159. В средней части рисунка (под цифрой I) условно изображено возбужденное ядро. В левой части (II) изображено «высвечивание» возбужденного ядра с испусканием  $\gamma$ -кванта. В правой части (III) показана схема конкурирующего процесса — испускание электрона внутренней конверсии с K-слоя ( $e_{в.к}^K$ ); там же изображена схема образования характеристического рентгеновского кванта  $K_{\alpha}$  и схема испускания электрона Оже с N-слоя атома ( $e_{Оже}^N$ ). Пренебрегая энергией отдачи атомов, с помощью закона сохранения энергии получаем:

$$\begin{aligned} E_{\gamma} &= E_{\text{возб}}; \\ T(e_{в.к}^K) &= E_{\text{возб}} - \varepsilon_{св}^K; \\ E(\hbar\omega_{K\alpha}) &= \varepsilon_{св}^K - \varepsilon_{св}^L; \\ T(e_{Оже}^N) &= (\varepsilon_{св}^L - \varepsilon_{св}^M) - \varepsilon_{св}^N. \end{aligned}$$

Здесь  $\varepsilon_{св}^K$ ,  $\varepsilon_{св}^L$ ,  $\varepsilon_{св}^M$  и  $\varepsilon_{св}^N$  — энергии связи электронов в соответствующих слоях электронной оболочки атома.

**Естественная радиоактивность. Радиоактивные ряды.** Большая часть радиоактивных изотопов, содержащихся в земной коре, входит в три радиоактивных ряда (семейства), в каждом из которых  $\sim 15$  звеньев. В каждом из семейств все изотопы, кроме первого и последнего, получают при распаде предыдущих изотопов и сами распадаются



ся. «Родоначалниками» семейств являются:  ${}_{92}^{238}\text{U}$  ( $T_{1/2} = 4,5 \cdot 10^9$  л),  ${}_{92}^{235}\text{U}$  ( $T_{1/2} = 7,0 \cdot 10^8$  л) и  ${}_{90}^{232}\text{Th}$  ( $T_{1/2} = 1,4 \cdot 10^{10}$  л). Периоды полураспада этих изотопов сравнимы с геологическим возрастом Земли, равным  $\sim 4,6$  млрд лет. Среди членов семейств встречаются как  $\alpha$ -активные, так и  $\beta^-$ -активные изотопы. Их периоды полураспада варьируются от тысяч лет до долей секунды; все они находятся в состоянии радиоактивного равновесия со своими родоначалниками (см. формулу 14.24). В каждом ряду есть один из изотопов *эманации радия* ( $Z = 86$ ), существующих только в газообразном состоянии (изотоп  ${}_{86}^{222}\text{Rn}$  называется радоном, его другое обозначение —  ${}^{222}\text{Rn}$ ). Ряды заканчиваются стабильными изотопами свинца — элемента с магическим числом  $Z = 82$ , причем ряд, начинающийся с  ${}_{90}^{232}\text{Th}$ , заканчивается дважды магическим изотопом  ${}_{82}^{208}\text{Pb}_{(126)}$ .

В естественных радиоактивных рядах в результате распада массовое число  $A$  или уменьшается на 4 ед. (при  $\alpha$ -распаде), или остается без изменения (при  $\beta^-$ -распаде). Поэтому массовые числа в каждом из трех семейств описываются формулами  $4n+2$ ,  $4n+3$  и  $4n$ , соответственно. Искусственным путем с помощью ядерных реакций был получен 4-й радиоактивный ряд с  $A = 4n+1$ . У его родоначалника — изотопа нептуния  ${}_{93}^{237}\text{Np}$  период полураспада равен  $2,1 \cdot 10^6$  лет. Он сам и продукты его распада сохранились в земной коре лишь в очень небольшом количестве. Кроме изотопов, входящих в радиоактивные ряды, в земной коре сохранилось еще около 10 долгоживущих радиоактивных изотопов. Это изотоп  ${}_{19}^{40}\text{K}_{(21)}$ , несколько  $\alpha$ -активных изотопов редкоземельных элементов, о которых упоминалось выше, и некоторые другие. Кроме этого, в атмосфере Земли постоянно присутствуют изотопы  ${}_{1}^3\text{T}$ ,  ${}_{6}^{14}\text{C}$ ,  ${}_{15}^{32}\text{P}$  и ряд др. изотопов, получающихся в результате ядерных реакций, происходящих под действием космических частиц. Некоторые из них используются в «радиоизотопных» методах при различного рода исследованиях.

Например,  $\beta$ -активный изотоп  ${}_{6}^{14}\text{C}$  частично замещает изотоп  ${}_{6}^{12}\text{C}$  в молекулах  $\text{CO}_2$ . Эти молекулы поглощаются растениями, а затем и животными, питающимися этими растениями. Весь живой растительный и животный мир содержит небольшое количество изотопа  ${}_{6}^{14}\text{C}$ . Если же обмен с внешней средой заканчивается (срублено дерево, погибло животное и т. п.), то концентрация изотопа  ${}_{6}^{14}\text{C}$  уменьшается по обычному закону 14.17). По уменьшению относительной концентрации этого изотопа можно судить о возрасте исследуемого объекта (до  $\sim 30$  тыс. лет).

**Спонтанное деление ядер.** Самые тяжелые ядра ( ${}_{92}^{238}\text{U}$ ,  ${}_{92}^{235}\text{U}$  и др.) способны самопроизвольно делиться на сравнимые по массе фрагменты (их число чаще всего равно двум), которые называют «осколками». Из формулы Вайцеккера следует, что тяжелым ядрам делиться

энергетически выгодно. При делении происходит изменение кулоновской (она уменьшается) и поверхностной (она растет) энергии. Для ядер с  $A > 100$  рост уменьшения кулоновской энергии превалирует над ростом поверхностной энергии ( $\Delta Q_{\text{пов}} - \Delta Q_{\text{кул}} > 0$ ), и деление ядер становится энергетически выгодным. У самых тяжелых ядер с  $A = 230 \div 240$  энергия, выделяющаяся при делении, достигает  $\sim 200$  МэВ. Осколки деления, как правило, несимметричны: один из них (легкий) имеет  $A_1 \approx 90 \div 100$ , а другой (тяжелый)  $A_2 \approx 140 \div 150$ . Эта несимметричность в оболочечной модели ядра объясняется тем, что энергия делящегося ядра недостаточна для разрушения внутренних, наиболее прочных оболочек, и они не делятся, а входят целиком в один из осколков (тяжелый).

Т. к. у самых тяжелых ядер отношение  $N_n/N_p \approx 1,6$ , а у ядер с вдвое меньшей массой это отношение равно  $\sim 1,3$ , то при делении, кроме осколков, испускаются  $2 \div 3$  нейтрона, а сами осколки  $\beta^-$ -активны и образуют радиоактивные цепочки из нескольких звеньев.

Делению препятствует потенциальный барьер, аналогичный барьеру, мешающему вылету  $\alpha$ -частиц из  $\alpha$ -активных ядер (рис. 155), и процесс спонтанного деления, как и  $\alpha$ -распад, происходит в результате туннельного эффекта. Периоды полураспада для спонтанного деления тяжелых ядер, существующих в природе, существенно больше периодов полураспада для  $\alpha$ -распада этих же ядер ( ${}_{92}^{238}\text{U } T_{1/2}^{\text{сп. дел.}} = 1,3 \cdot 10^{16}$  лет). Однако, у искусственно получаемых изотопов с  $Z > 92$  и  $A > 240$  высота потенциального барьера уменьшается с ростом  $A$ , и вероятность спонтанного деления растет. Именно этот процесс, по-видимому, ограничивает получение сверхтяжелых элементов с  $Z > 110$ .

**Запаздывающие нейтроны (нейтронная активность).** Ядра — осколки, образующиеся при делении, перегружены нейтронами и, как уже указывалось выше, оказываются  $\beta^-$ -активными. При распаде они образуют цепочки, в некоторых из которых находятся ядра, способные испытывать «нейтронный распад», т. е. самопроизвольно испускать нейтроны. Рассмотрим одну из таких цепочек. Среди ядер-осколков с довольно большой вероятностью ( $\sim 3\%$ ) образуется  $\beta^-$ -активный изотоп  ${}_{35}^{87}\text{Br}$  ( $T_{1/2} = 55,6$  с); его дочернее ядро  ${}_{36}^{87}\text{Kr}_{(51)}$  образуется и в основном и в возбужденном состояниях. Число нейтронов в этом ядре равно 51, т. е. на 1 ед. больше магического числа 50. Энергия связи «лишнего» нейтрона в возбужденном ядре  ${}_{36}^{87}\text{Kr}_{(51)}^*$  оказывается отрицательной, и нейтрон почти мгновенно покидает его. Однако, изотоп  ${}_{36}^{87}\text{Kr}^*$  образуется в результате распада ядра-предшественника, у которого  $T_{1/2} = 55,6$  с. Это время и воспринимается как период полураспада запаздывающих нейтронов.

Наличие запаздывающих нейтронов среди продуктов распада ядер-осколков оказывается чрезвычайно важным для решения проблемы управления ядерными реакторами. Без запаздывающих нейтронов среднее время жизни  $\tau$  нейтронов одного поколения в активной зоне реактора даже в реакторах, работающих на тепловых нейтронах, не превышало бы  $10^{-3}$  с. Для запаздывающих нейтронов  $\tau \approx 13$  с. Их влияние сказывается на величине  $\tau_{\text{ср}}$ , которое может достигать нескольких секунд, что достаточно для управления работой реактора.

**Трансурановые элементы.** Трансурановыми называются элементы с  $Z > 92$ . Некоторые изотопы  ${}_{93}\text{Np}$  и  ${}_{94}\text{Pu}$  в очень небольших количествах сохранились в земной коре. Изотоп  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$  ( $T_{1/2} = 24 \cdot 10^3$  л) удобен для использования в ядерной энергетике. При взаимодействии нейтроном любой энергии с этими ядрами (так же, как и с ядрами  ${}_{92}^{235}\text{U}$ ), наиболее вероятной оказывается реакция деления. Поэтому во второй половине XX века изотоп  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$  получался искусственно в больших количествах путем облучения нейтронами урана-238. Ядра  ${}_{92}^{238}\text{U}$  с большой вероятностью захватывают нейтроны и превращаются в  $\beta^-$ -активные ядра  ${}_{92}^{239}\text{U}$ . После 2-х последовательных  $\beta^-$ -распадов (с малыми  $T_{1/2}$ ) получаются ядра изотопа  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$ . Этим же методом (при наличии нейтронных потоков с большой плотностью) можно получать и изотопы других элементов с  $Z > 94$ . Это изотопы америция  ${}_{95}\text{Am}$ , кюрия  ${}_{96}\text{Cm}$ , берклия  ${}_{97}\text{Bk}$ , калифорния  ${}_{98}\text{Cf}$ , эйнштейния  ${}_{99}\text{Es}$  и фермия  ${}_{100}\text{Fm}$ . Среди них самым долгоживущим является  $\alpha$ -активный изотоп  ${}_{95}^{241}\text{Am}$  ( $T_{1/2} = 458$  л).

Для получения изотопов элементов с  $Z > 100$  мишени из  ${}_{82}\text{Pb}$ ,  ${}_{92}\text{U}$  и  ${}_{94}\text{Pu}$  облучаются ускоренными  $\alpha$ -частицами и многозарядными ионами. Этими методами были получены изотопы элементов с  $101 \div 109$ . Среди них два элемента названы в честь русских ученых: менделевий  ${}_{101}\text{Md}$  и курчатовий  ${}_{104}\text{Kh}$ . У большинства синтезированных изотопов преобладают  $\alpha$ -распад и спонтанное деление, причем периоды полураспада обычно равны миллисекундам, секундам и только в редких случаях — минутам, часам и более. Оболочечная модель ядра предсказывает существование магических чисел  $N_p = 114$  и  $N_n = 184$ . Если это предсказание справедливо, то среди изотопов с значениями  $A$ , близкими к  $\sim 298$ , должны существовать «островки стабильности». Экспериментального подтверждения эта гипотеза пока не имеет.

## ГЛАВА 15

# ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ

Ядерными реакциями называют процессы, происходящие между частицами и ядрами под действием ядерных сил. Частицы, на которые действуют ядерные силы, называются «ядерноактивными». К таким частицам относятся нуклоны, дейтроны и  $\alpha$ -частицы, и все др. атомные ядра.

Гамма-кванты, электроны и нейтрино не являются ядерноактивными частицами.

В этой главе мы будем рассматривать ядерные реакции при энергиях частиц, не превышающих  $10 \div 20$  МэВ.

Из всех ядерноактивных частиц только у нейтронов электрический заряд равен нулю, и они при прохождении через вещества не испытывают кулоновского взаимодействия ни с электронами, ни с ядрами. Взаимодействие нейтронов с веществом сводится к их ядерному взаимодействию с ядрами атомов; результатом этого взаимодействия и являются ядерные реакции. Заряженные частицы, напротив, при попадании в вещество испытывают кулоновское взаимодействие, причем в первую очередь с электронами, которых в веществе в  $Z$  раз больше, чем ядер. Взаимодействие с электронами приводит к возбуждению и ионизации атомов; при этом вдоль траекторий частиц появляются ионы<sup>1</sup>, а частицы, передавая небольшими порциями свою энергию атомам, постепенно затормаживаются. Этот процесс получил название *ионизационного торможения*. Пробеги заряженных частиц, т.е. их пути до полной остановки, зависят и от характеристик частиц (заряда, скорости) и от свойств вещества. В плотных средах, содержащих атомы с большими  $Z$ , пробеги протонов с энергией  $\sim 10$  МэВ по порядку величины не превышают  $\sim 10^{-2}$  см, пробеги  $\alpha$ -частиц еще меньше. Вероятность вступления в ядерную реакцию заряженной частицы, даже еще не потерявшей всей своей энергии на ионизационное торможение,

---

<sup>1</sup>Ионизация, возникающая вдоль траектории частиц, используется для их регистрации с помощью таких приборов, как ионизационная камера, пропорциональный счетчик, счетчик Гейгера—Мюллера и др.

невелика. Ядерные силы в отличие от дальнедействующих электромагнитных сил — короткодействующие, а подойти на близкое расстояние к ядру заряженной частице мешает кулоновский потенциальный барьер, и энергия частицы может оказаться недостаточной для его преодоления. Поэтому ядерные реакции с участием заряженных частиц происходят редко. Альфа-частицы, испускающиеся радиоактивными изотопами, могут вступать в ядерные реакции только с легкими ядрами. Чтобы заряженные частицы могли вызвать ядерные реакции на средних и тяжелых ядрах, их необходимо «ускорять».

Мы подошли к выводу, что самыми «удобными» для осуществления ядерных реакций частицами являются нейтроны, т. к. они не тратят энергию на ионизационное торможение и между ними и ядрами нет кулоновского барьера. И действительно, ядерных реакций с участием нейтронов известно так много и они имеют такое большое научное и практическое значение, что их часто выделяют в отдельный раздел ядерной физики — нейтронную физику. Наиболее интересные и важные реакции из этого раздела мы и будем рассматривать в первую очередь. Но сначала введем характеристики ядерных реакций, без которых невозможно их описание.

## § 76. Основные характеристики ядерных реакций

**Законы сохранения в ядерных реакциях. Энергия реакции.** Для ядерной реакции между частицей  $a$  и ядром  $A$ , в результате которой образовались частица  $b$  и ядро  $B$ , принята запись:



Здесь  $Q$  — энергия реакции. В этом процессе, как всегда, выполняются законы сохранения зарядового числа ( $Z_a + Z_A = Z_b + Z_B$ ) и массового числа ( $A_a + A_A = A_b + A_B$ ), законы сохранения полной энергии и импульса.

Наиболее часто ядерные реакции происходят по схеме «пучок-мишень». В этом случае в лабораторной системе координат (ЛСК) ядро  $A$  покоится:  $T_A = 0$ . Энергия  $Q$ , выделяющаяся в реакции, распределяется между продуктами реакции и по определению равна:

$$Q = (T_b + T_B) - T_a. \quad (15.1)$$

Из закона сохранения полной энергии (полная энергия  $i$ -й частицы  $E_i = m_i c^2 + T_i$ ) с учетом (15.1) получаем:  $Q = (m_a + M_A)c^2 - (m_b + M_B)c^2$ , или:

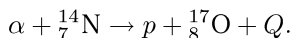
$$Q \text{ (МэВ)} = 931,5 \text{ (МэВ / а.е.м.)} \cdot [(m_a + M_A) - (m_b + M_B)] \text{ (а.е.м.)}. \quad (15.2)$$

Ядерные реакции могут идти как с выделением энергии ( $Q > 0$ ), так и с затратой энергии ( $Q < 0$ ). При  $Q = 0$  реакции происходят без изменения природы частиц и, если они идут под действием ядерных сил, называются реакциями упругого рассеяния. В этих реакциях энергия частиц, перераспределяется между рассеянными частицами и ядрами отдачи, но изменения структуры ядер не происходит. Если  $Q < 0$ , то реакции являются пороговыми и идут только при  $T_a \geq T_{a \text{ пор}}$ . Очевидно, что  $T_{a \text{ пор}} > |Q|$ . Применив к пороговым реакциям законы сохранения энергии и импульса, получаем для  $T_{a \text{ пор}}$ :

$$T_{a \text{ пор}} = |Q| \frac{A_A + A_a}{A_A}. \quad (15.3)$$

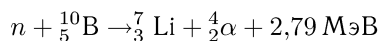
Заметим, что если ядерная реакция  $A(a b)B$  возможна, то и обратная реакция  $B(b a)A$  тоже возможна. Но если в первой реакции  $Q > 0$ , то во второй реакции  $Q$  имеет обратный знак, т. е. эта реакция является пороговой.

Рассмотрим несколько примеров ядерных реакций. Первой наблюдавшейся ядерной реакцией, происходящей при прохождении  $\alpha$ -частиц через воздух (Резерфорд, 1919 г), была реакция:



Расчеты по формулам (15.2) и (15.3) дают для этой реакции:  $Q = -1,20$  МэВ и  $T_{a \text{ пор}} = 1,54$  МэВ. Высота кулоновского барьера между  $\alpha$ -частицами и ядрами азота еще больше:  $\sim 4$  МэВ. Но среди  $\alpha$ -частиц, испускаемых радиоактивным источником, были частицы с достаточно большой энергией, и реакцию удалось наблюдать. На рис. 160 приведена фотография этой реакции в камере Вильсона. Частицы ( $\alpha$ -частица, ядро  ${}_8^{17}\text{O}$  и протон  $p$ ) создают на своем пути в камере ионы, служащие центрами конденсации капелек жидкости из пересыщенного пара, заполняющего рабочий объем камеры. Ионизирующая способность частиц пропорциональна квадрату заряда частиц, поэтому след протона получился тонким по сравнению со следами  $\alpha$ -частиц и ядра  ${}_8^{17}\text{O}$ .

Как уже обсуждалось выше, между нейтронами и ядрами нет кулоновского барьера. И если для какой-либо реакции  $Q > 0$ , то реакция может идти при любой энергии нейтронов. Например, реакция



широко используется для регистрации медленных нейтронов с помощью пропорциональных счетчиков, заполненных содержащим бор газом  $\text{BF}_3$ . Продукты реакции обладают высокой ионизирующей способностью, и на

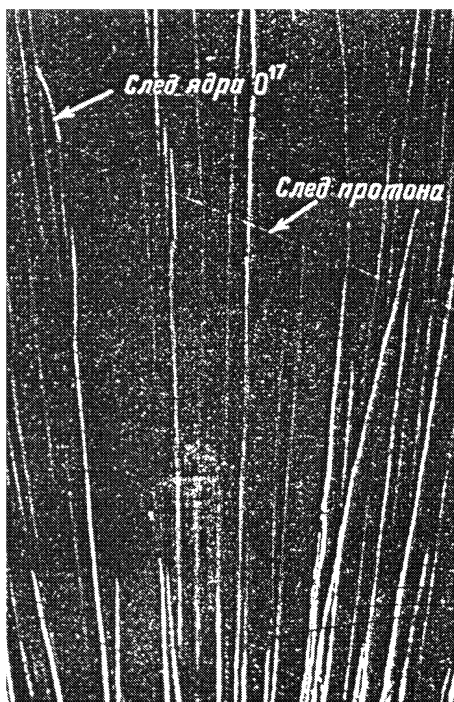
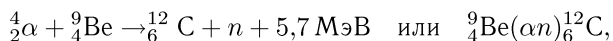


Рис. 160. Реакция  $^{147}\text{N}(\alpha p)^{17}\text{O}$ , зарегистрированная в камере Вильсона.

выходе счетчика создается импульс, достаточный для последующей регистрации.

Однако свободных нейтронов в окружающем нас пространстве практически нет. Их нужно получать. Удобной реакцией для получения нейтронных потоков является реакция



в которой и были открыты нейтроны (Чадвик, 1932 г). Высота кулоновского барьера между  $\alpha$ -частицей и ядром бериллия невелика, и энергии  $\alpha$ -частиц от радиоактивных изотопов для этой реакции вполне хватает. В источниках этого типа в качестве  $\alpha$ -излучателя чаще других используется изотоп  ${}^{239}_{94}\text{Pu}$ . Источник, содержащий смесь соли плутония с активностью  $A = 1$  Ки с порошком бериллия, испускает  $\sim 10^6$  нейтро-

нов в секунду с энергией  $1 \div 11$  МэВ. В источниках нейтронов могут использоваться также реакции др. типов, например  $(pn)$ ,  $(dn)$ ,  $(\gamma n)$  и др. Но самыми мощными источниками нейтронов являются ядерные реакторы.

**Эффективные сечения и выходы ядерных реакций** являются вероятностными характеристиками ядерных реакций. С эффективными сечениями  $\sigma$  мы уже встречались в § 35 и § 47. Физический смысл эффективных сечений во всех случаях одинаков.

Измерение эффективных сечений ядерных реакций в реальных физических экспериментах является трудной задачей. Непосредственно измеряемой величиной является выход реакции  $w$  — отношение числа зарегистрированных в мишени ядерных реакций  $\Delta N$  к числу частиц  $N$ , прошедших через мишень:  $w = \Delta N/N$ . В тонкой мишени число ядерных реакций невелико, и число частиц, проходящих через такую мишень, можно считать неизменным. В такой мишени  $\Delta N$  пропорционально  $N$ , концентрации ядер  $n_0$ , толщине мишени  $\Delta x$ , а также эффективному сечению  $\sigma$ , являющимся коэффициентом пропорциональности, характеризующим вероятность реакции одной частицы конкретного сорта с одним конкретным сорта ядром.

Итак, в тонкой мишени:

$$\Delta N = N n_0 \Delta x \sigma, \quad w = \Delta N/N = n_0 \Delta x \sigma, \quad \text{и} \quad \sigma = w/n_0 \Delta x. \quad (15.4)$$

Измеряется  $\sigma$  в  $\text{см}^2$  и барнах (напоминаем, что  $1 \text{ барн} = 10^{-24} \text{ см}^2$ ).

В тонких мишенях выходы реакции могут оказаться слишком малыми. И тогда приходится использовать «толстые» мишени. В толстой мишени число частиц  $N(x)$ , достигших какого-либо слоя  $dx$  на расстоянии  $x$  от поверхности мишени, будет зависеть от этого расстояния (см. рис. 70). В этом случае для нахождения связи между выходом  $w = \Delta N/N$  и эффективным сечением следует составить дифференциальное равенство для убыли числа частиц  $-dN$ , вступивших в реакцию в тонком слое  $dx$ :

$$-dN = N(x) n_0 \sigma dx. \quad (15.5)$$

После интегрирования получим:

$$N(x) = N_0 \exp(-n_0 \sigma x), \quad (15.6)$$

где  $N_0$  — первичный поток частиц, а  $N(x)$  — число частиц, не вступивших в реакцию при прохождении слоя вещества толщиной  $x$ . Для толстой мишени связь между выходом  $w$  и эффективным сечением  $\sigma$  имеет следующий вид:

$$w = \Delta N/N_0 = (N_0 - N(x))/N_0 = 1 - \exp(-n_0 \sigma x). \quad (15.7)$$



Полный выход реакции  $\omega_t$  легко определить экспериментально, измерив за одинаковые промежутки времени числа частиц перед мишенью и после мишени. Экспериментальное значение полного эффективного сечения  $\sigma_t^{\text{эксп}}$  находится после этого по формуле (15.7) (индексы у  $\omega_t$  и  $\sigma_t$  от англ. *total* — полный). Экспериментальные измерения «парциальных» сечений, т. е. сечений реакций какого-то одного сорта, являются более трудными (мы не будем останавливаться на методиках этих измерений).

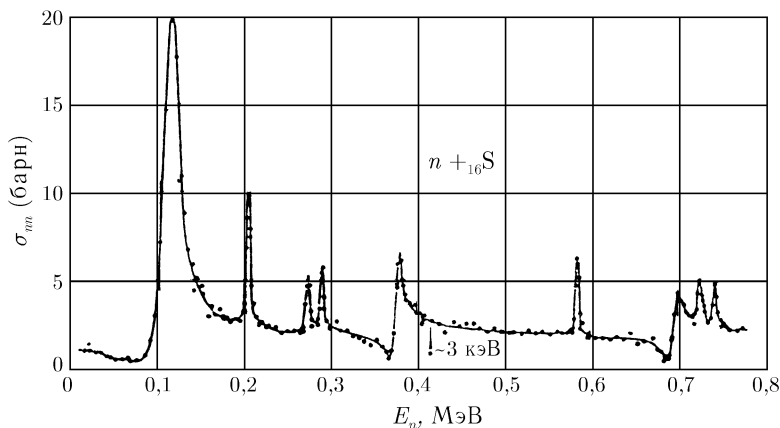


Рис. 161. Сечения рассеяния нейтронов на ядрах серы.

Эффективные сечения являются константами для конкретных ядерных реакций при конкретной энергии частиц. Поэтому их экспериментальные значения заносятся в таблицы, по ним строятся удобные для использования графики. На рис. 161 и 162 приведены графики зависимости  $\sigma$  от энергии нейтронов для ядерных реакций  ${}_{16}^{32}\text{S}(nn){}_{16}^{32}\text{S}$  и  ${}_{49}^{115}\text{In}(n\gamma){}_{49}^{116}\text{In}$ . На графиках отчетливо проявляются «резонансы», т. е. существование особенно больших значений сечений при некоторых энергиях частиц. И энергии, при которых наблюдаются резонансы, и эффективные сечения в резонансах для этих двух реакций (как и для всех других) — не одинаковы. Такой теории ядерных реакций, которая позволила бы рассчитать сечения хотя бы в резонансах, не существует. Но понять происхождение резонансов, поведение сечений вблизи них и некоторые другие особенности ядерных реакций можно, познакомившись с теорией составного ядра, созданной Н. Бором на основании анализа большого числа ядерных реакций под действием частиц с небольшой

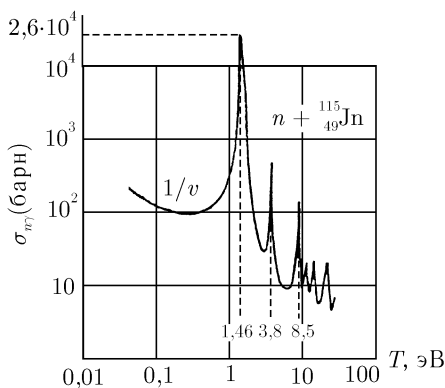


Рис. 162. Сечения реакции  ${}_{49}^{115}\text{In}(n\gamma){}_{49}^{116}\text{In}$ .

энергией. Небольшими мы будем считать такие энергии, при которых дебройлевская длина волны частиц  $\lambda = \hbar/p \geq R_{\text{яд}}$ , где  $R_{\text{яд}}$  — радиус ядра, с которым происходит ядерное взаимодействие частицы. Найдем значения энергии  $T$ , при которых  $\lambda = \hbar/p = R_{\text{яд}}$ . Импульс  $p = \sqrt{2mT}$ , а  $R_{\text{яд}} = 1,3 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$  см. Из расчетов следует, что при взаимодействии нуклонов с легкими ядрами ( $A \approx 40$ ) граница между «медленными» и «быстрыми» нейтронами проходит при  $T \approx 1$  МэВ, а при взаимодействии с тяжелыми ядрами ( $A \approx 200$ ) граница сдвигается к  $\sim 0,3$  МэВ. Опыт показывает, что резонансы проявляются только при взаимодействии ядер с медленными частицами (см. рис. 161, 162 и 167).

## § 77. Теория составного ядра. Ядерные реакции с участием нейтронов

Прежде, чем мы обратимся к основным положениям теории составного ядра, рассмотрим некоторые характеристики возбужденных ядер, которые проявляются как при радиоактивном распаде (см. § 75), так и при захвате частиц ядрами. В первом случае энергия возбуждения  $E^*$  составляет обычно  $10 \dots 100$  кэВ и редко превышает  $1 \dots 2$  МэВ. Возможные для конкретного ядра значения энергии определяют дискретный ряд энергетических уровней, характерных для ядер данного сорта. Уже знаем, что потеря энергии такими ядрами возможна только путем испускания  $\gamma$ -квантов или электронов внутренней конверсии (см. § 75).

Если же возбужденное ядро  $A^*$  возникает в результате захвата ядром  $A$  частицы  $a$  с кинетической энергией  $T_a$ , то энергия возбуждения образовавшегося ядра определяется формулой:

$$E^* = \varepsilon_{\text{св}} + T_a A_A / (A_A + A_a). \quad (15.8)$$

Здесь  $A_a$  и  $A_A$  — массовые числа частицы и ядра.  $\varepsilon_{\text{св}}$  — энергия связи частицы  $a$  в ядре, образовавшемся после ее захвата. Множитель  $A_A / (A_A + A_a)$  учитывает закон сохранения импульса. Для тяжелых ядер, у которых  $A_{\text{яд}} \gg A_{\text{част}}$ , этот множитель близок к единице и для них с достаточной точностью выполняется равенство:

$$E^* \approx \varepsilon_{\text{св}} + T_a. \quad (15.9)$$

Энергия связи частиц в ядрах  $\varepsilon_{\text{св}} \approx 8$  МэВ. Когда кинетическая энергия  $T_a$  мала и энергия возбуждения  $E^* \approx \varepsilon_{\text{св}}$ , энергетические уровни ядра, образовавшегося при захвате частицы, еще дискретны, причем каждому уровню, кроме энергии, соответствует определенный спин (и др. характеристики). Однако при  $T_a \geq 1$  МэВ уровни сливаются по нескольким причинам. Первая причина связана с тем, что с ростом энергии возбуждения растет число способов перераспределения энергии между нуклонами ядра, и расстояния между уровнями уменьшаются, причем у тяжелых возбужденных ядер уровни сгущаются быстрее, чем у легких. Вторая причина заключается в том, что все уровни, кроме уровня, соответствующего основному состоянию, имеют разброс в энергии  $\Delta E$  (см. § 17), называемой шириной уровня. Ширина уровня  $\Gamma = \Delta E$  связана со средним временем существования ядра в возбужденном состоянии  $\tau$  соотношением неопределенностей:

$$\Gamma \cdot \tau \geq \hbar. \quad (15.10)$$

В возбужденных состояниях ядра находятся недолго; время  $\tau$ , характерное для каждого из переходов (в основное или нижнее возбужденное состояние), зависит от энергии, а также от спинов и от других характеристик верхнего и нижнего уровней.

Найдем значение  $\Gamma$  при  $\tau = 10^{-14}$  с:

$$\Gamma = \hbar / \tau = (1,05 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с} / 10^{-14} \text{ с}) \cdot (1 / 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} / \text{эВ}) = 6,56 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}. \quad (15.10)$$

Мы получили очень маленькую величину. Но с ростом энергии возбуждения  $\tau$ , как правило, уменьшаются, а  $\Gamma$  растут. Следует отметить также, что формула (15.10) определяет естественную ширину уровня. Реальная его ширина может оказаться существенно большей (из-за

теплого движения ядер и др. причин). Когда расстояния между уровнями становятся сравнимыми с  $\Gamma$ , уровни сливаются. У разных ядер это происходит при различных значениях энергии, но общая тенденция одинакова: с ростом энергии возбуждения расстояния между уровнями уменьшаются, ширины уровней растут и уровни в конце концов сливаются. У самых тяжелых ядер это происходит при энергии частиц порядка 1 кэВ, а у легких ядер эта энергия составляет  $\sim (1 \div \text{неск.})$  МэВ (рис. 163).

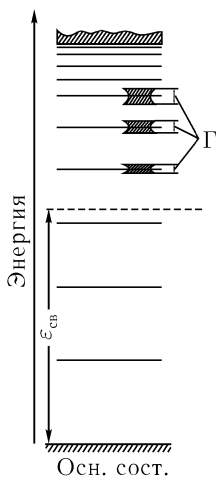


Рис. 163. Структура энергетических уровней ядер, проявляющихся в ядерных реакциях ( $E_i^{yp} > \epsilon_{св}$ ).

реакции протекают в две стадии:

1-ая стадия — образование составного ядра:  $a + A \rightarrow C^*$ ;

2-ая стадия — распад составного ядра  $C^*$ .

1-ая и 2-ая стадии, как показал Н. Бор, независимы друг от друга. Составное ядро «живет» до распада в течение времени  $\tau \approx 10^{-13} \dots 10^{-14}$  с. Это время намного превышает «ядерный масштаб времени»  $\tau_{яд} \approx 2R_{яд}/c \approx 10^{-23}$  с, ядро успевает «забыть» о способе своего образования и во второй стадии теряет энергию возбуждения любыми

Ширина уровня  $\Gamma$  характеризует не только разброс в энергии состояния, но и вероятность перехода возбужденного ядра с этого уровня. В самом деле, переход ядра в нижнее возбужденное состояние должен сопровождаться испусканием  $\gamma$ -кванта или вылетом какой-либо частицы. Таким образом, потеря энергии возбуждения ядром аналогична радиоактивному распаду ядер. Вероятность перехода  $\omega$  связана с  $\tau$  соотношением  $\omega = 1/\tau$ . Но  $\tau = \hbar/\Gamma$ , и следовательно,  $\Gamma = \omega\hbar$ , т. е.  $\Gamma$  действительно равна вероятности перехода, выраженной в энергетических единицах. Полная вероятность распада ядра равна сумме вероятностей распада с вылетом частиц разного сорта:  $\omega = \omega_1 + \omega_2 + \dots$ . Если мы умножим обе части этого равенства на  $\hbar$ , то получим:  $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \dots$ . В сумму справа входят парциальные ширины; они характеризуют не ширину уровня, а вероятности распада возбужденного ядра с вылетом той или иной частицы.

