
Р. А. БЕДАНОКОВ

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА И ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Учебник



САНКТ-ПЕТЕРБУРГ
МОСКВА • КРАСНОДАР
2020

УДК 539.1

ББК 22.314я73

Б 38 Беданок Р. А. Квантовая физика и элементы квантовой механики : учебник / Р. А. Беданок. — Санкт-Петербург : Лань, 2020. — 116 с. : ил. — (Учебники для вузов. Специальная литература). — Текст : непосредственный.

ISBN 978-5-8114-4048-1

Издание содержит теоретические разделы курса «Квантовая физика и квантовая механика», включающие основы теории теплового излучения, атомного строения вещества, волновой теории, операторного метода квантовой механики, физики атомов и молекул. В каждой главе представлены примеры расчетов, приводятся задачи для самостоятельного решения и контрольные вопросы, охватывающие все дидактические единицы теоретического курса.

Учебник предназначен для студентов вузов, обучающихся по направлениям подготовки, входящим в УГСН: «Химия», «Химические технологии», может быть интересен магистрам, аспирантам и преподавателям вузов.

УДК 539.1

ББК 22.314я73

Рецензенты:

А. Г. КРИВЕНКО — доктор физико-математических наук, зав. лабораторией лазерной электрохимии Института проблем химической физики РАН;

В. Р. ФЛИД — доктор химических наук, профессор, зав. кафедрой физической химии МИРЭА — Российского технологического университета.

Обложка
П. И. ПОЛЯКОВА

© Издательство «Лань», 2020

© Р. А. Беданок, 2020

© Издательство «Лань»,

художественное оформление, 2020

ВВЕДЕНИЕ

Квантовая физика — раздел теоретической физики, в котором изучаются квантово-механические и квантово-полевые системы и законы их движения. Квантовая физика — это физика микромира. Она смогла объяснить те явления, происходящие с микрочастицами, которые была не в состоянии объяснить классическая физика.

Квантово-механический метод описания мира является наиболее полным и точным из существующих. Квантовая теория исходит из того, что энергии, возникающие в квантовых полях, кратны определенной фундаментальной энергии — энергии кванта $h\nu$. С точки зрения квантовой механики предсказание результата любого эксперимента носит вероятностный характер, а математическое описание квантовой системы представляет собой волновую функцию, квадрат которой определяет вероятность нахождения квантового объекта в той или иной области. Квантовая теория признает существование систем, в которых измерения, сделанные в разном удаленных местах, могут коррелировать так, чтобы исход одного определял другое, и результат эксперимента стал нелокальным.

Развитие нанотехнологий и современной техники подразумевает использование квантовой механики во многих направлениях. Формирование нового физического мировоззрения у студентов предполагает изучение квантовой механики как инженерной дисциплины.

Данный учебник написан в соответствии с программой курса «Квантовая физика и квантовая механика» направлений подготовки высшего образования 04.03.01 «Химия» и 18.03.01 «Химическая технология». Небольшой объем книги, состоящей из 9 глав, достигнут с помощью тщательного отбора и краткого изложения материала.

В первой части дано систематическое изложение основ и закономерностей теплового излучения, формулы Планка и фотоэффекта.

Вторая часть посвящена развитию идеи атомизма и моделям атома, в том числе квантовой теории Бора с описанием подтверждающих теорию экспериментов.

В третьей части изучается корпускулярно-волновая теория. Рассматривается гипотеза де Бройля, соотношение неопределенностей Гейзенберга, проводится разбор соответствующих задач.

Четвертая часть посвящена основному уравнению квантовой механики и изложению элементов теории операторов, а также операторов физических величин.

В пятой части рассмотрены случаи нахождения частицы в потенциальной яме, прохождения сквозь потенциальный барьер, линейный гармонический осциллятор.

Шестая часть посвящена решению уравнения Шредингера для атома водорода.

Седьмая часть посвящена поведению атома в магнитном поле.

В восьмой и девятой частях представлены элементы физики атомного ядра и элементарных частиц.

Изложение материала проведено без громоздких математических выкладок, обращается внимание на суть физических явлений, описывающих их понятий и законов, на взаимосвязь классической и квантовой физики.

Издание может быть полезно студентам высших учебных заведений, обучающимся по химическим и химико-технологическим специальностям, магистрам, аспирантам и преподавателям профильных дисциплин.

1. ТЕПЛОВОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

Тепловое излучение — это электромагнитное излучение, возникающее за счет его внутренней энергии и испускаемое веществом. Оно возникает при возбуждении частиц вещества в результате соударений в процессе теплового движения или ускоренного движения зарядов (колебания ионов кристаллической решетки, теплового движения свободных электронов и т. д.).

Тепловое излучение является самым распространенным видом излучения и происходит при любой температуре. Характерной чертой теплового излучения является сплошной спектр. Интенсивность излучения и спектральный состав зависят от температуры тела, поэтому не всегда тепловое излучение воспринимается глазом как свечение. Например, тела, нагретые до высокой температуры, значительную часть энергии испускают в видимом диапазоне. При невысоких температурах излучаются лишь длинные (инфракрасные) электромагнитные волны.

Если поместить нагретое тело внутри полости с идеально отражающей стенкой, из которой откачан воздух, то между телом и излучением внутри полости будет происходить обмен энергией. Если для каждой длины волны распределение энергии между телом и излучением остается неизменным, то такое состояние системы называется *равновесным*. Тепловое излучение является единственным видом излучения, которое может находиться в равновесии с излучающими телами, что позволяет применять законы термодинамики к рассматриваемым процессам.

1.1. ЗАКОНОМЕРНОСТИ ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Энергия, которую теряет тело вследствие теплового излучения, характеризуется следующими величинами.

Энергетическая светимость R выражает поток энергии с единицы поверхности по всем направлениям.

Излучение содержит волны разных частот ω . Для малой величины интервала частот $d\omega$:

$$dR_{\omega} = r_{\omega} d\omega, \quad (1)$$

где r_{ω} — испускательная способность тела, или спектральная плотность энергетической светимости.

Из опыта установлено, что энергетическая светимость и испускательная способность зависят от частоты и температуры, т. е. $r = r(\omega, T)$ и $R = R(\omega, T)$.

Зная испускательную способность, можно вычислить R :

$$R_T = \int_0^{\infty} r_{\omega} T d\omega. \quad (2)$$

При исследовании излучения можно применять вместо частоты ω длину волны λ , используя связь:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = 2\pi c / \omega. \quad (3)$$

Для участка спектра $d\omega$, соответствующего интервалу длин волн $d\lambda$, дифференцирование (3) дает:

$$d\omega = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda. \quad (4)$$

Знак « $-$ » в формуле (4) показывает, что с возрастанием одной из величин другая убывает.

По аналогии с (1) можно записать:

$$dR_{\lambda} = r_{\lambda} d\lambda. \quad (5)$$

Примерный вид зависимости спектральной плотности энергетической светимости от λ в интервале длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$ показан на рисунке 1.

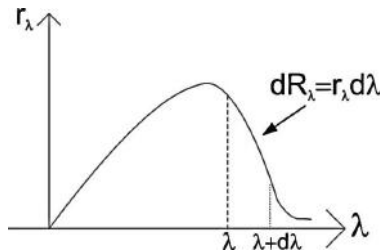


Рис. 1

Зависимость спектральной плотности энергетической светимости от длины волны излучения

Для одного и того же участка спектра с учетом (4) можно установить взаимосвязь:

$$r_{\omega}d\omega = r_{\lambda}d\lambda;$$

$$r_{\omega}d\omega = r_{\lambda} \frac{2\pi c}{\omega^2} d\omega = r_{\lambda} \frac{\lambda^2}{2\pi c} d\omega$$

или

$$r_{\omega} = r_{\lambda} \frac{\lambda^2}{2\pi c}. \quad (6)$$

Если на поверхность площадки падает лучистый поток $d\Phi$, обусловленный электромагнитными волнами в интервале частот $d\omega$, то часть этого потока $d\Phi'$ поглощается:

$$a_{\omega T} = \frac{d\Phi'}{d\Phi}, \quad (7)$$

где $a_{\omega T}$ — поглощательная способность тела, которая есть функция частоты и температуры. Она является безразмерной величиной и не может быть больше единицы.

Если тело поглощает все падающее излучение ($a_{\omega T} = 1$), то *тело абсолютно черное*.

По своим поглощательным свойствам к абсолютно черному телу близки платиновая чернь, черный бархат, сажа.

Замкнутая полость с небольшим отверстием с зачерненными стенками является хорошей моделью абсолютно черного тела (рис. 2).



Рис. 2

Модель абсолютно черного тела

Экспериментально установленную связь между испускательной и поглощательной способностью описывает соотношение:

$$\left(\frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} \right)_1 = \left(\frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} \right)_2 = \dots, \quad (8)$$

где цифры 1, 2, ... подразумевают разные тела.

Количественную связь между излучением и поглощением установил Г. Р. Кирхгоф в 1859 г.:

отношение испускательной и поглощательной способностей не зависит от природы тела, оно является для всех одной и той же (универсальной) функцией частоты (длины волны) и температуры:

$$\frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} = f(\omega, T). \quad (9)$$

Некоторые следствия этого закона:

- если тело при данной температуре не поглощает какое-либо излучение, то оно его и не испускает;
- при одной и той же температуре черное тело излучает больше, чем любое другое тело;
- если для некоторого тела экспериментально определить зависимость $a = a(\omega, T)$, то можно рассчитать спектр его излучения.

Для абсолютно черного тела $a_{\omega T} = 1$, и

$$f(\omega, T) = r_{\omega T}, \quad (10)$$

т. е. универсальная функция Кирхгофа есть спектральная плотность энергетической светимости черного тела, хотя абсолютно черных тел в природе не существует.

Установлено, что энергетическая светимость абсолютно черного тела сильно возрастает с ростом температуры, а максимум испускательной способности сдвигается в область коротких длин волн.

В 1879 г. Й. Стефан, анализируя экспериментальные данные, установил, что энергетическая светимость R любого тела пропорциональна T^4 .

Л. Больцман уточнил выводы Стефана, исходя из термодинамических соображений. Им было теоретически получено, что энергетическая светимость абсолютно черного тела равна:

$$R = \int_0^{\infty} f(\omega, T) d\omega = \sigma T^4, \quad (11)$$

где T — абсолютная температура; σ — постоянная, численное значение которой $\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/м}^2 \cdot \text{град}^4$.

Соотношение (11) носит название *закона Стефана — Больцмана*.

Закон Стефана — Больцмана касается лишь зависимости энергетической светимости от абсолютной температуры и не дает ответа относительно спектрального состава излучения черного тела.

Первым исследователем, пытавшимся теоретически определить вид функции $f(\omega, T)$, был В. А. Михельсон (1887). Хотя полученные им результаты не вполне удовлетворяли опытным данным, тем не менее в истории этого вопроса они сыграли известную роль.

Позже, в 1893 г., В. Вин, применяя законы термодинамики к электромагнитному излучению, теоретически обосновал так называемый *второй закон черного излучения*:

частота, соответствующая максимальному значению испускательной способности абсолютно черного тела, прямо пропорциональна его термодинамической температуре.

С ростом T максимум $f(\omega, T)$ смещается в область больших частот. Поэтому и закон носит название *закона смещения Вина*.

График зависимости функции $f(\omega, T)$ от частоты ω для различных температур показан на рисунке 3.

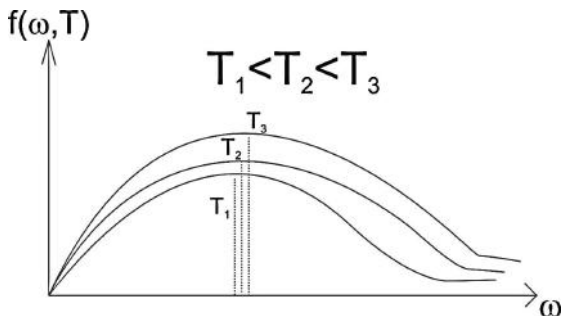


Рис. 3
Зависимость функции $f(\omega, T)$
от частоты ω для различных температур

Площадь под кривой есть энергетическая светимость абсолютно черного тела при данной температуре. Ее рост с ростом температуры соответствует закону Стефана — Больцмана.

Существует вторая формулировка закона Вина:

длина волны λ_{\max} , соответствующая максимальному значению испускательной способности абсолютно черного тела, обратно пропорциональна его термодинамической температуре:

$$T\lambda_{\max} = b. \quad (12)$$

Значение константы b установлено из эксперимента и равно $b = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$.