После предварительных замечаний о структуре и характеристиках уровней возбужденных ядер перейдем к основным положениям модели составного ядра. Согласно этой модели ядерные

возможными для него способами. Разным способам распада ядра  $C^*$  соответствуют различные каналы реакции (рис. 164). Каналу с вылетом  $\gamma$ -кванта соответствует реакция радиационного захвата частицы  $a$ ; эффективное сечение этой реакции  $\sigma_{a\gamma} = \sigma_c p_\gamma$ , где  $\sigma_c$  — сечение образования составного ядра  $C^*$ , а  $p_\gamma$  — относительная вероятность вылета  $\gamma$ -кванта из ядра  $C^*$  ( $p_\gamma = \omega_\gamma / \sum \omega_i = \Gamma_\gamma / \Gamma$ ). В случае, когда из составного ядра вылетает та же частица  $a$ , происходит реакция упругого рассеяния; ее сечение  $\sigma_{aa} = \sigma_c p_a$ . Для 3-го канала сечение реакции равно  $\sigma_{ab} = \sigma_c p_b$ ; здесь частицей  $b$  может быть любая частица, отличная от  $\gamma$ -кванта и частицы  $a$ . Полное эффективное сечение  $\sigma_t$  реакций, идущих при взаимодействии частицы  $a$  с ядром  $A$ , равно:  $\sigma_t = \sum \sigma_{ai} = \sigma_c \sum p_i = \sigma_c$ , т. к.  $\sum p_i = 1$ .

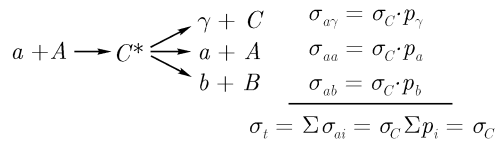


Рис. 164. Каналы реакций, идущих через составное ядро.

В квантовой механике получена формула для расчета эффективного сечения образования составного ядра  $\sigma_c$ , а следовательно, и для расчета всех  $\sigma_{ai}$ . Прежде, чем привести эту формулу, рассмотрим энергетическую схему уровней, проявляющихся при образовании составного ядра (рис. 165). Слева вдоль шкалы энергий обозначен уровень, соответствующий суммарной энергии покоя частицы  $a$  и ядра  $A$  до их взаимодействия. У составного ядра  $C$  уровень, соответствующий основному состоянию, находится ниже на величину энергии  $\varepsilon_{св}$ , равной энергии связи частицы  $a$  в ядре  $C$ . Ядро  $C$  обладает присущей только ему структурой энергетических уровней и при  $E_i^{yp} < \varepsilon_{св}$ , и при  $E_i^{yp} > \varepsilon_{св}$ . При захвате частиц  $a$  ядрами  $A$  ядра  $C^*$  могут получиться только при таких значениях кинетической энергии частиц  $T_a$  (точнее,  $T_a \pm \Gamma/2$ ), которые равны  $T_{oi} = E_i^{yp} - \varepsilon_{св}$ , и которым соответствуют жирные стрелки в левой части схемы. Не удивительно поэтому, что зависимость  $\sigma_c$  от  $T_a$  должна иметь резонансный характер, как это и изображено в правой части схемы. Ранее уже упоминалось о том, что эффективные сечения реакций при небольших энергиях частиц, как правило, имеют резонансный характер. Модель составного ядра, как видим, объясняет происхождение резонансов.

Приведем одну из формул, полученных в квантовой механике, — формулу Брейта – Вигнера, описывающую сечение образования состав-

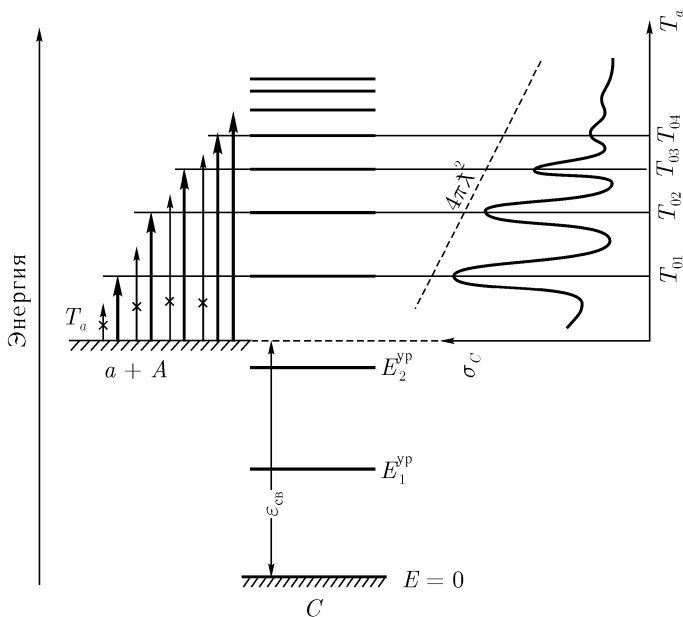


Рис. 165. Зависимость  $\sigma_c$  от энергии частиц  $T_a$ .

ного ядра  $\sigma_c(T_a)$  для одиночного резонанса (когда рядом с рассматриваемым уровнем нет других уровней):

$$\sigma_c(T_a) = \pi \lambda^2 \frac{\Gamma \Gamma_a}{(T_a - T_{oi})^2 (\Gamma/2)^2}. \quad (15.11)$$

Постараемся понять происхождение и влияние на величину сечения всех членов, входящих в эту формулу. Множитель  $\pi \lambda^2$ , где  $\lambda$  — дебройлевская длина волны налетающей на ядро частицы, является геометрическим фактором, определяющим максимальную величину сечения при энергии частицы  $T_a$ .

Этот множитель логичнее было бы записать, как  $\pi(\lambda + R_{\text{яд}})^2$ , т.к. сумму  $(\lambda + R_{\text{яд}})$  можно рассматривать как максимальное расстояние между частицей и ядром, при котором ядерное взаимодействие еще возможно. Но для медленных частиц  $R_{\text{яд}} \ll \lambda$  и величиной  $R_{\text{яд}}$  можно пренебречь.

Ширина уровня  $\Gamma$  влияет на ширину резонансного пика: чем меньше  $\Gamma$ , тем уже пик. Парциальная ширина  $\Gamma_a$ , пропорциональная веро-

ятности вылета частицы  $a$  из ядра, характеризует также и вероятность проникновения частицы  $a$  внутрь ядра при столкновении с ним. Форма резонансного пика описывается «резонансным» членом  $(T_a - T_{0i})^2$  в знаменателе (15.11). Чем ближе  $T_a$  к значению энергии  $T_{0i} = E_{0i}^{yp} - \varepsilon_{св}$ , тем больше  $\sigma_c$ . При  $T_a = T_{0i}$  получаем резонансное значение сечения  $\sigma_c^0$ :

$$\sigma_c^0 = 4\pi\lambda_0^2 \frac{\Gamma_{0a}}{\Gamma}, \quad (15.12)$$

где  $\lambda_0 = \hbar/(2m_a T_{0i})^{1/2}$ , а  $\Gamma_{0a}$  — парциальная ширина, определяемая характеристиками уровня  $E_{0i}^{yp}$ . В области малых энергий ( $T < \text{неск. кэВ}$ ) частицей  $a$  может быть только нейтрон. При  $T_n \approx 1 \text{ эВ}$  получаем:

$$\lambda = 1,05 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с} / (2 \cdot 1,67 \cdot 10^{-24} \text{ г} \cdot 1 \text{ эВ} \cdot 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг/эВ})^{1/2} = 4,5 \cdot 10^{-10} \text{ см}$$

$$\text{и } 4\pi\lambda_0^2 \approx 2,5 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2 \approx 2,5 \cdot 10^6 \text{ барн.}$$

Это очень большая величина. Но полученная цифра дает только максимально возможное значение для  $\sigma_c^0$  при энергиях близких к  $1 \text{ эВ}$ . В действительности такие большие сечения в резонансах встречаются сравнительно редко, так как отношение  $\Gamma_n/\Gamma$  может быть существенно меньшим единицы. Можно показать, что  $\Gamma_n \sim (T_n)^{1/2}$ , т. е.  $\Gamma_n$  растет с ростом энергии нейтронов и  $\Gamma_n/\Gamma \rightarrow 1$ . Но  $\lambda^2$  уменьшается с ростом энергии пропорционально  $1/T_n$ , и сечения в резонансах при этом тоже уменьшаются (см. рис. 165).

Схема образования составного ядра при захвате нейтронов с не большой энергией  $T_n$  и схема возможных каналов распада возбужденного составного ядра  $C^*$  в таком случае представлены на рис. 166. Наиболее вероятным способом распада составного ядра  $C^*$  будет испускание  $\gamma$ -кванта. В этом случае произойдет ядерная реакция  $(n\gamma)$ . Из всех других частиц из составного ядра при малой энергии возбуждения может вылететь только нейтрон, для которого нет кулоновского барьера. В этом случае происходит реакция  $(nn)$ . Таким образом, мы пришли к выводу, что на нейтронах малой энергии должны идти реакции радиационного захвата  $(n\gamma)$  и упругого рассеяния нейтронов  $(nn)$ ; поэтому  $\Gamma = \Gamma_\gamma + \Gamma_n$ . При совсем малых  $T_n$  вероятность радиационного захвата больше вероятности упругого рассеяния нейтронов ( $\Gamma_\gamma \gg \Gamma_n$ ), но с ростом  $T_n$  вероятность упругого рассеяния увеличивается, т. к. при  $T_n \geq \text{несколько кэВ}$   $\Gamma_n > \Gamma_\gamma$ .

Вернемся к рис. 161 и 162. При взаимодействии нейтронов с тяжелыми ядрами индия (рис. 162) резонансы проявляются в области энергий  $1 \dots 20 \text{ эВ}$ ; при таких малых энергиях преобладает реакция  $(n\gamma)$

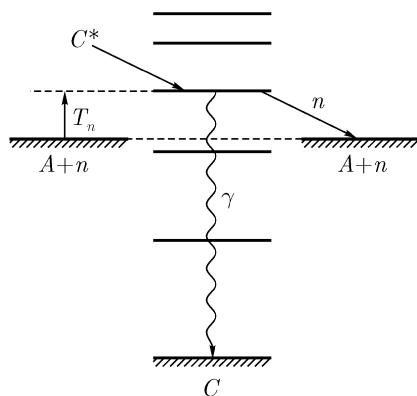


Рис. 166. Схем образования и распада составного ядра  $C^*$  при небольших  $T_n$ .

и  $\sigma_t \approx \sigma_{n\gamma}$ . При взаимодействии нейтронов с легкими ядрами серы (рис. 161) резонансы проявляются вплоть до  $T_n \approx 1$  МэВ; как и следовало ожидать, в этом случае преобладает реакция  $(nn)$  и  $\sigma_t \approx \sigma_{nn}$ .

Формулы Брейта – Вигнера для  $\sigma_{n\gamma}$  и  $\sigma_{nn}$  имеют следующий вид:

$$\sigma_{n\gamma} = \pi\lambda^2 \frac{\Gamma\Gamma_n}{(T_n - T_{0i})^2 + (\Gamma/2)^2} \cdot \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} = \pi\lambda^2 \frac{\Gamma_n\Gamma_\gamma}{(T_n - T_{0i})^2 + (\Gamma/2)^2}; \quad (15.13)$$

$$\sigma_{nn} = \pi\lambda^2 \frac{\Gamma\Gamma_n}{(T_n - T_{0i})^2 + (\Gamma/2)^2} \cdot \frac{\Gamma_n}{\Gamma} = \pi\lambda^2 \frac{\Gamma_n^2}{(T_n - T_{0i})^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (15.14)$$

Если известны энергия уровня и характеристики уровней составного ядра  $\Gamma$ ,  $\Gamma_n$  и  $\Gamma_\gamma$ , то по формулам (15.13) и (15.14) можно вычислить эффективные сечения реакций  $(n\gamma)$  и  $(nn)$  как в резонансах, так и вблизи резонансов<sup>1</sup>. Анализ формулы (15.13) приводит к выводу, что при условии  $T_n \ll T_{0i}$ , т. е. при энергиях, меньших резонансной (в этом случае  $(T_n - T_{0i})^2 \approx \text{const}$ ,  $\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_\gamma \approx \Gamma_\gamma$ ), сечения  $\sigma_{n\gamma} \sim \Gamma_n \sim 1/T^{1/2} \sim 1/\nu$  («закон  $1/\nu$ »). Области, где этот закон проявляется, хорошо видны на рис. 162 и 167.

<sup>1</sup>В формулы (15.12), (15.13) и (15.14) входит также множитель, учитывающий спины исходного и составного ядра. Мы не учли его, т. к. этот множитель не слишком сильно отличается от единицы, не влияет на форму резонансов.



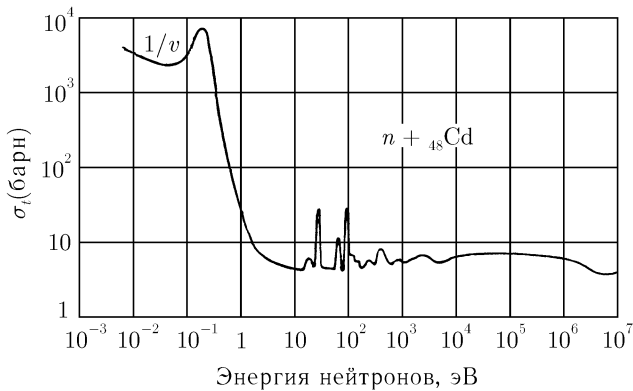
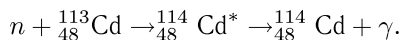


Рис. 167. Сечения реакции  $(n\gamma)$  при взаимодействии нейтронов с ест.  ${}_{48}\text{Cd}$ .

С ростом энергии частиц, вступающих в реакцию, увеличивается и энергия возбуждения составного ядра; уровни энергии при этом сгущаются, уширяются и, наконец, сливаются. Эффективные сечения при взаимодействии нейтронов с  $T_n > 1$  МэВ, как правило, уже не имеют резонансов и изменяются с изменением энергии достаточно плавно; сечение образования составного ядра при этом равно  $\sigma_c \approx (R_{\text{яд}} + \lambda)^2 \rightarrow \pi R_{\text{яд}}^2$ . (Ранее мы уже подсчитывали, что  $\pi R_{\text{яд}}^2$  не превышает нескольких барн.) При достаточно большой энергии составного ядра становится возможным вылет из него заряженных частиц, в первую очередь — протонов. Становится возможной реакция неупругого рассеяния нейтронов  $(nn')$ , когда в результате реакции ядро остается на одном из его нижних уровней. При  $T_n > 10$  МэВ возможна и реакция  $(n, 2n)$ . Таким образом, полное эффективное сечение реакций, идущих с образованием составного ядра, при  $T_n > 10$  МэВ складывается из  $\sigma_{nn}$ ,  $\sigma_{nn'}$ ,  $\sigma_{np}$ ,  $\sigma_{n\gamma}$  и др. На долю каждого из этих сечений приходится только часть сечения образования составного ядра и каждое из них, как правило, не превышает нескольких миллибарн. Исключение составляет реакция  $(nn)$ . Реакция упругого рассеяния может идти прямым путем (подобно кулоновскому рассеянию заряженных частиц), без образования составного ядра. Этот процесс называется потенциальным рассеянием нейтронов. При небольших  $T_n$   $\sigma_{nn}^{\text{пот}} = 4\pi R_{\text{яд}}^2$ , а при  $T_n \rightarrow 10$  МэВ  $\sigma_{nn}^{\text{пот}} = \pi(\lambda + R_{\text{яд}})^2 \rightarrow \pi R_{\text{яд}}^2$  и  $\sigma_t \rightarrow 2\pi R_{\text{яд}}^2$ .

В качестве еще одного примера реакций, идущих под действием медленных нейтронов, рассмотрим реакцию радиационного захвата ней-

тронов ядрами изотопа кадмия  $^{113}_{48}\text{Cd}$ :



В сечении этой реакции при  $T_n = T_0 = 0,176$  эВ наблюдается резонанс с параметрами:  $\sigma_{n\gamma}^0 \approx 60000$  барн,  $\Gamma = 0,115$  эВ. При энергиях  $T_n > T_0$  сечение довольно быстро падает с ростом  $T_n$ , а в области  $T_n < T_0$ , как и предсказывает теория, оно меняется пропорционально  $1/\nu$  и для тепловых нейтронов  $\sigma_{n\gamma}^t \approx 20000$  барн. В естественном кадмии содержание изотопа  $^{113}_{48}\text{Cd}$  составляет всего 12,3%, но и для естественного кадмия сечение радиационного захвата для «тепловых» нейтронов, т. е. нейтронов с  $T_n \approx 0,025$  эВ (происхождение этой цифры будет объяснено ниже), оказывается достаточно большим:  $\sigma_{n\gamma}^t(^{ест}\text{Cd}) \approx 20000 \cdot 0,123 \approx 2500$  барн (рис. 167). Поэтому кадмий является удобным защитным материалом от медленных нейтронов (при  $T_n < 0,5$  эВ) и широко используется при работе с нейтронами, в том числе и на атомных реакторах. Если необходимо защищаться от более быстрых («закадмиевых») нейтронов, то защитное устройство должно содержать довольно толстый слой «замедлителя» — вещества, содержащего легкие ядра (вода, графит и т. д.). При взаимодействии нейтронов с такими ядрами преобладает реакция упругого рассеяния, и нейтроны при каждом рассеянии передают ядрам заметную часть своей энергии. Замедлившиеся нейтроны затем хорошо поглощаются тонким слоем кадмия (или другого вещества, тоже хорошо поглощающего медленные нейтроны, например, бора).

В ядерных реакциях типа  $(n\gamma)$  получают изотопы, ядра которых содержат один лишний нейтрон по сравнению с ядрами изотопов, содержащихся в мишени. Такие изотопы часто оказываются  $\beta^-$ -активными, и некоторые из них имеют практическое применение. Реакция  $(n\gamma)$  удобна для получения искусственных радиоактивных изотопов, т. к. мишень, содержащую исходные ядра, можно просто помещать на некоторое время внутрь ядерного реактора. Например, при помещении в «нейтронный» канал реактора мишени из золота ( $^{197}_{79}\text{Au}$  — 100%) в ней под действием нейтронов происходит реакция:



В этой реакции в зависимости  $\sigma_{n\gamma}$  от  $T_n$  наблюдается резонанс при  $T_0 = 4,9$  эВ с сечением в резонансе  $\sigma_{n\gamma}^0 \approx 3000$  барн; при  $T_n < T_0$  сечение подчиняется закону  $1/\nu$ , и для тепловых нейтронов оказывается довольно большим ( $\sim 100$  барн). Изотоп  $^{198}_{79}\text{Au}$ , получающийся в этой реакции, является  $\beta^-$ -активным изотопом с периодом полураспада  $T_{1/2} = 2,7$  дня.

Схема распада:  ${}_{79}^{198}\text{Au} \rightarrow {}_{80}^{198}\text{Hg}$  (стаб.). Облученное в реакторе естественное золото оказывается «помеченным» изотопом  ${}_{79}^{198}\text{Au}$  и затем используется в некоторых промышленных технологиях, в медицине и биологии. За перемещением «помеченного» золота легко следить с помощью обычного счетчика электронов.

В реакции  ${}_{49}^{115}\text{In}(n\gamma){}_{49}^{116}\text{In}$ , уже обсуждавшейся выше, эффективное сечение для тепловых нейтронов равно 155 барн. Изотоп  ${}_{49}^{116}\text{In}$  получается и в основном и в возбужденном состояниях. Оба состояния  $\beta^-$ -активны. Период полураспада для возбужденного состояния равен 54 мин. Поэтому  ${}_{49}^{115}\text{In}$  является одним из удобных радиоактивных индикаторов нейтронов. Небольшую фольгу из  ${}_{49}\text{In}$  можно поместить на некоторое время в то место, где предполагается наличие нейтронов, а затем проверить ее на  $\beta$ -активность. Если фольга окажется  $\beta$ -активной, то через нее действительно проходили нейтроны. По величине «наведенной» активности можно получить информацию и о плотности потока нейтронов.

Ядерные реакции упругого рассеяния нейтронов на легких ядрах  $A(n, n_1)A$  имеют огромное практическое значение: они используются для замедления быстрых нейтронов, т. к. нейтрон после рассеяния ( $n_1$ ) всегда имеет энергию  $T_{n1} < T_n$ . Если среда слабо поглощает нейтроны, то замедление продолжается до тех пор, пока энергия нейтронов не станет равной энергии теплового движения при температуре окружающей среды. Такие нейтроны называются *тепловыми*. Их спектр близок к максвелловскому, средняя энергия нейтронов  $T_n^{\text{ср}} = \frac{3}{2}kT$ , а наивероятнейшая  $T_n^{\text{вср}} = kT$ . При  $T \approx 300 \text{ K}$   $T_n^{\text{вср}} = kT \approx 0,025 \text{ эВ}$ .

**Холодные нейтроны.** Разграничение нейтронов на медленные ( $\lambda_n \geq R_{\text{яд}}$ ) и быстрые ( $\lambda_n \leq R_{\text{яд}}$ ) является очень грубым. К медленным нейтронам относятся и тепловые нейтроны, о которых мы только что говорили, и с которыми еще будем встречаться, к медленным нейтронам относятся и «холодные» нейтроны, которые не участвуют в обычных ядерных реакциях, но представляют большой научный интерес.

Если дебройлевская длина волны нейтрона  $\lambda_n = 2\pi\hbar/p_n$  по порядку величины равна расстоянию  $d$  между атомными плоскостями в каком-либо кристалле, то при прохождении через кристалл нейтроны рассеиваются в соответствии с законом Брэгга–Вульфа:  $2d \sin \theta = k\lambda$  (см. формулу (1.5) в § 1). Существуют нейтронные спектрометры, работающие по тому же принципу, что и рентгеновские спектрометры. Однако, если  $\lambda_n \geq 2d$  (энергия нейтронов при этом  $T_n \leq \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n d^2}$ ), то нейтроны не отражаются от кристаллических плоскостей и проходят через кристалл без рассеяния. Эти нейтроны и называются *холодными*. Оценим их энергию. Пусть  $d \approx 2\text{Å}$ . Тогда  $\lambda \geq 4 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ ,

а  $T_n \leq 0,005$  эВ. Замедлить нейтроны до таких энергий невозможно. Их нужно иметь. Нейтроны с такой энергией есть в спектре нейтронов реакторов, работающих на тепловых нейтронах, в хвосте максвелловского распределения. Но их мало. Для их выделения на реакторах устанавливаются графитовые колонки, через которые и выпускаются из реакторов холодные нейтроны, если они нужны для исследований.

**Особенности ядерных реакций под действием заряженных частиц.** Ядерные реакции под действием  $\alpha$ ,  $p$  и др. заряженных частиц возможны в том случае, если  $T_{\text{част}} > U_{\text{кул}}$ . Высота кулоновского барьера при взаимодействии протонов с легкими ядрами по порядку величины равна  $\sim 1$  МэВ, а при взаимодействии  $\alpha$ -частиц с тяжелыми ядрами приближается к  $20 \dots 30$  МэВ. Поэтому на  $\alpha$ -частицах, получающихся при распаде радиоактивных изотопов ( $T_\alpha = 5 \dots 9$  МэВ) возможны ядерные реакции лишь на легких ядрах. Одну из таких реакций — ядерную реакцию  ${}^9_4\text{Be}(\alpha n){}^{12}_6\text{C}$ , при изучении которой был открыт нейтрон, мы уже рассмотрели в § 76.

Протоны и дейтроны не испускаются радиоактивными ядрами. Их пучки могут быть созданы в простых «ускоряющих трубках», или (если нужны частицы с более высокой энергией) в более сложных ускоряющих устройствах — ускорителях.

Рассмотрим одну из ядерных реакций, происходящих под действием дейтронов. Эта реакция имеет огромное практическое значение:



Реакция широко используется для получения нейтронов. Высота кулоновского барьера между  $d$  и ядром трития невелика, в сечении реакции при  $T_d \approx 0,2$  МэВ есть резонанс с  $\sigma^0 \approx 4$  барна, и реакция может идти с заметным выходом на дейтронах, ускоренных всего до  $T_d \approx 0,2$  МэВ. Устройства, в состав которых входят источник дейтронов, ускоряющая трубка и мишень, содержащая ядра трития, называются «генераторами нейтронов». Работают они по принципу «пучок — мишень». Обычно используются пучки нейтронов, вылетающих из генератора под углом  $90^\circ$  к направлению дейтронов; энергия этих нейтронов равна  $14$  МэВ (т.е. это — быстрые нейтроны).

Рассмотрим реакцию (15.15) с другой точки зрения. Эта реакция относится к реакциям с и н т е з а ядер. Энергия, выделяющаяся в этой реакции, очень велика (ведь в результате реакции образуется «дважды-магический» изотоп  ${}^4_2\text{He}$ ), и реакция кажется перспективной для генерации энергии. Однако, при осуществлении реакции по методу «пучок — мишень» затраты на ускорение нейтронов превосходят энергию, которая может быть «снята» с мишени. Энергетически выгодными являются

«термоядерные» реакции синтеза  $d + t$  ( $t$ -ядро атома  ${}^3_1\text{T}$ ), когда и те и др. частицы получают нужную для преодоления кулоновского барьера энергию от нагретой до очень высоких температур среды, в равновесии с которой они находятся. Из соотношения, связывающего наивероятнейшую энергию  $T^{\text{вер}}$  с температурой среды  $T$  ( $T^{\text{вер}} = kT$ ), нетрудно получить, что при  $T^{\text{вер}} = U_{\text{кул}}/2 \approx 0,2$  МэВ температура должна достигать  $T \approx 2 \cdot 10^9$  К. При более низкой температуре реакция может идти, но только на нейтронах «хвоста» максвелловского распределения и за счет туннельного эффекта. Наилучшего успеха удалось добиться в «токамаках» — тороидальных камерах с магнитной стабилизацией дейтериево-тритиевой горячей плазмы. Плазма, получаемая при пропускании очень больших импульсов тока через камеру, наполненную смесью ( $D + T$ ) при давлении  $\sim 10^{-5}$  атм., удерживается от соприкосновения со стенками камеры магнитным полем. При температуре  $10^8$  К реакции синтеза в плазме возбуждаются (на это указывает появление нейтронов), но КПД даже самых успешных установок этого типа пока остается меньшим единицы. Установки продолжают совершенствоваться, создаются международные проекты, и надежда на получение управляемого термоядерного синтеза остается.

## § 78. Взаимодействие с ядрами $\gamma$ -лучей. Фотоядерные реакции. Эффект Мёссбауэра

**Процесс образования пар  $e^- - e^+$ .** В § 35 рассматривалось взаимодействие рентгеновских лучей с веществом. Основными процессами, уменьшающими интенсивность пучка рентгеновских лучей при прохождении его через вещество, являются фотоеффект и комптоновское рассеяние. Эти же процессы являются преобладающими для  $\gamma$ -лучей с  $E_\gamma < 1$  МэВ. При  $E_\gamma > 1 \div$  неск. МэВ становится возможным, а при еще больших энергиях — преобладающим — процесс образования электронно-позитронных пар:  $e^- - e^+$ . Этот процесс является результатом электромагнитного взаимодействия  $\gamma$ -излучения и поля любой заряженной частицы. Однако, его вероятность пропорциональна квадрату заряда частицы  $Z^2$ , и при взаимодействии с ядрами он оказывается существенно более вероятным, чем при взаимодействии с электронами. Энергия, выделяющаяся в этом процессе, распределяется между образовавшимися в самом процессе электроном и позитроном и ядром, в поле которого произошел процесс. Минимальная энергия  $\gamma$ -кванта, при которой становится возможным процесс образования пары  $e^- - e^+$ , определяется законами сохранения энер-

гии и импульса и равна:

$$E_{\gamma\text{мин}} = 2m_e c^2 (1 + m_e/M), \quad (15.16)$$

где  $M$  — масса заряженной частицы, в поле которой произошло взаимодействие.

Этот процесс не относится к ядерным реакциям. Но его следует учитывать при расчетах ослабления потоков  $\gamma$ -лучей при прохождении их через вещество. В частности, и линейный коэффициент ослабления  $\mu$ , входящий в формулу (6.20), и эффективное сечение  $\sigma_t$ , входящее в формулу (6.24), в общем случае складываются из трех компонент:

$$\mu = \mu_{\text{ф}} + \mu_{\text{к}} + \mu_{\text{п}}, \quad (15.17)$$

$$\sigma = \sigma_{\text{ф}} + \sigma_{\text{к}} + \sigma_{\text{п}} \quad (15.17')$$

**Фотоядерные реакции.** Если на мишень, содержащую ядра с массовым числом  $A$ , падает пучок  $\gamma$ -квантов с  $E_{\gamma} > \varepsilon_{\text{св}}^n$  или  $E_{\gamma} > \varepsilon_{\text{св}}^p$ , то под действием таких  $\gamma$ -лучей в мишени могут происходить фотоядерные реакции ( $\gamma n$ ) и ( $\gamma p$ ). (Эти процессы происходят под действием не ядерных, а электромагнитных сил, но т. к. они сопровождаются изменениями структуры ядер (массовые числа ядер уменьшаются на единицу), то их относят к ядерным реакциям.

Самой меньшей энергией связи обладает ядро атома дейтерия:  $E_{\text{св}} = 2,22$  МэВ. В этом ядре  $\varepsilon_{\text{св}}^n = \varepsilon_{\text{св}}^p = E_{\text{св}} = 2,22$  МэВ. Бета-распад изотопа таллия  ${}_{81}^{208}\text{Tl}$  сопровождается испусканием  $\gamma$ -лучей с энергией  $E_{\gamma} = 2,6$  МэВ, достаточной для осуществления реакции:  $\gamma + {}_1^2\text{D} \rightarrow {}_1^1\text{H} + n$ . Если окружить радиоактивный препарат, содержащий  ${}_{81}^{208}\text{Tl}$ , толстым слоем тяжелой воды  $\text{D}_2\text{O}$ , то с поверхности такого устройства будут вылетать нейтроны со средней энергией  $\sim 0,2$  МэВ. Это устройство является источником нейтронов (протоны рассеиваются и тормозятся в воде). Однако эффективное сечение рассматриваемой реакции мало, нейтронное излучение перемешано с  $\gamma$ -лучами, испытывавшими в веществе комптоновское рассеяние, или прошедшими через него без взаимодействия. Поэтому в качестве источников нейтронов удобнее использовать другие ядерные реакции (см. § 77).

**Реакции резонансного поглощения и резонансного рассеяния  $\gamma$ -квантов.** Если энергия  $\gamma$ -лучей меньше энергии связи частиц в ядре, то фотоядерные реакции становятся невозможными. Под действием таких  $\gamma$ -лучей может происходить резонансное поглощение  $\gamma$ -квантов с образованием ядер в одном из возможных для него возбужденных состояний. Использование этого процесса является

удобным методом определения не только энергии, но и среднего времени жизни возбужденных состояний и др. его характеристик. Резонансное рассеяние  $\gamma$ -квантов сводится к их поглощению (с образованием возбужденных состояний) и последующему испусканию  $\gamma$ -квантов (при этом ядра возвращаются в невозбужденные состояния).

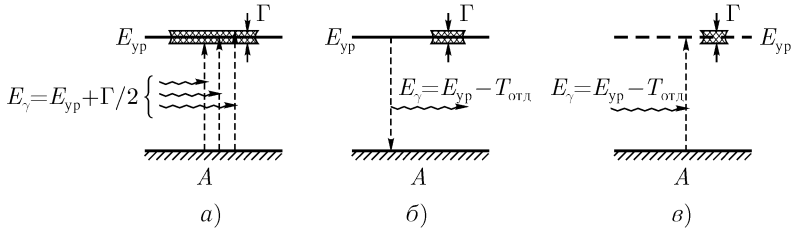


Рис. 168. Схемы резонансного поглощения и рассеяния  $\gamma$ -квантов ядрами.

Рассмотрим особенности этих процессов (рис. 168). Для перехода ядра  $A$  на уровень с энергией  $E_{ур}$  в ядро необходимо внести энергию, равную  $E_{ур} \pm \Gamma/2$ , где  $\Gamma$  — ширина уровня (рис. 168а). При  $\tau \approx 10^{-10}$  с  $\Gamma \approx 6 \cdot 10^{-6}$  эВ. Если  $E \approx 100$  кэВ, то точность, с которой вносимая в ядро энергия должна быть равна энергии уровня (она определяется отношением  $\Gamma/E_{ур}$ ), составляет  $6 \cdot 10^{-6}/10^5 \approx 6 \cdot 10^{-11}$ . Получить  $\gamma$ -кванты, энергия которых с такой точностью совпадает с  $E_{ур}$ , можно только, используя излучение других, уже возбужденных на этот уровень ядер. Однако и при испускании  $\gamma$ -квантов (рис. 167б) и при поглощении (рис. 167в) ядра приобретают энергию отдачи. Оценим энергию отдачи для ядер с массовым числом  $A = 100$ , находящихся на уровне с энергией  $E_{ур} = 100$  кэВ и испускающих  $\gamma$ -кванты. В соответствии с законом сохранения импульса  $p_{отд} = p_{\gamma} = E_{\gamma}/c \approx E_{ур}/c$ . Энергия отдачи  $T_{отд} = p_{отд}^2/2M_A \approx E_{ур}^2/2M_A c^2 \approx \frac{(10^5 \text{ эВ})^2}{2 \cdot 100 \cdot 931,5 \cdot 10^6 \text{ эВ}} \approx 5 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$ . Энергия

отдачи  $T_{отд} \ll E_{\gamma}$ , но  $T_{отд} \gg \Gamma$ . Поэтому энергии испущенных  $\gamma$ -квантов ( $E_{\gamma} = E_{ур} - T_{отд}$ ) не хватит для их резонансного поглощения невозбужденными ядрами (рис. 168в). К тому же для резонансного возбуждения уровня энергия падающих квантов также должна быть больше энергии уровня на величину, равную  $T_{отд}$ . Т.о., резонансное рассеяние может происходить, только если  $2T_{отд} < \Gamma$ . Оценки для  $\Gamma$  и  $T_{отд}$  показывают, что это условие не выполняется. Поэтому для осуществления резонансного рассеяния были предложены разные методы компенсации энергии отдачи.

Самым эффективным оказался метод, предложенный Мёссбауэром в 1958 г. Он предложил и в качестве излучающих, и в качестве поглощающих ядер использовать ядра, связанные в кристаллической решетке. При излучении  $\gamma$ -квантов импульс отдачи может восприниматься всем кристаллом, энергия отдачи в этом случае оказывается очень малой, много меньшей, чем ширина уровня. В самом деле, при массе кристалла  $m = 1$  мг и энергии уровня  $E_{ур} \approx 100$  кэВ, получаем:

$$T_{отд} = \frac{E_{ур}^2}{2Mc^2} = \frac{(10^5 \text{ эВ}) \cdot 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг/эВ}}{2 \cdot 10^{-3} \text{ г} \cdot (3 \cdot 10^{10} \text{ см/с})^2 \text{ эрг}} \approx 10^{-20} \text{ эВ} \ll \Gamma.$$

Эффект Мёссбауэра имеет гораздо большее значение, чем просто метод изучения характеристик энергетических уровней ядер. Он предоставляет в руки исследователей (не только физиков, но и химиков, биологов и пр.) инструмент, дающий возможность проводить различные исследования с огромной точностью, определяемой отношением  $\Gamma/E_{ур}$ . В частности, метод Мёссбауэра был использован для доказательства существования гравитационных свойств у  $\gamma$ -лучей. Мёссбауэровская компенсация энергии отдачи ядер, по-видимому, неизбежна в любых проектах по созданию г а з е р о в — квантовых генераторов  $\gamma$ -лучей.

## § 79. Цепная реакция деления. Проблемы ядерной энергетики

Основой ядерной энергетики является процесс деления тяжелых ядер. В § 75 мы познакомились с процессом спонтанного деления тяжелых ядер, и выяснили, что этот процесс энергетически выгоден, но ему препятствует потенциальный барьер. Поэтому процесс идет за счет туннельного эффекта. Массы ядер-осколков настолько велики, что процесс идет очень медленно, с огромными периодами полураспада.

Рассмотрим важную характеристику делящихся ядер — э н е р г и ю а к т и в а ц и и. Построим график зависимости (рис. 169) энергии взаимодействия  $U(r)$  ядер-осколков от расстояния между ними, считая, что деление уже произошло (график следует строить справа налево). При  $r = \infty$   $U(r) = 0$ . При сближении осколков  $U(r)$  растет из-за их кулоновского отталкивания. При соприкосновении ядер-осколков ( $r \approx R_1 + R_2$ ) начинают действовать ядерные силы притяжения, и кривая  $U(r)$  идет вниз. Она подходит к оси энергии в точке  $A$ , определяющей величину энергии  $Q_f$ , выделяющейся при делении. Для ядер с  $A = 230 \div 240$ , как мы уже знаем,  $Q_f \approx 200$  МэВ. Отрезок  $AB$  на оси энергий соответствует реальной высоте барьера, который предстоит преодолеть осколкам



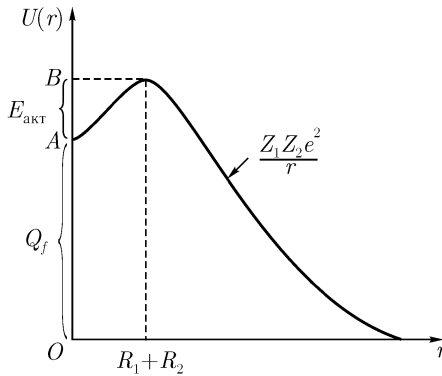


Рис. 169. Потенциальный барьер, мешающий делению тяжелых ядер.

при делении ядра. Энергия, определяемая этим отрезком, и называется энергией активации  $E_{\text{акт}}$ . Для расчета этой важной характеристики получено несколько формул. Приведем одну из них:

$$E_{\text{акт}}(\text{МэВ}) = 0,555(46 - Z^2/A). \quad (15.18)$$

Отношение  $Z^2/A$  называется параметром деления. От его значения зависит величина энергии активации. У ядер с  $A = 230 \div 240$  параметр  $Z^2/A \approx 36 \div 37$  и  $E_{\text{акт}} \approx 5,5 \div 5,0$  МэВ.

**Деление ядер под действием нейтронов.** Деление ядер можно вызвать, сообщив им извне энергию, превышающую высоту барьера. Наилучшим образом для этой цели подходит облучение ядер нейтронами, т. к. между нейтронами и ядрами нет кулоновского отталкивания, и нейтроны легко проникают внутрь ядер. Энергия возбуждения составного ядра складывается из энергии связи нейтрона в составном ядре и кинетической энергии нейтрона :

$$E_{\text{возб}} = \varepsilon_{\text{св}}^n (A + 1) + T_n. \quad (15.19)$$

(Часть кинетической энергии нейтрона идет не на возбуждение ядра, а на сообщение ему энергии отдачи, однако, доля этой энергии невелика и ею можно пренебречь.).

Рассмотрим захват нейтрона с энергией  $T_n$  ядром изотопа  ${}_{92}^{235}\text{U}$ . При захвате образуется возбужденное ядро  ${}_{92}^{236}\text{U}^*$ . При  $T_n \approx 0$  его энергия

возбуждения равна энергии связи нейтрона в составном ядре:  $E_{\text{возб}} = \varepsilon_{\text{св}}^n(^{236}_{92}\text{U})$ . Воспользуемся формулой (14.9) и рассчитаем энергию связи нейтрона в ядре  $^{236}_{92}\text{U}$ :

$$\varepsilon_{\text{св}}^n(\text{МэВ}) = 931.5(\text{МэВ/а.е.м.}) \cdot \{[M^{\text{ат}}(^{235}_{92}\text{U}) + m_n] - M^{\text{ат}}(^{236}_{92}\text{U})\}(\text{а.е.м.});$$

после подстановки табличных значений масс атомов и нейтрона получаем:

$$E_{\text{возб}} = \varepsilon_{\text{св}}^n(^{236}_{92}\text{U}) = 6,4 \text{ МэВ.}$$

Возбужденное ядро может потерять энергию возбуждения путем испускания  $\gamma$ -кванта (в этом случае произойдет реакция радиационного захвата нейтрона ( $n\gamma$ )), или путем испускания нейтрона (тогда произойдет реакция упругого рассеяния нейтрона ( $nn$ )). Кроме этих каналов распада у тяжелых ядер есть возможность разделиться на два (или больше) ядер-осколков (рис. 170). Однако, для того, чтобы этот канал распада стал возможным, нужно, чтобы энергия возбуждения была не меньше высоты потенциального барьера, препятствующего делению, т. е. не меньше энергии активации:  $E_{\text{возб}} \geq E_{\text{акт}}$ . Если при захвате нейтрона ядром ( $Z, A$ ) энергия связи нейтрона в составном ядре ( $Z, A + 1$ ) будет больше или равна  $E_{\text{акт}}$  этого ядра, то деление оказывается возможным даже на самых медленных нейтронах с  $T_n \approx 0$ . Если же  $E_{\text{акт}} > \varepsilon_{\text{св}}^n$ , то для осуществления реакции деления нейтроны должны иметь энергию, равную или большую пороговой энергии:

$$T_n \geq T_n^{\text{пор}} = E_{\text{акт}} - \varepsilon_{\text{св}}^n. \quad (15.20)$$

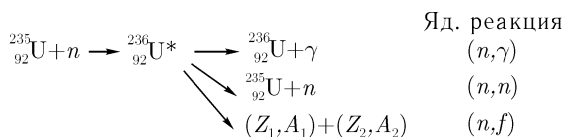
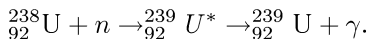


Рис. 170. Возможные каналы распада тяжелого возбужденного ядра.

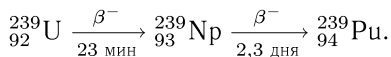
Для использования в ядерной энергетике необходимы изотопы, которые делятся на нейтронах любой энергии, т. е. для которых пороговая энергия деления на нейтронах  $T_n^{\text{пор}}$  равна нулю. В природе существует только один изотоп, удовлетворяющий этому требованию. Это изотоп  $^{235}_{92}\text{U}$ . Энергия активации для ядра  $^{236}_{92}\text{U}$ , рассчитанная по формуле (15.18), равна 5,6 МэВ. Она меньше, чем  $\varepsilon_{\text{св}}^n(^{236}_{92}\text{U}) = 6,4 \text{ МэВ}$ , и  $T_n^{\text{пор}} = 0$ . Однако в естественной смеси изотопов урана на долю  $^{235}_{92}\text{U}$

приходится всего 0,72%; изотопы  ${}_{92}^{238}\text{U}$  (99,28%) и  ${}_{92}^{234}\text{U}$  (0,006%) на медленных нейтронах не делятся, для них  $T_n^{\text{пор}} \approx 1 \text{ МэВ}$ .

Характеристиками, близкими к характеристикам  ${}_{92}^{235}\text{U}$ , обладает изотоп плутония  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$  ( $T_{1/2}^{\alpha} = 24,3 \cdot 10^3 \text{ л}$ ;  $T_{1/2}^{\text{сп. дел.}} = 5,5 \cdot 10^{15} \text{ л}$ ). Этот изотоп практически не сохранился в природе, но он с большим выходом получается в любом ядерном реакторе, активная зона которого содержит изотоп  ${}_{92}^{238}\text{U}$ . Под действием нейтронов идет реакция:



Изотоп  ${}_{92}^{239}\text{U}$   $\beta^-$ -активен и распадается по схеме:



Полученный  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$  может быть выделен из смеси изотопов, которая получается при работе ядерных реакторов. Эти два изотопа — естественный  ${}_{92}^{235}\text{U}$  и искусственный  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$  — и являются основными изотопами, как для использования в ядерной энергетике, так и для изготовления ядерного оружия.

При облучении изотопа тория  ${}_{90}^{232}\text{Th}$  медленными нейтронами с большим выходом идет реакция  ${}_{90}^{232}\text{Th}(n\gamma) + n \rightarrow {}_{90}^{233}\text{Th}$ ; Изотоп  ${}_{90}^{233}\text{Th}$  после 2-х последовательных  $\beta^-$ -распадов превращается в изотоп  ${}_{92}^{233}\text{U}$ , у которого, так же, как и у изотопов  ${}_{92}^{235}\text{U}$  и  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$ ,  $T_{\text{пор}} = 0$ . Но этот изотоп по некоторым причинам пока не оказал заметного влияния на развитие ядерной энергетике.

**Продукты реакции деления.** К продуктам реакции деления, кроме ядер-осколков, относятся «мгновенные» нейтроны и  $\gamma$ -кванты, а также продукты распада ядер-осколков, в том числе и запаздывающие нейтроны. Деление ядер под действием нейтронов осуществляется по  $\sim 40$  различным каналам, причем, как правило, получают два несимметричных осколка: легкий (изотопы  ${}_{35}\text{Br}$ ,  ${}_{36}\text{Kr}$ ,  ${}_{37}\text{Rb}$ , ... с  $A \approx 90 \dots 100$ ) и тяжелый (изотопы  ${}_{55}\text{Cs}$ ,  ${}_{56}\text{Ba}$ ,  ${}_{57}\text{La}$ , ... с  $A \approx 135 \dots 145$ ).

Пример одного из каналов деления:

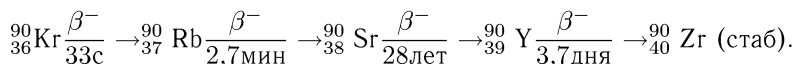


Ядра-осколки разлетаются с суммарной кинетической энергией  $\Sigma T_{\text{оск}} \approx 167 \text{ МэВ}$ , которая распределяется между ними в соответствии с законом сохранения импульса.

При делении ядра  ${}_{92}\text{U}^{236*}$ , как это видно из записи процесса, приведенного в качестве примера, образовалось 3 нейтрона и несколько  $\gamma$ -квантов. Эти частицы испускаются возбужденными ядрами-осколками

практически сразу же после их образования. Для нейтронов  $\tau_n^{\text{МГН}} \approx 10^{-14}$  с, их среднее число на 1 акт деления  $\nu \approx 2,5$ , т. е. с наибольшей вероятностью при делении ядра испускаются два или три мгновенных нейтрона. Среди них встречаются нейтроны с  $T_n > 15$  МэВ. Но средняя энергия мгновенных нейтронов  $T_n^{\text{МГН}} \approx 2$  МэВ и на долю мгновенных нейтронов в среднем приходится энергия  $\sum T_n^{\text{МГН}} \approx 5$  МэВ. Оставшаяся после вылета нейтронов энергия возбуждения осколков уносится  $\gamma$ -квантами ( $\tau_\gamma \approx 10^{-9}$  с;  $\sum E_\gamma \approx 7$  МэВ).

Ядра-осколки, образовавшиеся при делении ядер  ${}_{92}^{236}\text{U}^*$ , имеют то же, что и у этих ядер отношение  $(A - Z)/Z \approx 1,5$ . Но у стабильных изотопов с  $A_1 \approx 90$  и  $A_2 \approx 143$  отношение числа нейтронов к числу протонов должно быть меньшим: 1,25 и 1,35. Таким образом, ядра-осколки перегружены нейтронами по сравнению со стабильными изотопами с тем же числом нуклонов, и должны испытывать  $\beta^-$ -распад. Например, изотоп  ${}_{36}^{90}\text{Kr}$  распадается по схеме:



Легко проверить, что у  ${}_{36}^{90}\text{Kr}$   $(A - Z)/Z = 1,5$ , а у стабильного  ${}_{40}^{90}\text{Zr}$  оно равно  $\sim 1,25$ . В среднем на каждый из 80 осколков приходится радиоактивная цепочка из 3 звеньев; периоды полураспада изотопов находятся в широком диапазоне от долей секунды до многих лет.

В частности, изотоп  ${}_{38}^{90}\text{Sr}$  является одним из долгоживущих изотопов, надолго заражающих местность в случае взрыва ядерного заряда или аварии на атомной электростанции.

Энергия, которую уносят продукты  $\beta^-$ -распада осколков в одном акте деления составляет  $\sim 24$  МэВ (по  $\sim 7$  МэВ уносят электроны и  $\gamma$ -кванты, и  $\sim 10$  МэВ приходится на долю антинейтрино, участвующих в распаде).

К продуктам реакции деления относятся и нейтроны, получившие название *запаздывающих*. Их происхождение уже обсуждалось в § 75. Различают 6 групп запаздывающих нейтронов; интенсивность каждой группы спадает по экспоненте со своим  $\tau_i$  (от 0,33 до 80,6 с). Общая доля запаздывающих нейтронов по отношению ко всем нейтронам деления невелика, меньше 0,01, их суммарная энергия меньше 1 МэВ. Тем не менее, как мы увидим далее, запаздывающие нейтроны играют огромную роль в процессах управления ядерными реакторами.

**Цепная реакция деления. Размножающая среда и ее основные характеристики.** В реакции деления тяжелых ядер выделяется большая энергия. Практическое использование этой энергии возможно лишь

в том случае, если начавшийся процесс деления будет самоподдерживающимся, или **ц е п н ы м**. Это оказывается возможным, т. к. среди продуктов реакции есть нейтроны — частицы, способные вызвать деление других ядер. Как уже отмечалось, среднее число нейтронов деления на один акт деления заметно больше единицы ( $\nu \approx 2,5$ ), и реакция деления может оказаться не только самоподдерживающейся, но и быстро развивающейся. Эти особенности реакции деления используются как в ядерных зарядах, так и в атомных электростанциях. Среда, в которой развивается или может развиваться цепная реакция деления (ц.р.д.), называется **р а з м н о ж а ю щ е й с р е д о й**. Любая размножающая среда содержит делящиеся изотопы, но кроме них может содержать и другие вещества, например, вещества, замедляющие нейтроны, или регулирующие скорость ц.р.д. и др.

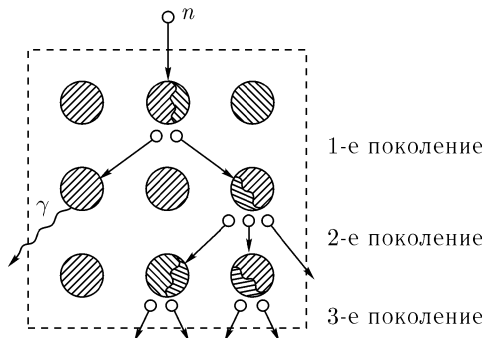


Рис. 171. Схема развития ц.р.д.

Рассмотрим ц.р.д. в очень малом объеме размножающей среды, содержащей только делящиеся ядра (рис. 171). Пусть в среду извне попадает один нейтрон. Если этот нейтрон вызовет реакцию деления одного из ядер, то в среде появится  $\nu$  нейтронов 1-го поколения. Эти нейтроны (в рассматриваемом случае — два) сталкиваются с др. ядрами среды и могут вызвать как реакцию деления с появлением нейтронов 2-го поколения, так и реакцию, в результате которой нейтрон погибает (например, реакцию  $(n\gamma)$ ). К уменьшению числа нейтронов приводит и их выход за пределы размножающей среды. Если число нейтронов и число делящихся ядер от поколения к поколению все же увеличивается (происходит «размножение» нейтронов), то цепная реакция деления **р а з в и в а е т с я**.

Основной характеристикой размножающей среды является коэффициент размножения  $k$ :

$$k = N_i/N_{i-1}, \quad (15.21)$$

где  $N_i$  — число нейтронов в некотором поколении,  $N_{i-1}$  — число нейтронов в предыдущем поколении. Очевидно, что при  $k > 1$  ц.р.д. развивается, при  $k = 1$  протекает в стационарном режиме, а при  $k < 1$  затухает.

Выясним связь между  $k$  и  $\nu$ . Очевидно, что  $k < \nu$ , т.к. в размножающей среде кроме реакции деления идут реакции захвата нейтронов без последующего деления, и, кроме того, возможен вылет нейтронов за пределы размножающей среды. Чтобы исключить последнюю причину, рассмотрим сначала бесконечную размножающую среду и введем для нее коэффициент размножения  $k_\infty$ ; тогда  $k = \alpha k_\infty$ , где  $\alpha$  — безразмерный коэффициент, характеризующий вероятность для нейтронов остаться в пределах размножающей среды. В любой реальной среде  $\alpha < 1$ ; с ростом размеров среды  $\alpha \rightarrow 1$ . Но и в бесконечной размножающей среде  $k_\infty < \nu$ .

Введем «эффективное» число нейтронов  $\eta$  — среднее число нейтронов деления на один захваченный нейтрон. В размножающей среде, содержащей делящиеся ядра одного и того же сорта,

$$\eta = \nu \cdot \sigma_f / \sigma_a, \quad (15.22)$$

где  $\sigma_f$  — сечение деления, а сечение поглощения  $\sigma_a = \sigma_t - \sigma_{nn}$ .

В бесконечной размножающей среде, содержащей только делящиеся ядра,  $k_\infty = \eta$ .

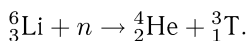
Рассчитаем  $\eta$  для  ${}_{92}^{235}\text{U}$  по табличным значениям физических величин, входящих в формулу (15.22). При делении  ${}_{92}^{235}\text{U}$  на быстрых нейтронах спектра деления ( $T_n^{\text{cp}} = 2$  МэВ) эти величины имеют следующие значения:  $\nu = 2,43$ ;  $\sigma_f = 1,81$  барн;  $\sigma_a = 2,33$  барн. Для  ${}_{92}^{235}\text{U}$  получаем:  $\eta = 2,43 \cdot 1,81 / 2,33 = 1,89$ . Для  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$  в тех же условиях:  $\eta = 2,94 \cdot 1,76 / 2,22 = 2,33$ . Так как для этих изотопов  $\eta \gg 1$ , то из них могут быть изготовлены ядерные заряды, в которых ц.р.д. будет развиваться быстро. В размножающей среде ядерного заряда  $k = \alpha k_\infty = \alpha \eta$ . Для осуществления ц.р.д. должно выполняться условие  $k \geq 1$ . При  $k = 1$  вероятность избежать утечки  $\alpha = 1/\eta$ . Такому значению  $\alpha$  будут соответствовать «критический размер» и «критическая масса» размножающей среды. Существуют различные методы расчета критических размеров и масс размножающих сред. Но любые расчетные значения проверяются в «критопытах», т.е. в опытах, в которых критические параметры определяются экспериментально. Для  ${}_{92}^{235}\text{U}$   $M_{\text{кр.}} \approx 50$  кг, а для  ${}_{94}\text{Pu}^{239}$  критическая масса значительно меньше, порядка десяти килограммов (зависит от чистоты размножающей среды, наличия отражателя нейтронов и др. причин).

**Ядерный и термоядерный заряды.** Для изготовления ядерного заряда (атомной бомбы, ядерной боеголовки) используется преимущественно Pu-239. Масса делящегося вещества в заряде должна быть больше критической ( $M > M_{кр}$ ), но до взрыва заряд должен находиться в подкритическом состоянии ( $k < 1$ ). Подкритичность заряда может быть достигнута разделением делящегося вещества на 2 или больше частей с  $M_i < M_{кр}$ , размещенных в общей оболочке. Для перехода в надкритическое состояние, что необходимо для возникновения взрыва, нужно быстро сблизить все части ядерного заряда; для сближения обычно используется взрыв химического заряда (взрывателя). Если ядерное горючее разделено в заряде на две части (например, две полусферы), то уровень надкритичности заряда  $M/M_{кр} < 2$  и при взрыве заряда может прореагировать количество делящегося вещества, не превышающее  $\Delta M < M_{кр}$ .

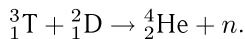
Легко подсчитать, что при полном делении всех ядер в 1 кг  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$  выделится энергия  $W = 10^{21}$  эрг, что эквивалентно энерговыделению  $2 \cdot 10^7$  кг тротила, т. е. ядерная взрывчатка «эффективнее» химической в  $\sim 2 \cdot 10^7$  раз.

В центре взрыва развиваются огромные температура ( $\sim 10^8$  К) и давление ( $\sim 10^{12}$  атм); за время  $t =$  неск. мкс вещество заряда переходит в состояние плазмы, разлетается и теряет надкритичность, взрыв прекращается. Обычная энергия ядерного взрыва  $1 \div 20$  кт тротилового эквивалента.

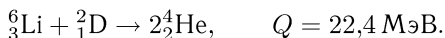
Существенно большая энергия выделяется при взрывах термоядерных зарядов (тротиловый эквивалент  $0,1 \div 1$  Мт). Непременной составной частью термоядерного заряда является ядерный заряд, при взрыве которого создается необходимая для термоядерного синтеза температура (см. конец § 77). Ядерный заряд окружают веществом, содержащим ядра  ${}^2_1\text{D}$  и  ${}^3_1\text{T}$ , при синтезе которых образуются ядра  ${}^4_2\text{He}$  и нейтроны (формула (15.15)). Очень удобным для использования в термоядерных зарядах оказался дейтерид лития LiD. Нейтроны, возникающие при ядерном взрыве, вызывают реакцию:



Образовавшиеся в этой реакции ядра трития вступают в реакцию с ядрами дейтерия:



Общий итог обеих реакций:



Средняя энергия, выделяющаяся на 1 нуклон в этих реакциях, равна:  $q_{\text{синт}} = Q_{\text{синт}} / \sum A \approx 22,4/8 \approx 3 \text{ МэВ/нукл}$ . Это в  $\sim 3,5$  раза больше, чем при делении ( $q_{\text{дел}} \approx 200 \text{ МэВ}/239 \approx 0,85 \text{ МэВ/нукл}$ ).

Для веществ, вступающих в реакции термоядерного синтеза, не существует понятия «критической массы», и эти вещества могут полнее «выгорать» при взрыве, чем делящиеся. Мощность термоядерной бомбы можно значительно увеличить, если окружить ее слоем дешевого U-238. Нейтроны термоядерного взрыва (их энергия  $T_n \approx 14 \text{ МэВ}$ ) будут вызывать деление ядер  ${}_{92}^{238}\text{U}$ , что приведет к увеличению мощности бомбы, а также к увеличению количества радиоактивных изотопов, выпадающих на Землю после взрыва и являющихся одним из поражающих факторов ядерного и термоядерного взрывов. Другими поражающими факторами являются электромагнитный импульс (ЭМИ), поток нейтронов и  $\gamma$ -лучей, и ударная волна. Радиус поражения  $R$  от взрывной волны зависит от мощности заряда. Для заряда с тротильным эквивалентом 20 кт  $R \approx 1 \text{ км}$ . Радиоактивное же облако (нагретый воздух, содержащий продукты деления) поднимается вверх на высоту 10 км и более и распространяется затем на сотни километров.

**Скорость развития цепной реакции деления. Влияние запаздывающих нейтронов.** Рассмотрим размножающую среду, в которой осуществляется ц.р.д. с коэффициентом размножения  $k$ . Найдем закон, по которому изменяется с течением времени число нейтронов (а следовательно, и делящихся ядер).

Пусть  $N$  — число нейтронов в произвольном поколении, тогда  $N \cdot k$  — число нейтронов в следующем поколении, а  $\Delta N = N \cdot k - N = N \cdot (k - 1) = N \cdot \Delta k$  — приращение числа нейтронов за 1 поколение. Характеристика размножающей среды  $\Delta k = k - 1$  называется избыточным коэффициентом размножения. Обозначим  $\tau$  — среднее время жизни нейтронов одного поколения. Тогда

$$\begin{aligned} dN/dt &= \Delta N/\tau = N\Delta k/\tau, \quad \text{или:} \\ dN/dt &= N\Delta k/\tau. \end{aligned}$$

После интегрирования и подстановки начального условия ( $N(t) = N_0$  при  $t = 0$ ) получаем:

$$N(t) = N_0 \exp(\Delta k t / \tau). \quad (15.23)$$

Эта формула описывает изменение числа нейтронов (а также числа делящихся ядер и количества выделяющейся энергии) в цепной реакции деления.

Из формулы (15.23) следует, что при  $k > 1$  скорость роста  $N(t)$  зависит не только от избыточного коэффициента размножения  $\Delta k$ , но и от



среднего времени жизни нейтронов одного поколения  $\tau$ , и, следовательно, на скорость развития ц.р.д. влияют запаздывающие нейтроны. Напомним, что среди нейтронов деления есть мгновенные нейтроны с  $\tau_{\text{мгн}}$  и запаздывающие нейтроны с  $\tau_{\text{зап}} \gg \tau_{\text{мгн}}$ . При делении ядер  ${}^{235}_{92}\text{U}$  доля запаздывающих нейтронов всех групп  $\beta = \sum \beta_i = 0,0064$ , а усредненное по всем группам  $\tau_{\text{зап}} \approx 13$  с. Эти цифры нам понадобятся для оценочных расчетов, которые позволят сделать важные выводы.

Представим коэффициент размножения  $k$  в следующем виде:

$$k = (1 - \beta)k + \beta k. \quad (15.24)$$

В этом равенстве первое слагаемое имеет смысл коэффициента размножения на мгновенных нейтронах ( $k_{\text{мгн}} = (1 - \beta)k$ ), а второе слагаемое определяет вклад запаздывающих нейтронов в коэффициент размножения:  $k_{\text{зап}} = \beta k$ . Ц.р.д. развивается, если  $k > 1$ . Если при этом и  $k_{\text{мгн}} = (1 - \beta)k > 1$ , то ц.р.д. идет только на мгновенных нейтронах; в этом случае  $\Delta k > \beta$ . Для того, чтобы понять, как быстро будет развиваться ц.р.д. в таких случаях, вычислим, во сколько раз будет увеличиваться число делений за время  $t$  при  $\Delta k = 0,01$ . Для расчета необходимо знать  $\tau_{\text{мгн}}$ . Из теории и опыта известно, что в размножающей среде, содержащей только делящиеся ядра, среднее время до захвата нейтронов после их испускания другими делящимися ядрами составляет  $\sim 10^{-8}$  с, т. е.  $\tau_{\text{мгн}} \approx 10^{-8}$  с. Следовательно,  $N(t)/N_0 = \exp(\Delta k t / \tau) = \exp(0,01 \cdot t / 10^{-8})$ . При  $t = 10$  мкс  $N(t)/N_0 = \exp 10 \approx 2 \cdot 10^4$ ! Мы видим, что даже при казалось бы очень небольших  $\Delta k \approx 0,01$  (но все же больших, чем  $\beta$ !) ц.р.д. развивается чрезвычайно быстро, т. е. происходит взрыв. Очевидно, что такая скорость развития ц.р.д. подходит для ядерных зарядов, но совершенно непригодна для управляемой ц.р.д. в ядерных реакторах. Проведем теперь расчет  $N(t)/N_0$  за время  $t$  для случая, когда  $\Delta k = 0,001$ , т. е.  $\Delta k < \beta$ . В этом случае  $k_{\text{мгн}} < 1$  и в развитии ц.р.д. принимают участие и запаздывающие нейтроны. Можно показать, что в этом случае  $\tau = \tau_{\text{мгн}} + (\beta - \Delta k)\tau_{\text{зап}}$ . При  $\beta = 0,0064$ ,  $\tau_{\text{зап}} \approx 13$  с и при  $\Delta k = 0,001$  получаем:  $\tau \approx 0,07$  с. Теперь даже при  $t = 1$  с  $N(t)/N_0 = \exp(0,001 \cdot 1 / 0,07) = e^{0,014} \approx 1,014$ . Такая скорость развития ц.р.д. вполне приемлема для систем управления, использующихся в ядерных реакторах.

**Принципы работы ядерных реакторов.** Ядерными реакторами называют установки, в которых осуществляется управляемая ц.р.д. Существуют экспериментальные ядерные реакторы (они используются для решения задач, связанных с разработкой новых идей в реакторостроении; как правило, эти реакторы обладают небольшой мощностью), энергетические реакторы, использующиеся на АЭС, и

бридерные реакторы, предназначенные для воспроизводства ядерного горючего ( для получения изотопа  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$  из изотопа  ${}_{92}^{238}\text{U}$ ).

Большая часть энергетических ядерных реакторов работает на тепловых нейтронах, а не на нейтронах спектра деления. В таких ядерных реакторах для замедления нейтронов используются графит, тяжелая вода ( $\text{D}_2\text{O}$ ) и обычная вода. Реакторы на быстрых нейтронах являются более выгодными для воспроизводства ядерного горючего (в них на 1 кг «выгоревшего»  ${}_{92}^{238}\text{U}$  может быть получено больше 1 кг  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$ ). Однако, при их эксплуатации возникают проблемы, еще не получившие полного разрешения. Реакторы на быстрых нейтронах продолжают совершенствоваться и их количество будет увеличиваться.

Остановимся на реакторах, работающих на тепловых нейтронах. При строительстве самых первых ядерных реакторов в качестве ядерного горючего имелся только естественный уран:  $(99,28\%{}_{92}^{238}\text{U} + 0,72\%{}_{92}^{235}\text{U})$ . Выше было показано, что изотоп  ${}_{92}^{235}\text{U}$  делится на нейтронах любой энергии, причем  $\sigma_f$  тем больше, чем меньше энергия нейтронов («закон  $1/\nu$ »), а для ядер  ${}_{92}^{238}\text{U}$  необходимы нейтроны с  $T_n > T_{n\text{пор}} \approx \approx 1$  МэВ. Нейтроны, возникающие при делении ядер имеют среднюю энергию  $T_n = 2$  МэВ. Казалось бы, на таких нейтронах должно осуществляться деление и тех и других ядер. Но в действительности в среде из естественного урана ц.р.д. на быстрых нейтронах не развивается по следующей причине: при  $T_n \approx 2$  МэВ эффективное сечение  $n$  е у п р у г о г о рассеяния нейтронов на ядрах урана, при котором они сразу же теряют большую часть своей энергии, в несколько раз превышает  $\sigma_f$ , а потерявшие свою энергию нейтроны не вызывают деления ядер  ${}_{92}^{238}\text{U}$ . Поэтому в естественном уране при делении на нейтронах спектра деления (т.е. на быстрых нейтронах)  $\eta < 1$  и ц.р.д. н е в о з м о ж н а. Если же замедлить нейтроны до тепловой энергии, то ядра  ${}_{92}^{238}\text{U}$  совсем не будут делиться, но эффективное сечение деления ядер  ${}_{92}^{235}\text{U}$  становится таким большим ( $\sigma_f = 582$  барн), что значение  $\eta$  (а следовательно, и  $k_\infty$ ) оказывается большим единицы.

В реакторах на тепловых нейтронах приходится использовать большие количества замедлителя. Однако, при столкновении с ядрами атомов замедлителя нейтроны не только замедляются, но и поглощаются. Кроме того, при малых  $T_n$  ядра  ${}_{92}^{238}\text{U}$ , как уже знаем, не делятся, но поглощают нейтроны в результате реакции ( $n\gamma$ ). Поэтому максимальное значение  $k_\infty$  для размножающей среды, содержащей естественный уран и хороший замедлитель (в первых реакторах — графит), лишь незначительно превышает единицу:  $k_\infty = 1,12$ . Очевидно, что при таком  $k_\infty$  ц.р.д. хоть и возможна, но размеры размножающей среды должны быть большими, чтобы вероятность ухода нейтронов за пределы активной зоны была малой. Поэтому размножающие среды реакторов, работающих на

естественном уране, имеют размеры порядка 10 м. Критическую массу ядерного горючего, а следовательно и размеры реактора, можно уменьшить, если вместо естественного урана использовать обогаченный уран, содержащий 2...5% изотопа  $^{235}_{92}\text{U}$ . Именно такой уран и используется в настоящее время в энергетических ядерных реакторах. В смесях, где содержание  $^{235}_{92}\text{U}$  или  $^{239}_{94}\text{Pu}$  превышает 20%, становится возможной ц.р.д. на быстрых нейтронах.