Таким образом, с ростом температуры излучение смещается в область коротких длин волн.

Закон смещения Вина объясняет, почему при понижении температуры нагретых тел в их спектре все сильнее преобладает длинноволновое излучение (например, переход белого каления в красное при остывании металла).

Используя законы Стефана — Больцмана и Вина, можно определить температуры тел по излучению этих тел. Например, с помощью этого метода можно определить температуру поверхности Солнца (~ 6000 К), температуру в эпицентре взрыва ($\sim 10^6$ К). Этот метод называется *пирометрией*.

Дж. С. Рэлей и Дж. Х. Джинс для определения $f(\omega, T)$ использовали теорему классической статистики о равномерном распределении энергии по степеням свободы, предположив, что на каждое электромагнитное колебание приходится энергия, равная двум половинкам kT — одна половинка на электрическую, другая — на магнитную энергию волны (k — постоянная Больцмана).

Рассматривая равновесное излучение внутри полости с плотностью $u = u(T)$, его спектральное распределение энергии можно охарактеризовать функцией $u(\omega, T)$ так, что часть плотности энергии в интервале частот $d\omega$ равна:

$$du_\omega = u(\omega, T)d\omega.$$

Тогда

$$u(T) = \int_0^\infty u(\omega, T)d\omega. \quad (13)$$

Равновесная плотность энергии излучения $u(T)$ зависит только от температуры и не зависит от свойств стенок полости.

Рассматривая равновесное излучение в полости как систему стоячих волн, Рэлей и Джинс установили связь между $f(\omega, T)$ и $u(\omega, T)$, а именно:

$$f(\omega, T) = \frac{c}{4}u(\omega, T), \quad (14)$$

где c — скорость света в вакууме.

Формула Рэля — Джинса, полученная с использованием методов статистической физики, имеет вид:

$$f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT. \quad (15)$$

Она согласуется с экспериментом в области больших длин волн (малых частот) и расходится с опытом в области коротких длин волн (больших частот).

Интегрирование (15) по ω в пределах от 0 до ∞ для энергетической светимости тела приводит к бесконечно большому значению, которое получило название *ультрафиолетовой катастрофы*. Данный физический термин описывает парадокс классической физики, состоящий в том, что полная мощность теплового излучения любого нагретого тела должна быть бесконечной. Название парадокс получил из-за того, что спектральная плотность энергии излучения должна была неограниченно расти по мере сокращения длины волны, что не соответствует действительности. Это несоответствие показало если не внутреннюю противоречивость классической физики, то, во всяком случае, резкое расхождение теории с экспериментом, что в конце XIX в. привело к возникновению трудностей в описании фотометрических характеристик тел. Проблема была решена при помощи квантовой теории излучения Макса Планка в 1900 г.

1.2. ФОРМУЛА ПЛАНКА

С классической точки зрения вывод формулы Рэлея — Джинса является безупречным. Поэтому расхождение этой формулы с опытом указывало на существование каких-то закономерностей, не совместимых с представлениями классической физики.

Исчерпывающее описание равновесного теплового излучения дал М. Планк, предположив, что электромагнитное излучение испускается в виде порций энергии (квантов), величина которых пропорциональна частоте излучения:

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad (16)$$

где $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-34}$ Дж·с — постоянная Планка.

Если излучение испускается квантами $\hbar\omega$, то энергия излучающей системы может принимать кратные этой величине значения:

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (17)$$

Планк рассматривал модель излучающей системы в виде совокупности линейных гармонических осцилляторов, учитывая, что распределение осцилляторов по возможным энергетическим состояниям

подчиняется закону распределения Больцмана. В данном случае это число возможных способов распределения энергии между осцилляторами, согласно (17), принимающих не любые непрерывные значения, а лишь дискретные значения, кратные $\hbar\omega$. Принципиальное отличие вывода Планка от выводов Рэлея и других в том, что «не может быть и речи о равномерном распределении энергии между осцилляторами».

Окончательный вид формулы Планка следующий:

$$f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2c^2} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}. \quad (18)$$

Теоретический вывод этой формулы М. Планк представил на заседании Немецкого физического общества 14 декабря 1900 г. Этот день стал датой рождения квантовой физики.

Выражение (18) согласуется с экспериментом во всем диапазоне частот от 0 до ∞ (рис. 4).

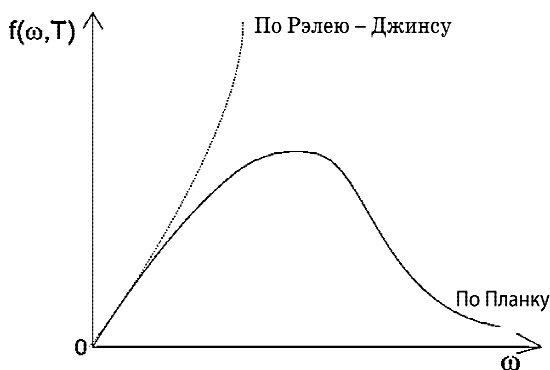


Рис. 4

Зависимость универсальной функции $f(\omega, T)$ от частоты

Отметим, что графически энергетическая светимость равна площади, ограниченной графиком функции $f(\omega, T)$ (рис. 4).

Для малых частот формула (18) переходит в формулу Рэлея — Джинса, а именно при $\hbar\omega \ll kT$, $\frac{\hbar\omega}{e^{kT}} = 1 + \frac{\hbar\omega}{kT} + \dots$, поэтому $\frac{\hbar\omega}{e^{kT}} - 1 \approx \frac{\hbar\omega}{kT}$, отсюда получается формула (15).

Проинтегрировав (18) по частоте от 0 до ∞ , можно получить формулу Стефана — Больцмана (11):

$$R = \int_0^{\infty} f(\omega, T) d\omega = \int_0^{\infty} \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{d\omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}.$$

Окончательно интегрирование дает:

$$R = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} T^4.$$

Вводя обозначение

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3},$$

получаем выражение (11) для энергетической светимости:

$$R = \sigma T^4.$$

Зная универсальные постоянные \hbar , k , c и используя формулу Планка, можно вычислить постоянные Стефана — Больцмана σ и Вина b . В свою очередь, экспериментальное определение значений σ и b дает возможность вычислить \hbar и k .

Таким образом, формула Планка согласуется с экспериментом во всем диапазоне длин волн излучения, содержит в себе частные законы теплового излучения, что дает основание полагать его полным решением основной задачи теплового излучения.

1.3. ФОТОЭФФЕКТ

Свет, воздействуя на вещество, передает ему энергию световой волны. Вещество, поглощая энергию, повышает свою температуру. Чаще всего только часть энергии переходит в тепло, другая часть испытывает превращение в механическую энергию электронов, вызывая те или иные изменения.

Одним из таких явлений воздействия света на вещество является *внешний фотоэлектрический эффект* — испускание электронов веществом под действием света. Исследование фотоэффекта сыграло важную роль в становлении квантовой теории.

Фотоэффект обнаружен Г. Герцем в 1887 г. как усиление процесса разряда при облучении искрового промежутка ультрафиолето-

вым излучением. Русским ученым А. Г. Столетовым в 1888–1890 гг. проведены первые фундаментальные исследования фотоэффекта.

Были установлены закономерности:

- наибольшее воздействие на фотоэффект оказывают ультрафиолетовые лучи;
- под действием света вещество теряет отрицательные заряды;
- при увеличении освещенности пластины сила возникающего тока увеличивается.

Дж. Дж. Томсон в 1898 г. измерил удельный заряд испускаемых под действием света частиц по отклонению в электрическом и магнитном полях. Эти измерения показали, что под действием света вырываются электроны. Вакуумная трубка, внутри которой находятся анод и катод, подключена к батарее, поддерживающей разность потенциалов (рис. 5).

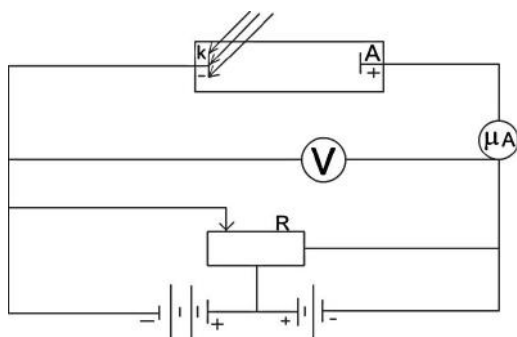


Рис. 5
Опыт по фотоэффекту

С помощью потенциометра R можно изменять не только значение, но и знак подаваемого на них напряжения. Ток, возникающий при освещении катода монохроматическим светом, измеряется миллиамперметром.

Свет, падающий на катод, высвобождает электроны с его поверхности, и под действием напряжения они попадают на анод, замыкая ток в цепи. В отсутствие падающего света ток в цепи фотоэлемента прекращается.

Вольт-амперная характеристика фотоэффекта — зависимость фототока $I_{\text{ф}}$, образуемого потоком электронов, испускаемых катодом под действием света, от напряжения U между электродами — представлена на рисунке 6.

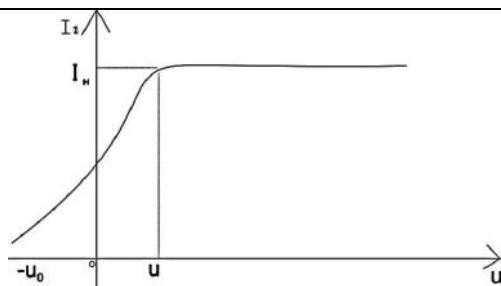


Рис. 6

Вольт-амперная характеристика фотоэффекта

Характер кривой показывает, что электроны вылетают из катода с различными скоростями. Максимальное значение тока I_{\max} — *фототок насыщения* — определяется таким значением U , при котором все электроны, испускаемые катодом, достигают анода.

При $U = 0$ фототок не исчезает, так как электроны, выбитые светом из катода, обладают некоторой начальной скоростью v и могут достигнуть анода без внешнего поля. Только при $U = U_0$ (*задерживающее напряжение*) фототок равен нулю. То есть даже электрон, вылетевший из катода с m_{\max} , не может преодолеть задерживающее поле:

$$\frac{mv_{\max}^2}{2} = eU_0, \quad (19)$$

где e и m — заряд и масса электрона соответственно.

Измеряя задерживающее напряжение U_0 , можно найти максимальную скорость и кинетическую энергию фотоэлектронов.

Различают и *внутренний фотоэффект*. Это перераспределение электронов по энергетическим состояниям в полупроводниках и диэлектриках под действием света. В результате внутреннего фотоэффекта увеличивается концентрация носителей тока в веществе. Возникает фотопроводимость — увеличение электропроводности полупроводника или диэлектрика при его освещении.

Разновидностью внутреннего фотоэффекта является *вентильный фотоэффект* — возникновение ЭДС (фото-ЭДС) при освещении контакта двух разных полупроводников (при отсутствии внешнего электрического поля). Фотоэффект играет важную роль в процессах прямого преобразования солнечной энергии в электрическую.

Экспериментально установлены *три закона фотоэффекта*:

1) количество испускаемых с катода электронов пропорционально интенсивности падающего света;

2) максимальная начальная скорость фотоэлектронов не зависит от интенсивности падающего света, а определяется его частотой;

3) красная граница фотоэффекта для каждого вещества — это минимальная частота падающего света, при которой возможен фотоэффект.

Красная граница зависит от химической природы вещества и состояния его поверхности.

Согласно волновой теории кинетическая энергия вырываемого из металла электрона зависит от интенсивности падающего света, и с увеличением последней электрону передавалась бы большая энергия. Это противоречит второму закону фотоэффекта. Далее, по этой же теории, энергия, которую получают электроны, пропорциональна интенсивности света. Тогда свет любой частоты при большой интенсивности должен вырывать электроны из катода. Другими словами, красной границы фотоэффекта не должно быть. Это противоречит третьему закону.

1.4. УРАВНЕНИЕ ЭЙНШТЕЙНА ДЛЯ ФОТОЭФФЕКТА. ФОТОНЫ

В 1905 г. А. Эйнштейн показал, что с позиций предложенной им квантовой теории могут быть объяснены фотоэффект и его закономерности. А именно, свет как электромагнитная волна с частотой ω может не только испускаться, но и распространяться в пространстве, и поглощаться веществом в виде отдельных квантов, получивших название *фотонов*. В вакууме они распространяются со скоростью $c = 300\,000$ км/с, энергия каждого кванта — фотона равна $\hbar\omega$. Эйнштейн фактически получил закон сохранения энергии для этого процесса:

$$\hbar\omega = A + mv_{\max}^2 / 2, \quad (20)$$

т. е. энергия падающего фотона расходуется на совершение электронном работы выхода A из металла и на сообщение вылетевшему фотоэлектрону кинетической энергии.

Массу фотона Эйнштейн определил из закона взаимосвязи массы и энергии:

$$m = \frac{\hbar\omega}{c^2}. \quad (21)$$

В покое фотон не существует, так как его масса покоя равна нулю. Эта частица отличается от таких элементарных частиц, как электрон, протон и нейтрон, у которых есть масса покоя.

Импульс фотона можно получить из теории относительности. Если в формуле для энергии и импульса

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + P^2 c^2}$$

положить m_0 фотона равной нулю, то

$$P = \frac{E}{c} = \frac{\hbar \omega}{c} = mc. \quad (22)$$

Таким образом, масса, импульс и энергия, так же как и для других частиц, есть характеристики фотона как частицы. Фактически, формулы (21), (22) связывают корпускулярные характеристики фотона с волновой характеристикой света — его частотой ω . В этом проявляется *корпускулярно-волновой дуализм*.

Свет, представляя собой поток фотонов, обладающих импульсом, должен оказывать давление на препятствия. Русский физик А. А. Лебедев экспериментально измерил световое давление и подтвердил существование импульса у фотонов:

$$P = \frac{E_e}{c} (1 + \rho), \quad (23)$$

где E_e — энергия всех фотонов; ρ — коэффициент отражения от поверхности.

1.5. ЭФФЕКТ КОМПТОНА

Эффектом Комптона называется упругое рассеяние коротковолнового электромагнитного излучения (рентгеновского и γ -излучений) на свободных (или слабосвязанных) электронах вещества, сопровождающееся увеличением длины волны. Этот факт не совпадает с волновой теорией, согласно которой длина волны излучения при рассеянии изменяться не может.

В рамках квантовой теории объяснение этого эффекта состоит в том, что излучение — это поток фотонов, обладающих импульсом, и поэтому данное явление можно рассматривать как результат упругого столкновения рентгеновских фотонов со свободными электронами вещества.

Фотон при столкновении передает электрону часть энергии и импульса в соответствии с законом сохранения энергии и импульса (рис. 7).

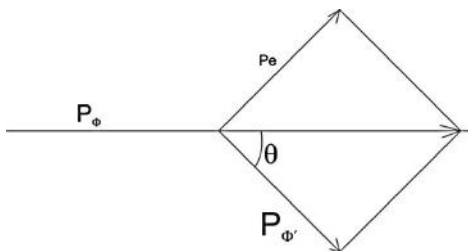


Рис. 7

Рассеяние фотона на покоящемся электроне

$$W_0 + \epsilon_{\Phi} = W + \epsilon'_{\Phi}; \quad (24)$$

$$P_{\Phi} = P_e + P'_{\Phi}, \quad (25)$$

где $W_0 = m_0 c^2$ — энергия покоя электрона; m_0 — масса покоя электрона; $W = \sqrt{P_e^2 c^2 + m_0^2 c^4}$ — энергия электрона после соударения; $\epsilon_{\Phi} = \hbar \omega$, $\epsilon_{\Phi'} = \hbar \omega'$ — энергия фотона до и после столкновения; $P_{\Phi} = \frac{\hbar \omega}{c}$ — импульс фотона до столкновения; P_e, P'_{Φ} — импульсы электрона и фотона после столкновения соответственно.

Подставляя в (24) и (25) соответствующие выражения величин и решая совместно полученные уравнения, получим:

$$\Delta \lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta) \quad (26)$$

или

$$\Delta \lambda = \lambda_c (1 - \cos \theta), \quad (27)$$

где $\lambda_c = \frac{h}{m_0 c}$ — комптоновская длина волны электрона.

Эффект Комптона наблюдается не только на электронах, но и на других заряженных частицах, например, протонах.

Необходимо еще раз указать на то, что эффект Комптона и фотоэффект обусловлены квантовым взаимодействием фотонов с электронами. В первом — фотоны рассеиваются, во втором — поглощаются. Рассеяние происходит при взаимодействии фотона со свободным электроном, фотоэффект — со связанным электроном.

ПРИМЕРЫ РАСЧЕТОВ

Пример. При освещении поверхности металла светом с частотой ν вырываемые электроны полностью задерживаются разностью потенциалов $U = 3$ В. Вычислить частоту ν и работу выхода A электрона из металла, если красная граница фотоэффекта $\nu_0 = 6 \cdot 10^{14}$ Гц.

Решение.

Учитывая красную границу фотоэффекта для данного металла, вычислим работу выхода электрона A по формуле

$$A = h\nu_0 = 4,136 \cdot 10^{-15} \cdot 6 \cdot 10^{14} = 2,48 \text{ эВ} \\ (h = 4,136 \cdot 10^{-15} \text{ эВ} \cdot \text{с}).$$

Используем формулу Эйнштейна

$$h\nu = A + \frac{mv^2}{2}.$$

Для задержания вылетающих электронов с кинетической энергией $\frac{mv^2}{2}$ необходимо приложить задерживающую разность потенциалов U , т. е.

$$\frac{mv^2}{2} = eU,$$

где e — заряд электрона.

Тогда

$$h\nu = A + eU,$$

откуда

$$\nu = \frac{A + eU}{h} = \frac{2,48 + 1,6 \cdot 10^{-19} + 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 3}{6,62 \cdot 10^{-34}} = 13,2 \cdot 10^{14} \text{ Гц},$$

так как $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл, $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с.

Ответ. $\nu = 13,2 \cdot 10^{14}$ Гц, $A = 2,48$ эВ.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАЧИ

1. Что называют тепловым излучением?
2. Что определяет энергетическую светимость тела?
3. Что является основным свойством абсолютно черного тела?

4. В какую область длин волн смещается максимум испускательной способности абсолютно черного тела при уменьшении термодинамической температуры?

5. Что показывает закон Стефана — Больцмана?

6. Что выражает обобщенная формула Планка?

7. Что такое фототок насыщения и как он изменится с уменьшением освещенности при данной частоте?

8. Определение красной границы фотоэффекта.

9. В чем различие в физических процессах, происходящих при фотоэффекте и при эффекте Комптона?

10. С 1 м^2 поверхности Земли в среднем ежеминутно излучается энергия в $5,4 \text{ кДж}$. Какой должна быть температура абсолютно черного тела, чтобы оно излучало такую же энергию?

11. Температура поверхности Солнца 5800 К . Определить область спектра, в которой лежит длина волны, соответствующая максимуму излучательной способности.

12. Из формулы Планка получить закон Стефана — Больцмана и определить постоянную b в законе смещения Вина.

13. Определить работу выхода электрона из железа, лития, калия, если красная граница фотоэффекта у этих металлов 262 , 517 , 620 нм соответственно. Работу выхода выразить в электрон-вольтах.

14. Вычислить, какова будет максимальная скорость электронов, покидающих поверхность молибдена, при освещении его лучами с длиной волны 200 нм .

15. Поверхность рубидия освещается ультрафиолетовыми лучами с длиной волны 100 нм . Какое задерживающее напряжение нужно приложить к фотоэлементу из этого вещества, чтобы электроны не смогли преодолеть задерживающее поле? Красная граница фотоэффекта рубидия равна 810 нм .

16. Определить изменение длины волны фотона в процессе рассеяния на релятивистском электроном под углом 60° , если известно, что энергия фотона до столкновения $0,51 \text{ МэВ}$, а электрон потерял всю кинетическую энергию.

17. Какую энергию приобретает комптоновский электрон отдачи в процессе рассеяния фотона под углами 30 и 180° , если первоначальная длина волны падающего фотона 5 пм ?

2. АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

2.1. РАЗВИТИЕ ИДЕИ АТОМИЗМА

Представления об атомном строении вещества уходят в глубокую древность. Эмпидокл (490–430 гг. до н. э.) утверждал, что Вселенная состоит из четырех элементов: огня, воздуха, воды и земли, и их существование вечно. Соединение этих элементов в разных количествах создает все окружающее. Демокрит (460–370 гг. до н. э.) ввел понятие об *атомах* — неделимых частицах. Их соединения создают физические тела.

К началу XVIII в. атомистическая теория приобрела большую популярность, чему способствовали работы французского химика А. Лавуазье (1743–1794), М. В. Ломоносова (1711–1765) и Д. Дальтона (1766–1844), доказывающие реальность существования атомов. Но внутреннее строение атома не обсуждалось, так как атомы по-прежнему считались неделимыми.

С открытием в 1869 г. Д. И. Менделеевым (1834–1907) Периодической системы элементов впервые на научной основе было сформулировано предположение о единой природе атомов.

Во второй половине XIX в. экспериментально было доказано, что *электрон* (открыт в 1891 г.) является частью любого вещества. Проведенные позже эксперименты и открытие самопроизвольного радиоактивного излучения А. Беккерелем (1852–1908) привели к тому, что в начале XX в. серьезно встал вопрос о строении атома.

Дж. Дж. Томсон (1903) на основе накопленных экспериментальных данных первым предложил модель атома, представляющего собой непрерывно заряженный положительным зарядом шар радиусом 10^{-10} м (рис. 8).

Внутри шара около своих положений равновесия колеблются электроны, причем их суммарный отрицательный заряд равен положительному заряду шара.

Через несколько лет экспериментально было установлено, что такое представление ошибочно.

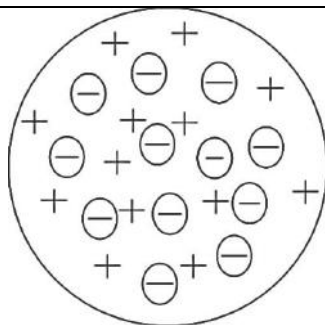


Рис. 8
Модель атома Томсона

При исследовании излучения от урановой руды, открытого Беккерелем в 1896 г., П. и М. Кюри, а также Э. Резерфордом, было установлено, что это излучение имеет сложный состав и разделяется на три вида: α -лучи, состоящие из дважды ионизированных атомов гелия, названных α -частицами; β -лучи — поток быстрых электронов (β -частиц); γ -лучи — очень короткие электромагнитные волны, впоследствии получившие название γ -излучения — фотоны очень жесткого рентгеновского излучения.

2.2. ЛИНЕЙЧАТЫЙ СПЕКТР ИЗЛУЧЕНИЯ АТОМА

Линейчатым спектром излучения является излучение отдельных атомов, не взаимодействующих друг с другом. Спектр получается состоящим из отдельных спектральных линий, или групп близко расположенных линий.

В 1885 г. швейцарский ученый И. Бальмер подобрал эмпирическую формулу, описывающую длины волн, которые соответствуют линиям видимой части спектра атома водорода:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, 5, \dots), \quad (28)$$

где $R = 1,10 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ — постоянная Ридберга.

Спектральные линии, соответствующие выражению (28) и отличающиеся значениями n , образуют группу или серию, получившую название *серии Бальмера*.

Следующие исследования (в начале XX в.) в спектре атома водорода установили наличие:

- в ультрафиолетовой части спектра:

— серии Лаймана

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 2, 3, 4, \dots); \quad (29)$$

- в инфракрасной части спектра:

— серии Пашена

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 4, 5, 6, \dots); \quad (30)$$

— серии Брэкета

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 5, 6, 7, \dots); \quad (31)$$

— серии Пфунда

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 6, 7, 8, \dots); \quad (32)$$

— серии Хэмфри

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{6^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 7, 8, 9, \dots). \quad (33)$$

Обобщенная формула Бальмера, описывающая все серии в спектре атома водорода:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, 5, \dots), \quad (34)$$

где $m = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ определяет серию; $n = m + 1$ определяет отдельные линии этой серии.

Экспериментально полученные результаты, выраженные в спектральных формулах, не имели теоретического обоснования, поскольку в рамках классической физики не представлялось возможным объяснить физический смысл найденных закономерностей.

2.3. ЯДЕРНАЯ (ПЛАНЕТАРНАЯ) МОДЕЛЬ РЕЗЕРФОРДА

Опыты английского физика Э. Резерфорда (1871–1937) по рассеянию α -частиц в веществе привели к созданию планетарной (ядерной) модели атома (рис. 9).