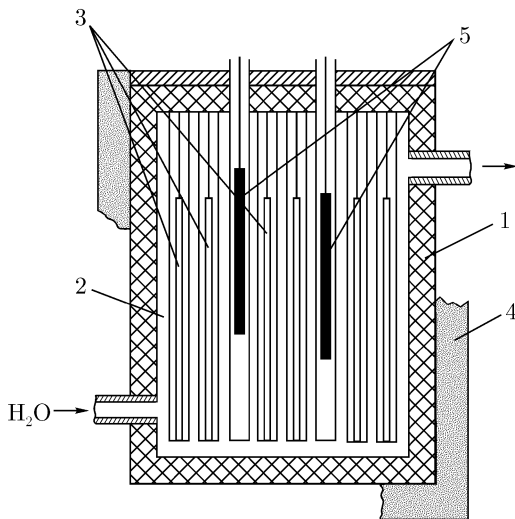


Рис. 172. Схема гетерогенного ядерного реактора.

В ядерной энергетике применяется несколько типов ядерных реакторов. Рассмотрим упрощенную схему активной зоны гетерогенного ядерного реактора на тепловых нейтронах (рис. 172), предназначенного для работы на АЭС. В гетерогенных ядерных реакторах замедлитель и ядерное горючее не перемешиваются: в замедлителе делаются каналы, в которые вставляют содержащие ядерное горючее стержни, или ТВЭЛы — тепловыделяющие элементы. (В гомогенных реакторах ядерное горючее и вещество, используемое для замедления, представляют собой однородную смесь, иногда являющуюся и теплоносителем.)

В представленном на схеме реакторе замедлителем (2) является вода. Она выполняет также функцию теплоносителя и переносит выделяющееся в активной зоне тепло к паровой турбине. Количество стержней (3) с ядерным горючим может быть большим нескольких сотен; их диаметр не превышает десяти сантиметров при длине, доходящей до

нескольких метров. Для уменьшения утечки нейтронов из активной зоны корпус реактора (1) окружается отражателем нейтронов (4) — графитом или др. веществом.

Управление скоростью ц.р.д., а следовательно, и мощностью реактора, осуществляется с помощью управляющих стержней (5). В них содержатся вещества, хорошо поглощающие нейтроны: кадмий, бор. При опускании управляющих стержней в активную зону реактора  $k$  уменьшается, а при поднятии — увеличивается. Это позволяет приводить реактор в режим пуска ( $1 < k < 1,0064$ ), стационарной работы ( $k \approx 1$ ) и остановки ( $k < 1$ ). На каждом реакторе предусмотрены аварийные управляющие стержни, которые автоматически «падают» в активную зону реактора при малейшем увеличении мощности сверх установленного значения.

В работающих реакторах количество  ${}_{92}^{235}\text{U}$  в ТВЭЛах со временем уменьшается, и в них накапливаются осколки деления и продукты их распада, а также некоторое количество  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$ . Для получения плутония-239 в больших количествах должны использоваться реакторы на быстрых нейтронах, работающие на смеси изотопов  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$  и  ${}_{92}^{238}\text{U}$ . При делении ядер  ${}_{94}^{239}\text{Pu}$  в реакторах на быстрых нейтронах эффективное число нейтронов  $\eta = 2,33$ ; при таком большом значении  $\eta$  удается «направить» на воспроизводство (т.е. на реакцию  ${}_{92}^{238}\text{U}(n\gamma){}_{92}^{239}\text{U} \rightarrow \dots \rightarrow {}_{94}^{239}\text{Pu}$ ) более 1 нейтрона.

Активная зона таких реакторов, как правило, окружается дополнительным толстым слоем  ${}_{92}^{238}\text{U}$ . В этом слое под действием нейтронов из активной зоны реактора также идет реакция  ${}_{92}^{238}\text{U}(n\gamma){}_{92}^{239}\text{U}$ , и общий (для всей установки) коэффициент воспроизводства может быть заметно большим единицы.

Отработавшие положенный срок стержни заменяются новыми и отправляются в специальные хранилища, т.к. они чрезвычайно радиоактивны. Через некоторое время становится возможной их переработка с целью извлечения плутония — 239 или каких-либо других радиоактивных изотопов. Но и после переработки содержимое стержней очень долго сохраняет высокую активность. Проблема его «захоронения» еще не решена. Тем не менее ядерная энергетика продолжает развиваться. Запасов ядерного горючего (с учетом его воспроизводства) должно хватить на сотни лет.

В настоящее время в мире работают несколько сотен энергетических ядерных реакторов; в некоторых странах на долю ядерной энергии приходится свыше 50% от потребляемой в стране электроэнергии. В России еще в 1954 г. была введена в строй первая в мире АЭС с мощностью 5 МВт. Сейчас большая часть АЭС имеет мощность порядка 1000 МВт. Ведется работа по созданию новых типов энергетических ядерных реакторов и совершенствованию уже работающих.

## ГЛАВА 16

# ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЧАСТИЦЫ

В этой главе мы займемся изучением элементарных частиц. Интуитивное представление о том, какие частицы являются элементарными у всех, конечно, есть. Атомы не являются элементарными частицами, потому что они легко расщепляются на электроны и ионы. Атомные ядра также не являются элементарными частицами, потому что они могут быть разделены на более легкие составляющие: на более легкие ядра или даже на отдельные нуклоны. Электроны и нуклоны — протон и нейтрон — расщеплены на составляющие быть не могут. При попытке их расщепить, например, при облучении другими быстрыми частицами, происходит либо упругое соударение, либо рождаются новые частицы, а старые остаются в неизменном виде или превращаются в другие элементарные частицы, не более простые, чем исходные. К этому следует добавить, что элементарные частицы не имеют возбужденных состояний. Состояния, которые можно было бы назвать возбужденными, например, состояния с большей величиной углового момента, если они есть, являются новыми элементарными частицами.

В этой книге вы уже встречались с элементарными частицами двух типов: с легкими (к ним относятся электрон, позитрон, нейтрино и антинейтрино) и тяжелыми, из которых пока шла речь только о протоне и нейтроне. Мы говорили также о фотонах, занимающих среди других частиц особое положение. Известные вам элементарные частицы далеко не исчерпывают всего списка. Сейчас известны несколько сотен элементарных частиц. Появилась необходимость в их упорядочении.

Упорядочить это многообразие позволило введение представления о кварках. Создана Стандартная Теория элементарных частиц, которая играет здесь ту же роль, что таблица Менделеева и обычная (нерелятивистская) квантовая механика, которые внесли порядок в свойства и многообразие атомов. Релятивистская квантовая механика, квантовая хромодинамика, и теория слабых взаимодействий позволяют производить расчеты, если не с такой же легкостью, то, по крайней мере, с такой же надежностью, как обычная квантовая механика позволяет это делать по отношению к атомам. Мы не будем здесь

рассматривать эти разделы квантовой физики, потому что они далеко выходят за рамки общего курса физики.

Физика элементарных частиц внесла в науку не только новые представления и новые вычислительные методы, но и обширную новую терминологию, которая часто затрудняет чтение литературы. Мы постараемся разъяснить, если не всю эту терминологию, то, по крайней мере, наиболее употребительную ее часть.

## § 80. Нуклоны и лептоны. Терминология. Слабое взаимодействие

Из глав, посвященных ядерной физике, уже известно, что при радиоактивных превращениях сохраняется суммарное число протонов и нейтронов. Если бы это было не так, то нейтрон, в частности, мог бы распадаться не на протон, электрон и антинейтрино, как это происходит на самом деле, а на электроны, позитроны и, может быть, нейтрино. При таком распаде выделилась бы существенно большая энергия, чем при реально происходящем распаде: не несколько сотен килоэлектронвольт, как на самом деле, а сотни мегаэлектронвольт, так что такой распад происходил бы неизмеримо быстрее. Запретить такой распад может только нарушение какого — либо фундаментального физического закона. Сформулируем этот закон: **число барионов в природе сохраняется**. (Позднее мы уточним эту формулировку.) Пока нам встречался только частный случай этого закона, справедливый в рамках ядерной физики, — закон сохранения массового числа  $A$ . Ввести для тяжелых частиц новый термин — **барионы** — пришлось потому, что сейчас известны не две тяжелых частицы — протон и нейтрон (нуклоны), а несколько сотен. Эти новые тяжелые частицы не способны образовывать сколько-нибудь стабильные атомные ядра, так что к ним неприменимо название нуклонов. Название барионы происходит от греческого корня *barys* — тяжелый.

Вместо того, чтобы говорить о сохранении числа барионов, мы будем говорить в дальнейшем о **сохранении барионного числа** (или барионного заряда).

Рассмотрим распад нейтрона. Как вы уже знаете, нейтрон распадается на протон, электрон и антинейтрино:

$$n \rightarrow p + e + \bar{\nu}. \quad (16.1)$$

В отличие от тяжелых частиц — барионов — электрон и нейтрино называют **лептонами** (от греч. *leptos* — тонкий, легкий). Напомним основные свойства входящих в это равенство частиц.

Таблица 9. Важнейшие свойства основных частиц

	Электр. заряд $q$ (в един. $e$ )	Масса покоя $mc^2$ (МэВ)	Спин ( $h$ )	Магн. момент (в магнетонах)	Среднее время жизни до распада, $\tau$
$p$	+1	938,27	1/2	2,79	$> 10^{25}$ лет
$n$	0	939,57	1/2	-1,91	614,6 с
$e$	-1	0,511	1/2	1	$> 4 \cdot 10^{24}$ лет
$\nu$	0	$< 3 \cdot 10^{-6}$	1/2	$< 1,5 \cdot 10^{-10}$	$\infty$ ?

В этой таблице для магнитных моментов использованы разные магнетоны: для электрона и нейтрино — магнетон Бора, а для нуклонов — ядерный магнетон (см. §72). Здесь и всюду в дальнейшем под массой мы будем иметь в виду величину  $mc^2$ .

Закон сохранения барионного числа обеспечивает стабильность протонов. Он мешает им распадаться на позитроны и нейтрино.

Продолжим рассмотрение распада нейтрона. Из схемы распада (16.1), видно, что при распаде нейтрона, кроме протона и электрона, возникает еще и антинейтрино. Антинейтрино, как и нейтрино, — это частица, которая почти ни с чем и никак не взаимодействует. Обнаружить ее крайне трудно, а в то время, когда она была введена, это было попросту невозможно. Откуда же мы знаем, что она рождается при распаде нейтрона? Если бы распад происходил не на три, а на две частицы — протон и электрон, то из законов сохранения следовало бы, что уносимая ими энергия равна энергии, выделяющейся при распаде, а импульсы протона и электрона при распаде неподвижного нейтрона в сумме должны были бы быть равны нулю, т.е. импульсы протона и электрона должны были бы быть направлены в противоположные стороны и равны по абсолютной величине. Энергия электрона была бы при этом четко определена.

Опыт убеждает нас в том, что это не так. Энергия электронов, рождающихся при распаде нейтрона, занимает целый диапазон — от нуля до максимума (почти равного всей энергии, выделяющейся при распаде нейтрона). Следовательно, нейтрон распадается больше, чем на две частицы, причем две из них (протон и электрон) наблюдаются, а остальные (или остальная) «убегают» от наблюдения. Простейшее предположение (Паули, 1930 г) состоит в том, что такая частица одна, а полное число частиц три. Расчеты распределения электронов по величине импульса (см. §75) и сравнение расчетов с опытом показали, что частиц, действи-

тельно, три, причем одна из них не наблюдается. Эта частица и получила название антинейтрино. Так мы приходим к выводу о распаде нейтрона на три частицы и к схеме распада (16.1).

Из опыта следует, что у всех частиц имеются античастицы (некоторые исключения из этого правила мы приведем позднее). Остановимся на некоторых свойствах античастиц. Массы частиц и античастиц равны, а все квантовые числа античастиц имеют обратный знак по сравнению с соответствующими числами частиц. К таким квантовым числам относятся электрический заряд, а также барионный (у барионов) и лептонный (у лептонов) заряды. Так, позитрон является античастицей по отношению к электрону. Заряды этих частиц противоположны по знаку, их массы одинаковы, а лептонные числа противоположны: единица у электрона и минус единица у позитрона. У системы из двух частиц — электрона и позитрона — суммарное лептонное число равно нулю. Об античастице для нейтрино — об антинейтрино — мы уже говорили. Античастицы есть и у протона (антипротон) и у нейтрона (антинейтрон). Антипротон заряжен отрицательно, а антинейтрон нейтрален, как и сам нейтрон. Барионное число у протона и нейтрона равно единице, а у антипротона и антинейтрона — минус единице и т. д. Античастицы, если они не имеют специального обозначения, как в случае позитрона, обозначаются тем же символом, что и частица, с волнистой чертой (тильдой) над ним, как это сделано в формуле (16.1) для антинейтрино.

Почему же при распаде нейтрона природа генерирует не две частицы, а три, зачем это нужно? Дело в том, том что в природе сохраняется не только барионное, но и лептонное квантовое число. Лептонное число у электрона равно  $+1$ , а у антинейтрино  $-1$ , так что при распаде нейтрона суммарное лептонное число равно нулю как до, так и после распада.

Теперь мы можем понять также, почему при взаимодействии квантов электромагнитного излучения с веществом генерируются не просто электроны, а электрон — позитронные пары. Не только для того, чтобы сохранялся электрический заряд (этого нередко можно было бы достичь и другим способом, скажем, превратив один из протонов в ядре, на котором происходит генерация, в нейтрон), но и потому, что при генерации электрон — позитронных пар не меняется лептонное число. Оно как было, так и остается равным нулю.

Итак, в природе выполняются два важнейших закона: барионный заряд (барионное число) и лептонный заряд (лептонное число) всегда сохраняются. Эти законы абсолютны (в условиях, далеких от экстремальных), и мы будем широко ими пользоваться в дальнейшем.



Скажем несколько слов о фотонах (напомним, что к ним, кроме световых, относятся также рентгеновские и  $\gamma$ -кванты). У них нет никаких квантовых чисел (за исключением спина). Поэтому они являются сами себе античастицами, иначе говоря, являются с т и н н о н е й т р а л ь н ы м и ч а с т и ц а м и. С другими такими частицами мы познакомимся позже.

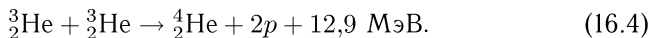
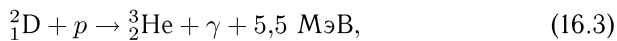
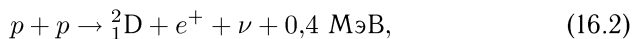
Продолжим разговор о нейтрино и о слабом взаимодействии, которое приводит к его рождению. Мы уже упоминали о том, что нейтрино почти ни с чем и никак не взаимодействует. Что значит «почти»? Если бы нейтрино совсем не взаимодействовало, то оно не могло бы и родиться. Значит, оно все-таки взаимодействует. Это взаимодействие, однако, чрезвычайно слабо. Его слабость возникает из-за слабости сил слабого взаимодействия вообще. Эта слабость приводит к огромным по сравнению с другими взаимодействиями временам взаимодействия: В тех случаях, когда реакция (распад или какая-либо др. реакция) под действием слабого взаимодействия не является единственно возможной, происходят другие реакции, и мы только их и наблюдаем. Мы наблюдаем распад нейтрона и рождение антинейтрино потому, что никакие другие способы распада нейтрона невозможны — на них нехватает энергии. Поэтому нейтрон и живет до распада в среднем целых 10 минут, пока слабое взаимодействие все-таки работает.

Если бы понадобилось установить защиту какой-либо установки от источника нейтрино, то между источником и установкой пришлось бы установить свинцовую стену толщиной в несколько световых лет (световой год — это расстояние, который проходит свет в течение года).

Продолжим обсуждение свойств слабого взаимодействия. До его обнаружения были известны три типа взаимодействий: гравитационное, электромагнитное и ядерное. Все они носят универсальный характер. Гравитационное и электромагнитное взаимодействия проявляются не только на малых, но и на сколь угодно больших расстояниях. Они первыми были обнаружены и исследованы. Их свойства хорошо известны. Последнее из них — ядерное — является проявлением с и л ь н о г о в з а и м о д е й с т в и я (подробнее о соотношении сильного и ядерного взаимодействия мы поговорим в § 85). На малых расстояниях (на расстояниях порядка ядерных) оно чрезвычайно сильно, а на больших не действует вовсе. За распад нейтрона ответственно четвертое, — с л а б о е в з а и м о д е й с т в и е, которое действует на все частицы, включая нейтрино.

Можно было бы подумать, что слабое взаимодействие из-за своей слабости не является уж очень важным. Но это не так. Оно, в частности, является необходимым участником С о л н е ч н о г о Ц и к л а, который

поддерживает температуру Солнца, а вместе с ней и нашу жизнь. Этот цикл состоит из следующего ряда реакций:



Все эти реакции могут происходить лишь в том случае, если участвующие в них заряженные частицы (два протона в первой реакции, дейтрон и протон во второй и два ядра гелия в третьей) могут достаточно близко подойти друг к другу. Этому мешает их кулоновское отталкивание, которое на малых расстояниях чрезвычайно сильно. Поэтому эти реакции могут происходить лишь при огромных температурах и давлениях. Они относятся к термоядерным реакциям. Во внутренних областях Солнца условия для осуществления таких реакций имеются.

Первая из этих реакций происходит под действием трех взаимодействий: сильного, ответственного за начало реакции и за образование дейтерия, электромагнитного и слабого (генерация позитрона и нейтрино). Если было бы возможно «выключить» слабое взаимодействие, «погасло» бы наше Солнце и не было бы нас с вами. . .

## § 81. Сильное взаимодействие. Кварки. Цвет и аромат кварков. Фундаментальные частицы первого поколения

**Кварки.** Приступая к рассмотрению сильного взаимодействия, мы начнем с кварков. Говоря о магнитных моментах нуклонов, мы уже обращали внимание читателя на аномальные значения их магнитных моментов. Даже электрически нейтральный нейтрон обладает заметным магнитным моментом:  $-1,91\mu_N$ . Это послужило нам первым указанием на сложный состав нейтрона (и протона). Но представление о кварках возникло после того, как были открыты  $\Delta$ -частицы (дельта-частицы) и  $\pi$ -мезоны (пи-мезоны).

В настоящее время твердо установлено, что протоны и нейтроны состоят из некоторых составных частей, которые получили название кварков. Это не значит, что нуклоны могут быть разделены на кварки. Мы уже говорили о том, что ни протон, ни нейтрон ни на какие составляющие разделены быть не могут. Кварки в свободном состоянии получить нельзя. Однако, только теория кварков (Стандартная Теория) позволила объяснить основные свойства известных барионов и мезонов, и предсказать существование других, еще не открытых.

Существует несколько разновидностей кварков. Мы рассмотрим сначала самые легкие кварки — кварки первого поколения. Таких кварков два: верхний, который принято обозначать как  $u$ -кварк, или  $up$ -кварк (произносится ап-кварк от англ. *up* — верхний) и нижний  $d$ -кварк, или  $down$ -кварк (произносится даун-кварк от англ. *down* — нижний). Их заряды равны  $+2/3e$  у верхнего и  $-1/3e$  у нижнего кварков. Спины кварков всех типов и поколений равны  $1/2$ .

Протон состоит из двух верхних кварков и одного нижнего:  $p = (uud)$ . Соответственно, его заряд равен  $2 \times 2/3 + (-1/3) = +1$  (в ед.  $e$ ). Нейтрон состоит из двух нижних кварков и одного верхнего:  $n = (udd)$ . Его заряд равен нулю. Кварки и лептоны объединяют общим названием фундаментальных частиц.

К фундаментальным частицам первого поколения относятся не только  $up$ - и  $down$ -кварки и уже знакомые нам лептоны — электрон  $e^-$  и электронное нейтрино  $\nu_e$ , но также и их античастицы: антикварки  $\tilde{u}$  и  $\tilde{d}$ , позитрон  $e^+$  и антинейтрино  $\tilde{\nu}_e$ . На этом список частиц первого поколения заканчивается.

До сих пор мы говорили просто о нейтрино. Но сейчас мы знаем, что к фундаментальным частицам первого поколения относятся именно электронное нейтрино и электронное антинейтрино. Сравнительно недавно (в начале 60-х годов) выяснилось, что разновидностей нейтрино существует несколько. Остальные нейтрино не относятся к частицам первого поколения и о них речь пойдет ниже.

Возвратимся снова к распаду нейтрона. Преобразование нейтрона в протон сводится к замене одного нижнего кварка на верхний. Изменение заряда компенсируется генерацией электрона, а вместе с ним возникает и электронное антинейтрино.

Возникает естественный вопрос о массах кварков. Этот вопрос не имеет простого ответа. Как уже пояснялось, кварки не могут быть получены в свободном виде и поэтому не имеют определенной массы в обычном смысле этого слова. Обычно  $u$ -кварку приписывают массу 5 МэВ, а  $d$ -кварку — массу 7 МэВ. То обстоятельство, что кварки невозможно выделить из элементарных частиц, называют английским словом «конфайнмент» (от *confinement* — удержание, заточение). Кварки в элементарных частицах находятся «в пожизненном заточении».

**Глюоны.** Обратимся теперь к переносчикам взаимодействий. Переносчиком электромагнитного взаимодействия является электромагнитное поле, на квантовом языке — фотоны. Переносчиком гравитационного взаимодействия является гравитационное поле и, соответственно, — гравитоны. Переносчиков сильного взаимодействия называют глюонами (от англ. *glue* — клей). Рассмотрение природы ядерных сил мы снова отложим до дальнейшего.

Переносчики электромагнитного и гравитационного взаимодействий, фотоны и гравитоны, — из-за слабости взаимодействия — легко отрываются от источников соответствующих зарядов и могут существовать отдельно. При сильном взаимодействии это не так: оторвать глюоны от элементарных частиц не удастся. При этом, конечно, затрудняются построение и наглядность теории.

**Мезоны.** Познакомимся с некоторыми другими частицами, построенными из кварков первого поколения. Это, прежде всего,  $\pi$ -мезоны или пионы. Существует три разновидности этих частиц:  $\pi^+$ ,  $\pi^-$  и  $\pi^0$ -мезоны. Название «мезоны» происходит от греческого слова *mesos* — средний, промежуточный. И, действительно,  $\pi$ -мезоны обладают массой, которая лежит между массой электронов и нуклонов. В настоящее время известны мезоны с очень большими массами. Название «мезоны», однако, сохраняется и для них.

По современной терминологии мезонами называют частицы, состоящие из кварка и антикварка, независимо от массы частиц и от того, о каких кварках идет речь, о верхних или нижних, о кварках первого или следующих поколений.

Приведем кварковый состав  $\pi$ -мезонов:

$$\begin{aligned}\pi^+ &= (u\bar{d}), \\ \pi^- &= (\bar{u}d), \\ \pi^0 &= (1/\sqrt{2})(u\bar{u} - d\bar{d}).\end{aligned}$$

Из состава  $\pi^0$ -мезона следует, что часть времени он проводит в состоянии  $u\bar{u}$ , а часть — в  $d\bar{d}$ -состоянии.

Масса всех  $\pi$ -мезонов составляет около 140 МэВ.  $\pi$ -мезоны, как и все частицы, состоящие из кварков, относятся к сильно взаимодействующим частицам. Заряженные  $\pi$ -мезоны живут  $\sim 2,6 \cdot 10^{-8}$  с, а  $\pi^0$ -мезон —  $8,4 \cdot 10^{-17}$  с.

В главе XV при обсуждении ядерных реакций был введен термин «адроны» для ядерноактивных частиц. Выше мы ввели термин «барионы» и только что — термин «мезоны». Теперь эти термины следует уточнить.

Барионами называют частицы, состоящие из трех кварков или трех антикварков (антибарионы). Адронами называют все частицы, способные к сильному взаимодействию, то есть все частицы, состоящие из кварков и антикварков. К адронам, таким образом, относятся как барионы, так и мезоны. Эти определения следует запомнить.

Вернемся к свойствам  $\pi$ -мезонов. Начнем с  $\pi^0$ -мезона. Из его состава ясно, что этот мезон принадлежит к истинно нейтральным частицам: у него нет никаких квантовых чисел (кроме спина). Поэтому он может распадаться на гамма кванты, что он и делает:  $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$ . В его распаде не принимают участие нейтрино и вообще не участвуют силы слабого взаимодействия. Поэтому время его жизни так мало. Два других  $\pi$ -мезона являются частицей и античастицей. Один из способов распада  $\pi^+$ -мезона — это распад на позитрон и нейтрино:

$$\pi^+ \rightarrow e^+ + \nu_e. \quad (16.6)$$

Другой способ распада приводит к образованию мюона (лептон с массой  $\sim 105$  МэВ, принадлежащий ко второму поколению фундаментальных частиц):

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu. \quad (16.7)$$

Здесь мы впервые встретились с еще одним типом нейтрино — с мюонным нейтрино  $\nu_\mu$ . Подробный рассказ о фундаментальных частицах второго поколения мы отложим до следующего параграфа. Большое время жизни заряженных  $\pi$ -мезонов ( $2,6 \cdot 10^{-8}$  с) связано с тем, что их распад может происходить только под действием сил слабого взаимодействия.

Распад (16.7) (и аналогичный распад  $\pi^-$ -мезона) является основным источником мюонов в космических лучах и на ускорителях. Мюоны, как и другие лептоны (за исключением электронов и позитронов), непосредственно не генерируются и возникают только как продукты распада тех или иных адронов (прямая генерация происходит, но крайне редко).

Познакомимся с еще одним типом частиц, состоящих из кварков первого поколения. Речь идет о  $\Delta$ -барионах. Таких барионов четыре:

$$\Delta^{++}, \quad \Delta^+, \quad \Delta^0 \quad \text{и} \quad \Delta^-.$$

Спин этих частиц равен  $3/2$ . Первый из них несет двойной электрический заряд и состоит из трех  $u$ -кварков ( $3 \times 2/3$ ), второй несет одинарный положительный заряд и состоит из двух  $u$ -кварков и одного  $d$ -кварка ( $2 \times 2/3 - 1/3$ ), третий состоит из одного  $u$ -кварка и двух  $d$ -кварков ( $2/3 + 2 \times (-1/3)$ ) и четвертый — из трех  $d$ -кварков ( $3 \times (-1/3)$ ). Представление о кварках и здесь является решающим. Оно позволяет понять, почему дельта — барионов четыре, и объяснить их зарядовые состояния.

У внимательного читателя должен был возникнуть вопрос: как могут три кварка — три фермиона — находиться в одном и том же квантовом состоянии? Мы имеем в виду  $\Delta^{++}$  и  $\Delta^-$ -частицы. Возникает естественное предположение, что у кварков есть еще одно квантовое число, и три фермиона в  $\Delta$ -частицах могут различаться по этому квантовому

числу. Такое квантовое число, действительно, есть. Оно носит название цвета, хотя никакого отношения к цвету в оптическом понимании не имеет. В качестве «цветов» обычно выбирают желтый, синий и красный. Чтобы продолжить аналогию с нашими чувствами, принято говорить, что кварки разных типов отличаются друг от друга ароматом. Цвета кварков являются источником сил сильного взаимодействия — источником глюонов.

Выше мы попутно подготовили ответ еще на один вопрос, который не мог не возникнуть у читателя: почему барионы состоят именно из трех кварков, а мезоны из кварка и антикварка? Ответ на этот вопрос заключается в следующем: в природе могут существовать в свободном состоянии только бесцветные комбинации кварков. Набор из трех цветов у кварков, содержащихся в барионах, составляет бесцветную комбинацию, аналогично тому, как белый цвет является комбинацией нескольких цветовых компонент. А в состав мезонов, которые также должны быть бесцветными, входит кварк, окрашенный в некоторый цвет и антикварк, окрашенный в соответствующий «антицвет», или, как принято говорить, в дополнительный цвет.

Несколько исторических замечаний. Первые «нестандартные» частицы были обнаружены при исследовании бета-распада ядер. При этих исследованиях был обнаружен позитрон, а вслед за ним появилась гипотеза о существовании нейтрино. Следующий шаг был сделан при исследовании космических лучей. В космических лучах был обнаружен мюон, который сначала получил название  $\mu$ -мезона (в дальнейшем название мезонов, как вы уже знаете, получили частицы, состоящие из кварка и антикварка, к числу которых мюон не относится). Мюон был обнаружен благодаря своему большому времени жизни (целых две микросекунды!). Из-за такого большого времени жизни мюоны, рожденные в верхних слоях атмосферы, успевают долетать до поверхности Земли, где они и были обнаружены. Космические частицы (в основном протоны больших энергий), взаимодействуя с верхними слоями атмосферы, вызывают ядерные реакции, в которых рождается множество быстро распадающихся частиц, в том числе  $\pi$ -мезонов, а мюоны рождаются при их распаде. Обнаружение мюонов в космических лучах вызвало поток исследовательских работ по поиску других новых частиц. В космических лучах были обнаружены  $\pi$ - и  $K$ -мезоны. Однако, поток этих частиц слишком мал для серьезных исследований, и эти работы сейчас оставлены. Новые частицы, в том числе  $\pi$ - и  $K$ -мезоны, сейчас генерируют на ускорителях, с устройством которых мы познакомимся в § 88.

В гл. 14 уже шла речь об изотопической инвариантности. Там отмечалось, что массы и ядерные свойства протона и нейтрона так мало

отличаются друг от друга, что естественно рассматривать эти частицы как два состояния — заряженное и незаряженное — одной и той же частицы — нуклона. В рамках этой концепции протон и нейтрон отличаются друг от друга проекцией некоторой величины, которая получила название *изотопического спина*. У протона эта проекция равна  $+1/2$ , а у нейтрона  $-1/2$ . Никакого отношения к обыкновенному спину изотопический спин не имеет. Название «спин» используется в этом случае потому, что, как и у обыкновенного спина, его проекция квантуется и для спина  $1/2$  может принимать два значения:  $+1/2$  и  $-1/2$ .

Изотопическая инвариантность ядерных сил является следствием изотопической инвариантности кварков, а именно *u*- и *d*-кварков. Как уже ясно из сказанного ранее, изотопический спин кварков равен  $1/2$ . Его проекция может принимать два значения:  $+1/2$  у *u*-кварка (и у  $\tilde{d}$ ) и  $-1/2$  у *d*-кварка (и у  $\tilde{u}$ ). Изотопический спин является аддитивным квантовым числом, так что изотопический спин системы равен алгебраической сумме спинов составляющих частиц. Так, изотопический спин барионов, состоящих из трех кварков первого поколения, т.е. *u*- или *d*-кварков, может быть равным  $3/2$  ( $\Delta$ -частицы) или  $1/2$  (нуклоны), а изотопический спин мезонов может равняться 0 или 1.

## § 82. Некоторые результаты теории относительности

Мы приведем здесь — без строгого вывода — некоторые утверждения и формулы теории относительности. Нас будут интересовать, главным образом, формулы, которые важны для понимания процессов генерации, взаимодействия и распада элементарных частиц.

Начнем с координат и времени. В теории относительности, так же как в классической физике, считается, что равноправны все системы координат, которые движутся друг относительно друга равномерно и прямолинейно. Однако, в классической физике считается, что при переходе из одной такой системы в другую скорость света преобразуется по тем же формулам, что и всякая другая скорость, а в теории относительности — в согласии с опытом — считается, что во всех таких системах скорость света одинакова. Поясним это на примере. Пусть в некоторой системе свет движется на нас со скоростью  $c$ , а сама система движется на нас со скоростью  $V$ . В классической физике полагается, что свет будет двигаться относительно нас со скоростью  $c + V$ , а в теории относительности считается, что он движется к нам все с той же скоростью  $c$ .

Рассмотрим переход из одной равномерно и прямолинейно движущейся системы координат в другую, движущуюся относительно пер-

вой. Одну из них назовем «штрихованной», а другую — «нештрихованной». Пусть некоторое тело имеет в этих системах координаты  $x', y', z'$  и  $x, y, z$ . Время в этих системах обозначим через  $t'$  и  $t$ . В классической физике считается, что во всех таких системах часы идут одинаково, так что  $t = t'$ . Как показывает анализ, это утверждение противоречит постоянству скорости света и должно быть заменено на другое:

$$s = s', \quad (16.8)$$

где

$$s^2 = (ct)^2 - x^2 - y^2 - z^2. \quad (16.9)$$

В этом равенстве  $c$ , как всегда, обозначает скорость света. Величина  $s$  называется *интервалом*. Классическая физика возникает из релятивистской при предельном переходе  $c \rightarrow \infty$ . В самом деле, при этом члены, содержащие  $x, y$  и  $z$  в выражении для  $s^2$  перестают играть роль, и из формулы (16.8) сразу следует, что  $t = t'$ .

Рассмотрим, как преобразуется время при переходе из штрихованной, «движущейся» системы в нештрихованную «неподвижную» систему координат. Пусть в «движущейся» системе работают часы, расположенные в начале координат. В этой системе координата часов все время равна нулю.

$$x' = y' = z' = 0, \quad (16.10)$$

так что

$$s' = ct'. \quad (16.11)$$

Пусть измеренная в неподвижной системе скорость движущейся системы равна  $V$ , и эта система движется от нас вдоль оси  $x$ . Пусть часы при наблюдении в неподвижной системе показали время  $t$ . Координата часов, измеренная в нештрихованной системе, равна  $x = Vt$ . Чтобы понять, какое время измерит наблюдатель, движущийся вместе с часами, воспользуемся формулами (16.8) и (16.9).

$$s'^2 = (ct')^2 = s^2 = (ct)^2 - (Vt)^2, \quad (16.12)$$

так что

$$t'^2 = t^2(1 - (V/c)^2). \quad (16.13)$$

Итак, время  $t'$ , которое показывают часы в движущейся вместе со штрихованной системой координат меньше, чем время  $t$ , измеренное наблюдателем, относительно которого часы движутся.

Чтобы сформулировать полученный результат яснее, заметим, что при выводе формулы (16.13) мы считали, что в движущейся (штрихованной) системе координат часы неподвижны. Система координат, связанная с рассматриваемым предметом (в нашем случае с часами), носит



название собственной, а время, измеренное в этой системе, называется собственным временем. Итак, наш результат заключается в том, что медленнее всего идут часы, показывающие собственное время.

Перепишем формулу (16.13) в более удобном виде. Для этого обозначим собственное время не через  $t'$ , а через  $t_0$ .

$$t = \frac{t_0}{\sqrt{1 - (V/c)^2}}. \quad (16.14)$$

Рассуждая аналогичным образом, можно показать, что длина предмета, измеренная в «неподвижной», нештрихованной системе координат  $l$ , и его длина  $l_0$  в собственной системе координат, связаны соотношением

$$l_0 = \frac{l}{\sqrt{1 - (V/c)^2}}, \quad (16.15)$$

т.е. в собственной системе координат предмет оказывается самым длинным.

Итак, в теории относительности время и координаты преобразуются совместно. Этот результат обычно выражается в виде утверждения, что время и координаты образуют 4-вектор, вектор с четырьмя проекциями, одной временной и тремя пространственными. А интервал — это длина 4-вектора. Она выражается не совсем так, как длина обычного вектора, но ведь это 4-, а не обычный 3-вектор (с тремя проекциями на пространственные оси.)

На этом мы закончим рассмотрение координат и времени и перейдем к более важным для нас формулам для энергии и импульса. Энергия и импульс образуют такой же 4-вектор, как время и координаты. Формулы преобразования из одной системы в другую для них такие же. Но нас сейчас будут интересовать не эти формулы, а связь энергии и импульса со скоростью. Соответствующие формулы имеют вид:

$$p = \frac{m\nu}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}, \quad (16.16)$$

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}, \quad (16.17)$$

В этих формулах  $m$  — масса тела, а  $v$  — скорость тела в рассматриваемой системе координат. Из этих формул видно, что при  $v \rightarrow c$  импульс и

энергия тела стремятся к бесконечности, так что «разогнать» тело до скорости, равной скорости света, невозможно (если, конечно, масса тела не равна нулю; тогда его нельзя остановить).

Из формул (16.16) и (16.17) легко получить:

$$E^2 - p^2 c^2 = m^2 c^4. \quad (16.18)$$

Эта формула напоминает формулу для интервала. Его роль играет теперь масса. При переходе из одной системы координат в другую энергия и импульс тела изменяются. Масса тела (она аналогична интервалу, введенному ранее) не меняется. Масса является релятивистским инвариантом.

Формула (16.18) играет фундаментальную роль в физике. Мы уже пользовались этой формулой ранее, а теперь постарались показать, как она возникает. Из формулы видно, что при нулевом импульсе (у неподвижной частицы)  $E = mc^2$ . Эта величина носит название энергии покоя. Таким образом, импульс покоя равен нулю, а энергия покоя равна не нулю, а  $mc^2$ .

Перейдем теперь к системам, состоящим из нескольких частиц. Энергия и импульс аддитивны. Это означает, что энергия системы равна сумме энергий составляющих частиц, а импульс системы равен сумме их импульсов:

$$E_{\text{сист}} = \sum E_i,$$

$$\mathbf{P}_{\text{сист}} = \sum \mathbf{p}_i.$$

Из этих равенств следует, что масса системы свойством аддитивности не обладает. Масса двух монет не равна сумме масс этих монет! Она равна ей только, если монеты неподвижны или движутся друг относительно друга с небольшими (нерелятивистскими) скоростями.

В самом деле, масса системы равна

$$M_{\text{сист}}^2 c^4 = E_{\text{сист}}^2 - P_{\text{сист}}^2 c^2 = \left(\sum E_i\right)^2 - \left(\sum p_i\right)^2 c^2 \neq \sum (E_i^2 - p_i^2 c^2).$$

Повторим полученные нами результаты. Энергия и импульс аддитивны, но не являются релятивистскими инвариантами, а масса является релятивистским инвариантом, но не аддитивна. Эти утверждения следует запомнить.

Рассмотрим генерацию частиц на ускорителях. Ускоренные до большой энергии первичные частицы заставляют сталкиваться либо с частицами, находящимися в неподвижной мишени, либо с частицами, движущимися им навстречу. Первый из этих способов несравненно проще

и эффективнее, потому что мишень может быть сделана толстой, и вероятность столкновения, а значит и вероятность реакции, велика. Во втором случае ускоренные частицы сталкиваются с разреженным пучком летящих навстречу частиц, и вероятность соударения крайне мала. Чтобы повысить ее, нужно приводить в столкновение циркулирующие навстречу друг другу пучки ускоренных частиц и повторять столкновения многократно. Насколько отличаются энергии, которые используются для генерации новых частиц, в этих двух случаях? На первый взгляд, в 4 раза. В первом случае это половина энергии ускоренных частиц (из-за движения центра инерции), а во втором — удвоенная их энергия. Так ли это при больших энергиях?

Энергия, выделяющаяся при столкновении, должна рассчитываться в системе центра инерции сталкивающихся частиц, т. е. в системе, где суммарный импульс этих двух частиц равен нулю. Рассмотрим ускоритель LEP, до последнего времени работавший в Европейском Центре Ядерных Исследований (CERN). В этом ускорителе сталкивались пучки электронов, ускоренных до 100 ГэВ. Ускорители, работающие со сталкивающимися пучками, называют коллайдерами. Лабораторная система координат является в этом случае системой центра инерции. При столкновении частиц выделяется энергия

$$E_1 = 2 \cdot 100 = 200 \text{ ГэВ.}$$

(Напомним читателю, что  $1 \text{ ГэВ} = 1000 \text{ МэВ} = 10^9 \text{ эВ}$ ).

Какая энергия выделяется при столкновении электрона, движущегося с энергией 100 ГэВ, с неподвижным электроном? Прямой переход в систему центра инерции оказывается в этом случае не таким простым. Воспользуемся для расчета следующим приемом. В системе координат, связанной с центром инерции, суммарный импульс электронов равен нулю, а значит их суммарная энергия (которую мы и ищем) просто равна  $Mc^2$ , где  $M$  — полная масса системы. Найдем эту массу. Как мы уже знаем, масса является релятивистским инвариантом и может быть рассчитана в любой системе координат. Рассчитаем ее в лабораторной системе, где один из электронов покоится, а другой имеет энергию 100 ГэВ. Импульсы этих электронов равны 0 и  $p$ , а значит суммарный их импульс просто равен  $p$ . Величина  $p$  при необходимости может быть рассчитана по энергии электрона, но нам не придется этого делать. В лабораторной системе энергия первого, неподвижного электрона равна  $mc^2$ . Обозначим энергию второго, летящего электрона через  $E_l$  и вместо  $p$  для упрощения вида формулы будем писать  $p_l$ . В лабораторной системе:

$$\begin{aligned} M^2 c^4 &= E^2 - P^2 c^2 = (E_l + mc^2)^2 - p_l^2 c^2 = \\ &= E_l^2 + 2E_l mc^2 + m^2 c^4 - p_l^2 c^2 = 2E_l mc^2 + 2m^2 c^4. \end{aligned}$$

Примем теперь во внимание, что в нашем случае  $E_1$  в две тысячи раз превосходит  $mc^2$ , так что второй член равенства представляет собой небольшую поправку к первому. Пренебрежем ею. Итак, с хорошей точностью можно считать, что

$$Mc^2 = \sqrt{2E_1mc^2}.$$

Энергия соударения  $E_2$  в этом случае равна следовательно:

$$E_2 = Mc^2 = \sqrt{2E_1mc^2}.$$

Сравним энергии, выделяющиеся в первом и во втором случае:

$$E_1/E_2 = 2E_1/\sqrt{2E_1mc^2} = 2 \cdot 10^2 \cdot 10^3 / (2 \cdot 10^2 \cdot 10^3 \cdot 0,51)^{1/2} \approx 600.$$

Так что искомое отношение равно не 4, а 600! Очевидно, что переход к методу встречных пучков оказывается не просто полезным, а совершенно необходимым.

### § 83. Старшие поколения фундаментальных частиц

Перейдем ко второму поколению фундаментальных частиц. К нему, как и к первому поколению, относятся четыре частицы: два кварка и два лептона. Верхний из кварков носит название «очарованного», а нижний — «странного». Так же, как у кварков первого поколения, электрический заряд верхнего кварка равен  $+2/3$ , а нижнего кварка  $-1/3$ . Очарованный кварк называют  $c$ -кварком (от англ. *charm* — очарование), а странный —  $s$ -кварком (от англ. *strange* — странный). К числу лептонов второго поколения относятся также два лептона — мюон  $\mu$  и мюонное нейтрино  $\nu_\mu$ . Как и у фундаментальных частиц первого поколения, у всех частиц второго поколения есть античастицы.

Из частиц второго поколения мы пока встречались только с мюоном. Что касается нейтрино второго поколения, то до последнего времени (1962 г.) только теоретические соображения заставляли думать, что мюонные нейтрино отличаются от электронных. Сейчас экспериментально подтверждено, что это действительно так. Как и во всех опытах с нейтрино, их инертность затрудняет эксперименты.

Из адронов, содержащих кварки второго поколения, первыми были открыты  $K$ -мезоны. Как и все мезоны, они содержат один кварк и один антикварк. При этом один из кварков является странным, а второй —

кварком первого поколения. Как нетрудно понять, таких мезонов четыре:

$$\begin{aligned} K^+ &= (u\bar{s}), \\ K^0 &= (d\bar{s}), \\ \bar{K}^0 &= (\bar{d}s), \\ K^- &= (\bar{u}s). \end{aligned} \quad (16.19)$$

Масса  $K$ -мезонов составляет около 500 МэВ. При распаде  $K$ -мезонов входящие в их состав  $s$  (или  $\bar{s}$ )-кварки превращаются в  $u$ - или  $d$ -кварки (или, соответственно, в антикварки). Такие распады могут происходить с генерацией или без генерации лептонов. Приведем в качестве примера безлептонный распад  $K^+$ -мезона:

$$K^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^0 \quad (16.20)$$

$$(u\bar{s}) \rightarrow (\bar{d}u) + (\bar{u}u)$$

При распаде  $K^+$ -мезона  $\bar{s}$ -кварк переходит в  $\bar{d}$ -кварк и рождается пара  $u\bar{u}$ -кварков. Этот распад происходит сравнительно медленно: он требует целых  $10^{-8}$  с. Дело в том, что всякое изменение аромата кварков т. е. всякое превращение одного кварка в другой происходит только под действием сил слабого взаимодействия, а значит происходит медленно (распад нейтрального  $K^0$ -мезона происходит за  $10^{-10}$  с). Легче других происходит переход между кварками одного поколения.

Полный набор реакций, приводящих к распаду  $K^+$ -мезона, очень велик. Основной способ его распада — это распад на мюон и мюонное нейтрино:

$$K^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu. \quad (16.21)$$

Кроме того, он может распадаться на  $3\pi$ -мезона, на  $\pi^0$ -мезон, мюон и нейтрино и т. д. Перечислять все способы его распада мы не будем.

В отличие от  $\pi^0$ -мезона  $K^0$ -мезон не является истинно нейтральной частицей, т. к.  $\bar{K}^0$ -мезон имеет другой состав, чем  $K^0$ -мезон.

На опыте наблюдаются, однако, не эти частицы, а их линейные комбинации  $K_S^0$ - и  $K_L^0$ -мезоны. Один из них,  $K_S^0$ , т. е.  $K^0$ -«короткий» (от англ. *short* — короткий) распадается намного быстрее, чем другой,  $K_L^0$ , т. е.  $K^0$  — «длинный» (от англ. *long* — длинный). Время жизни  $K_S^0$ -мезона составляет  $0,9 \cdot 10^{-10}$  с, а время жизни  $K_L^0$ -мезона равно  $5,2 \cdot 10^{-8}$  с.

Существуют и странные барионы. Они могут содержать один, два или три странных кварка. Укажем, например, на  $\Lambda^0$ -частицу, содержащую  $u$ ,  $d$ , и  $s$ -кварки. Ее масса равна 1116 МэВ, а время жизни  $2,6 \cdot 10^{-10}$  с. Основных мод распада у  $\Lambda^0$ -частицы две: на  $p$  и  $\pi^-$ -мезон и на  $n$  и  $\pi^0$ -мезон. Существуют и многие другие способы распада.

К легким странным барионам относятся и три  $\Sigma$ -бариона:  $\Sigma^+(uus)$ ,  $\Sigma^0(uds)$  и  $\Sigma^-(dds)$  с массой около 1190 МэВ. Как следует из сказанного,  $\Lambda^0$ - и  $\Sigma^0$ -частицы имеют одинаковый кварковый состав. Тем не менее это разные частицы.

Вернемся к вопросу о массах кварков. Как уже упоминалось выше, этот вопрос не имеет простого ответа, поскольку кварки нельзя получить в свободном виде и «взвесить» в тех или иных экспериментах. В адронах кварки окружены силовыми полями, масса которых составляет основную массу адронов. Приведем общепринятые значения масс кварков второго поколения.

$$m(s) \approx 150 \text{ МэВ},$$

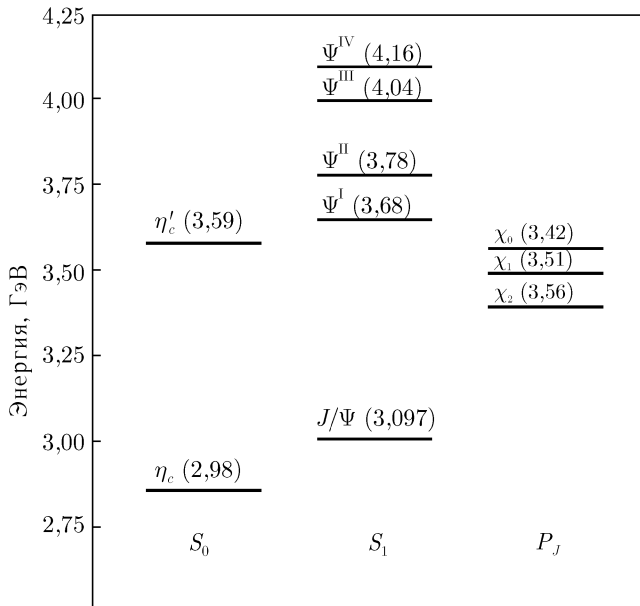
$$m(c) \approx 1400 \text{ МэВ}.$$

Резкое возрастание массы при переходе к кваркам второго поколения делает понятным, почему в состав нуклонов входят только  $u$ - и  $d$ -кварки, а адроны, содержащие  $s$ -кварк («странные барионы») и тем более  $c$ -кварк, оказываются очень тяжелыми и поэтому неустойчивыми.

Мы не будем далее обсуждать странные барионы, число которых довольно велико. Укажем только, что среди прочих существует  $\Omega^-$ -барион, состоящий из трех  $s$ -кварков.

Рассмотрим таблицу мезонов, состоящих из одного  $c$  и одного  $\bar{c}$ -кварка (рис. 173). Все эти мезоны носят общее название: «чармоний». Рисунок содержит три колонки. В первой из них приведены два  $\eta_c$ -мезона. Они находятся в  $S_0$  состоянии. Это означает, что в  $\eta_c$ -мезонах орбитальный момент кварков равен нулю ( $S$ -состояние), суммарный спиновый момент тоже равен нулю (нижний индекс), и число состояний, отличающихся направлением момента (который в этом случае отсутствует) равно единице. Два  $\eta_c$ -мезона отличаются друг от друга радиальными квантовыми числами (т. е. они находятся в состояниях, когда возбуждены разные радиальные колебания).

Во второй колонке содержатся шесть  $\psi$ -мезонов (из них на рисунке приведены 5). Их орбитальное квантовое число равно нулю, суммарное спиновое число входящих в их состав кварков равно единице, а значит возможное число ориентаций спина равно 3. Нижний из этих мезонов называется  $J/\psi$ -мезоном. Это название он получил потому, что был одновременно открыт двумя группами ученых. Одна из них назвала его  $J$ -

Рис. 173. Таблица  $c\bar{c}$ -мезонов.

мезоном, а другая —  $\psi$ -мезоном. Разные  $\psi$ -мезоны отличаются друг от друга радиальными возбуждениями.

Перейдем к третьей колонке рисунка. В нее входят три  $\chi$ -мезона, обладающие единичным орбитальным моментом ( $P$ -состояние) и единичным полным моментом. Это состояние может возникать при различных полных моментах кварков (нижний индекс  $j$ ) при соответствующих взаимных ориентациях орбитального и спинового моментов. Различные радиально возбужденные мезоны «ничего не знают друг о друге» и являются разными частицами.

Второе поколение кварков оказалось не последним. В настоящее время известны три поколения фундаментальных частиц. Их можно свести в общую таблицу.

В таблице указаны три поколения фундаментальных частиц. Частиц третьего поколения тоже четыре. В третьем поколении содержатся два кварка:  $t$ -кварк (от англ. *top* — верхний) и  $b$ -кварк (от англ. *bottom* — нижний).  $t$ -кварк распадается так быстро (и имеет такую большую энер-

гетическую ширину), что не образует частиц. Частицы, содержащие  $b$ -кварк, хорошо известны, но мы их рассматривать не будем.

Таблица 10. Полная таблица фундаментальных частиц.

кварки	$u$	$c$	$t$
	$d$	$s$	$b$
лептоны	$e$	$\mu$	$\tau$
	$\nu_e$	$\nu_\mu$	$\nu_\tau$

лептонами разных поколений запрещены. Соответствующее правило для кварков менее категорично. Мы уже отмечали, что переход кварка в кварк другого поколения возможен, но происходит значительно труднее, чем переход в кварк того же поколения.

В настоящее время имеются указания на то, что перечень существующих в природе поколений фундаментальных частиц исчерпывается этими тремя. Так ли это на самом деле, покажут дальнейшие исследования.

Приведем значения масс кварков (из сказанного ранее ясно, что значения масс носят ориентировочный характер, потому что получить кварки в свободном виде невозможно). Массы, которые мы здесь приводим, это массы «голых кварков». При удалении от них должны все более чувствоваться влияние, а следовательно, и масса, окружающей их «глюонной шубы».

Таблица 11. Массы «голых» кварков

$u$	5 МэВ
$d$	7 МэВ
$s$	150 МэВ
$c$	1,4 ГэВ
$b$	5 ГэВ
$t$	175 ГэВ

В заключение остановимся на  $SU$ -симметриях. Это — симметрии в свойствах элементарных частиц, которые возникают, если пренебречь различием масс соответствующих кварков. Мы уже говорили об  $SU(2)$  симметрии (изотопической инвариантности), основанной на близости масс  $u$ - и  $d$ -кварков. Из таблицы 11 следует, что массы трех первых кварков  $u$ -,  $d$ - и  $s$ - тоже отличаются одна от другой не так сильно, как их отличие от масс остальных кварков. Это дало основание для построения теории  $SU(3)$ -симметрии, в которой пренебрегается различием между этими тремя массами.

Приведем диаграмму, иллюстрирующую этот подход (рис. 174). На рисунке изображены барионы, содержащие  $u$ -,  $d$ - и  $s$ -кварки. На ле-

Еще два важных замечания. Слабое взаимодействие может переводить электрон в электронное нейтрино и ни в какое другое. Аналогично мюон может превращаться в мюонное нейтрино, но не в электрон и не в электронное нейтрино. Так при распаде мюона он переходит в мюонное нейтрино и рождается пара: электрон и электронное антинейтрино. Генерация такой пары ничем не запрещена. Переходы между



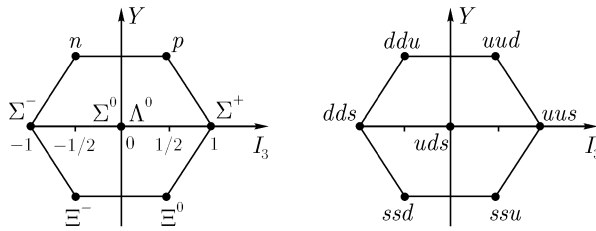


Рис. 174.  $SU(3)$ -схема для барионов.

вом рисунке представлены сами барионы, а на правом — их кварковый состав. В верхнем ряду расположены хорошо нам известные нейтрон и протон с изотопическим спином, равным  $1/2$  (у протона проекция  $I_3 = +1/2$ , а у нейтрона  $I_3 = -1/2$ ). В следующем ряду находятся  $\Sigma$ -частицы. Их изоспин равен  $1$  ( $I_3 = +1$  у  $\Sigma^+$ -бариона,  $I_3 = -1$  у  $\Sigma^-$ -бариона и  $I_3 = 0$  у  $\Sigma^0$ -бариона). В центре таблицы, кроме  $\Sigma^0$ , находится еще и  $\Lambda^0$ -частица с изоспином равным  $0$ . В нижнем ряду расположены  $\Xi$ -частицы с изоспином  $1/2$ . Значения  $I_3$  отложены по горизонтальной оси. По вертикальной оси отложены «гиперзаряды». Вводить эту величину мы не будем, поскольку она нам не понадобится.

Массы частиц, входящих в октет барионов (рис. 174), как мы и ожидали, не так уж сильно отличаются одна от другой:  $940$  МэВ у нуклонов,  $1190$  МэВ у  $\Sigma$ -частиц,  $1115$  МэВ у  $\Lambda^0$ -частицы и  $1320$  МэВ — у  $\Xi$ -частиц.

### § 84. Диаграммы Фейнмана. Виртуальные частицы. Поляризация вакуума. Асимптотическая свобода

В физике элементарных частиц часто используются диаграммы Фейнмана, которые позволяют представлять распады частиц и реакции между элементарными частицами в простой и наглядной форме.

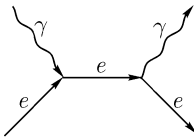


Рис. 175. Диаграмма Фейнмана для  $\gamma - e$  рассеяния.

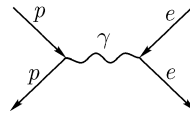


Рис. 176. Диаграмма Фейнмана для  $p - e$  рассеяния.

Начнем с простого примера — с рассеяния фотона на электроне. Соответствующая диаграмма Фейнмана приведена рис. 175. Слева изображены линии первоначально имевшихся частиц: линия электрона (сплошная линия) и линия фотона (волнистая линия). Их стрелки направлены к левой вершине взаимодействия. В правой части мы видим линии тех же частиц, разлетающихся после реакции. Их линии направлены от правой вершины. Линия электрона проходит также от левой вершины к правой. Он не поглощается и не генерируется. Фотон поглощается в левой вершине и вновь рождается в правой.

Линии, изображающие входящие и выходящие частицы, с одного конца свободны. Они изображают частицы, вступающие в реакцию и разлетающиеся после нее. Линия электрона, идущая между вершинами, не имеет свободных концов. Она изображает ненаблюдаемый — виртуальный — электрон. Его введение и изображение на рисунке позволяет существенно упростить не только качественное рассмотрение, но и расчеты.

Остановимся на свойствах виртуальных частиц. Законы сохранения энергии и импульса справедливы для входящих и выходящих частиц, но не для каждой из нарисованных вершин. Для виртуальной частицы, соединяющей две вершины, это не так. Поясним сказанное на другом примере. Рассмотрим кулоновское рассеяние электрона на протоне (рис. 176). В правой вершине электрон испускает виртуальный фотон, а в левой этот фотон поглощается протоном. Масса протона в  $\sim 2000$  раз превосходит массу электрона. Поэтому электрон «отскакивает» от протона, как от бесконечно тяжелой частицы, почти не меняя своей энергии. Виртуальный фотон переносит поэтому почти нулевую энергию. Однако, он несет заметный импульс, потому что импульс электрона при рассеянии может меняться очень существенно. Виртуальный фотон имеет, таким образом, заметный импульс и очень небольшую энергию. Для него, следовательно,  $E^2 - p^2c^2$  не равно нулю, как это должно быть у реального фотона. Физика виртуальных частиц, как мы видим, заметно отличается от физики реальных частиц. Мы не будем углубляться в этот вопрос, потому что нам это не понадобится. Отметим однако, что рождение виртуальной частицы тем менее вероятно, чем больше нехватает массы для рождения реальной частицы вместо виртуальной. Это правило важно помнить при оценке вероятностей реакций, изображаемых на диаграммах Фейнмана.

Рассмотрим еще несколько примеров применения диаграмм Фейнмана. При этом мы пока не будем рассматривать случаи, когда превращения частиц происходят под действием сил слабого взаимодействия, потому что с переносчиками этих сил мы еще незнакомы.

На рис. 177 изображено рассеяние электрона на протоне с испусканием тормозного  $\gamma$ -кванта. Линия электрона после рассеяния на протоне не имеет свободных концов — она соответствует виртуальному электрону, который становится реальным (продолжение этой линии) только после испускания тормозного кванта. Изображенная на рисунке диаграмма Фейнмана не только поясняет ход процесса, но и соответствует технике его теоретического рассмотрения.

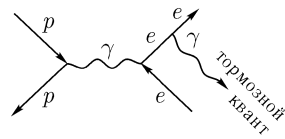


Рис. 177. Диаграмма Фейнмана для  $p - e$  рассеяния с испусканием фотона.

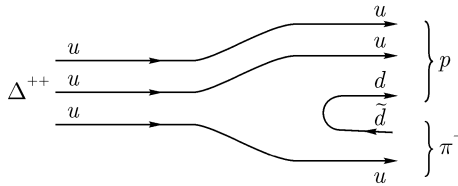
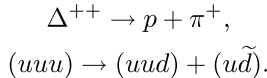


Рис. 178. Диаграмма безлептонного распада  $\Delta^{++}$ -частицы. Кварковая петля.

На рис. 178 изображена схема безлептонного распада  $\Delta^{++}$ -частицы:



Левая часть рисунка изображает кварковый состав  $\Delta^{++}$  частицы, состоящей из трех  $u$ -кварков. Частица распадается. Если в этой реакции не участвует слабое взаимодействие (а оно не участвует), то в ходе реакции кварки не могут изменить своего аромата, а могут только перегруппироваться. Справа, кроме линий, изображающих  $u$ -кварки, мы видим кварковую петлю, изображающую  $d$ -кварк. Идущий слева направо  $d$ -кварк изображает обычный выходящий кварк, а линия кварка, идущая справа налево, может изображать либо входящий кварк, либо выходящий антикварк, как это и происходит в настоящем случае. Вообще в с античастицы, в том числе антикварки, на диаграммах Фейнмана движутся не по стрелкам, а навстречу им. Соблюдение этого правила обеспечивает сохранение числа и аромата кварков. Верхние три линии, т.е. два  $u$ -кварка и  $d$ -кварк, составляют протон, а нижние две изображают выходящие  $u$ -кварк и  $\bar{d}$ -кварк. Эти частицы образуют  $\pi^+$ -мезон. На этом рисунке мы в первый раз столкнулись с

петлей, образованной в нашем случае  $d$ - и  $\tilde{d}$ -кварками. Петли всегда изображают рождение пар.

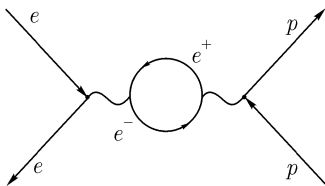


Рис. 179. Диаграмма, иллюстрирующая поляризацию вакуума.

Рассмотрим более сложную, чем на рис. 176, фейнмановскую диаграмму (рис. 179). Испущенный электроном фотон, прежде, чем поглотиться протоном, рождает виртуальную электрон-позитронную петлю. Такой процесс, действительно, существует и носит название поляризации вакуума. Образование виртуальных пар, конечно, сказывается, на распределении электрического поля, окружающего рассматриваемый электрон, но обнаруживается только на малых расстояниях.

Применим сказанное к адронам. Виртуальные кварк-антикварковые пары возникают вокруг каждого из кварков, входящих в состав адронов, и на малых расстояниях от кварков уменьшают глюонное поле, ответственное за сильное взаимодействие. Внутри адронов действующие на кварки силы уменьшаются. Это явление получило название асимптотической свободы. Кварки не могут покинуть адрона, потому что на них действуют огромные силы притяжения — силы сильного взаимодействия. А внутри него они почти свободны. Интересно было бы исследовать это экспериментально. Однако «прощупать» пространство внутри адрона не так просто. Для этого нужно локализовать пробные частицы в пространстве внутри адрона (знать, что пробная частица пролетела не возле, а именно внутри адрона), а для этого необходимы огромные энергии: чтобы локализовать частицы в некотором объеме, нужно, чтобы они имели соответственно малую длину волны, а значит большую энергию. По мере возрастания энергии ускорителей такие опыты постепенно становятся возможными.

Скажем несколько слов об электрослабом взаимодействии. Оно возникает в результате объединения электрического и слабого взаимодействий и при небольших энергиях проявляется слабо. Так, при распаде нейтрона оно приводит только к небольшим поправкам к формулам, но при энергии LEP (205 ГэВ) уже сказывается в полную силу.

Для полноты изложения упомянем о Великом объединении. По современным представлениям по мере возрастания энергии силы электромагнитного, слабого и сильного взаимодействия должны сближаться и смешиваться в одно взаимодействие. Наблюдать Великое объединение на опыте, по-видимому, никогда не удастся (оно должно наступить при энергиях порядка  $10^{16}$  ГэВ).

## **§ 85. Переносчики взаимодействий. Ядерные силы. Таблицы фундаментальных частиц и переносчиков взаимодействий**

До сих пор мы рассматривали силы гравитационного, электромагнитного, ядерного, сильного и слабого взаимодействий, почти не обращая внимание на переносчиков этих сил. В классической физике просто полагается, что на частицы действуют силовые поля — гравитационное и электромагнитное — других полей классическая физика не знает. В квантовой физике эти представления изменяются. За полями мы уже научились видеть истинных переносчиков взаимодействия — кванты этих полей. Для классических полей — это гравитоны и фотоны. Когда поля достаточно сильны и квантов много, мы перестаем различать их как отдельные частицы и воспринимаем просто как поле. Но истинными переносчиками взаимодействий являются, конечно, соответствующие частицы. В этой главе уже говорилось о том, что переносчиками сильных взаимодействий являются глюоны. К сказанному следует добавить, что их число равно восьми, что их спин равен единице, а масса равна нулю. Мы сведем данные о переносчиках взаимодействий в таблицу в конце этой главы.

А сейчас постараемся понять почему их восемь. Мы уже говорили о том, что сильное взаимодействие возникает из-за того, что кварки могут быть «окрашены» в три цвета: «красный», «желтый» и «зеленый». Глюоны являются переносчиками цвета. Это означает, что они меняют один цвет кварка на другой, например, желтый на красный. То есть они уничтожают желтый цвет и генерируют красный или любой другой из возможных. Таких возможностей девять. Так для желтого цвета это означает: уничтожить желтый цвет и родить вместо него красный, зеленый или снова желтый. И так с остальными двумя цветами. Из этих девяти преобразований три ничего не меняют. Они генерируют тот же цвет, что уничтожают. Дальнейший анализ показывает, что из них образуются две независимые комбинации со «скрытым» цветом, две вместо трех. Поэтому глюонов не шесть и не девять, а восемь.

В течение многих лет физики искали переносчиков слабого взаимодействия. Теоретические соображения показывали, что этих переносчиков должно быть три и что их массы должны быть очень большими.

ми. Они были обнаружены только в начале 80-х годов. Это  $W^{+}$ -,  $W^{-}$ - и  $Z^0$ -бозоны.

$W^{+}$ - и  $W^{-}$ -бозоны являются частицей и античастицей. Эти частицы имеют массу, равную 80,4 ГэВ. Они неустойчивы и имеют много каналов распада. Многообразие этих каналов и приводит к тому, что слабое взаимодействие действует на все частицы. Эти бозоны способны распадаться как на адроны, так и на лептоны. (При этом, конечно, выполняются общие правила, и не только электрический заряд, но и барионное и лептонное числа всегда остаются неизменными). Спин  $W^{+}$ -,  $W^{-}$  и  $Z^0$ -бозонов равен единице, поэтому они подчиняются статистике Бозе. Их называют векторными бозонами. Время жизни этих частиц столь мало, что измерить его невозможно. Вместо этого измеряют и указывают в таблицах их энергетическую ширину (ширину линии генерации на половине высоты), которая, если нужно, может быть переведена во время жизни с помощью соотношения неопределенностей  $\tau = \hbar/\Gamma$ , где  $\Gamma$  — ширина линии. Для  $W$ -частиц  $\Gamma = 2,12$  ГэВ.

$Z^0$ -бозон имеет массу 91,2 ГэВ, что близко к массе  $W$ -бозонов. Он тоже может распадаться как на адроны, так и на лептоны. Его полная энергетическая ширина  $\Gamma = 2,5$  ГэВ. Среди мод распада  $Z^0$ -бозона 20% занимают распады, при которых видимые частицы не образуются, т. е. распады на нейтральные слабо взаимодействующие частицы, вероятнее всего, на нейтрино.

Большая масса  $W^{-}$ - и  $Z^0$ -частиц является важной причиной «слабости» слабого взаимодействия.

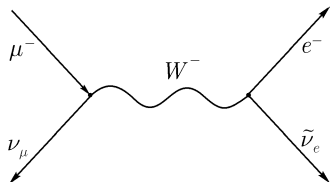


Рис. 180. Диаграмма Фейнмана для распада мюона.

Приведем фейнмановскую диаграмму для распада мюона (рис. 180). Отрицательный мюон рождает виртуальный  $W^{-}$ -бозон и превращается в мюонное нейтрино. Этот процесс возможен, потому что среди различных мод (способов) распада  $W^{-}$ -бозона имеется и распад на  $\mu^{-}$  и мюонное антинейтрино. Здесь же мы имеем дело с обратным процессом, с генерацией  $W^{-}$ -бозона, при которой мюон поглощается и нейтрино испускается (напоминаем читателю, что испускание античастицы соответствует поглощению частицы). Далее  $W^{-}$ -бозон распадается на электрон и электронное антинейтрино (среди способов распада  $W^{-}$ -бозона есть и такой). Фейнмановская диаграмма показывает, что в согласии с экспериментом, при распаде мюона возникают мюонное нейтрино, электрон и электронное антинейтрино. Из всех способов распада виртуального  $W^{-}$ -бозона в этом случае может осуществиться только один: рас-

пад на электрон и антинейтрино. Для остальных мод распада просто не хватает энергии. Положение меняется, если происходит распад  $\tau$ -лептона. Его масса велика (1777 МэВ), и распад может происходить по многим каналам. При этом, конечно, всегда рождается  $\nu_\tau$ -нейтрино. Из всех возможных каналов распада укажем на каналы:  $\tau \rightarrow \nu_\tau + \mu^- + \tilde{\nu}_\mu$  и  $\tau \rightarrow \nu_\tau + e^- + \nu_e$ . Каждый из них происходит в 17% случаев. В остальных случаях происходит распад на адроны, например по каналам  $\tau \rightarrow \nu_\tau + \pi^-$  и  $\tau \rightarrow \nu_\tau + \pi^- + \pi^0$ . Все эти способы распада происходят в согласии с модами распада  $W^-$ -бозона.

Теперь мы можем понять, почему слабое взаимодействие может изменять аромат кварков. Это делают возможным адронные моды распада  $W^+$ ,  $W^-$  и  $Z^0$ -бозонов. Конечно, эти моды включают в себя и распады с сохранением аромата кварков. Но в этих случаях они, практически, ничего не добавляют к обычным превращениям, происходящим под действием сильного взаимодействия, которое неизмеримо сильнее.