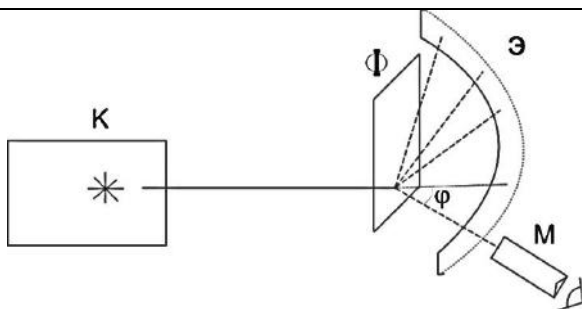


Рис. 9

Схема опыта Резерфорда по рассеянию α -частиц:
 К — свинцовый контейнер с радиоактивным веществом;
 Ф — золотая фольга; М — микроскоп; Э — экран.

α -частицы из свинцового контейнера К с радиоактивным веществом, проходя через золотую фольгу Ф, рассеиваются и попадают на экран Э. Экран, покрытый слоем кристаллов сульфида цинка, светится под ударами быстрых заряженных частиц. Это явление можно наблюдать с помощью микроскопа М.

Исследования прохождения α -частиц в веществе через золотую фольгу толщиной 1 мкм показали, что основная часть частиц отклоняется от первоначального направления на величины ϕ больше 30° после прохождения фольги. Редкие частицы отклонялись на углы, близкие к 180° . Этот результат привел к противоречию с моделью распределения заряда в атоме Томсона, согласно которой положительный заряд распределен по всему объему атома. При таком распределении положительный заряд не может создать сильное электрическое поле, способное отбросить α -частицы назад. Для такой модели электрическое поле однородного заряженного шара максимально на его поверхности и убывает до нуля по мере приближения к центру шара.

Так как α -частицы возникают при радиоактивных превращениях, имеют положительный заряд $|2e|$ и массу, в 7300 раз превышающую массу электрона, то последние не могут существенно изменить движение столь тяжелых и быстрых частиц. Резерфорд делает вывод, что отклонение α -частиц на большие углы от первоначального направления движения является результатом их взаимодействия с положительным зарядом большой массы. Значительные отклонения (180°) испытывают лишь некоторые α -частицы, следовательно положительный заряд сосредоточен в области, значительно меньшей, чем сам атом (рис. 10).

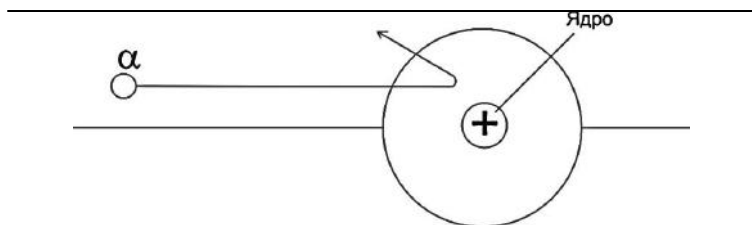


Рис. 10

Рассеяние α -частиц в атоме Резерфорда

В 1911 г. на основании своих исследований Резерфорд предложил ядерную модель атома: в центре атома находится положительно заряженное ядро, имеющее заряд z_e (z — порядковый номер элемента в периодической системе Д. И. Менделеева, e — элементарный заряд). Размер ядра порядка 10^{-14} м. Практически вся масса атома сосредоточена в ядре. Размер атома в среднем составляет 10^{-10} м. Электроны образуют электронную оболочку атома, двигаясь по замкнутым орбитам вокруг ядра. Заряд ядра равен суммарному заряду электронов, и атом в целом электронейтрален.

Созданная Резерфордом модель атома напоминала строение солнечной системы, где вокруг Солнца движутся планеты, благодаря чему получила название «планетарной» модели.

Но полученные Резерфордом результаты не только не объяснялись с позиций классической физики, но и входили в противоречие с законами классической механики и электродинамики.

Для электрона, движущегося по круговой орбите вокруг ядра радиуса r , второй закон Ньютона будет иметь вид:

$$\frac{z_e e}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}, \quad (35)$$

где m_e и v — масса и скорость электрона; ϵ_0 — электрическая постоянная.

Так как в уравнении (35) два неизвестных (r и v), то может существовать бесчисленное множество значений радиуса r и соответствующих ему значений скорости v (а значит и энергий), удовлетворяющих последнему уравнению. Возможность непрерывного изменения этих величин приводит к тому, что при излучении может испускаться любая, а не определенная порция энергии. То есть спектры излучения атомов должны быть сплошными. Однако эксперимент показывает, что спектр атомов линейчатый.

При $r = 10^{-10}$ м, $v = 10^6$ м/с ускорение электрона составит $\frac{v^2}{r} = 10^{22}$ м/с. Согласно классической электродинамике, с таким ускоренным движением электрон должен терять энергию и вскоре упасть на ядро, чего не происходит.

Таким образом, атом Резерфорда оказывается неустойчивой системой, что противоречит действительности. Атом очень устойчив и излучает линейчатый спектр.

2.4. БОРОВСКАЯ ТЕОРИЯ

Датский физик Нильс Бор в 1913 г. выдвинул качественно новую — квантовую теорию атома.

В основу нового подхода Н. Бор положил два постулата, связавшие в единое целое закономерности линейчатых спектров, — ядерную модель Резерфорда и квантовый характер излучения и поглощения света.

ПОСТУЛАТЫ БОРА

1. *Первый постулат (постулат стационарных состояний)*: в атоме существуют стационарные состояния, в которых он не излучает. Этим стационарным состояниям соответствуют стационарные орбиты, по которым движутся электроны, не излучая. Электроны на этих орбитах имеют квантовые значения момента импульса, кратные постоянной Планка:

$$m_e v_n r_n = n \hbar, \quad (36)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ — целое число (*правило квантования*); m_e — масса электрона; r — радиус орбиты; $\hbar = h/2\pi$.

2. *Второй постулат (правило частот)*: фотон излучается или поглощается атомом при переходе с одной стационарной орбиты на другую:

$$\hbar \omega = E_n - E_m, \quad (37)$$

где E_n и E_m — энергии стационарных состояний атома до и после излучения (поглощения). При $E_m < E_n$ происходит излучение фотона, атом переходит в состояние с меньшей энергией, т. е. электрон в атоме, излучив энергию, перешел с более дальней орбиты на более близкую к ядру орбиту. При $E_m > E_n$ происходит процесс поглощения фотона, электрон переходит на более высокую стационарную орбиту.

2.5. БОРОВСКАЯ ТЕОРИЯ ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА

Использование теории Бора позволяет рассчитать спектр атома водорода и водородоподобных атомов (He^+ , Li^{2+}) и теоретически вычислить постоянную Ридберга.

Пусть электрон движется в поле атомного ядра с зарядом z_e . Для атома водорода $z_e = 1$.

Закон Кулона для этого случая можно представить в виде:

$$F_K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}. \quad (38)$$

Уравнение движения:

$$m_e \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}. \quad (39)$$

Решая уравнение (39) с учетом правила квантования (36) и исключая v , получим для радиуса n -й стационарной орбиты:

$$r_n = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e Z e^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (40)$$

Для $z_e = 1$ радиус первой боровской орбиты ($n = 1$):

$$r_1 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e e^2} = 0,528 \cdot 10^{-10} \text{ м},$$

что согласуется с кинетической теорией газов.

Энергия электрона складывается из его кинетической энергии и потенциальной энергии его взаимодействия с ядром:

$$E = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (41)$$

так как $\frac{m_e v^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$.

Используя выражение (40), для дозволённых дискретных значений энергии получим:

$$E = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad (42)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ — номер орбиты.

В формуле (42) знак « \rightarrow » означает связанное состояние электрона. n носит название *главного квантового числа* и его набор значений

есть последовательность энергетических уровней, определяющих энергетическое состояние атома.

Значение $n = 1$ отвечает основному состоянию, $n > 1$ — возбужденному состоянию атома.

При увеличении n энергия атома водорода возрастает, и энергетические уровни сдвигаются к границе, соответствующей $n = \infty$. В этом случае $E_\infty = 0$ соответствует ионизации атома (отрыву электрона от него).

При переходе атома в состояние с меньшей энергией

$$\hbar\nu = E_n - E_m = -\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \frac{m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2}; \quad (43)$$

$$\nu = \frac{1}{\lambda} = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad (44)$$

где $R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2}$ — постоянная Ридберга.

Выражение (44) есть *обобщенная формула Бальмера*.

При движении электрона по круговой орбите радиусом r со скоростью v (рис. 11) возникает круговой ток.

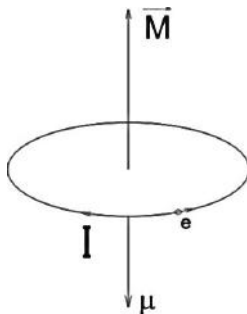


Рис. 11

Возникновение тока при движении электрона по круговой орбите

Поскольку заряд электрона отрицателен, направление движения электрона противоположно направлению тока. Магнитный момент такого тока (в гауссовой системе) определяется формулой:

$$\mu = \frac{IS}{c} = \frac{evr}{2c},$$

где c — скорость света.

Если учесть, что момент импульса электрона \vec{L} равен

$$\vec{L} = [\vec{r}, m\vec{v}],$$

то

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2mc} \vec{L},$$

где знак « $-$ » указывает, что направление обоих моментов взаимно противоположно. Вектор \vec{L} называют *орбитальным моментом электрона*.

Отношение магнитного момента частицы к ее механическому моменту называют *гиромагнитным отношением*.

Для электрона

$$\frac{\mu}{L} = \frac{e}{2mc}.$$

Воспользовавшись правилом квантования, получаем:

$$\mu = \frac{e\hbar}{2m} n = \mu_B n,$$

где $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ А} \cdot \text{м}^2$ — магнетон Бора.

Теория Бора нашла свое подтверждение в 1913 г. в экспериментах Франка и Герца, принципиальная схема которых приведена на рисунке 12.

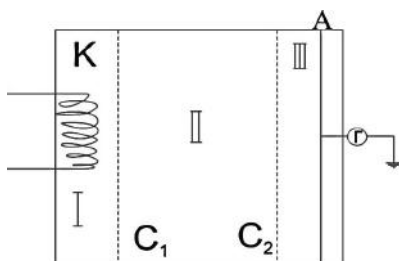


Рис. 12

Схема опыта Франка — Герца

Внутри электровакуумной трубки, заполненной парами ртути, находятся две сетки C_1 и C_2 , а также катод K и анод A . К катоду K и сетке C_1 прикладывается разность потенциалов, ускоряющая электроны. К сетке C_2 и аноду A прикладывается замедляющая разность потенциалов.

После разгона ускоряющим полем электрон соударяется с атомами ртути, и, если его остаточной энергии хватит для преодоления замедляющего потенциала между анодом и сеткой C_2 , то он попадет на анод.

Увеличение ускоряющего потенциала до 4,86 В приводит к монотонному возрастанию анодного тока, а затем к его резкому уменьшению и последующему новому увеличению. Электроны с энергией $E < 4,9$ эВ производят упругие соударения с атомами ртути, и внутренняя энергия атомов не меняется. Резкие спады тока при $E = 4,9$ В и кратных данной величине значениях объясняются тем, что в этом случае соударения электронов являются неупругими, т. е. энергия электронов достаточна для перевода атома Hg в возбужденное состояние, и в такие неупругие столкновения электрон может вступать несколько раз при значениях E , кратных 4,9 В.

Опыт Франка — Герца подтвердил, что атом поглощает энергию порциями, причем минимальная порция (квант), поглощаемая атомом ртути, равна 4,9 эВ. Возбужденный атом, излучая эту порцию энергии, возвращается в основное состояние:

$$E_1 - E_0 = \frac{hc}{\lambda} = 4,9 \text{ эВ},$$

где E_0 и E_1 — энергии основного и возбужденного состояний соответственно.

Несмотря на это, теория Бора была внутренне противоречива. С ее помощью невозможно было создать теорию атома гелия, содержащего ядро и два электрона. Практика показала, что теория атома Бора явилась переходным этапом на пути создания последовательной теории атомных и ядерных явлений.

ПРИМЕРЫ РАСЧЕТОВ

Пример. Вывести формулу скорости движения электрона по круговой орбите для атома Резерфорда — Бора. Вычислить скорость электрона на первой орбите.

Решение.