Обратимся теперь к ядерным силам. Требуют ли ядерные силы введения еще одного типа сил или они являются проявлением уже известных нам взаимодействий? Ответ на этот вопрос за время, прошедшее с начала 30-ых годов, полностью изменился. В начале 30-х годов Тамм и Юкава выдвинули гипотезу о том, что ядерные силы переносятся сравнительно тяжелыми неустойчивыми частицами, которые получили название «мезонов». После открытия  $\pi$ -мезонов такими частицами стали считаться именно они. Мезонная гипотеза успешно объясняла основные свойства ядерных сил: их короткодействие и свойственное ядерным силам насыщение. Она опиралась на уже известный в то время радиус действия ядерных сил и на почти постоянную удельную энергию связи ядер. Все эти особенности ядерных сил успешно интерпретировались  $\pi$ -мезонной теорией. Анализ экспериментальных данных позволил не только предсказать существование этих частиц, к моменту создания гипотезы еще не открытых, но и правильно оценить их массу. Поиски предсказанных частиц в космических лучах (других источников тяжелых частиц в то время не было), действительно, позволили обнаружить эти частицы.

Несмотря на все эти успехи,  $\pi$ -мезонная теория ядерных сил сейчас оставлена. Эта теория требует введения еще одного (пятого) типа взаимодействия, переносчиком которого являются  $\pi$ -мезоны. Это взаимодействие действует только на нуклоны, что уже само по себе непонятно. Как мы уже видели, основные свойства  $\pi$ -мезонов хорошо описываются на языке кварков, т. е. следуют из теории сильного взаимодействия. Для переносчиков нового типа взаимодействия это невозможно, как невозможно, чтобы свойства гравитонов следовали из электромагнитной те-

ории и т. д. В то же время основные свойства ядерных сил находят естественное объяснение в рамках сильного взаимодействия.

Рассмотрим этот вопрос подробнее. Начнем с аналогии. Под действием электромагнитных сил из ядер и электронов образуются незаряженные атомы. Значит ли это, что атомы не способны к электрическому взаимодействию? Конечно, нет. Это взаимодействие приводит к образованию молекул и кристаллов. Весь окружающий нас мир, да и мы сами, возникли из-за электрического взаимодействия незаряженных атомов. Как происходит это взаимодействие? Чтобы понять это, рассмотрим еще более простой пример — электрический диполь. Он представляет собой незаряженное образование. Поэтому на далеких расстояниях никакого электрического поля диполь не создает. Однако на близких расстояниях (малых или не очень больших по сравнению с размерами диполя) это поле существует и вполне заметно. Итак, незаряженные электрические системы способны к «остаточному» электрическому взаимодействию. Конечно, создаваемые ими электрические поля падают с расстоянием существенно быстрее, чем по закону Кулона, а на больших расстояниях вообще отсутствуют. Но на небольших расстояниях они вполне заметны.,

Перейдем к взаимодействию нуклонов. Они представляют собой «бесцветные» объекты. Это не значит, однако, что они не способны ни к какому сильному взаимодействию. «Остаточное» сильное взаимодействие бесцветных нуклонов намного слабее «нормального» сильного взаимодействия кварков, но оно способно приводить к образованию ядер, подобно тому, как остаточное электромагнитное взаимодействие атомов приводит к образованию молекул. Такова, в грубых чертах, современная точка зрения на ядерные силы.

Приведем теперь две таблицы: таблицу фундаментальных частиц и таблицу переносчиков взаимодействий.

В таблице встретились не упоминавшиеся ранее конститuentные (или блоковые) массы. Значения, которые были приведены ранее для масс кварков, это массы «свободных» кварков, которые используются в «алгебре токов», которую мы не рассматривали, а «конститuentные» массы — это массы, с которыми кварки «входят» в адроны.

В заключение скажем несколько слов о Хиггс-бозонах. Все, что мы рассказывали до сих пор об элементарных частицах, лежит в рамках Стандартной Теории. Эта теория является сейчас общепринятой. Однако, кварки, глюоны и векторные бозоны в этой теории, как она излагалась до сих пор, не должны обладать массами. Поэтому теория требует уточнения. Сейчас предполагается, что массы придает частицам еще одно взаимодействие, взаимодействие с хиггсовыми полями.



Таблица 12. Полная таблица фундаментальных частиц.

	Свободная масса	Конституентная масса	Спин	Заряд
$u$	$\sim 9$ МэВ	$\sim 330$ МэВ	1/2	+2/3
$d$	$\sim 5$ МэВ	$\sim 330$ МэВ	1/2	-1/3
$s$	$\sim 175$ МэВ	$\sim 500$ МэВ	1/2	+2/3
$c$	$\sim 1,27$ ГэВ	$\sim 1,50$ ГэВ	1/2	-1/3
$b$	$\sim 4,4$ ГэВ	$\sim 5$ ГэВ	1/2	+2/3
$t$	$\sim 175$ ГэВ	$\sim 175$ ГэВ	1/2	-1/3
$e$	0,511 МэВ		1/2	-1
$\mu$	105,6 МэВ		1/2	-1
$\tau$	1776,9 МэВ		1/2	-1
$\nu_e$	$< 8$ эВ		1/2	0
$\nu_\mu$	$< 0,25$ МэВ		1/2	0
$\nu_\tau$	$< 35$ МэВ		1/2	0

Таблица 13. Таблица переносчиков взаимодействий.

Взаимодействие	Переносчик взаимодействия	Частицы, на которые действуют силы взаимодействия	Масса (ГэВ)	Спин
Тяготение	Гравитон	Все частицы	0	2
Электромагнитное	Фотон ( $\gamma$ )	Все электрически заряженные частицы	0	1
Сильное (КХД)	8 глюонов ( $g$ )	Все цветные частицы	0	1
Слабое	$W^+$ , $W^-$ , $Z^0$	Кварки и сами бозоны	80–90 ГэВ	1

Квантами этого поля являются скалярные Хиггс-бозоны. По теоретическим предсказаниям эта частица очень тяжела, однако не настолько, чтобы ее наблюдение представлялось невозможным уже в ближайшее время. Если эта частица действительно существует, ее масса должна быть меньше 8 масс  $Z^0$ -частицы, а по некоторым предположениям, даже меньше двух ее масс. Если в этом диапазоне она не будет найдена, она просто не существует, и теория будет требовать пересмотра. Поисками Хиггс-бозонов заняты сейчас лучшие лаборатории мира.

## § 86. Симметрии в физике. Нарушение основных типов симметрии при слабом взаимодействии

Исследование различных типов симметрии приобрело в последнее время важную роль в физике. Различают следующие типы симметрии:

$P$  — симметрия или пространственная симметрия,

$C$  — симметрия или зарядовая симметрия,

$T$  — симметрия или симметрия по отношению к преобразованию времени, и некоторые другие типы симметрии, которые мы будем вводить по мере необходимости.

Рассмотрим сначала  $P$ -симметрию. Ее предмет — исследование законов и явлений, которые действуют в мире, являющемся зеркальным отражением нашего мира, и сравнение их с законами и явлениями в «нашем» мире. Очевидно, что попавшие в «зазеркальном мире» в поле действия сил тела (это те же тела, которые мы просто видим в зеркале), движутся по тем же законам, что и в нашем мире. Мы видим, что заряженные тела притягиваются и отталкиваются по закону Кулона. Под влиянием действующих на них сил тела в зеркале приобретают ускорение, а не координату и не скорость. В зеркале или без зеркала — законы классической физики одинаковы. Не сказывается такой переход и на явлениях, происходящих под действием сил сильного взаимодействия, в том числе — ядерных сил. Нуклоны по-прежнему объединяются в ядра, а ядра и электроны — в атомы. До самого последнего времени физики думали, что зеркальная симметрия — это просто всеобщий закон природы. Однако, оказалось, что при слабом взаимодействии это не так.

Прежде, чем заняться изучением вопроса о том, как проявляются  $P$ -и другие типы симметрии при слабом взаимодействии, посмотрим, как ведут себя при отражении в зеркале разные физические величины. Уточним, что мы имеем ввиду. Зеркальным преобразованием называют последовательное отражение в трех зеркалах, расположенных в плоскостях  $XY$ ,  $YZ$  и  $XZ$ . Оси координат при этом не отражаются, отражаются только исследуемые предметы.

Начнем с какой-либо векторной величины, например, со скорости частицы. Пусть в выбранной системе координат вектор скорости проходит через начало координат, а проекции скорости на координатные оси равны  $v_x$ ,  $v_y$  и  $v_z$ . Отразим вектор скорости в трех зеркалах. После отражения в зеркале, перпендикулярном оси  $OX$ , изменит знак ее  $v_x$ -проекция. После отражения в зеркале, перпендикулярном оси  $OY$ , — ее  $v_y$ -проекция, а затем нужно произвести отражение скорости в зеркале, перпендикулярном оси  $OZ$ . В результате все три проекции скорости изменят знак, т.е. изменит знак вектор скорости:  $\mathbf{v}_{\text{отр}} = -\mathbf{v}$ . Производить отражение вектора в трех зеркалах в нашем случае — да и всегда —

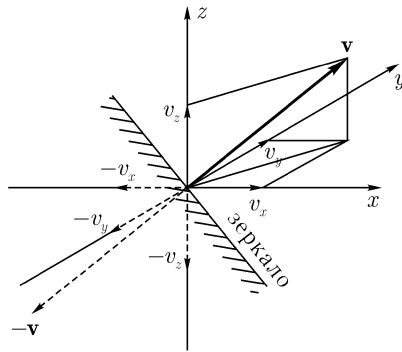


Рис. 181. Преобразование вектора скорости при отражении.

не обязательно. Достаточно отразить его в одном, надлежащим образом расположенном зеркале. В нашем случае таким зеркалом является зеркало, перпендикулярное вектору скорости. Такое отражение изображено на рис. 181.

Величины, меняющие при  $P$ -преобразовании свой знак, называются  $P$ -нечетными величинами, а величины, не меняющие знака, —  $P$ -четными. Векторы являются, таким образом,  $P$ -нечетными величинами.

Рассмотрим теперь скалярное произведение двух векторов. При  $P$ -преобразовании оба входящие в скалярное произведение вектора меняют знак. Их произведение знака не меняет. Скалярное произведение двух векторов, как и всякий «настоящий» скаляр — величина  $P$ -четная.

Перейдем к векторному произведению двух векторов. Хорошим примером такого векторного произведения является вектор момента импульса  $\mathbf{L}$ . Из классической физики известно, что этот вектор является векторным произведением радиус-вектора  $\mathbf{r}$  и импульса  $\mathbf{p}$ :

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}].$$

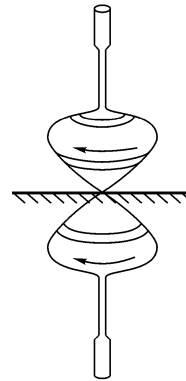


Рис. 182. Иллюстрация  $P$ -четности момента импульса.

Представим себе обыкновенный волчок, вращающийся на зеркальной поверхности (рис. 182). Сравним зеркальное изображение волчка с ним самим. Мы увидим, что волчок «перевернулся», т. е. его зеркальное изображение направлено «головой вниз». Однако, он продолжает вертеться в ту же сторону (по отношению к «нашей» системе координат). Итак, вектор момента импульса при отражении в зеркале своего направления не меняет ( $\mathbf{L}_{\text{отр}} = \mathbf{L}$ ), тогда как «настоящие вектора», например, скорость, его меняют. Вектор момента импульса не является поэтому «настоящим» вектором. Он ничем не отличается от обычных векторов пока дело не доходит до отражения в зеркале, т. е. до  $P$ -преобразования. Здесь обнаруживается, что он относится к  $P$ -четным, а не к  $P$ -нечетным величинам. Такие векторы называются псевдовекторами.

Можно рассмотреть и псевдоскаляры — скаляры, ведущие себя при  $P$ -преобразованиях как  $P$ -нечетные величины. Нам такие величины не потребуются.

Все взаимодействия, с которыми имеет дело классическая физика, все ее законы сохраняют  $P$ -четность.  $P$ -нечетный вектор скорости частицы остается  $P$ -нечетным и после того, как она испытала притяжение со стороны другой заряженной частицы.  $P$ -четность сохраняется и в полях сильного взаимодействия. Поэтому всегда полагалось, что сохранение  $P$ -четности при движении в силовых полях является одним из основных законов природы.

Обратимся теперь к  $C$ -преобразованиям. При  $C$ -преобразованиях протоны заменяются на антипротоны, электроны на позитроны и т. д. Как выглядят физические законы в этом новом мире? Никакие законы классической физики при таком переходе не меняются. Гравитация притягивает все предметы без исключения, одноименные заряды отталкиваются, а разноименные притягиваются и в том случае, когда речь идет об антипротонах и позитронах, а не о протонах и электронах. Ничто не меняется и в законах сильного взаимодействия. Мы могли бы быть построены не из частиц, а из античастиц и спокойно пить «античай» на «антибалконе» (если бы, конечно, весь окружающий нас мир тоже испытал  $C$ -преобразование, т. к. иначе возникла бы аннигиляция!). Всегда ли это так? Если бы законы физики исчерпывались перечисленными взаимодействиями, это было бы так. А на самом деле? Мы еще не готовы ответить на этот вопрос. Во всяком случае, если говорить о слабом взаимодействии, роль которого сразу после Большого взрыва, после «*big bang*»'а, при котором возникла наша Вселенная, была отнюдь не мала, то, как мы скоро увидим, это не так. . .

$T$ -преобразование — это обращение времени. До последнего времени все были убеждены, что если изменить знак времени, то все физические законы останутся без изменения. В уравнение Ньютона входят

вторые, а не первые производные координат по времени. При изменении знака времени уравнение не меняется. Не изменяет своего вида уравнение Шредингера и т. д. Если направить столкнувшиеся шары или частицы, которые разлетелись после соударения, в обратную сторону, то вся картина рассеяния повторится в обратном порядке.

При изменении знака времени все ядерные процессы пойдут в обратном направлении, пройдут через те же стадии и приведут к состояниям, которые раньше были начальными (только скорости изменят свое направление, как это и должно происходить с первыми производными по времени). Так что классическая физика и физика сильных взаимодействий к  $T$ -преобразованию нечувствительны. До 50-х годов 20-го столетия физики были убеждены в том, что нечувствительность к  $C$ -,  $P$ - и  $T$ -преобразованиям, или  $C$ -,  $P$ - и  $T$ -симметрия, является одним из основных законов природы, так же, как, например, законы сохранения энергии и импульса. Говоря современным языком, предполагалось, что все законы физики должны сохранять  $C$ -,  $P$ - и  $T$ -четности. Этим требованиям должны были удовлетворять и все предлагавшиеся новые теории. Оказалось, однако, что при слабых взаимодействиях ни одно из этих утверждений несправедливо. Объясним, как это было показано.

В 1956–57 годах было обнаружено, что рождающиеся при  $\beta^-$ -распаде электроны продольно поляризованы. Это означает, что их спин направлен не как угодно, а преимущественно параллельно направлению их движения (точнее — противоположно этому направлению). Или, как еще говорят, электроны при  $\beta^-$ -распаде имеют преимущественно «левую поляризацию». Слово «преимущественно» мы использовали потому, что степень поляризации электронов равна не единице, а  $v/c$ , где  $v$  — скорость электронов, а  $c$ , как всегда, — скорость света. Не следует думать, что электроны всегда имеют левую поляризацию. Они могут иметь любую поляризацию или не иметь ее вовсе. Мы говорим здесь об электронах, рождающихся при  $\beta^-$ -распаде, и только о них.

Посмотрим, как процесс  $\beta^-$ -распада выглядит в зеркале. (Напомним, что либо зеркал должно быть три, либо — если зеркало одно — его направление должно быть правильно выбрано.) Скорость, как всякий вектор, при отражении изменит знак, а спин, т. е. момент импульса, свой знак сохранит. При наблюдении в зеркале мы увидим, что рождающиеся при  $\beta^-$ -распаде электроны, преимущественно имеют не левую, а правую поляризацию. Явление, наблюдаемое в зеркале, отличается от исходного. Иначе говоря, при  $\beta^-$ -распаде  $P$ -четность не сохраняется. Здесь следует подчеркнуть, что  $\beta^-$ -распад происходит под действием сил слабого взаимодействия. Итак, при слабом взаимодействии  $P$ -симметрия нарушается.

Продолжим рассмотрение  $\beta$ -распада. Обратимся к  $\beta^+$ -распаду. В таких же опытах было обнаружено, что рождающиеся при  $\beta^+$ -распаде позитроны преимущественно «право поляризованы». Значит, переход от электронов к позитронам, т. е.  $C$ -преобразование — влечет за собой изменение левой поляризации на правую, т. е. при  $\beta$ -распаде и  $C$ -четность не сохраняется. Слабое взаимодействие нарушает, как  $P$ -, так и  $C$ -четность.

В течение некоторого времени сохранялось убеждение (Л.Д.Ландау), что при слабом взаимодействии сохраняется  $CP$ -четность, т. е. что слабое взаимодействие не приводит к изменениям, если  $C$ - и  $P$ -преобразования произвести одновременно. Оказалось, что и это не так. Это было доказано при изучении распада  $K^0$ -мезонов. Мы не будем рассматривать этот вопрос подробнее.

В настоящее время господствует убеждение, что законы природы инвариантны только по отношению к  $CPT$ -преобразованиям, иначе говоря, к одновременному применению всех трех преобразований. Это утверждение даже получило название « $CPT$ -теоремы».  $CPT$ -инвариантность лежит в основе всех существующих теорий. Здесь следует заметить, что  $CPT$ -инвариантность достаточна для того, чтобы были равны массы и электрические заряды (с точностью до знака) частиц и античастиц. Конечно, и это утверждение должно быть экспериментально проверено. Проще всего это сделать, проверяя, действительно ли частицы и античастицы имеют одинаковые массы. Для такой проверки нельзя сравнивать массы протона и антипротона, потому что соответствующие измерения приходится производить в совершенно разных опытах: что хорошо для стабильного протона, не годится для антипротона. Нельзя производить эти опыты и с электронами и позитронами. Такие опыты сейчас производятся на  $K^+$  и  $K^-$ -частицах. Различие масс этих частиц пока не обнаружено. Следует надеяться, что его и нет. Однако, необходимая точность в этих опытах пока не достигнута.

## § 87. Элементарные частицы и космос

Теория элементарных частиц позволяет пролить свет на происхождение и динамику Вселенной в первые минуты ее существования. Эта динамика во многом определила сегодняшнее состояние и свойства мира.

**Вселенная — наш дом.** Наша планета Земля — это одна из планет, вращающихся вокруг «нашей» звезды — Солнца. Солнечная система сравнительно невелика. Расстояние Земли от Солнца составляет всего 8 световых минут. Световая минута это расстояние, которое свет проходит в течение 1 минуты. Как нетрудно найти, это расстояние рав-

но  $3 \cdot 10^5$  км/с  $\cdot 8 \cdot 60$  с =  $1,4 \cdot 10^8$  км. ( $3 \cdot 10^5$  км/с — это скорость света в пустоте). Для измерений в космосе эта единица слишком мала, и расстояния принято измерять в световых годах — в расстояниях, которые проходит свет в течение года. Легко найти, что 1 световому году соответствует расстояние равное  $9,5 \cdot 10^{12}$  км.

В астрономии используется и другая единица измерения расстояний — парсек. 1 парсек = 3,3 св года.

Солнце — это одна из звезд, составляющих нашу галактику. Чтобы отличать «нашу» галактику от всех других, ее пишут с большой буквы: Галактика. Галактику раньше называли «Млечным путем» (это название употребляется и сейчас). Галактика представляет собой диск диаметром 80000 св. лет и толщиной 6000 св. лет. В состав Галактики входят  $\sim 10^{11}$  звезд. Вокруг нее расположен ореол диаметром 100000 св. лет. Солнечная система вращается вместе с Галактикой. Галактика имеет спиральные «рукава». Солнечная система расположена в начале одного из них на расстоянии 30000 св. лет от центра вращения.

Вселенная содержит огромное количество галактик. Среди светящихся объектов, которые мы наблюдаем, имеются «взрывающиеся» звезды. Каждая из них испускает кратковременно больше света, чем целая галактика. В состав Вселенной входит также несветящаяся материя. По оценкам в ней сосредоточено 90% массы Вселенной. Заметную часть этой материи, повидимому, составляют нейтрино.

В состав Вселенной входят также «черные дыры». Их массы так велики, что они втягивают обратно все световые кванты, которые были бы испущены объектами меньшей массы. Об их существовании мы знаем потому, что они отклоняют «к себе» пролетающий мимо свет, испускаемый другими телами, и поглощают свет, падающий на них.

Галактики разлетаются друг от друга с огромной скоростью, так что плотность вещества во Вселенной уменьшается. Нередко вместо этого говорят, что размеры Вселенной увеличиваются. Неизвестно, имеет ли смысл это утверждение, потому что мы не знаем, конечно Вселенная или бесконечна. Утверждение об увеличении размеров имеет смысл только в первом случае. Однако, поскольку говорить так проще, мы тоже будем пользоваться этим утверждением.

**Экспериментальные методы.** Дальнейшие рассуждения будут основаны на том, что галактики разлетаются, и на законе Хаббла — на связи между удалением галактик и скоростью их удаления. Этот закон был получен Хабблом в результате сопоставления экспериментальных данных. Познакомимся с тем, как они получаются.

Надежнее всего измеряется скорость удаления звезд (и галактик). Для ее измерения используется доплеровское смещение спектральных

линий. Пусть светящийся объект удаляется от неподвижного наблюдателя. Посмотрим на гребешки световых волн. Вследствие удаления каждый следующий гребешок испускается с несколько большего расстояния. На «дорогу» ему потребуется немного больше времени, и он запоздает относительно предыдущего гребешка на несколько большее время, чем для наблюдателя, движущегося вместе с источником света. Поэтому время, которое разделяет гребешки, у неподвижного наблюдателя (у нас с вами) окажется увеличенным. Измеренная нами длина волны тоже окажется увеличенной (это явление названо «красным смещением»), а частота света уменьшенной. И наоборот: наблюдатель, к которому источник света приближается, обнаружит увеличение частоты света. Формула Доплера, описывающая изменение частоты в общем случае имеет вид:

$$\omega = \omega_0 \frac{\sqrt{1 - (v/c)^2}}{1 + (v/c) \cos \theta},$$

где  $\omega$  — частота, измеренная неподвижным наблюдателем,  $\omega_0$  — частота, испускаемая источником света,  $v$  — скорость источника света, а  $\theta$  — угол между вектором скорости источника и направлением на источник. При измерении продольных скоростей  $\theta = 0$  при удалении от нас источника света, и  $\theta = \pi$  при его приближении. Формула Доплера в этом случае приобретает более простой вид:

$$\omega = \omega_0 \sqrt{\frac{1 \mp v/c}{1 \pm v/c}}.$$

Верхние знаки в числителе и в знаменателе соответствуют  $\theta = 0$ , а нижние  $\theta = \pi$ .

При малых скоростях смещение частоты оказывается незначительным, но частоты спектральных линий измеряются сейчас с точностью до 8 значащих цифр, так что положение оказывается не таким уж плохим.

Итак, скорости удаления звезд измеряются по изменению частоты линий. О каких линиях идет речь? Спектр испускаемого звездой излучения непрерывен. Но на пути к нам свет проходит через газовую оболочку, окружающую звезду. Атомы газа избирательно поглощают свет разных частот, так что спектр прорезается тонкими линиями поглощения атомов оболочки. По этим линиям исследуется состав оболочек. В них всегда содержатся линии водорода и в меньшем количестве — гелия. Это замечание нам потребуется в дальнейшем.



Вернемся к измерению скорости удаления звезд. Приведем в качестве примера смещение линий в звезде Капелла. Эти линии смещены относительно солнечных на  $10^{-4}$ . Это означает, что звезда удаляется от нас со скоростью  $10^{-4}$  от скорости света, т. е. всего (!) на 30 км/с. Скорости разбегания галактик, удаленных от нас на расстояния порядка  $10^9$  св. лет, составляют уже  $\sim 15000$  км/с.

Измерение поперечных скоростей оказывается более трудным, а часто и невозможным. Такие измерения делаются по смещению видимого положения звезд со временем. Нас эти скорости интересовать не будут.

Следующая проблема — определение расстояний — решается менее надежно. Расстояния находятся по яркости звезд. В самом деле, нет никаких причин, которые заставили бы звезды в одних галактиках испускать больше света, чем в других. Поэтому различие в видимых яркостях связано с разными расстояниями от нас. Есть еще один метод определения расстояний. Существуют звезды, светимость которых периодически изменяется — цефеиды. Измерения показали, что между периодом изменения светимости и светимостью цефеид имеется жесткая связь. Определяя видимые яркости цефеид в разных галактиках, можно определить их удаление. Измерения, сделанные обоими методами, дают согласные результаты.

Самым важным методом исследования Вселенной остаются астрономические исследования с помощью телескопов. Телескопы необходимы и для всех перечисленных выше методов. Астрономические наблюдения получили могучий толчок вперед после того, как начал работать научный центр на горе Вильсон в США, расположенный выше облачного слоя при существенно меньшем атмосферном давлении, чем на поверхности Земли.

Обработывая результаты исследования нескольких десятков галактик, Хаббл пришел к важнейшему выводу. Скорость разбегания галактик пропорциональна их расстоянию от нас:

$$v = Hd,$$

где  $v$  — скорость удаления галактики, а  $d$  — ее удаление. Заметим, что так и должно быть, если все они начали разбегаться в одно время из одного центра. Константа  $H$  носит название постоянной Хаббла. Принятое сейчас значение  $H$  определяется следующим образом: скорость удаления увеличивается на 20 км/с на миллион световых лет.

Важные данные были получены в последние годы при исследовании «фонового» радиоизлучения. Информация об этом излучении сначала была получена случайно. Лишь через несколько лет была понята ее научная ценность, и измерения стали проводиться систематически. Сначала фоновое радиоизлучение было обнаружено на длине волны 7,5 см.

Оно оказалось изотропным и не менялось со временем. Затем измерения были проведены в диапазоне длин волн от 0,33 см до 73,5 см. Оказалось, что величина и спектральное изменение интенсивности излучения соответствуют излучению черного тела при температуре 3 К. Мы обсудим этот результат ниже. Пока просто укажем, что фоновое излучение досталось нам в наследство от далекого прошлого и, повидимому, заполняет всю Вселенную. Это излучение называют реликтовым.

**Теория Большого взрыва**. Закон Хаббла позволяет не только предсказать будущее, но и заглянуть в прошлое. Просматривая историю Вселенной назад по времени, можно установить, что все галактики начали разлетаться одновременно из одной небольшой области (центра). Если исходить из принятого значения постоянной Хаббла, то  $t_{\text{всел}} \approx 10^{10}$  лет. При расчете возраста Вселенной учитывается изменение постоянной Хаббла с изменением размера Вселенной (из-за изменения гравитационных сил).

Закон Хаббла не позволяет установить, сколь мал этот центр был вначале, однако другие данные (мы рассмотрим их ниже), показывают, что этот центр был чрезвычайно мал.

Расширение Вселенной, как и расширение любого тела, сопровождалось ее охлаждением. Собираение Вселенной в небольшой центр, наоборот, приводит к ее нагреванию. Начальные температуры были чрезвычайно большими. Затем началось стремительное расширение и охлаждение, которые продолжаются и сейчас. Эта теория — теория Большого взрыва — получила сейчас всеобщее признание.

Теория Большого взрыва устанавливает связь между временем существования Вселенной, ее температурой и средней плотностью энергии: Плотность энергии обратно пропорциональна квадрату времени и прямо пропорциональна температуре в четвертой степени. Для оценок можно применить простую формулу, которая хорошо работает при небольших временах существования Вселенной

$$t \approx 1/(kT)^2,$$

где  $t$  измеряется в секундах, а  $kT$  в МэВ ( $k$  — постоянная Больцмана).

При высокой температуре и плотности между всеми частицами, входящими в состав Вселенной, должно было существовать термодинамическое равновесие. Оно продолжалось до тех пор, пока соударения частиц друг с другом происходили достаточно часто. Частота соударений зависит не только от плотности Вселенной, но и от эффективных сечений взаимодействия рассматриваемых частиц. По мере расширения

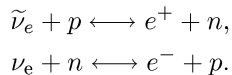
плотность Вселенной уменьшалась, и соударения переставали происходить «достаточно часто». Первыми «оторвались» от остального вещества нейтрино. Они унесли с собой много энергии, потому что на каждую частицу при термодинамическом равновесии приходится одинаковая энергия  $kT$ , независимо от того, протон это или нейтрино (с расширением Вселенной энергия, приходящаяся на каждое нейтрино, падала в соответствии с уменьшением температуры Вселенной).

При температуре 3000 К электроны и протоны начали объединяться в атомы водорода. Количество свободных электронов заметно уменьшилось, а значит уменьшилось количество частиц, с которыми могли взаимодействовать фотоны, и электромагнитное излучение тоже «оторвалось» от вещества. Это то самое реликтовое излучение, которое сейчас имеет температуру 3К. Исследование электромагнитного излучения несколько приблизило нас к точке начального взрыва, но недостаточно. Продвинуться ближе электромагнитное излучение не позволяет, потому что до момента «отрыва» фотоны находились в состоянии термодинамического равновесия со всеми остальными частицами, а при этом они «ничего не могут помнить» о своем прошлом.

Дальнейшее продвижение основывается на соотношении количества водорода и гелия. Реакция превращения водорода в гелий идет через несколько стадий. Непосредственное превращение невозможно, потому что вероятность одновременной встречи двух протонов и двух нейтронов ничтожно мала. Реакция должна проходить через промежуточные стадии, прежде всего, через образование дейтронов. Энергия связи дейтрона  $d$  намного меньше, чем энергия связи гелия. Чтобы разрушить дейтрон, нужны фотоны с меньшей энергией, а значит образование дейтронов — а потом гелия — стало возможным только при сравнительно низких температурах.

Посмотрим, как выглядела эволюция Вселенной в течение первых микросекунд, секунд и минут после сингулярности (т. е. начального момента), положившей начало Вселенной.

Начнем с 0,01 с. Температура Вселенной была в это время равна  $10^{11}$  К. Вселенная находилась в термодинамическом равновесии и представляла собой «кашу» из всех существующих частиц. Плотность энергии составляла  $\sim 4 \cdot 10^9$  кг/л (при расчете плотности энергии массу надо переводить в энергию по обычной формуле). При такой плотности энергии нейтрино успевали взаимодействовать со всеми остальными частицами и находились в тепловом равновесии с ними. При этом происходили реакции:



Эти реакции происходили одинаково часто, потому что энергия нейтрино при этой температуре (10 МэВ) существенно превосходит разность масс нейтрона и протона. Распадом нейтрона можно пренебречь. Число нейтронов равнялось числу протонов.

Следующий шаг — к температуре  $3 \cdot 10^{10}$  К. Возраст Вселенной 0,11 с. Никаких качественных изменений не произошло, но доля нейтронов упала до 38%, потому что реакции перехода более тяжелых нейтронов в более легкие протоны стали происходить чаще, чем обратные реакции.

Третий шаг — переход к температуре  $10^{10}$  К. Возраст Вселенной составляет 1,09 с. Плотность энергии упала настолько, что нейтрино начинают выпадать из равновесия с остальными частицами. Они перестают играть роль в реакциях, поддерживающих термодинамическое равновесие остальных частиц. Основная доля энергии приходится теперь на долю электронов, позитронов и фотонов. Плотность энергии упала до  $\sim 3 \cdot 10^5$  кг/л. Доля нейтронов уменьшилась до 24%.

Четвертый шаг — к температуре  $3 \cdot 10^9$  К. Возраст Вселенной — 14 с. Электроны и позитроны начинают аннигилировать, их количество резко уменьшается, и главными компонентами Вселенной становятся фотоны и нейтрино. Доля нейтронов падает до 17%.

Пятый шаг — к температуре  $10^9$  К. Доля нейтронов — 14%. Возраст Вселенной несколько более 3 минут. Образование гелия все еще невозможно, потому что дейтрон обладает очень небольшой (2,22 МэВ) энергией связи.

Образование гелия происходит несколько позднее, когда доля нейтронов падает до 13%. При образовании гелия связывается весь наличный запас нейтронов. Доля гелия (по массе) составляет поэтому  $13 \cdot 2 = 26\%$ . Эта доля сохранилась до настоящего времени. Казалось бы, после этого открылась дорога к синтезу всех остальных элементов. Это, однако, не так. Следующая трудность заключается в отсутствии ядер с массовыми числами 5 и 8. Это затянуло процесс нуклеосинтеза, и он стал возможным только при температурах, близких к температурам центральной части звезд, где условия неизмеримо более стабильны, чем в остывающей Вселенной. Сейчас считается, что основной нуклеосинтез происходил именно в звездах.

Мы начали наше обсуждение с 0,01 с. Правильность расчетов подтверждается наличием реликтового излучения и данными, полученными для распространенности гелия. Можно ли продвинуться еще ближе к сингулярности? Теория сейчас позволяет это сделать до  $10^{-43}$  с. Считается, что ранее этого момента («планковский момент времени») теория гравитации Эйнштейна несправедлива. Чтобы рассмотреть еще меньшие времена, нужна квантовая теория гравитации, которая пока не создана.

Есть еще один вопрос, на который хотелось бы знать ответ: почему

после всех процессов аннигиляции оказалось, что Вселенная — или, по крайней мере, ближайшая к нам ее часть — состоит из вещества, а не из антивещества. Ясного ответа на этот вопрос не существует. Поскольку вещество и антивещество не аннигилируют и не рождаются друг без друга, избыток вещества существовал с самого начала. Откуда и почему он возник — мы не знаем. Неизвестно, является ли этот избыток местным или общим. Общепринятого ответа на этот вопрос нет. Неизвестно также, как оказалось, что число электронов равно числу протонов. Ответа на этот вопрос пока тоже нет.