Используя второй закон Ньютона для движения по круговой орбите

$$F = \frac{mv_k^2}{r_k},$$

где m — масса электрона; v_k — его скорость на k -й орбите; r_k — радиус этой орбиты, $k = 1, 2, 3, \dots$ — целое положительное число (главное квантовое число), и выражение для значения F :

$$F = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_k^2},$$

получим:

$$\frac{mv_k^2}{r_k} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_k^2}.$$

Выразим из данного выражения v_k^2 :

$$v_k^2 = \frac{e^2}{4\pi m \epsilon_0 r_k}$$

или

$$v_k = \frac{e^2}{2k\epsilon_0\pi}.$$

При $k = 1$ получаем

$$v_1 = \frac{(1,6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} \cdot 3,14} = 2,19 \text{ мм/с.}$$

Ответ: $v_1 = 2,19 \text{ мм/с.}$

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАЧИ

1. Что такое линейчатый спектр атома?
2. Что описывает эмпирическая формула Бальмера?
3. Каковы достоинства и недостатки модели атома Резерфорда?
4. Каково значение постулатов Бора?
5. Что подтверждают опыты Франка и Герца?
6. Каковы недостатки боровской теории?
7. Определить скорости движения электрона на первых двух боровских орбитах в атоме водорода.
8. Вычислить силу кулоновского притяжения и напряженности электрического поля для первой и второй круговых орбит атома водорода.
9. Электрон в атоме водорода, излучая фотон с длиной волны $\lambda = 102,6 \text{ нм}$, переходит с n -й на m -ю орбиту ($m = 1$). Вычислить радиус n -й орбиты.

10. Определить наибольшую длину волны в серии Бальмера, если наибольшая длина волны спектральной водородной линии Лаймана 121,6 нм.

11. Электрон в атоме водорода переходит на более близкую к ядру орбиту, при этом энергия атома уменьшается на 1,892 эВ. Вычислить длину волны излучения.

12. Вычислить работу, которую нужно совершить, чтобы удалить электрон со второй орбиты за пределы притяжения его ядра.

3. КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ

3.1. ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ

Дальнейшие исследования привели к пониманию сложности физики микромира (электронов, протонов). Фотону, обладающему частотой и длиной волны, приписывали еще и корпускулярные характеристики (энергию, массу, импульс). То есть свет обладает свойствами волны и частицы одновременно.

Французский физик Л. де Бройль в 1923 г. выдвинул гипотезу об универсальности самого дуализма. Он предположил, что сами элементарные частицы наряду с энергией E и импульсом p (корпускулярные характеристики) обладают волновыми свойствами — частотой ν и длиной волны λ .

Выражения, связывающие количественно волновые и корпускулярные свойства частиц, имеют вид:

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda}. \quad (45)$$

Соотношения (45) справедливы для любой частицы, обладающей импульсом.

Но это было лишь гипотезой, так как экспериментального подтверждения существования волновых свойств частицы еще не было. Волновые свойства частиц должны были проявиться в таких явлениях, как дифракция, интерференция. Лишь в 1927 г. американские физики К. Дэвиссон и Л. Джермер обнаружили, что пучок электронов, рассеивающийся от естественной дифракционной решетки — кристалла никеля, — дает дифракционную картину (рис. 13).

Максимумы дифракционной картины соответствуют формуле Вульфа — Брэгга:

$$2d\sin\theta = n\lambda, \quad (46)$$

где d — постоянная дифракционной решетки; θ — угол скольжения (угол между направлением падающих лучей и поверхностью кристалла).

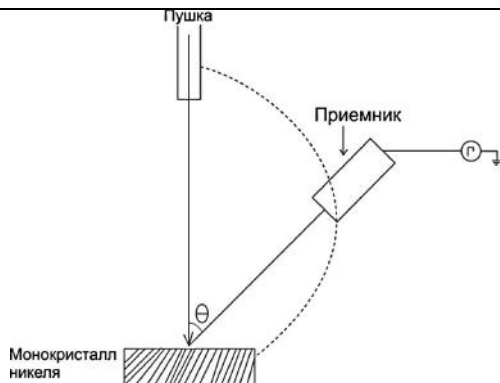


Рис. 13
Опыт Дэвиссона — Джермера

Брэгговская длина волны совпала с длиной волны, вычисленной по формуле де Бройля (45), что и явилось подтверждением существования волновых свойств у микрочастиц.

Дифракция частиц — рассеяние микрочастиц (электронов, нейтронов, атомов и т. д.) кристаллами и молекулами жидкостей и газов, при котором у начального пучка частиц одного типа возникают дополнительно отклоненные пучки этих частиц, причем на конечную картину влияет строение рассеивающего объекта. Явление дифракции частиц может быть понято лишь с позиций квантовой теории. Дифракция — волновое явление, оно наблюдается при распространении волн различной природы (световых, звуковых, волн по поверхности жидкости). Дифракция при рассеянии потока электронов с точки зрения классической физики невозможна.

Грань между волной и частицей устраняет квантовая механика, основным положением которой при описании поведения микрообъектов является корпускулярно-волновой дуализм — двойственная природа микрочастиц. Например, поведение электронов в явлениях их движения в камере Вильсона или при измерении электрического заряда в фотоэффекте описывается на основе представлений о частицах, в явлениях дифракции — только на основе представлений о волнах.

Необходимо добавить, что дифракционная картина рассматривалась для потока электронов. То, что волновые свойства присущи не только потоку электронов, но и отдельно взятой частице, удалось экспериментально установить российскому физiku В. А. Фабриканту (1948) для слабого электронного пучка.

Наличие волновых свойств микрочастиц говорит об универсальном явлении, которое относится к общим свойствам материи. Тогда волновые свойства должны быть присущи и макротелам, которые не обнаружены. Объяснение простое. Для частицы массой 1 г, движущейся со скоростью 1 м/с, соответствующая ей длина волны будет равна $\lambda = 6,7 \cdot 10^{-31}$ м. Она настолько мала, что лежит за пределами допустимого наблюдения (периодических структур с периодом $d = 10^{-31}$ м не существует). Поэтому считают, что макротела проявляют только корпускулярные свойства.

3.2. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Теория о двойственности свойств микрочастиц поставила вопрос о границе применимости классической механики в микромире.

В классической физике частица находится на определенной траектории, и в любой момент можно конкретизировать ее координату и импульс.

Свойства микрочастиц существенно отличаются от свойств классических частиц из-за наличия у микрочастиц волновых свойств. Основным отличием является невозможность одновременного определения координаты и импульса микрочастицы, а также неприменимость понятия траектории в микромире. Дуализм частицы лишает физического смысла понятие длины волны в данной точке, а так как импульс выражается через длину волны, то частица с определенным импульсом будет иметь неопределенную координату. И наоборот.

В 1927 г. немецкий физик В. Гейзенберг, исследуя волновые свойства микрочастиц, сформулировал основополагающий принцип квантовой механики — *принцип (соотношение) неопределенностей*:

микрочастица не может одновременно иметь определенную координату и соответствующую компоненту импульса:

$$\Delta x \Delta P_x \geq \hbar, \quad (47)$$

где Δx , ΔP_x — неопределенности координаты и импульса соответственно.

Из выражения (47) следует, что при точно известной координате ($\Delta x = 0$) импульс стремится к бесконечности:

$$\Delta P_x = \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{\hbar}{0} = \infty.$$

Таким образом, соотношение неопределенностей является квантовым ограничением применимости классической механики к микрообъектам.

Для макрочастиц или макрообъектов выражение (47) можно представить в виде:

$$\Delta x \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{m}, \quad (48)$$

т. е. чем больше масса частицы, тем меньше соотношение неопределенности ее координаты и импульса и, следовательно, с большей точностью можно применять к ней понятие траектории.

Соотношение неопределенностей также существует для энергии и времени в виде:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar, \quad (49)$$

где ΔE — неопределенность энергии некоторого состояния системы; Δt — промежуток времени, в течение которого оно существует.

ПРИМЕРЫ РАСЧЕТОВ

Пример. Электрон ускоряется разностью потенциалов $U = 100 \text{ кВ} = 10^5 \text{ В}$. Вычислить его длину волны.

Решение.

Используем уравнение де Бройля:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_0 v}, \quad (1)$$

где m_0 — масса электрона.

Обозначим $E_0 = m_0 c^2$ — начальную энергию, $E = mc^2$ — конечную энергию. Ускоряющее электрическое поле совершает работу $A = eU$, за счет чего происходит изменение массы:

$$E - E_0 = \Delta m c^2 = eU,$$

откуда

$$\Delta m = \frac{eU}{c^2}.$$

Если Δm соизмеримо с массой покоя электрона, то из выражения

$$E^2 = E_0^2 + P^2 c^2$$

выразим импульс P :

$$P^2 c^2 = E^2 - E_0^2 = (E - E_0)(E + E_0),$$

где

$$E - E_0 = eU, \quad E_0 = m_0 c^2.$$

Тогда

$$P^2 c^2 = eU(2E_0 + eU) = eU(2m_0 c^2 + eU),$$

следовательно,

$$P = \frac{\sqrt{eU(2m_0 c^2 + eU)}}{c}.$$

Данное выражение подставим в (1) и получим:

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{hc}{eU \sqrt{1 + \frac{2m_0 c^2}{eU}}} = \\ &= \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 299,8 \cdot 10^6}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^5 \sqrt{1 + \frac{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (299,8 \cdot 10^6)^2}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^5}}} = 0,014 \text{ \AA}. \end{aligned}$$

Ответ: $\lambda = 0,014 \text{ \AA}$.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАЧИ

1. Что показывает длина волны де Бройля?
2. В чем смысл соотношения неопределенностей Гейзенберга?
3. Что поясняет опыт Дэвиссона и Джермера?
4. Как соотношение неопределенностей объясняет наличие ширины спектральных линий?
5. Вычислить длину волны де Бройля, если электрон движется по первой орбите атома водорода.
6. Определить длину волны де Бройля электрона, у которого скорость равна: 1) 40 км/с; 2) 0,9 км/с.
7. Кинетическая энергия протона 150 эВ. Определить соответствующую длину волны де Бройля.
8. Какова длина волны де Бройля для электрона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов 510 кВ?
9. Найти неопределенность координаты Δx молекул водорода, участвующих в тепловом движении при $T = 300 \text{ К}$.
10. Оценить неопределенность координаты Δx для электрона, движущегося вдоль оси x со скоростью, определенной с точностью $\Delta v_x = 0,1 v$.

4. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

4.1. Ψ -ФУНКЦИЯ И ЕЕ СТАТИСТИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Новый этап развития квантовой теории связан с исследованиями микромира, охватывающими период с 1900 г. (Планковская гипотеза квантов) до 20-х гг. XX в. (работы Э. Шредингера, В. Гейзенберга, П. Дирака). На данном этапе в самостоятельную науку оформилась квантовая механика, изучающая законы движения и взаимодействия микрочастиц.

В результате опытов по дифракции электронов выяснилось, что волны де Бройля имеют специфическую квантовую природу и не имеют аналогии с волнами в классической физике. Для этого провели сравнение дифракционных картин световых волн и микрочастиц. По волновым представлениям о природе света интенсивность дифракционной картины пропорциональна квадрату амплитуды световой волны.

Фотонная теория определяет интенсивность числом фотонов, попадающих в данную точку дифракционной картины, т. е. квадратом амплитуды световой волны определяется число фотонов в данной точке. Для единичного фотона квадрат амплитуды есть *вероятность попадания фотона в данную точку*.

Исследование дифракции электронов обнаруживает неодинаковое распределение их по различным направлениям. Согласно волновой теории наличие максимумов в дифракционной картине в некоторых направлениях говорит о наибольшей интенсивности волн де Бройля.

Таким образом, интенсивность волн в данной точке пространства определяет плотность вероятности попадания частиц в данную точку. Но по волновому закону меняется не сама вероятность, а амплитуда вероятности, понятие которой в квантовую механику ввел М. Борн. Он назвал ее Ψ -(пси)-функцией, или *волновой функцией* $\Psi(x, y, z, t)$.

Квадрат ее модуля определяет вероятность нахождения электрона в объеме dV :

$$dW = A|\Psi|^2 dV, \quad (50)$$

где A — некоторый коэффициент пропорциональности, который находится из условия:

$$A \int_V |\Psi|^2 dV = A \int_V \Psi \Psi^* dV = 1 \quad (51)$$

(знак «*» означает комплексное сопряжение).

Условие (51) называется *условием нормировки вероятностей* и означает, что пребывание частицы где-либо в объеме есть достоверное событие и его вероятность должна быть равна единице.

Физический смысл имеет не сама Ψ -функция, а квадрат ее модуля, причем:

$$|\Psi|^2 = \Psi \Psi^*, \quad (52)$$

где Ψ^* — комплексно-сопряженная с Ψ функция, которая задает интенсивность волн де Бройля.

Сама Ψ -функция должна удовлетворять трем ограничительным условиям — конечности, однозначности и непрерывности.

4.2. ПРИНЦИП СУПЕРПОЗИЦИИ СОСТОЯНИЙ

Несмотря на то что физический смысл имеет не сама функция Ψ , а квадрат ее модуля $\Psi\Psi^*$, квантовая механика рассматривает ее для объяснения волновых свойств вещества — интерференции и дифракции. Эти явления реально отражают волновые свойства материи. Сама волновая теория принимает справедливость принципа суперпозиции волновых полей, а не их интенсивностей, пропорциональных квадрату полей, что позволяет включить в теорию явления интерференции и дифракции.

В квантовой механике в качестве постулата вводится принцип суперпозиции волновых функций, суть которого заключается в следующем:

если волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 описывают какие-либо два состояния системы, то и их линейная комбинация $\alpha_1\Psi_1 + \alpha_2\Psi_2$ также описывает третье состояние той же системы.

α_1 и α_2 в общем случае есть комплексные коэффициенты.

Пусть некоторая физическая величина f характеризует состояние квантовой системы. Значения, которые принимает величина f , в квантовой теории, называют собственными значениями, а их совокупность — спектром собственных значений данной величины.

В классической физике существуют физические величины, собственные значения которых образуют непрерывный ряд (например, координаты). В квантовой механике в таких случаях говорят о непрерывном спектре собственных значений. Но наряду с такими величинами квантовая теория оперирует величинами, собственные значения которых образуют дискретный набор — дискретный спектр.

Пусть рассматриваемая физическая величина f имеет дискретный спектр, который обозначим как f_n ($n = 0, 1, 2, \dots$). Волновую функцию системы, в которой величина f имеет значения f_n , обозначим как Ψ_n — собственные функции величины f . Эти функции удовлетворяют условию нормировки:

$$\int |\Psi_n|^2 dx = 1. \quad (53)$$

Для системы, находящейся в состоянии с волновой функцией Ψ , измерение физической величины f дает одно из значений f_n . По принципу суперпозиции волновую функцию произвольного состояния Ψ можно представить в виде ряда:

$$\Psi = \sum C_n \Psi_n, \quad (54)$$

где C_n — коэффициенты, не зависящие от координат.

Можно говорить, что всякая функция Ψ может быть разложена по собственным функциям любой физической величины, причем сумма вероятностей всех возможных величин f_n должна быть равна единице:

$$\sum |C_n|^2 = 1 \quad (55)$$

при условии, что функция Ψ является нормированной.

Сами коэффициенты ряда (54) находятся по формуле

$$C_n = \int \Psi \Psi_n^* dx, \quad (56)$$

а собственные функции с учетом (54) должны удовлетворять условию:

$$\int \Psi_m \Psi_n^* dx = \delta_{mn}, \quad (57)$$

где δ_{mn} — символ Кронекера, определяемый следующим образом: $\delta_{mn} = 1$ при $n = m$ и $\delta_{mn} = 0$ при $n \neq m$.

Условие (57) выполняется для физической величины с невырожденным спектром, т. е. когда каждому значению физической величины соответствует одна волновая функция.

Функции, подчиняющиеся условию (57), считают *ортogonalными функциями*. Таким образом, совокупность собственных функций Ψ_n образует полную систему нормированных и взаимно ортогональных функций.

4.3. ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ (НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ) КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

В 1926 г. Э. Шредингер предложил основное уравнение нерелятивистской квантовой теории, которое явилось новым фундаментальным законом. Данное уравнение не выводится из прежних представлений и теорий, а подтверждается соответствием эксперименту всех его следствий.

Найденное уравнение играет такую же роль в квантовой теории, как и основное уравнение динамики в классической механике.

Само уравнение Шредингера выглядит следующим образом:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi, \quad (58)$$

где i — мнимая единица ($\sqrt{-1}$); m — масса частицы; $U = U(x, y, z, t)$ — функция, градиент которой, взятый с отрицательным знаком, есть сила, действующая на частицу (функция U имеет смысл потенциальной энергии); ∇ — оператор набла, $\nabla^2 = \Delta$ — оператор Лапласа:

$$\Delta = \nabla^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right). \quad (59)$$

Оператор ∇ (набла) был впервые введен в физику Максвеллом и назван так по аналогии с восточным музыкальным инструментом, имеющим сходную треугольную форму.

Уравнение (58) справедливо для частицы, движущейся с малой скоростью $v \ll c$. Кроме непрерывности, однозначности и конечности на Ψ -функцию дополнительно накладываются ограничения:

- производные $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$, $\frac{\partial \Psi}{\partial y}$, $\frac{\partial \Psi}{\partial z}$ должны быть непрерывны;
- функция $|\Psi|^2$ должна быть интегрируемой и удовлетворять условию (51).

Если рассматриваемое силовое поле, в котором движется частица, стационарно, т. е. все наблюдаемые физические величины не меняются с течением времени, то U не зависит явно от времени. В этом случае решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде произведения двух множителей, один из которых зависит только от времени, другой — от координат:

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z)e^{-i\omega t}, \quad (60)$$

где $\omega = E/\hbar$, E — полная энергия частицы (в случае стационарных полей считается постоянной).

Для нахождения функции $\Psi(x, y, z)$ в стационарных состояниях подставим (60) в исходное уравнение (58) и, сократив на $\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$, получим уравнение Шредингера в виде:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = E\Psi. \quad (61)$$

Уравнение (61) называют *уравнением Шредингера для стационарных состояний*.

Уравнение (58) называют *общим уравнением*.

Уравнение (61) принято записывать в виде:

$$\nabla^2\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi = 0, \quad (62)$$

где U — потенциальная энергия частицы.

По теории Шредингера физический смысл имеют лишь те решения уравнения (62), которые удовлетворяют условиям конечности, однозначности и непрерывности (стандартным условиям).

Решения, удовлетворяющие этим условиям, возможны лишь при некоторых значениях энергии E . Их называют *собственными значениями*, а функции $\Psi(x, y, z)$, являющиеся решениями уравнения (62) при этих значениях энергии, — *собственными функциями*, соответствующими собственным значениям E . В этом состоит общий принцип квантования.

4.4. ОПЕРАТОРЫ

Операторный метод применяют для установления связи символов квантовой механики с реально наблюдаемыми физическими величинами. Под *оператором* понимают правило, по которому некоторой функции Ψ ставится в соответствие другая функция ϕ :

$$\Psi = \hat{G}\varphi, \quad (63)$$

где \hat{G} — символическое обозначение оператора.

Говорят, что функция Ψ есть результат действия оператора \hat{G} на функцию φ , или оператор \hat{G} переводит функцию φ в функцию Ψ . Полная характеристика оператора требует определения всего множества функций, на которые он действует.

В качестве примеров рассмотрим некоторые операции с операторами.

Пусть оператор \hat{G} переводит функцию φ в функцию Ψ так, что

$$\Psi(x) = \hat{G}\varphi(x) = g\varphi(x), \quad (64)$$

где g — некоторое число.

Тогда говорят, что оператор \hat{G} — это оператор умножения на число.

Если

$$\Psi(x) = \hat{G}\varphi(x) = x\varphi(x), \quad (65)$$

то оператор \hat{G} есть оператор умножения функции на аргумент ($\hat{G} = x$).

Производная $\varphi'(x)$ представляется как результат действия оператора дифференцирования на функцию $\varphi(x)$:

$$\hat{G} = \frac{d}{dx}. \quad (66)$$

Оператор может представлять собой последовательность математических операций:

$$\hat{G} = x \frac{d}{dx}. \quad (67)$$

Выражение (67) является примером произведения операторов, когда сначала берется производная некоторой функции, затем результат действия оператора дифференцирования умножается на x .

Произведение двух операторов $\hat{G}\hat{F}$ действует на функцию в определенном порядке. Сначала выполняется действие оператора, стоящего справа, результатом которого является новая функция, затем на данную функцию действует оператор, стоящий слева, т. е.

$$\hat{G}\Psi = \hat{G}\hat{F}\varphi. \quad (68)$$

Если действующие на функцию n операторы одинаковы, то их записывают сокращенно — \hat{G}^n .

Условие $\hat{G} = \hat{F}$ означает, что эти операторы имеют общую область определения и результат их действия на одну и ту же функцию будет одинаков:

$$\hat{G}(\varphi) = \hat{F}(\varphi) = \Psi. \quad (69)$$

Сумму и разность операторов можно записать как

$$(\hat{G} \pm \hat{F})\varphi(x) = \hat{G}\varphi(x) \pm \hat{F}\varphi(x). \quad (70)$$

Результат действия произведения операторов зависит от их порядка в произведении $\hat{G}\hat{F}$, где $\hat{G} = x$, а $\hat{F} = \frac{d}{dx}$, поэтому результатом действия $\hat{G}\hat{F} = x \frac{d}{dx}$ на функцию φ будет $x \frac{d\varphi}{dx}$.

Если оператор имеет вид $\hat{F}\hat{G}$, то его действие на функцию φ даст

$$\frac{d}{dx} x \varphi = \frac{d}{dx} (x \varphi) = \varphi + x \frac{d\varphi}{dx}. \quad (71)$$

Тогда

$$(\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G})\varphi = \left(\frac{d}{dx} x - x \frac{d}{dx} \right) \varphi = \varphi + x \frac{d\varphi}{dx} - x \frac{d\varphi}{dx} = \varphi. \quad (72)$$

Таким образом, результат действия оператора $(\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G})$ на функцию φ таков же, как результат умножения на единицу.

Если для двух операторов \hat{G} и \hat{F} выполняется равенство

$$[\hat{G}, \hat{F}] = (\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G}) = 0, \quad (73)$$

то говорят, что операторы \hat{G} и \hat{F} *коммутируют*.

Если $[\hat{G}, \hat{F}] \neq 0$, то операторы не коммутируют.

Единичным называется оператор \hat{G} , если

$$\hat{G}\varphi = \varphi = 1\varphi. \quad (74)$$

Единичный оператор обозначается \hat{I} .

Если $\hat{G}\hat{F} = \hat{I}$, то оператор \hat{F} является *обратным* по отношению к оператору \hat{G} :

$$\hat{F} = \hat{G}^{-1}. \quad (75)$$

Оператор называется комплексно-сопряженным оператором к \hat{F} и обозначается \hat{F}^* , если для любой функции $\Psi(x)$ выполняется соотношение:

$$\hat{F}^* \Psi^*(x) = (\hat{F} \Psi(x))^*.$$

Существуют операторы, которые имеют *векторное выражение*, или *векторный характер*.

Например, оператор набла $\vec{\nabla}$ определяется как

$$\vec{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}, \quad (76)$$

где $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ — единичные орты координатных осей.

Оператор $\vec{\nabla}$ действует на функцию Ψ как

$$\vec{\nabla} \Psi = \vec{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial \Psi}{\partial z}.$$

Произведение двух векторных операторов определяется как обычное скалярное произведение двух векторов:

$$\vec{\nabla} \vec{\nabla} = \vec{\nabla}^2 \equiv \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (77)$$

где Δ — оператор Лапласа.

Применение линейных самосопряженных операторов занимает особое место в квантовой механике.

Если выполняется равенство

$$\hat{G}(\alpha_1 \varphi_1 + \alpha_2 \varphi_2) = \alpha_1 \hat{G} \varphi_1 + \alpha_2 \hat{G} \varphi_2, \quad (78)$$

то говорят, что оператор \hat{G} является *линейным*.

Оператор \hat{F} называется *самосопряженным*, или *эрмитовым*, если выполняется интегральное равенство:

$$\begin{aligned} \int \Psi_i^*(x) \hat{F} \Psi_k(x) dx &= \int \Psi_k(x) \hat{F}^* \Psi_i^*(x) dx = \\ &= \int \Psi_k(x) (\hat{F} \Psi_i(x))^* dx = \left(\int \Psi_k^*(x) \hat{F} \Psi_i(x) dx \right)^*, \end{aligned} \quad (79)$$

где x — совокупность всех независимых переменных, от которых зависят функции $\Psi_m(x)$, а интегрирование производится по всей области изменения этих переменных.

Оператор \hat{F}^* , комплексно сопряженный оператору \hat{F} , определяется следующим образом. Если в операторе \hat{F} имеется мнимая единица, то перед ней меняется знак, а вещественные операторы остаются без изменений.

Выполнение этих равенств проверим на операторе $\frac{d}{dx}$.

Пусть функции $\Psi_m(x)$, входящие в (79), нормированы к единице, т. е. $\Psi_m(x) = 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$.