**Что нас ждет в будущем** . Будет ли расширение Вселенной происходить всегда или сменится новым сжатием? Иначе говоря, преодолеют ли гравитационные силы кинетическую энергию разбегания галактик или их для этого не хватит. Ответ на этот вопрос зависит от количества вещества во Вселенной или, лучше сказать, от средней плотности вещества. И на этот вопрос ответа пока нет. Прежде всего его нет потому, что неизвестна масса темного вещества. Сейчас считается, что эта масса составляет 90% общей массы Вселенной. Мы уже приводили эту цифру. Принимая эту цифру, можно подсчитать среднюю плотность вещества в нашей Галактике. Дальше нужно переходить к ближайшей части Вселенной и затем — к ней всей. Расчет этот очень ненадежен.

Приведем все-таки некоторые цифры. Критическая плотность вещества (плотность, при которой расширение в конце концов перейдет в сжатие) — 3 атома водорода на  $1 \text{ м}^3$  пространства. (На самом деле, речь здесь идет не о плотности материи, а о плотности энергии. При расчетах масса и энергия должны переводиться друг в друга по обычной формуле Эйнштейна.) При расчете плотности вещества нужно учитывать не только плотность водорода, но и плотность световых квантов и нейтрино. На один атом водорода сейчас приходится  $4 \cdot 10^8$  квантов реликтового излучения. Сейчас принято считать, что имеющаяся плотность вещества во Вселенной близка к критической или даже несколько выше нее. Если это так, то через некоторое время Вселенная вновь начнет сжиматься, а потом последует новый цикл расширения, так что наше будущее — это просто наше прошлое. . .

## § 88. Ускорители заряженных частиц

Прежде, чем описывать разные типы ускорителей, выясним, в каких ускорителях может возникнуть необходимость при изучении явлений, которые мы рассматривали в последних главах.

Как вы уже знаете, энергия связи нуклонов в ядрах по порядку величины равна нескольким мегаэлектронвольтам. Для исследования

ядерных реакций достаточно поэтому иметь частицы (скажем, протоны), ускоренные до 10–20 МэВ. Для технических целей (изготовление искусственных радиоактивных изотопов и др.) нужны те же энергии. В медицине находят применение электроны и протоны с энергией до 200 МэВ.

Большой интерес для ядерных исследований представляют нейтроны, но для их генерации нужны не ускорители, а ядерные реакторы.

Важнейшей областью применения ускорителей являются исследования в области элементарных частиц. Только первые исследования в этой области были сделаны без них: позитроны, мюоны,  $\pi$ - и  $K$ -мезоны были найдены в космических лучах. Вот и весь перечень частиц, открытых не на ускорителях. Следовало ожидать существования и более тяжелых, еще неизвестных частиц. Так появилась нужда в ускорителях, причем на все большие и большие энергии. Сначала разные страны соревновались в этой области друг с другом. Одним из участников этого соревнования был и Советский Союз. Однако, новые поколения ускорителей требуют таких средств, что только Соединенные Штаты могут позволить себе строить крупные ускорители в одиночку. В Европе создан международный центр ядерных исследований (ЦЕРН), который объединяет усилия Европейских стран для сооружения новых гигантских ускорителей и для использования уже имеющихся. (В лабораториях ЦЕРН-а проводят исследования и русские физики.) Возникло новое направление в физике — физика высоких энергий. Для дальнейших научных исследований в этой области требуются ускорители на очень большие энергии. Уже для генерации  $W$ -частиц потребовались ускорители на энергии, равные сотням гигаэлектронвольт (сотням миллиардов электронвольт), а для генерации частиц Хиггс-бозонов нужны еще большие энергии.

**Ускорители прямого действия.** После предварительных замечаний перейдем к описанию ускорителей. Начнем с ускорителей прямого действия. Схема расположения электродов в таких ускорителях изображена на рис. 183. Высокое напряжение подается на левый — высоковольтный электрод. В центре электрода имеется отверстие для ввода частиц. В центре правого электрода также имеется отверстие. Сквозь него выводятся ускоренные частицы, направляясь к экспериментальной установке. Правый электрод заземлен. Такое распределение потенциалов является обязательным, потому что экспериментальные установки всегда должны находиться при потенциале Земли.

Максимальная энергия, которая достижима в ускорителях прямого действия, определяется напряжением, которое может быть получено между электродами без электрического пробоя, практически, это 2,5–3 МэВ. Энергия, которую могут при этом приобрести однозарядные частицы, равна, соответственно, 2,5–3 МэВ. Ускорители собираются внутри колпака, выдерживающего давление 10–15 атм. и наполняются

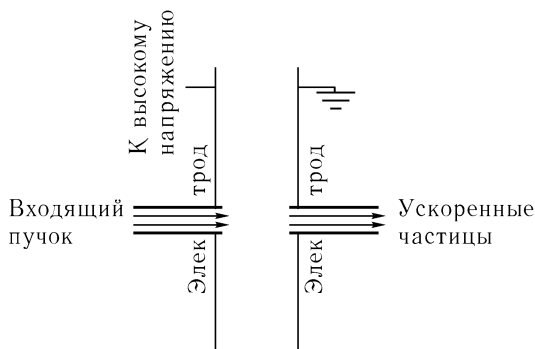


Рис. 183. Схема расположения электродов в ускорителе прямого действия.

азотом с примесью газов, повышающих пробойную прочность. Ускорители прямого действия использовались ранее как для получения ускоренных частиц, например, протонов с небольшой энергией, так и для предварительного ускорения частиц перед вводом в более мощные ускорители. Сейчас они уступили место линейным ускорителям.

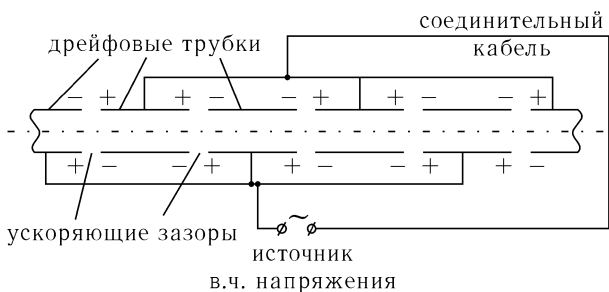


Рис. 184. Схема расположения электродов в линейном ускорителе.

**Линейные ускорители. Синхротронные колебания.** Более высокие энергии могут быть получены только с помощью переменных электрических полей. Рассмотрим рис. 184. На нем изображена установка, содержащая пять ускоряющих зазоров и столько же дрейфовых трубок. Ускоряемые частицы, скажем, протоны, попадают в первый ускоряющий зазор, когда напряжение в нем имеет нужный знак (верхние обозначены

ния полярности). Пройдя через него, электроны получают первую порцию энергии. Пролетев через дрейфовую трубку частицы попадают во второй ускоряющий зазор. Пока частицы движутся через трубку, напряжение успевает переменить полярность и теперь соответствует уже нижним обозначениям (частицы, движущиеся в металлической трубке, перемены напряжения не замечают). В зазоре напряжение снова имеет «правильный» знак, и частицы получают вторую порцию энергии. Затем следует новая дрейфовая трубка, за ней — следующий ускоряющий зазор, и т. д. Такие ускорители носят название линейных ускорителей со стоячей волной.

Энергия, приобретаемая в каждом зазоре, не очень велика. Она может лежать в пределах нескольких сотен килоэлектронвольт, а полная энергия, приобретаемая частицей, ограничена только числом ускоряющих зазоров, т. е., в конечном счете, длиной ускорителя. Пролетные трубки и ускоряющие зазоры должны, конечно, располагаться в вакуумной камере, откачанной до высокого вакуума, поскольку движение ускоряемых частиц может происходить только в высоком вакууме. Сейчас используется несколько типов линейных ускорителей; среди них ускорители с бегущей волной, резонансные линейные ускорители и т. д. Мы их устройство разбирать не будем.

Линейные ускорители применяются для ускорения электронов и в качестве инжекторов в кольцевые ускорители тяжелых частиц. Наиболее крупный из действующих линейных ускорителей находится в Стенфорде (США) и позволяет ускорять электроны до 36 ГэВ. Длина его ускоряющей системы равна 3,5 км. Этот ускоритель эффективно используется для экспериментов в области физики элементарных частиц.

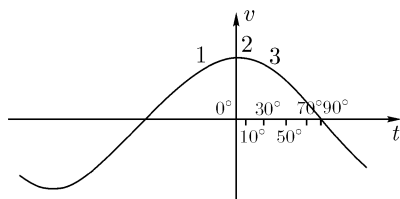


Рис. 185. Зависимость от времени напряжения в ускоряющем зазоре.

Рассмотрим динамику ускоряемых частиц в линейном ускорителе. Зависимость переменного напряжения от времени изображена на рис. 185. Частицы, прошедшие ускоряющий зазор при напряжении, близком к максимальному, получают почти максимальную энергию. Частицы, получившие существенно меньшую энергию, выбывают из режима ускорения. Так образуется сгусток частиц, захваченных в режим

ускорения. Но и в этом сгустке одни частицы имеют энергию, превышающую среднее значение, а другие — не дотягивают до нее. Необходимо, чтобы частицы с недостаточной энергией в следующих зазорах получили большую энергию, чем «средняя частица», а частицы, перебравшие энер-



гию, недополучили ее. Если это так, то через некоторое время ситуация изменится на обратную, отстававшие частицы обгонят средние, а имевшие слишком много энергии отстанут от средних и т. д. Так возникают синхротронные колебания.

Разберемся в этом подробнее. Напряжения на ускоряющих зазорах и длина дрейфовых трубок подбираются таким образом, чтобы «правильную» энергию получали частицы, подходящие к зазору, когда напряжение на нем близко к максимальному, но все таки не максимально, как это, например, имеет место для частиц (1) и (3) на рис. 185. Назовем эти частицы «средними». Рассмотрим частицу, движущуюся в окрестности точки (1), но пришедшую к зазору с небольшим опозданием, когда напряжение на нем уже выше, чем в точке (1). Эта частица получит большую энергию, чем средняя, и начнет догонять ее. Когда эта частица перегонит среднюю, она попадет в зазор при более низком напряжении и начнет возвращаться к средней. Синхротронные колебания частиц, движущихся в окрестности точки (1), оказываются устойчивыми.

Повторяя те же рассуждения для частиц, движущихся в окрестности точки (3), мы увидим, что их движение неустойчиво, они будут потеряны.

Обратимся теперь к пространственной устойчивости ускоряемого пучка. Ясно, что не все частицы, введенные в ускоритель, движутся по одной и той же — центральной — траектории. Существует некоторый разброс как в начальных координатах, так и в углах ввода. Частицы, движущиеся под некоторым углом к центральной траектории, со временем будут отклоняться от оси пучка все больше и, если не принять мер, вскоре попадут на стенки вакуумной камеры и будут потеряны. В ускорителе должны иметься устройства, возвращающие отклонившиеся частицы к оси камеры. Под действием этих устройств частицы, отклонившиеся, например, влево, получают отклонение вправо. Со временем они окажутся справа от осевой линии камеры и попадут под действие сил, направляющих их влево и т. д. Так возникают бетатронные колебания частиц, а устройства, возвращающие пучек к оси камеры, называются фокусирующими. Здесь следует отметить, что не существует эффективных устройств, одновременно обеспечивающих устойчивость в обоих перпендикулярных оси пучка направлениях: сверху вниз и справа налево. Фокусировка пучка в одном направлении всегда приводит к его дефокусировке в другом направлении. Мы рассмотрим бетатронные колебания подробнее на примере циклических ускорителей.

**Циклотроны. Бетатронные колебания.** Перейдем к циклическим ускорителям. Их идея заключается в том, чтобы с помощью магнитного поля возвращать ускоряемые частицы к одному и тому же — или к одним и тем же — ускорительным промежуткам. Простейшим цикли-

ческим ускорителем является циклотрон (Лоуренс, 1932 г.). Схема его устройства изображена на рис. 186.

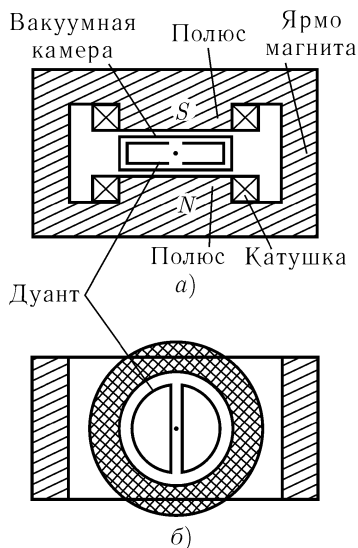


Рис. 186. Схема устройства циклотрона.

Внешне циклотрон имеет форму цилиндра, стоящего на основании. Магнитное ярмо циклотрона в разрезе представляет собой две сросшиеся буквы Ш, одна из которых расположена над другой. Средние части этих букв короче боковых и образуют магнитные полюса циклотрона. Между полюсами расположена вакуумная камера, в которой происходит ускорение частиц. Магнитное поле создается катушками, надетыми на полюса. В камере расположены дуанты — полые металлические полуцилиндры, между которыми создается высокочастотное электрическое поле. Вблизи центра в промежутке между дуантами размещается источник ускоряемых частиц. Ускоряемые частицы движутся внутри дуантов по спирали. Через каждые пол-оборота они выходят в пространство между дуантами и попадают в ускоряющее поле. Частота поля должна соответствовать частоте обращения частиц, чтобы частицы попадали в зазоры,

когда электрическое поле имеет нужное направление и величину.

Рассмотрим динамику частиц в постоянном магнитном поле. Будем считать частицы нерелятивистскими. Круговое движение частиц возникает, если ускорение, приобретаемое частицами в магнитном поле, равно необходимому для движения по окружности центростремительному ускорению. Для движения по окружности радиуса  $R$  это ускорение равно:

$$a = v^2/R = v\omega,$$

где  $v$  — скорость частицы, а  $\omega$  — частота ее обращения в циклотроне.

Ускорение, приобретаемое частицей в магнитном поле, равно:

$$a = (eBv/c)/m,$$

где  $B$  — величина магнитной индукции между полюсами,  $c$  — скорость света (мы использовали систему единиц Гаусса).

Приравнивая величины ускорения, из этих двух равенств найдем:

$$v\omega = (eBv/c)/m.$$

Сокращая на  $v$ , получим:

$$\omega = eB/mc. \quad (16.22)$$

Полученная формула показывает, что в циклотроне (т. е. в постоянном магнитном поле) частота обращения нерелятивистских частиц, а значит и необходимая частота ускоряющего напряжения не зависят от скорости, а значит, и от энергии частицы.

Радиус траектории, напротив, зависит от энергии очень сильно. В самом деле,

$$\omega = v/r, \quad \text{или} \quad r = v/\omega.$$

При постоянной частоте обращения радиус траектории, описываемой частицей в циклотроне, пропорционален ее скорости и по мере увеличения энергии частицы быстро возрастает. Траектория ускоряемых частиц представляет собой, таким образом, не окружность, а спираль.

Процесс ускорения в циклотроне происходит непрерывно. Когда одна частица заканчивает ускорение (движется по окружности максимального радиуса), другие начинают ускорение (движутся при небольших радиусах). Это возможно потому, что ускоряющее напряжение должно иметь одну и ту же частоту для всех ускоряемых частиц. В непрерывном режиме ускорения заключается огромное преимущество циклотрона, главное его отличие от всех других циклических ускорителей.

К сожалению, наш вывод о постоянстве частоты обращения справедлив только при нерелятивистских скоростях, когда массу частицы можно считать независимой от скорости. Поэтому циклотроны, используемые для ускорения протонов, могут работать только при энергиях до  $\sim 20$  МэВ, а для ускорения электронов вообще не годятся. В циклотронах можно ускорять также дейтроны,  $\alpha$ -частицы и тяжелые ионы, и они нередко используются для этой цели.

Прежде чем переходить к другим типам ускорителей, вернемся к устойчивости поперечных колебаний и к бетатронным колебаниям ускоряемых частиц. Рассмотрим вертикальную устойчивость частиц при ускорении. Вопрос о радиальной устойчивости в циклотроне не стоит остро потому, что для горизонтального движения имеется достаточно места. Устойчивость движения может обеспечиваться только магнитными силами. Магнитные силы, действующие на частицу, перпендикулярны ее скорости и магнитному полю. В однородном вертикальном поле

эти силы направлены по радиусу, и вертикальной слагающей не имеют. Частицы, имевшие при инжекции даже небольшую вертикальную скорость, сохраняют ее, пока не попадут на крышку дуантав и будут потеряны. Поэтому однородное магнитное поле в циклотроне применять нельзя.

Чтобы обеспечить вертикальную устойчивость частиц, магнитные силы должны иметь вертикальную слагающую, направленную к средней плоскости. Для этого магнитные полюса следует скашивать наружу, как это изображено на рис. 187.

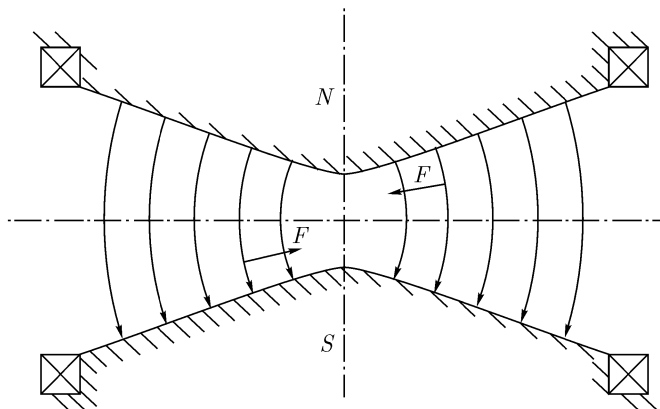


Рис. 187. Форма магнитных полюсов циклотрона.

Скос полюсов приводит к важным следствиям. С увеличением радиуса увеличивается зазор между полюсами магнита и уменьшается магнитное поле. Обратимся к формуле (16.22). Релятивистские эффекты приводят к увеличению с энергией, а значит и с радиусом, массы ускоряемой частицы. Релятивистская масса частицы равна  $E/c^2 = (T + m_0c^2)/c^2$ . Именно это значение входит в формулу (16.22). Значит, чтобы сохранить постоянной частоту обращения ускоряемых частиц, величину магнитного поля нужно с радиусом не уменьшать, а увеличивать, для чего следует скашивать полюса в обратную сторону, то-есть не в ту, которая нужна для радиальной устойчивости. При энергиях до  $\sim 20$  МэВ этот вопрос еще остро не стоит. Выход из этого положения был найден в изохронных циклотронах. Разговор о них пойдет ниже.

Скос магнитных полюсов влияет и на устойчивость радиальных колебаний. Мы уже отмечали, что в циклотронах радиальная устойчи-

вость не является особенно актуальной. Однако посмотрим, что с ней происходит. Для такой устойчивости необходимо, чтобы частицы, удалившиеся наружу от равновесной, получили толчок внутрь, а частицы, ушедшие внутрь, — толчок наружу. Значит частицы, ушедшие наружу, должны попадать в более сильное поле, а не в более слабое, как это изображено на рис. 187. Этот пример иллюстрирует общую теорему, о которой мы уже упоминали: фокусировка частиц в одном пространственном направлении приводит к их дефокусировке в другом.

Как строить циклотроны на энергии, превосходящие 20 МэВ? Для этого есть два пути:

1. отказ от постоянства частоты ускоряющего поля или
2. отказ от скашивания полюсов и обеспечение устойчивости вертикальных колебаний другими способами.

При движении по первому пути возникают *фазотроны* — циклотроны с изменяющейся во время цикла частотой магнитного поля. Такие ускорители раньше активно строились. Некоторые из них (например, фазотрон в Гатчине под Петроградом, ускоряющий протоны до 1 ГэВ) продолжают работать.

При движении по второму пути отказываются от азимутальной симметрии магнитного поля. Полюсам циклотрона придается сложная форма, способствующая устойчивости колебаний. Частота магнитного поля при этом остается постоянной, сохраняется и высокая интенсивность пучка ускоренных частиц. Так возникают *изохронные циклотроны*. Их энергию удается поднять до 200–250 МэВ. Несколько ускорителей такого типа вводятся в строй каждый год (например, для протонной лучевой терапии раковых больных).

**Синхротроны. Квадрупольные линзы.** Для ускорения частиц до больших энергий применяют синхротроны. В синхротронах частицы движутся в вакуумной камере, имеющей форму узкого кольца. Магнитное поле в камере создается магнитами, которые располагаются вдоль всего периметра. Цепочка магнитов периодически прерывается фокусирующими линзами, речь о которых пойдет впереди. Вакуумная камера, в которой движутся частицы, конечно, откачивается до высокого вакуума. Синхротроны намного экономичнее циклотронов, потому что магнитное поле в них (и «железо магнитов») занимает не всю площадь круга, по периметру которого движутся ускоряемые частицы, а только небольшую ее часть.

Процесс ускорения частиц разбивается на циклы. В процессе цикла магнитное поле возрастает в соответствии с возрастающей энергией партии ускоряемых частиц. Соответственно, меняется и частота уско-

ряющего напряжения. Когда ускорение рассматриваемой партии заканчивается, они выводятся из ускорителя, величина магнитного поля и частота ускоряющего напряжения возвращаются к начальным значениям, в камеру вводятся (инжектируются) новые частицы, и начинается очередной цикл ускорения.

Вернемся к проблеме устойчивости движения. В узкой вакуумной камере синхротрона устойчивость бетатронных колебаний должна быть обеспечена как в вертикальном, так и в горизонтальном направлениях. Как уже известно, эти задачи противоречат одна другой. Довольно долго из этого противоречия не было видно выхода. Потом было обнаружено, что задача может быть решена при последовательном расположении линз, попеременно фокусирующих частицы то в одном, то в другом направлении. Каждая из линз, фокусируя в одном, дефокусирует частицы в другом направлении. Как показывает расчет, общее действие такой последовательности оказывается не очень сильным, но приводит к фокусировке в обоих направлениях. Этот способ обеспечения устойчивости движения получил название принципа жесткой фокусировки. С его появлением появилась возможность строить ускорители на любые энергии.

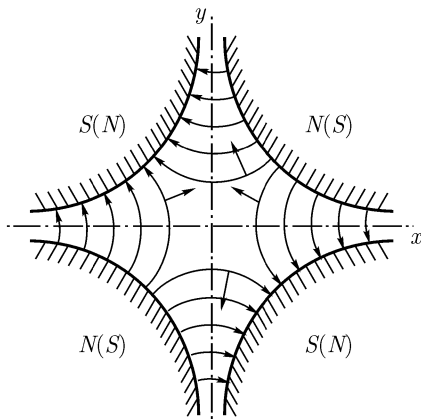


Рис. 188. Геометрия магнитных полюсов квадрупольной линзы.

Для фокусировки в синхротронах применяются квадрупольные линзы. Схема их устройства изображена на рис. 188. Обозначения полюсов  $S$  и  $N$  написаны на них. В соседних линзах полюса должны иметь обратную полярность (для них знаки  $N$  и  $S$  взяты в скобки). Стрелки,

отходящие от силовых линий, указывают направление магнитных сил, действующих на частицы. В первой линзе частицы, отклонившиеся от оси  $Y$ , заворачиваются к ней, но отклоняются от оси  $X$ . В следующей линзе направления отклонения меняются, и т. д. Как уже упоминалось выше, суммарное действие такой системы линз оказывается фокусирующим, и поперечные сечения кольцевых вакуумных камер могут быть сделаны очень небольшими, порядка нескольких квадратных дециметров.

Синхротроны применяются для ускорения любых стабильных частиц, протонов и антипротонов, ионов, электронов и позитронов. При ускорении электронов и позитронов процесс ускорения затрудняется, т. к. всякое искривление их траектории — а в циклических ускорителях оно возникает по необходимости — приводит к испусканию электромагнитного излучения. Это излучение так и называется синхротронным излучением. Оно не должно быть особенно большим, иначе ускорение станет неэффективным (или даже невозможным). Поэтому радиус электронных синхротронов — при той же энергии ускоренных частиц — намного превышает радиус протонных. А от ускорения электронов до рекордно больших энергий приходится вообще отказаться.

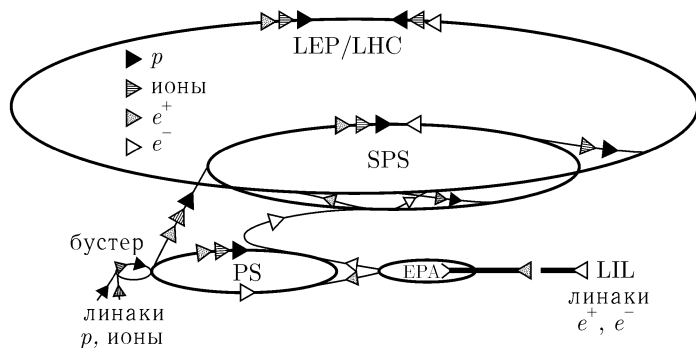


Рис. 189. Схема ускорительно-накопительного комплекса протонного синхротрона SPS.

В Европейском центре ядерных исследований (ЦЕРН) работает уникальный ускорительный комплекс. Схема его устройства приведена на рис. 189. Его центр составляют три гигантских коллайдера LEP, SPS и PS. К пуску готовится четвертый, самый большой коллайдер LHC. Эти коллайдеры пригодны для ускорения самых разных частиц: элек-

тронов и позитронов, протонов и антипротонов и тяжелых ионов вплоть до свинца. Но по порядку.

Начнем с ускорителя PS. Этот ускоритель был построен для ускорения — и аннигиляции — протонов и антипротонов. Отсюда происходит его название: протонный синхротрон, PS. Сейчас он может ускорять любые заряженные частицы. Его кольцо имеет в диаметре 200 метров. Он получает частицы от бустера, который в свою очередь получает их от системы линейных ускорителей — для каждого типа частиц нужен свой линейный ускоритель. Энергия инжектируемых в PS частиц меняется от 500 МэВ для электронов до 4,2 МэВ на нуклон для ионов свинца. (Электроны и позитроны накапливаются перед инъекцией в кольцо ЕРА, изображенном в нижней правой части рисунка.) Протоны ускоряются в PS до 28 ГэВ.

Затем следует SPS — «супер протонный ускоритель», который получил свое название от цели, для которой он вначале предназначался. Сейчас он может ускорять любые заряженные частицы. Периметр его кольца составляет 6 км. Магнитная система содержит 744 заворачивающих магнита и 216 квадрупольных линз. SPS получает частицы от PS. SPS расположен под землей. При ускорении протонов и антипротонов их энергия поднимается до 450 ГэВ. SPS часто используется как коллайдер протонов и антипротонов. Подготовка к работе в режиме коллайдера это сложный процесс. Сначала в течение многих циклов накапливаются антипротоны, а только потом в камеру вводится пучок протонов. При работе в режиме коллайдера на SPS были открыты переносчики слабого взаимодействия —  $W^+$ ,  $W^-$  и  $Z^0$  бозоны.

Скажем несколько слов об аннигиляции протонов и антипротонов. Среди продуктов аннигиляции большую часть составляют  $\pi$ -мезоны (~95%), затем следуют  $K$ -мезоны (~5%) и только менее 1% приходится на долю всех остальных частиц.

Последний из ускорителей — это LEP, получающий частицы от SPS. Его кольцо имеет в периметре 27 км. Тоннель LEP расположен на глубине 100 м и проходит под территорией Швейцарии и Франции. Рабочие станции располагаются на территории обоих государств. Название ускорителя происходит от его первоначального назначения — он строился для ускорения и исследования процесса аннигиляции электронов и позитронов. Сейчас он используется для ускорения и аннигиляции любых частиц. Его магнитная система содержит 3368 магнитов и 808 квадрупольных линз. Экспериментальные станции располагаются по периметру в четырех равноотстоящих участках кольца. LEP ускоряет электроны и позитроны до энергии 100 ГэВ. Ускорение электронов до более высоких энергий оказывается невозможным из-за синхротронного излучения. По-



тери на излучение тяжелых частиц при таких энергиях еще пренебрежимо малы.

В режиме аннигиляции пучки частиц и античастиц в точках соударения сжимаются до размера меньше человеческого волоса. Частицы совершают в камере 10 000 оборотов в секунду, но должны обращаться в камере ускорителя часами... Количество полученных на LEP  $Z^0$ -частиц исчисляется сейчас миллионами, а число  $W$ -бозонов — многими сотнями.

Сейчас интенсивно ведется подготовка к сооружению LHC — большого коллайдера тяжелых частиц. Он будет располагаться в тоннеле LEP. Индукция магнитного поля в его сверхпроводящих магнитах составит 8,3 Тл. LHC будет получать протоны и антипротоны от SPS при энергии 450 ГэВ и ускорять их до 7 ТэВ. Ток ускоренных частиц составит 0,56 А, а энергия, содержащаяся в каждом из пучков, будет равна 350 МДж!

В заключение скажем несколько слов об экспериментальных установках, работающих на ускорителях. Это многофункциональные измерительные комплексы, включающие в свой состав магнитные трековые спектрометры, детекторы  $\gamma$ -квантов и нейтральных адронов ( $n$ ,  $\pi^0$ ,  $K^0$ , ...), огромные дрейфовые камеры, черенковские и сцинтилляционные счетчики и многое другое. В последнее время начали интенсивно изучаться процессы взаимодействия нейтрино с веществом. В одной из таких установок на пути нейтринного пучка установлена 700-тонная стальная мишень, прослоенная детекторами. Результаты, полученные на экспериментальных установках, сразу попадают на ЭВМ, что позволяет непосредственно следить за ходом опытов и открывает доступ к результатам для широкого круга ученых.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На этом мы заканчиваем изложение основ нерелятивистской квантовой физики. Вне рамок книги остались многие важные ее разделы, в том числе исследование свойств зависящего от времени уравнения Шредингера (2.32) и вопросов, которые им описываются. Мы имеем в виду расчет вероятности различных процессов: электромагнитных переходов в электронных оболочках атомов, отклонения заряженных частиц в кулоновском поле, рассеяния в поле ядерных сил и т. д. Не обсуждались также экспериментальные и теоретические исследования времен жизни возбужденных состояний частиц и эффективных сечений при различного типа взаимодействиях, которые представляют огромную важность и служат одним из основных источников наших сведений о строении молекул, атомов и ядер.

Мы почти не обсуждали результатов релятивистской квантовой физики. Скажем о ней несколько слов. Создание этой науки относится к 1928 году, когда Поль Дирак предложил свое знаменитое релятивистки-инвариантное уравнение. В это уравнение симметрично входят  $\psi$ -функции частиц и античастиц в обоих возможных спиновых состояниях — всего четыре величины. Волновая функция Дирака представляет поэтому 4-компонентный вектор, а само уравнение носит матричный характер. При создании теории о существовании позитронов ничего не было известно, и их последующее экспериментальное обнаружение явилось подлинным триумфом теории. (На самом деле события развивались менее гладко. Дирак вначале думал, что его уравнение описывает одновременно не электрон и позитрон, а электрон и протон. В то же время К. Андерсон, открывший позитрон, по-видимому, ничего не знал о теории Дирака). Сравнение теоретических и экспериментальных результатов надежно подтверждает справедливость теории.

Следующий шаг в понимании электромагнитных явлений был сделан при создании квантовой электродинамики — последовательной квантовой теории электромагнитного поля. Наибольший вклад в создание этой науки внесли П. Дирак, Ю. Швингер, Ф. Дайсон и Р. Фейнман. Квантовая электродинамика сейчас прекрасно развита и служит образцом для построения других физических теорий, о которых мы расскажем ниже. С помощью квантовой электродинамики были рассчитаны многие электромагнитные явления, в частности, было уточнено значение

магнитного момента электрона. Измеренное на опыте значение, равное  $(1,001159652209 \pm 0,31 \cdot 10^{-10}) \mu_B$ , находится в прекрасном согласии с расчетным значением, которое было вычислено теоретически приблизительно с той же точностью.

Скажем несколько слов о физике макроскопических квантовых систем. Читатели уже познакомились с оптическими квантовыми генераторами и с основными представлениями физики твердого тела. Оба этих раздела современной физики исследуют свойства макроскопических систем, которые могут быть поняты только с помощью квантовых представлений. Два других важных явления остались вне рамок нашей книги. Мы имеем в виду сверхтекучесть и сверхпроводимость. Как мы уже отмечали, оба эти явления связаны с бозе-конденсацией. Такая конденсация возможна только у частиц, подчиняющихся статистике Бозе – Эйнштейна, а значит обладающих целыми значениями спина. Все частицы бозе-конденсата обладают одной и той же волновой функцией, соответствующей нижнему, невозбужденному состоянию.

Сверхтекучесть гелия (при температурах ниже 2,17 К) была открыта П. Л. Капицей в 1938 году. Первую теорию этого явления дал Л. Д. Ландау. В соответствии с теорией было обнаружено, что сверхтекучестью обладает  $^4\text{He}$ , имеющий нулевое значение спина, и не обладает  $^3\text{He}$ , спин атомов которого равен 1/2. Впоследствии было обнаружено, что при еще более низких температурах (ниже  $2,6 \cdot 10^{-3}$  К) и высоких давлениях сверхтекучестью обладает и  $^3\text{He}$ . Исследование этого вопроса показало, что в этих условиях атомы  $^3\text{He}$  объединяются в пары, обладающие нулевым спином.

Сверхпроводимость называется обращение в нуль электрического сопротивления некоторых веществ. Она была открыта в 1911 году Х. Каммерлинг-Оннесом. Механизм сверхпроводимости связан с бозе-конденсацией электронов, переносящих электрический ток. Ясно, что такая конденсация невозможна для отдельных электронов и может происходить только у электронных пар, обладающих целым (нулевым) спином. Долгое время механизм, связывающий электроны в пары не был ясен. В 1967 году Л. Купер, Д. Шриффер и Д. Бардин показали, что такая связь возникает из-за взаимодействия электронов с фононами — квантами колебаний плотности кристаллической решетки. Более полную теорию сверхпроводимости создал Н. Н. Боголюбов. Прямые опыты подтвердили, что заряд переносчиков электрического поля при сверхпроводимости, действительно, равен  $2e$ .

До 80-х годов были известны только вещества, переходящие в сверхпроводящее состояние при очень низких температурах — не выше 20 К. Получать и поддерживать такие температуры трудно и дорого, поэтому техническое применение сверхпроводящих материалов оказывалось

невыгодным. В 1987 г. было обнаружено, что некоторые керамики (из них наиболее известно керамическое оксидное образование  $\text{La}_{1,8}\text{Sr}_{0,2}\text{CuO}$ ) сохраняют сверхпроводимость до температур порядка 90–100 К, превышающих температуру кипения жидкого азота, равную 77,8 К. Не видно теоретических оснований, которые запрещали бы существование сверхпроводимости при еще более высоких температурах, вплоть до комнатных. Если окажется, что при комнатных или даже при азотных температурах сверхпроводимость может быть получена у каких-либо стабильных материалов, обладающих приемлемыми технологическими свойствами, то следует ожидать революционных изменений в технике.