Интегрируя по частям (79), получим:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_i^*(x) \frac{d}{dx} \Psi_k(x) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_i^*(x) \frac{d\Psi_k(x)}{dx} dx = \\ &= \Psi_i^* \Psi_k(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k(x) \frac{d\Psi_i^*(x)}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k(x) \frac{d\Psi_i^*(x)}{dx} dx = \\ &= - \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^*(x) \frac{d}{dx} \Psi_i(x) dx \right)^*, \end{aligned}$$

т. е. равенство (79) не выполняется.

Если теперь изменить оператор, вводя мнимую единицу, получим:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_i^*(x) i \frac{d}{dx} \Psi_k(x) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_i^*(x) i \frac{d\Psi_k(x)}{dx} dx = \\ &= i \Psi_i^* \Psi_k(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k(x) i \frac{d\Psi_i^*(x)}{dx} dx = \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k(x) \left(-i \frac{d\Psi_i^*(x)}{dx} \right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k(x) \left(i \frac{d}{dx} \Psi_i(x) \right)^* dx = \\ &= \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^*(x) i \frac{d}{dx} \Psi_i(x) dx \right)^*, \end{aligned}$$

и условие (79) выполняется, т. е. оператор $i \frac{d}{dx}$ — эрмитов.

4.5. ОПЕРАТОРЫ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ГАМИЛЬТониАН

Каждой динамической переменной (координата, импульс, энергия) в квантовой механике ставится в соответствие линейный самосопряженный оператор, и все функциональные отношения между величинами классической механики заменяются отношениями между

операторами. Данное положение формулируется как *постулат квантовой механики*.

Подобно тому, как в классической механике состояния системы могут быть определены координатами и импульсами всех частиц, в квантовой механике операторы физических величин задаются операторами координат и импульсов.

Вид этих операторов может быть определен, в частности, путем анализа поведения физических величин при преобразованиях пространства и времени с учетом законов сохранения физических величин.

Учитывая, что сама волновая функция рассматривается как функция координат частицы, то оператор координаты частицы \hat{x} есть само число x :

$$x \rightarrow \hat{x} = x.$$

Действие функции координат частицы $f(x, y, z)$ как оператора сводится к умножению волновой функции $\Psi(x, y, z)$ на $f(x, y, z)$.

Оператор импульса \vec{P} определяется операторами его проекций на декартовы оси координат:

$$\begin{aligned}\hat{P}_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \\ \hat{P}_y &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}; \\ \hat{P}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.\end{aligned}\tag{80}$$

Так, например,

$$\hat{P}_x f(x) = -i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x}.\tag{81}$$

Векторное выражение имеет вид:

$$\vec{P} = \hat{\vec{P}} = -i\hbar \vec{\nabla} = -i\hbar \left(\vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \right).\tag{82}$$

Функция любых динамических переменных $f(q, p)$ (например, координат и импульса) заменяется оператором $f(\hat{q}, \hat{p})$, который получается из классического выражения этой функции заменой q и p на соответствующие операторы:

$$\begin{aligned}f(x, y, z, \vec{p}) &= f(x, y, z, P_x, P_y, P_z) \rightarrow f(x, y, z, \vec{p}) = \\ &= f(x, y, z, \hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z).\end{aligned}\tag{83}$$

Нужно отметить, что операторы проекций импульса и координат подчиняются правилам перестановки, облегчающим расчеты с ними.

Например, для волновой функции $\Psi(x, y, z)$ имеем:

$$\begin{aligned}x(\hat{P}_x\Psi) &= x\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) = -i\hbar x\frac{\partial\Psi}{\partial x}; \\ \hat{P}_x(x\Psi) &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = -i\hbar x\frac{\partial\Psi}{\partial x} - i\hbar\Psi.\end{aligned}$$

Вычитая из последнего выражения первое, находим:

$$(x\hat{P}_x - \hat{P}_xx)\Psi = i\hbar\Psi$$

или

$$x\hat{P}_x - \hat{P}_xx = i\hbar. \quad (84)$$

Аналогично получаем:

$$y\hat{P}_y - \hat{P}_yy = i\hbar; \quad (85)$$

$$z\hat{P}_z - \hat{P}_zz = i\hbar. \quad (86)$$

То есть операторы импульса и координаты не являются коммутирующими. Выражения (84)–(86) называют *перестановочными соотношениями Гейзенберга*.

Заметим, что

$$\begin{aligned}x\hat{P}_y - \hat{P}_yx &= 0; \\ y\hat{P}_z - \hat{P}_zy &= 0; \\ z\hat{P}_y - \hat{P}_yz &= 0.\end{aligned} \quad (87)$$

Для любой функции $f(x, y, z)$ и операторов импульса устанавливаются более общие перестановочные соотношения:

$$\begin{aligned}f\hat{P}_x - \hat{P}_xf &= i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}; \\ f\hat{P}_y - \hat{P}_yf &= i\hbar\frac{\partial f}{\partial y}; \\ f\hat{P}_z - \hat{P}_zf &= i\hbar\frac{\partial f}{\partial z}.\end{aligned} \quad (88)$$

Из соотношений (84)–(88) следует, что не существует состояний, в которых импульс и сопряженная ему координата имеют определенные значения одновременно, т. е. являются другой математической формой выражения принципа неопределенности.

Для примера определим собственные значения и собственные функции оператора проекции импульса на ось OX . Для этого напишем уравнение в виде:

$$\hat{P}_x \Psi = P_x \Psi, \quad (89)$$

где P_x — собственное значение.

Используя выражение (80) для оператора \hat{P}_x , имеем:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = P_x \Psi. \quad (90)$$

Решением этого уравнения является функция вида:

$$\Psi_{P_x}(x) = A \exp\left(i \frac{P_x x}{\hbar}\right), \quad (91)$$

где A — постоянное число.

Для условия конечности этого решения достаточно, чтобы P_x было любым вещественным числом, т. е. спектр собственных значений $-\infty < P_x < +\infty$ непрерывный.

Постоянную A выбирают так, чтобы функция Ψ_{P_x} была нормирована к δ -функции, т. е. нужно положить $A = (2\pi\hbar)^{-1/2}$.

Тогда нормированные и ортогональные собственные функции оператора \hat{P}_x запишутся:

$$\Psi_{P_x}(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \exp\left(i \frac{P_x x}{\hbar}\right); \quad (92)$$

$$\int \Psi_{P'_x}^*(x) \Psi_{P_x}(x) dx = \delta(P'_x - P_x). \quad (93)$$

То есть собственные функции оператора импульса есть плоские волны де Бройля.

Оператор момента импульса частицы.

В классической механике момент импульса частицы определяется как векторное произведение его радиус-вектора \vec{r} на импульс:

$$\vec{L} = [\vec{r}, \vec{P}]. \quad (94)$$

Квантово-механическое представление этой величины в операторном виде:

$$\hat{L} = [\vec{r}, \hat{P}], \quad (95)$$

где \hat{P} — векторное выражение оператора импульса (82); \vec{r} — радиус-вектор.

Запишем в операторном виде компоненты \hat{L} , которые согласно (84) имеют вид:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \hat{P}_z y - \hat{P}_y z = i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right); \\ \hat{L}_y &= \hat{P}_x y - \hat{P}_z x = i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right); \\ \hat{L}_z &= \hat{P}_y x - \hat{P}_x y = i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right).\end{aligned}\tag{96}$$

Оператору квадрата момента импульса соответствует выражение:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \\ &= -\hbar^2 \left\{ \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \right\}.\end{aligned}\tag{97}$$

Используем приемы алгебры операторов для определения правил перестановки компонент момента импульса и вычислим коммутатор:

$$\hat{G} = \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y.$$

Подставив сюда соответствующие выражения из формулы (96), вычислим произведения $\hat{L}_y \hat{L}_z$:

$$\begin{aligned}\hat{L}_y \hat{L}_z &= (\hat{P}_z x - \hat{P}_x z)(\hat{P}_x y - \hat{P}_y x) = \hat{P}_z x \hat{P}_x y - \hat{P}_x z \hat{P}_x y - \hat{P}_z x \hat{P}_y x + \hat{P}_x z \hat{P}_y x = \\ &= y \hat{P}_z x \hat{P}_x - z y \hat{P}_x^2 - x^2 \hat{P}_z \hat{P}_y + z \hat{P}_y \hat{P}_x x.\end{aligned}$$

Аналогично

$$\hat{L}_z \hat{L}_y = y \hat{P}_z \hat{P}_x x - z y \hat{P}_x^2 - x^2 \hat{P}_z \hat{P}_y + z \hat{P}_y x \hat{P}_x.$$

Тогда

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = y \hat{P}_z (x \hat{P}_x - \hat{P}_x x) + z \hat{P}_y (\hat{P}_x x - x \hat{P}_x).$$

Учитывая формулы (84)–(86), имеем:

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i\hbar (y \hat{P}_z - \hat{P}_y z) = i\hbar \hat{L}_x.\tag{98}$$

Для двух других перестановок при тех же условиях имеем:

$$\hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z = i\hbar \hat{L}_y;\tag{99}$$

$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z. \quad (100)$$

Используя условие (73) и формулы (98)–(100), можно сделать вывод о том, что операторы компонент момента импульса некоммутативны, в то время, как каждая из компонент \hat{L}_x , \hat{L}_y , \hat{L}_z коммутирует с квадратом полного момента импульса \hat{L}^2 :

$$\begin{aligned} \hat{L}_x \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{L}_x &= 0; \\ \hat{L}_y \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{L}_y &= 0; \\ \hat{L}_z \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{L}_z &= 0. \end{aligned} \quad (101)$$

Из правил перестановки следует вывод о том, что одновременное измерение проекций моментов импульса невозможно.

Для произвольного направления возможные значения проекции момента импульса и значения абсолютной величины момента определяют в сферической системе координат (рис. 14).

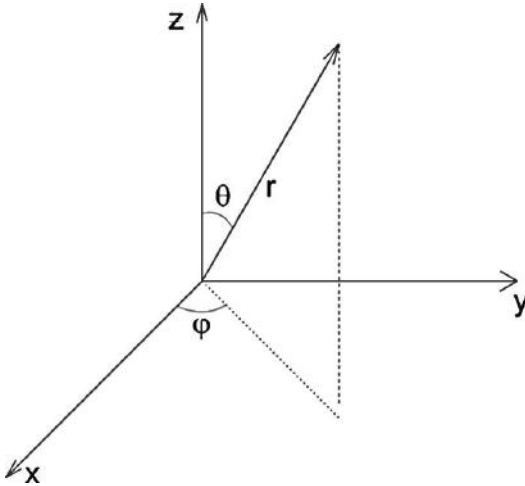


Рис. 14
Взаимосвязь сферических и декартовых координат

Если определить ось OZ за выделенное направление, то

$$x = r \sin \theta \cos \varphi = r \sin \theta \sin \varphi = r \cos \theta, \quad (102)$$

и преобразованные формулы (96) примут вид:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right); \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right); \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},\end{aligned}\tag{103}$$

а квадрат полного момента импульса равен:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2,$$

где

$$\nabla_{\theta, \varphi}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\tag{104}$$

— оператор Лапласа для сферы.

Исходя из выражений (103), зависящих только от углов θ и φ , волновую функцию Ψ можно искать в виде

$$\Psi = \Psi(\theta, \varphi).\tag{105}$$

Собственное значение оператора \hat{L}^2 определяется из уравнения:

$$\hat{L}^2 \Psi = L^2 \Psi.\tag{106}$$

Из выражений (103) и (106) получается

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \lambda \Psi = 0,\tag{107}$$

где

$$\lambda = \frac{L^2}{\hbar^2}.$$

Уравнение (106) является уравнением для сферических функций и решается методом разделения переменных. Здесь мы кратко резюмируем, что собственные функции (106) лежат в области изменения переменных $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ и удовлетворяют условиям непрерывности, конечности и однозначности, а параметр λ принимает значения

$$\lambda = l(l+1),\tag{108}$$

где l — целое положительное число. Для каждого значения l имеется $2l+1$ решений, являющихся сферическими функциями вида:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{(l+|m|)!4\pi}} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad (109)$$

где m — целое число, принимающее значения $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$, $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ (всего $2l + 1$ значений); $|m|$ — абсолютное значение числа m .

Функцию $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ выражают как

$$P_l^{|m|}(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi), \quad \xi = \cos\theta,$$

где $P_l(\xi)$ — полином Лежандра.

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} [(\xi^2 - 1)^l].$$

Собственные значения, которые может принимать оператор квадрата момента импульса:

$$L_l^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (110)$$

а соответствующие им собственные функции есть

$$\Psi_{l,m}(\theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (111)$$

Собственные функции оператора \hat{L}^2 являются также собственными функциями оператора проекции момента импульса \hat{L}_z на ось OZ , т. е. мы имеем дело со случаем вырождения.