В этой книге мы дали краткую и по необходимости неполную картину современной квантовой физики. Главное, на что нам еще раз хотелось бы обратить внимание, заключается в универсальности того нового понимания устройства нашего мира, которое принесла с собой квантовая механика. Основные ее идеи: волновая природа частиц, вероятностное описание их состояний (описание с помощью  $\psi$ -функций и операторов), принцип неопределенности, идеи квантовой статистики — оказались применимы не только к электронам (как вначале казалось), но и к атомным ядрам, к элементарным частицам, к макроскопическим системам, ко всему окружающему миру. Дальнейшее развитие теории привело к углублению, а не к замене этих представлений. Путь к изучению современной физики в этой книге только начат. Мы желаем читателям успехов на этом плодотворном, но нелегком пути.

# ПРИЛОЖЕНИЯ

## I. Среднее значение проекции импульса

Выведем формулу (2.13). Согласно (2.12) среднее значение проекции импульса равно

$$\langle p_x \rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m^* p_m C_m, \quad (1)$$

где  $C_m$  — коэффициент разложения  $\psi$ -функции по волнам де Бройля. Заменим  $C_m$  и  $C_m^*$  с помощью формулы (2.10):

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2A}} \int_{-A}^A \psi^*(x) \exp\left(i\frac{p_m}{\hbar}x\right) dx \times \\ &\quad \times p_m \frac{1}{\sqrt{2A}} \int_{-A}^A \psi(x') \exp\left(-i\frac{p_m}{\hbar}x'\right) dx' = \\ &= \frac{1}{2A} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-A}^A \psi^*(x) p_m \int_{-A}^A \psi(x') \exp\left[i\frac{p_m}{\hbar}(x-x')\right] dx' dx. \end{aligned}$$

Как нетрудно проверить непосредственным вычислением, это выражение может быть записано в виде

$$\langle p_m \rangle = \int_{-A}^A \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2A} \int_{-A}^A \psi(x') \exp\left[i\frac{p_m}{\hbar}(x-x')\right] dx' dx. \quad (2)$$

Вычислим сумму, входящую в (2), обозначив ее через  $Y(x)$ :

$$\begin{aligned} Y(x) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2A} \int_{-A}^A \psi(x') \exp\left[i\frac{p_m}{\hbar}(x-x')\right] dx' = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{m=-N}^N \frac{1}{2A} \int_{-A}^A \psi(x') \exp\left[i\frac{p_m}{\hbar}(x-x')\right] dx'. \end{aligned}$$

Заменим  $p_m$  с помощью (2.9) и внесем знак суммы под интеграл (с конечной суммой это всегда можно сделать, а с бесконечной суммой — не всегда):

$$Y(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2A} \int_{-A}^A \psi(x') \sum_{m=-N}^N \exp\left[\frac{i\pi m}{A}(x-x')\right] dx'. \quad (3)$$

Вычислим сумму, входящую в (3), введя для краткости обозначение

$$\alpha = \pi(x-x')/A \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \sum_{m=-N}^N \exp\left[\frac{i\pi m}{A}(x-x')\right] &= \sum_{m=-N}^N e^{im\alpha} = e^{-iN\alpha} + e^{-i(N-1)\alpha} + \dots + e^{iN\alpha} = \\ &= e^{-iN\alpha}(1 + e^{i\alpha} + e^{2i\alpha} + \dots + e^{2Ni\alpha}) = e^{-iN\alpha} \frac{e^{(2N+1)i\alpha} - 1}{e^{i\alpha} - 1} = \\ &= \frac{\sin[(N+1/2)\alpha]}{\sin(\alpha/2)} = \frac{\sin[(N+1/2)(\pi/A)(x-x')]}{\sin[(\pi/2A)(x-x')]} \end{aligned} \quad (5)$$

Нас интересуют очень большие — в пределе бесконечно большие — значения  $N$ . Во всей области изменения  $x'$ , кроме ближайшей окрестности  $x$ , выражение (5) быстро осциллирует, и интеграл в выражении (3) обращается в нуль всюду, кроме окрестности точки  $x$ . При очень малых  $x-x'$ , когда  $N(\pi/A)(x-x') \ll 1$ , синусы в числителе и знаменателе могут быть заменены своими аргументами и выражение (5) приобретает вид

$$\frac{(N+1/2)(\pi/A)(x-x')}{(\pi/2A)(x-x')} = 2N+1.$$

Это выражение при больших  $N$  очень велико. Таким образом, при больших  $N$  в интеграле (3) становится все более существенной окрестность точки  $x$  и все менее существенной вся остальная область изменения  $x'$ . Нас интересуют предельно большие значения  $N$ . В интеграле (3)  $\psi(x')$  может быть поэтому заменена на  $\psi(x)$ :

$$\begin{aligned} Y(x) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2A} \psi(x) \int_{-A}^A \sum_{m=-N}^N \exp\left[\frac{i\pi m}{A}(x-x')\right] dx' = \\ &= \psi(x) \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2A} \sum_{m=-N}^N \int_{-A}^A \exp\left[\frac{i\pi m}{A}(x-x')\right] dx'. \end{aligned} \quad (6)$$

Рассмотрим интегралы, которые суммируются в выражении (6). При  $m \neq 0$

$$\begin{aligned} \int_{-A}^A \exp\left[\frac{i\pi m}{A}(x-x')\right] dx' &= \exp\left(\frac{i\pi m}{A}x\right) \frac{A}{-i\pi m} \exp\left(-\frac{i\pi m}{A}x'\right) \Big|_{-A}^A = \\ &= \exp\left(\frac{i\pi m}{A}x\right) \frac{A}{-i\pi m} [\exp(-i\pi m) - \exp(+i\pi m)] = 0. \end{aligned}$$

При  $m = 0$

$$\int_{-A}^A \exp\left[\frac{i\pi m}{A}(x-x')\right] dx' = \int_{-A}^A dx' = 2A.$$

Имеем поэтому

$$Y(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2A} \psi(x) \cdot 2A = \psi(x). \quad (7)$$

В этом выражении предельный переход  $N \rightarrow \infty$  оказался ненужным. Мы использовали переход к пределу в неявном виде при замене  $\psi(x')$  на  $\psi(x)$ . Эта замена при любом конечном  $N$  является приблизительно правильной, а при  $N \rightarrow \infty$  оказывается точной. Подставляя (7) в (2), найдем окончательно

$$\langle p_m \rangle = \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x) dx, \text{ что и требовалось доказать.}$$

## II. Радиальная часть оператора Лапласа

Покажем, что оператор Лапласа в сферических координатах для случая, когда функция зависит только от  $r$ , выражается формулой (4.3).

В декартовых координатах оператор Лапласа имеет следующий вид:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (8)$$

Перейдем от производных по  $x, y, z$  к производным по  $r$ . Учтем, что

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2. \quad (9)$$

Дифференцируя это равенство, получаем

$$\partial r / \partial x = x/r, \quad \partial r / \partial y = y/r, \quad \partial r / \partial z = z/r.$$

Заменим первые производные по  $x, y, z$  производной по  $r$ :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{x}{r} \frac{d}{dr}, \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{y}{r} \frac{d}{dr}, \quad \frac{\partial}{\partial z} = \frac{z}{r} \frac{d}{dr}.$$

Найдем вторые производные

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{x}{r} \frac{d}{dr} \right) = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{x}{r^2} \frac{dr}{dx} \cdot \frac{d}{dr} + \frac{x}{r} \frac{\partial r}{\partial x} \frac{d^2}{dr^2} = \\ &= \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{x^2}{r^3} \frac{d}{dr} + \frac{x^2}{r^2} \frac{d^2}{dr^2}. \end{aligned} \quad (10)$$

Аналогично

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{y^2}{r^3} \frac{d}{dr} + \frac{y^2}{r^2} \frac{d^2}{dr^2}, \quad (10')$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{z^2}{r^3} \frac{d}{dr} + \frac{z^2}{r^2} \frac{d^2}{dr^2}, \quad (10'')$$

Суммируя (10), (10') и (10'') с учетом (9), находим

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{3}{r} \frac{d}{dr} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}. \quad (11)$$

Таким образом, мы получили выражение (4.3):

$$\Delta = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}.$$

### III. Уравнения движения связанных маятников

Покажем, что в формулах (12.2) дополнительные члены  $\alpha x$  и  $\alpha y$  должны иметь одинаковые коэффициенты  $\alpha$ .

Будем характеризовать отклонение первого маятника координатой  $x$ , а отклонение второго маятника — координатой  $y$ .

Силы, действующие на маятники, описываются потенциальной энергией, зависящей, вообще говоря, от координат обоих маятников, так что потенциальная энергия системы  $U = U(x, y)$ . Разложим  $U$  в ряд по  $x$  и  $y$ . Для малых колебаний достаточно ограничиться членами до второго порядка включительно:

$$\begin{aligned} U(x, y) &= U(x_0, y_0) + \left( \frac{\partial U}{\partial x} \right)_0 x + \left( \frac{\partial U}{\partial y} \right)_0 y + \\ &+ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right)_0 x^2 + \left( \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} \right)_0 xy + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right)_0 y^2 + \dots \end{aligned} \quad (12)$$

Производные  $(\partial U / \partial x)_0, \dots, (\partial^2 U / \partial y^2)_0$  берутся в точке  $x_0, y_0$  и являются числами.



Сила, действующая на каждый из маятников, равна взятой с обратным знаком производной потенциальной энергии по соответствующей координате:

$$F_1 = -\frac{\partial U}{\partial x} = -\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_0 - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)_0 x - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y}\right)_0 y,$$

$$F_2 = -\frac{\partial U}{\partial y} = -\left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)_0 - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial y^2}\right)_0 y - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y}\right)_0 x.$$
(13)

Примем за точку разложения положение равновесия маятников. В точке  $x_0 = y_0 = 0$  силы должны обратиться в нуль. Имеем поэтому

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_0 = \left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)_0 = 0.$$
(14)

Уравнения движения маятников получим, подставляя (13) во второй закон Ньютона. С учетом (14) получим

$$m_1 \ddot{x} = -\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)_0 x - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y}\right)_0 y,$$

$$m_2 \ddot{y} = -\left(\frac{\partial^2 U}{\partial y^2}\right)_0 y - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y}\right)_0 x.$$
(15)

При «выключении» связи между маятниками силы, зависящие от координаты «другого» маятника, обращаются в нуль и вторые члены в правых частях уравнений (15) исчезают. Видно поэтому, что у одинаковых маятников не только  $m_1 = m_2$ , но и

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)_0 = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial y^2}\right)_0.$$
(16)

Обозначим эти производные через  $m\omega^2$ . Деля выражение (15) на  $m$  и перенося все члены в левую часть равенства, найдем

$$\ddot{x} + \omega^2 x + \frac{1}{m} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y}\right)_0 y = 0,$$

$$\ddot{y} + \omega^2 y + \frac{1}{m} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y}\right)_0 x = 0.$$
(17)

Формулы (17) совпадают с (12.2). Легко видеть, что члены, зависящие от координат «другого» маятника, имеют одинаковые коэффициенты, обозначенные в уравнениях (12.2) буквой  $\alpha$ .

## IV. Основные физические константы

Наименование	Обозначение	В гауссовой системе единиц	В СИ
Скорость света	$c$	$2,997\,924\,6 \cdot 10^{10}$ см/с	$2,997\,924\,6 \cdot 10^8$ м/с
Постоянная Планка	$\hbar$	$6,582\,12 \cdot 10^{-16}$ эВ·с	$1,054\,57 \times 10^{-34}$ Дж·с
Элементарный заряд	$e$	$4,803\,20 \cdot 10^{-10}$ СГСЭ <sub>q</sub>	$1,602\,18 \cdot 10^{-19}$ Кл
Масса электрона	$m_e$	$9,109\,4 \cdot 10^{-28}$ г	$9,109\,4 \cdot 10^{-31}$ кг
Энергия покоя электрона	$m_e c^2$	0,510999 МэВ	
Масса протона	$m_p$	$1,672\,62 \cdot 10^{-24}$ г	$1,672\,62 \cdot 10^{-27}$ кг
Энергия покоя протона	$m_p c^2$	938,272 МэВ	
Постоянная Авогадро	$N_A$		$6,022\,14 \cdot 10^{23}$ моль <sup>-1</sup>
Постоянная тонкой структуры	$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$	1/137,036 0	
Комптоновская длина волны электрона	$\bar{\lambda}_e = \frac{h}{m_e c}$	$3,861\,59 \cdot 10^{-11}$ см	$3,861\,59 \cdot 10^{-13}$ м
Энергия Ридберга	$R_1 = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$	13,605 69 эВ	
Постоянная Ридберга	$R_\infty = \frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3 c}$	$1,097\,373 \cdot 10^5$ см <sup>-1</sup>	$1,097\,373 \cdot 10^7$ м <sup>-1</sup>
Магнетон Бора	$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$	$5,788\,381 \times 10^{-9}$ эВ/Гс	$5,788\,381 \times 10^{-5}$ эВ/Тл
Ядерный магнетон	$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c}$	$3,152\,451 \times 10^{-12}$ эВ/Гс	$3,152\,451 \times 10^{-8}$ эВ/Тл
Постоянная Больцмана	$k$	$1,380\,65 \cdot 10^{-16}$ эрг/К	$1,380\,65 \times 10^{-23}$ Дж/К
Постоянная Стефана – Больцмана	$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60\hbar^3 c^2}$	$5,670 \cdot 10^{-5}$ эрг/с·см <sup>2</sup> ·К <sup>4</sup>	$5,670 \cdot 10^{-8}$ Вт/м <sup>2</sup> ·К <sup>4</sup>

**V. Названия, символы и атомные массы химических элементов. (Скобкой отмечены радиоактивные элементы)**

1	Водород	H	1,00794	57	Лантан	La	138,9055
2	Гелий	He	4,00260	58	Церий	Ce	140,12
3	Литий	Li	6,941	59	Празеохим	Pr	140,9077
4	Бериллий	Be	9,01218	60	Неодим	Nd	144,24
5	Бор	B	10,81	61	Прометий	Pm	[144,91]
6	Углерод	C	12,011	62	Самарий	Sm	150,36
7	Азот	N	14,0067	63	Европий	Eu	151,96
8	Кислород	O	15,9994	64	Гадолиний	Gd	157,25
9	Фтор	F	18,998403	65	Тербий	Tb	158,92
10	Неон	Ne	20,179	66	Диспрозий	Dy	162,50
11	Натрий	Na	22,98977	67	Гольмий	Ho	164,930
12	Магний	Mg	24,305	68	Эрбий	Er	167,26
13	Алюминий	Al	26,98154	69	Тулий	Tm	168,934
14	Кремний	Si	28,0855	70	Иттербий	Yb	173,04
15	Фосфор	P	30,97376	71	Лютеций	Lu	174,967
16	Сера	S	32,06	72	Гафний	Hf	178,49
17	Хлор	Cl	35,453	73	Тантал	Ta	180,9479
18	Аргон	Ar	39,948	74	Вольфрам	W	183,85
19	Калий	K	39,0983	75	Рений	Re	186,207
20	Кальций	Ca	40,08	76	Осмий	Os	190,2
21	Скандий	Sc	44,9559	77	Иридий	Ir	192,22
22	Титан	Ti	47,88	78	Платина	Pt	195,08
23	Ванадий	V	50,9415	79	Золото	Au	196,9665
24	Хром	Cr	51,996	80	Ртуть	Hg	200,59
25	Марганец	Mn	54,9380	81	Таллий	Tl	204,383
26	Железо	Fe	55,847	82	Свинец	Pb	207,2
27	Кобальт	Co	58,9332	83	Висмут	Bi	208,9804
28	Никель	Ni	58,69	84	Полоний	Po	[208,98]
29	Медь	Cu	63,548	85	Астат	At	[209,99]
30	Цинк	Zn	65,38	86	Радон	Rn	[222,02]
31	Галлий	Ga	69,72	87	Франций	Fr	[223,02]
32	Германий	Ge	72,59	88	Радий	Ra	[226,0254]
33	Мышьяк	As	74,9216	89	Актиний	Ac	[227,027]
34	Селен	Se	78,96	90	Торий	Th	232,0381
35	Бром	Br	79,904	91	Протактиний	Pa	231,0359
36	Криптон	Kr	83,80	92	Уран	U	238,0289
37	Рубидий	Rb	85,4678	93	Нептуний	Np	[237,0482]
38	Стронций	Sr	87,62	94	Плутоний	Pu	[244,06]
39	Иттрий	Y	88,9059	95	Америций	Am	[243,06]
40	Цирконий	Zr	91,22	96	Кюрий	Cm	[247,07]
41	Ниобий	Nb	92,9064	97	Берклий	Bk	[247,07]
42	Молибден	Mo	95,94	98	Калифорний	Cf	[251,08]
43	Технеций	Tc	[98]	99	Эйнштейний	Es	[252,08]
44	Рутений	Ru	101,07	100	Фермий	Fm	[257,09]
45	Родий	Rh	102,9055	101	Менделевий	Md	[258,10]
46	Палладий	Pd	106,42	102	(Нобелий)	(No)	[259,10]
47	Серебро	Ag	107,8682	103	(Люренсий)	(Lr)	[262,11]
48	Кадмий	Cd	112,41	104	Резерфордий		[261,11]
49	Индий	In	114,82	105	Дубний		[262,11]
50	Олово	Sn	118,69	106	Сиборгий		[263,12]
51	Сурьма	Sb	121,75	107	Борий		[262,11]
52	Теллур	Te	127,60	108	Хассий		[265,13]
53	Иод	I	126,9048	109	Мейтнерий		[266,14]
54	Ксенон	Xe	131,29				
55	Цезий	Cs	132,9054				
56	Барий	Ba	137,33				

# СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

$e$	— заряд электрона
$c$	— скорость света
$m, m_e$	— масса электрона
$\omega$	— круговая частота
$\mathbf{p}$	— импульс
$\lambda$	— длина волны
$k = 2\pi/\lambda$	— волновое число
$\mathbf{k}$	— волновой вектор
$E$	— полная энергия частиц и фотонов
$T, E_k$	— кинетическая энергия
$U, E_{\text{пот}}$	— потенциальная энергия
$\hbar, h$	— постоянная Планка
$\lambda_e = \hbar/m_e c$	— комптоновская длина волны электрона
$\alpha = e^2/\hbar c$	— постоянная тонкой структуры
$\psi, \Psi$	— пси-функция
$\langle f \rangle$	— среднее значение физической величины $f$
$\hat{f}$	— оператор физической величины $f$
$l$	— орбитальный угловой момент частицы
$l$	— орбитальное квантовое число
$s$	— спин частицы
$s$	— спиновое квантовое число
$\mathbf{j}$	— полный угловой момент частицы
$j$	— «внутреннее» квантовое число
$\mu_B$	— магнетон Бора
$\mu_l$	— орбитальный магнитный момент частицы
$m_l$	— орбитальное магнитное квантовое число
$\mu_s$	— спиновый магнитный момент частицы
$m_s$	— спиновое магнитное квантовое число
$\mu_j$	— полный магнитный момент частицы
$m_j$	— квантовое число, определяющее проекцию полного углового момента частицы
$\mathbf{L}$	— орбитальный угловой момент атома, системы частиц
$L$	— орбитальное квантовое число атома, системы частиц
$\mathbf{S}$	— спиновый угловой момент атома
$S$	— спиновое квантовое число атома
$\mathbf{J}$	— полный угловой момент атома
$J$	— квантовое число, соответствующее полному угловому моменту
$\mu_L$	— орбитальная составляющая магнитного момента атома
$m_L$	— орбитальное магнитное квантовое число атома
$\mu_S$	— спиновая составляющая магнитного момента атома
$m_S$	— спиновое магнитное квантовое число атома
$\mu_J$	— полный магнитный момент атома
$m_J$	— квантовое число, определяющее проекцию полного момента атома на направление $\mathbf{J}$
$g$	— множитель (фактор) Ланде

# ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Адроны, 428  
Акцепторы, 330  
Альфа-распад, 68  
Альфа-частицы, 372, 375  
Амплитуда вероятности, 25, 42, 44  
Антинейтрино, 423  
Антинейтрон, 424  
Антипротон, 424  
Античастицы, 424  
Аромат (кварков), 426, 430  
Асимптотическая свобода, 441  
Атом водорода, 75  
— — пространственное распределение  
электронной плотности, 88  
— — спектр, 84  
— — тонкая структура, 129  
— гелия, 14, 160  
Атомы водородоподобные, 75, 129  
— сложные, 149  
— щелочных элементов, 162  
— электронных оболочек структура,  
147
- Бальмера обобщенная формула, 85  
Барионное число, 422, 424  
Барионы, 422  
Барн, 392  
Барнета эффект, 126  
Бета-частицы, 372, 378  
Бетатронные колебания, 465  
Бибермана, Сушкина, Фабриканта  
опыты, 24  
Блоковая масса, 448  
Блоха функции, 310  
Бозе-конденсат, 216  
Бозе – Эйнштейна распределение, 214  
Бозоны, 205
- Больцмана постоянная, 204, 213  
— распределение, 204, 215  
Бора постулаты, 132  
— теория строения атома водорода, 132  
Брава решетки, 281  
Брейта–Вигнера формула, 400  
Бриллюэна зоны, 287, 291  
Брэгга – Вульфа формула, 20
- W-бозоны, 446  
Вайцеккера формула, 385  
Векторная модель сложения моментов,  
127  
Векторные бозоны, 446  
Великое объединение, 445  
Взаимодействие слабое, 378, 425  
— электрослабое, 444  
— ядерное, 360  
Вильсона камера, 390  
Вина закон смещения, 229, 230  
Виртуальные частицы, 441, 442  
Влияние опыта на состояние микроча-  
стиц, 27  
Волновая функция (пси-функция), 24,  
58  
— — антисимметричная, 143  
— — симметричная, 143  
— — условие нормировки, 35  
Волновое число, 20, 24  
Волновой вектор, 24  
— пакет, 29  
Время жизни возбужденных атомов, 94  
Вынужденные (индуцированные) пере-  
ходы, 236  
Вырождение уровней, 111, 112, 242
- Гамильтониан, 49

- Гейгера–Нэттола закон, 376, 378  
 Гейзенберга соотношения неопределенностей, 33, 37  
 Гетерополярная (ионная) связь, 263  
 Гиромагнитное отношение, 127  
 Глюоны, 427  
 Гомеополярная (ковалентная) связь, 264  
 Гравитоны, 427
- Давление излучения, 232  
 Де Бройля волна, 24  
 — — гипотеза, 19  
 — — скорость групповая, 31  
 — — соотношение, 20  
 — — фазовая, 28  
 Дебая температура, 298  
 Девиссона и Джермера опыты, 18  
 Дейтрона теория, 361  
 Дисперсии закон, 294, 317  
 Дифракция частиц, 22  
 Диффузии длина, 347  
 Доноры, 330  
 Дрейфовые трубки, 463  
 Дуанты, 466  
 Дырки, 172, 331
- $\eta$ -мезоны, 438
- Жесткая фокусировка, 470
- $Z^0$ -бозон, 446  
 Запаздывающие нейтроны, 411, 412, 417  
 Зеемана эффект простой, 187, 190, 192  
 — — сложный, 187  
 Зеemanовских компонент поляризация, 193  
 Зоны проводимости, 307  
 — энергетических уровней запрещенные, 304  
 — — разрешенные, 304
- Излучение индуцированное (вынужденное), 236  
 — спонтанное, 236
- Изобары, 365  
 Изоляторы, 305  
 Изомеры, 368, 383  
 Изотопический сдвиг, 86  
 Изотопы, 352  
 Изохронные циклотроны, 468  
 Интегральная излучательная способность, 220  
 Интервал, 432, 433  
 Ионы водородоподобные, 75, 87  
 Истинно нейтральные частицы, 425
- $K$ -мезоны, 430, 436  
 Квадрупольные линзы, 469  
 Квазиимпульс, 324  
 Квазичастицы, 348  
 Квант, 12  
 — действия (постоянная Планка), 13  
 Квантование энергии, 59, 62  
 Квантовое число электрона внутреннее, 126  
 — — главное, 111  
 — — магнитное, 110  
 — — орбитальное, 110  
 — — спиновое, 123  
 Квантовые генераторы и усилителя, 243  
 Квантовые числа атома, 140  
 Квантовый коэффициент усиления, 244  
 Кварки, 426, 430  
 Кирхгофа закон, 218  
 Ковалентная (гомеополярная) связь, 264  
 Коллайдеры, 435  
 Комбинационное рассеяние света, 110  
 Комптона эффект, 14  
 Комптоновская длина волны электрона, 18  
 Конституентная масса, 448  
 Контактная разность потенциалов, 340  
 Конфайнмент, 427  
 Коэффициент размножения нейтронов, 416  
 Кристаллов симметрия, 278  
 $\Xi$ -барионы, 441

- $\Lambda^0$ -барион, 438  
 LEP, 435  
 LHC, 471  
 Лазерного излучения структура, 258  
 Лазеры (оптические квантовые генераторы), 248, 250  
 — гелий-неоновые, 254  
 — на  $\text{CO}_2$ , 255  
 — на неодимовом стекле, 253  
 — на рубине, 250  
 Ламберта закон, 227  
 Ланде фактор (множитель), 127  
 Лептонное число, 424  
 Лептоны, 422  
 Линейные ускорители, 463  
  
 Мёссбауэра эффект, 408  
 Магнетон Бора, 117, 482  
 — ядерный, 117, 482  
 Магнитный момент атома, 188  
 — — нейтрона, 202  
 — — орбитальный, 116  
 — — полный, 126  
 — — протона, 202  
 — — спиновый, 124  
 — — электрона аномальный, 126  
 Магнитомеханические явления, 125  
 Максвелла распределение, 204  
 Масса приведенная, 86  
 — эффективная, 321  
 Мезоатомы, 90  
 Менделеева периодическая система элементов, 145  
 Металлическая связь, 276, 277  
 Метастабильные состояния атомов, 161, 254  
 Модель ядра капельная, 363  
 — обобщенная, 370  
 — оболочечная, 366  
 Мозли закон, 168  
 Молекула водорода, 258  
 Молекулярные кристаллы, 275  
 — спектры, 104  
 Молекулярных пучков метод, 198  
 Момент угловой орбитальный, 110  
 — — полный, 126  
 — — правила сложения, 112  
 — — проекция, 97, 98  
 — — угловой, момент импульса, 97  
 — — атома, 140  
 — — квадрат, 100, 102  
  
 Населенность уровней, 240  
 — — инверсная, 245  
 Натрия дублет, 164  
 Нейтрино, 373, 379, 421, 423  
 — мюонное, 429, 436  
 — электронное, 427  
 Неопределенности соотношение для координаты и импульса, 33  
 — — энергии и времени, 94  
 Неопределенности принцип, 31  
 Нормировки условия, 35  
 Нуклоны, 351, 421, 422  
  
 $\Omega^-$ -барион, 438  
 Обменная энергия, 273  
 Обменное взаимодействие, 268  
 Обменные силы, 266  
 Объемная спектральная плотность излучения, 222  
 Оже эффект, 172  
 Оператор импульса, 46, 47  
 — кинетической энергии, 47  
 — полной энергии (гамильтониан), 49  
 — проекции момента импульса, 49, 50  
 — физической величины, 46, 47  
 — функции координат, 43  
 Ортоголий, 160, 161  
 Осциллятор гармонический, 69  
 Отбора правила при излучении атомов, 154  
  
 Парагелий, 161  
 Паули принцип, 142  
 Пашена и Бака эффект, 193  
 Переброса процессы, 293  
 Периодичность кристаллов, 287  
 Пи-мезоны, 426  
 Планка постоянная, 13  
 — формула, 222  
 Позитрон, 421, 424

- Позитроний, 87  
 Позитроны, 422  
 Поколение второе, 429, 436  
 — первое, 427  
 — третье, 439  
 Поколение первое, 431  
 Полупроводники, 328  
 Поляризация света, 99, 100  
 Пороговая энергия деления, 410  
 Потенциал возбуждения, 81, 82  
 — ионизационный, 83  
 — резонансный, 82  
 Потенциальная яма, 56  
 Потенциальный барьер, 67  
 Псевдовекторы, 452  
 $\psi$ -мезоны, 439  
  
 Раби метод, 198  
 Равновесное излучение, 218  
 Радиусы боровских орбит, 89, 90  
 Расщепление атомных энергетических уровней в магнитных полях, 188  
 Резонанс магнитный, 191  
 — — ядерный, 198  
 — циклотронный, 319  
 Резонанс электронный парамагнитный, 197, 200  
 Рентгеновские лучи, 166  
 — — ослабление, 175  
 — — поглощение, 175, 178  
 — — получение, 170  
 — — рассеяние когерентное, 177  
 — — рассеяние комптоновское, 14  
 — спектры тормозные (сплошные), 171  
 — — характеристические (линейчатые), 166  
 Ридберга постоянная, 85, 86  
 — энергия, 78, 79  
 Рэлея – Джинса формула, 231  
  
 $\Sigma$ -барион, 438  
 Сверхтонкая структура атомных спектров, 132  
 Сверхтонкая структура оптических спектров, 355  
 Связь атомов в молекулах, 263  
  
 — — твердых телах, 274  
 — электронов в атомах « $j - j$ -связь», 141  
 — — нормальная (Рассела – Саундерса), 140  
 Серии в спектре водорода (Лаймана, Бальмера и др.), 84, 85  
 Сильное взаимодействие, 426  
 Симметрии, 440, 450  
 Симметрия  $C$  (зарядовая), 450  
 —  $P$  (зеркальная), 450  
 —  $T$  (по времени), 450  
 Синхротронное излучение, 471  
 Синхротронные колебания, 463, 465  
 Синхротроны, 469, 471  
 Слабое взаимодействие, 422  
 Собственное время, 433  
 Собственные значения физической величины, 51  
 — функции оператора, 53  
 Солнечный цикл, 425  
 Соответствия принцип, 65  
 Состояния  $s, p, d, f, g, \dots$ , 110  
 Спектр водорода, 84  
 — гелия, 159  
 — лития, 162  
 Спектральная излучательная способность, 220  
 — плотность энергетической светимости, 220  
 Спектральный коэффициент поглощения, 221  
 Спектры молекул, 104  
 Спин фонона, 294  
 — фотона 129,, 155  
 — электрона, 121  
 Спин-орбитальное взаимодействие, 129, 139  
 Средние значения физических величин, 41, 50  
 Стандартная теория, 421  
 Статистика Бозе – Эйнштейна, 205, 209, 214  
 — Ферми-Дирака, 205, 209, 214  
 — световых квантов, 213  
 Стационарные состояния атомов, 54



- Стефана и Больцмана постоянная, 228  
 — — формула, 226  
 Стирлинга формула, 212
- Тау-нейтрино, 447  
 Тепловое излучение, 218  
 Ток насыщения, 346  
 Тонкая структура постоянная, 79  
 — — уровней в атоме водорода, 129  
 Тонкая структура уровней энергетических, 139, 159, 164  
 Транзисторы, 347  
 Туннельный эффект, 67
- Уровни энергии, 59  
 — — водородоподобных атомов, 75  
 — — вращательные, 69  
 — — вырождение, 111, 112  
 — — колебательные 64,, 73
- Фазовый объем, 207  
 Фазотроны, 469  
 Фейнмана диаграммы, 441  
 Ферми поверхность, 324  
 — энергия, 323, 334  
 Ферми – Дирака распределение, 214  
 Фермионы, 205  
 Фоновое радиоизлучение, 458  
 Фононы, 291, 294  
 Фотоны, 14, 99, 100  
 Фотоэффект, 10, 177, 178  
 — «красная граница», 11, 13  
 — работа выхода, 13  
 Франка и Герца опыты, 81  
 Фундаментальные частицы, 427, 436  
 Фурье интеграл, 35, 36  
 — ряд, 43
- $\chi$ -мезоны, 439  
 Хаббла постоянная, 457  
 Хиггс-бозоны, 448
- Холла эффект, 334  
 Хромодинамика, 421  
 Хунда правила, 150
- Цвет (кварков), 426, 430  
 Цефеиды, 457  
 Циклотронный резонанс, 319  
 Циклотроны, 465
- Чармоний, 438  
 Черное тело (абсолютно черное тело), 219  
 Четыре-векторы, 433
- Ширина энергетических уровней, 92  
 Шредингера уравнение, 54  
 Штерна и Герлаха опыты, 120, 121, 124
- Эйнштейна коэффициенты, 242  
 — уравнение для фотоэффекта, 13  
 Эйнштейна и де Гааза опыты, 125  
 Экранирования постоянная, 169  
 Электронный газ, 321  
 Электронный парамагнитный резонанс, 197  
 Электронных оболочек заполнение, 145  
 Электропроводность полупроводников, 337  
 — — собственная, 339  
 — проводников, 307, 317, 321  
 Электропроводность изоляторов, 308  
 Энергетическая светимость, 219, 220  
 Энергия покоя, 434  
 Энергия активации, 408  
 Эффективная масса, 321  
 Эффективное сечение, 176
- Ядерный заряд, 415  
 — магнетон, 351  
 — реактор, 417

**Лев Лазаревич Гольдин,  
Галина Ивановна Новикова**

## КВАНТОВАЯ ФИЗИКА. ВВОДНЫЙ КУРС

*Дизайнер М. В. Ботя  
Технический редактор А. В. Широбоков  
Корректор М. А. Ложкина*

---

Подписано в печать 19.06.02. Формат  $60 \times 84^{1/16}$ .  
Печать офсетная. Усл. печ. л. 28,83. Уч. изд. л. 28,12.  
Гарнитура Антиква. Бумага газетная.  
Тираж 1000 экз. Заказ №

АНО «Институт компьютерных исследований»  
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.  
Лицензия на издательскую деятельность ЛУ №084 от 03.04.00.  
<http://rzd.ru> E-mail: [borisov@rzd.ru](mailto:borisov@rzd.ru)

Отпечатано в полном соответствии с качеством  
предоставленных диапозитивов в ГИПП «Вятка».  
610033, г. Киров, ул. Московская, 122.

---