Вообще говоря, между операторами во многих случаях сохраняются те же соотношения, что и между физическими величинами в классической механике. Пользуясь этим принципом, можно построить все необходимые операторы физических величин.

Для определения оператора кинетической энергии микрочастиц воспользуемся классическим выражением кинетической энергии для частицы, имеющей массу m и импульс \vec{P} :

$$K = \frac{P^2}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2). \quad (112)$$

Операторное выражение запишем как

$$\hat{K} = \frac{\hat{P}^2}{2m} = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2). \quad (113)$$

и, подставляя вместо $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ значения из (80), получим:

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2, \quad (114)$$

где

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Собственные значения оператора кинетической энергии \hat{K} есть (112), если под p_x, p_y, p_z понимать собственные значения операторов импульса $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$.

Для собственных функций \hat{K} выполняется уравнение

$$\hat{K}\Psi = K\Psi, \quad (115)$$

решением которого является функция

$$\Psi_k(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left(i \frac{p_x x + p_y y + p_z z}{\hbar}\right). \quad (116)$$

Функция (116) также является собственной функцией операторов $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$. Таким образом, из условия коммутирования между собой операторов $\hat{K}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ следует, что эти величины могут быть измерены одновременно.

Полная энергия E классической системы равна сумме кинетической K и потенциальной U энергий. Аналогично в квантовой механике оператор полной энергии $\hat{H} = \hat{E}$ (*оператор Гамильтона*, или *гамильтониан* системы) есть сумма операторов кинетической \hat{K} и потенциальной \hat{U} энергий:

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}. \quad (117)$$

Потенциальная энергия

$$U = U(x, y, z, t) = U(q, t)$$

есть функция только координат и времени, вследствие чего ее оператор выражается через операторы координат по тем же формулам, что и потенциальная энергия в классической механике, т. е.

$$\hat{U} = U(q, t). \quad (118)$$

Сам вид потенциальной энергии так же, как и в классической механике, определяется из опыта и характеризует силовое поле, действующее на частицу. Важно отметить, что в квантовой механике нельзя сказать, что полная энергия частицы есть сумма кинетической энергии (функции импульсов) и потенциальной энергии (функции координат). Невозможность одновременного измерения этих величин следует из того, что операторы \hat{K} и \hat{U} не коммутируют.

С учетом операторов физических величин полное уравнение Шредингера (58) можно записать в виде:

$$\hat{H}(P, q, t)\Psi(q, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q, t). \quad (119)$$

При решении задач структурной химии и молекулярной физики, при интерпретации реакционной способности и физических свойств молекул, в основном, рассматривают так называемые стационарные состояния системы — состояния, не зависящие от времени. В этом случае гамильтониан системы явно не зависит от времени, что дает возможность саму волновую функцию Ψ представить в виде произведения двух функций:

$$\Psi(q, t) = \Psi(q)\Phi(t), \quad (120)$$

где $\Psi(q)$ — функция, зависящая только от координат; $\Phi(t)$ — функция, зависящая от времени.

С учетом этого при разделении переменных уравнение (119) принимает вид:

$$\frac{\hat{H}\Psi(q)}{\Psi(q)} = i\hbar \frac{\frac{\partial \Phi(t)}{\partial t}}{\Phi(t)}. \quad (121)$$

Соответственно левая и правая части выражения (121) должны быть равны одной и той же константе E , определяющей полную энергию системы:

$$\frac{\hat{H}\Psi(q)}{\Psi(q)} = E \quad \text{и} \quad i\hbar \frac{\frac{\partial \Phi(t)}{\partial t}}{\Phi(t)} = E$$

или

$$\hat{H}\Psi(q) = E\Psi(q) \quad \text{и} \quad i\hbar \left(\frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} \right) = E\Phi(t). \quad (122)$$

Первое выражение формул (122) есть стационарное уравнение Шредингера (62) в операторном виде и представляет собой линейное дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных эллиптического типа. Функция $\Psi(q)$ является собственной функцией оператора \hat{H} , а E — собственным значением.

ПРИМЕРЫ РАСЧЕТОВ

Пример 1. Оператор дифференцирования по координате $\frac{\partial}{\partial x}$ ставит волновой функции в соответствие ее производную $\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)$.

Определить $\frac{\partial^*}{\partial x}$.

Р е ш е н и е.

На основании определения комплексно-сопряженного оператора для произвольной функции $\Psi(x)$ имеем:

$$\frac{\partial^*}{\partial x}\Psi(x) = \left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi^*(x)\right)^* = \frac{\partial}{\partial x}\Psi(x).$$

Отсюда по определению равенства операторов

$$\frac{\partial^*}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}.$$

Пример 2. Заданы два оператора \hat{F} и \hat{G} такие, что их действие на волновую функцию $\Psi(x, y, z)$ дает:

$$\hat{F}\Psi(x, y, z) = f(x, y, z)\Psi(x, y, z);$$

$$\hat{G}\Psi(x, y, z) = g(x, y, z)\Psi(x, y, z),$$

где $f(x, y, z)$ и $g(x, y, z)$ — некоторые функции.

Определить коммутатор $[\hat{F}, \hat{G}]$.

Р е ш е н и е.

Действие коммутатора на произвольную волновую функцию дает:

$$\begin{aligned} [\hat{F}, \hat{G}]\Psi(x, y, z) &= (\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})\Psi(x, y, z) = \hat{F}(\hat{G}\Psi(x, y, z)) - \hat{G}(\hat{F}\Psi(x, y, z)) = \\ &= f(x, y, z)g(x, y, z)\Psi(x, y, z) - g(x, y, z)f(x, y, z)\Psi(x, y, z) = 0. \end{aligned}$$

В силу произвольности волновой функции следует

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0.$$

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАЧИ

1. Каков физический смысл Ψ -функции?
2. Каким условиям должна удовлетворять Ψ -функция?
3. Что определяют решения уравнения Шредингера?
4. Что такое операторный метод в квантовой механике?
5. Как выражается гамильтониан через операторы?
6. В чем состоит физический смысл главного квантового числа n ?
7. Частица находится в некоторой области объема V . Вычислить вероятность обнаружения частицы в этой области, если задана π -функция частицы $\Psi(x, y, z)$.
8. Определить Ψ -функцию свободной частицы в уравнении Шредингера в случае одномерного движения.
9. Частица с массой m находится в силовом поле

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, \quad x \geq a; \\ 0, & 0 < x < a. \end{cases}$$

Определить собственные функции и собственные значения оператора энергии.

10. Найти общее решение временного уравнения Шредингера для свободной частицы, движущейся вдоль оси x .

11. Определить, коммутируют ли операторы: а) \hat{Y} и \hat{P}_y ; б) \hat{Y} и \hat{P}_x ; в) \hat{P}_x и \hat{P}_y .

12. Вычислить собственные функции Ψ и собственные значения оператора $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, если $\Psi(x) = \Psi(x + a)$, a — постоянная.

13. Доказать, что операторы координат коммутируют между собой.

14. Доказать тождество

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}.$$

15. Определить вид оператора $(\hat{X} + \hat{G})^2$, где $G = \frac{d}{dx}$.

16. Вычислить собственные значения и собственные функции оператора проекции момента импульса на ось z в сферических координатах $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$, где φ — азимутальный угол.

5. ФИЗИКА АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

5.1. ЧАСТИЦА В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

Поведение частицы в потенциальной яме с бесконечными прямоугольными стенками описывается стационарным уравнением Шредингера, которое для одномерного движения вдоль оси x имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0, \quad (123)$$

где потенциальная энергия $U(x)$ равна:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ 0, & 0 \leq x \leq l; \\ \infty, & x > l, \end{cases} \quad (124)$$

где l — ширина потенциальной ямы (рис. 15).

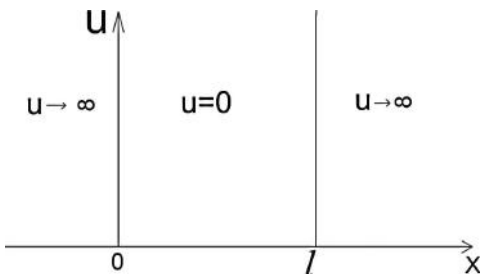


Рис. 15
Потенциальная энергия частицы

Считается, что стенки потенциальной ямы непроницаемы, поэтому вероятности попадания частицы в области I и III равны нулю.

Требование непрерывности Ψ -функции на границах в данном случае имеет вид:

$$\Psi(0) = \Psi(l) = 0. \quad (125)$$

В области II ($U = 0$) уравнение Шредингера (123) принимает вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi = 0 \quad (126)$$

или

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0, \quad (127)$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (128)$$

Из теории колебаний решение уравнения (127) имеет вид гармонической функции:

$$\Psi(x) = A \sin(kx + \alpha). \quad (129)$$

Учитывая граничные условия, имеем:

$$\Psi(0) = A \sin(0k + \alpha) = A \sin \alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0; \quad (130)$$

$$\Psi(l) = A \sin kl = 0.$$

Следовательно, $\sin kl = 0$ выполняется только при условии:

$$kl = n\pi, \quad (131)$$

где n — целые числа 1, 2, 3, ...

Из (131) следует, что

$$k = \frac{n\pi}{l}. \quad (132)$$

Используя выражения (128) и (132), можно вычислить собственные значения энергии частицы в потенциальной яме:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (133)$$

т. е. энергия принимает лишь определенные дискретные значения, или *квантуется*.

Квантовые значения E_n называют уровнями энергии, а число n , определяющее энергию энергетических уровней частицы, — *главным квантовым числом*.

Электрон может находиться в потенциальной яме на определенном уровне E_n , причем минимальное значение энергии, соответствующее первому уровню, равно:

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

Нахождение собственных значений функций с использованием граничных условий для функции

$$\Psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{l} x$$

сводится к расчету постоянной интегрирования из условия нормировки:

$$\int_0^l |\Psi|^2 dx = \int_0^l A^2 \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx = A^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx = 1.$$

Интегрирование дает значение $l/2$, тогда

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (134)$$

На рисунке 16 приведены графики собственных функций (134) для энергетических уровней (133).

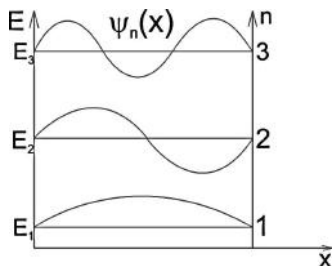


Рис. 16

Собственные функции (134) для энергетических уровней (133)

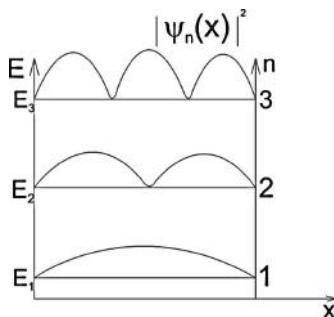


Рис. 17

Плотность вероятности нахождения частицы на различных расстояниях от стенок потенциальной ямы

Плотность вероятности $|\Psi|^2$ нахождения частицы на различных расстояниях от стенок потенциальной ямы для $n = 1, 2, 3, \dots$ представлена на рисунке 17.

Для примера, если $n = 2$, то электрон не может находиться в середине ямы, так как с равной вероятностью может находиться в левой и правой частях. Это также подтверждает невозможность применения понятия траектории в квантовой механике.

Используя формулу (133), можно определить расстояние между двумя соседними энергетическими уровнями:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2 n}{ml^2}. \quad (135)$$

Из выражений (133) и (135) следует, что при больших значениях квантовых чисел ($n \gg 1$) $\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n} \ll 1$, т. е. соседние уровни расположены очень близко.

Если n очень велико, то дискретный спектр энергий сглаживается и становится непрерывным. Этот вывод есть частный случай принципа соответствия Бора (1923), согласно которому при больших квантовых числах выводы и результаты квантовой механики должны переходить в классические.

5.2. ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Исследование с позиций квантовой механики прохождения частицы через потенциальный барьер аналогично задаче для частицы в потенциальной яме и также приводит к выводам, отличающимся от классических представлений.

Пусть частица движется вдоль оси x , встречает на своем пути потенциальный барьер прямоугольной формы высотой U_0 и шириной l (рис. 18).

Тогда потенциальная энергия частицы

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ U_0, & 0 \leq x \leq l; \\ 0, & x > l. \end{cases} \quad (136)$$

При условии, что кинетическая энергия $E > U_0$, классическая частица беспрепятственно пройдет над барьером или при $E < U_0$ отразится от него.

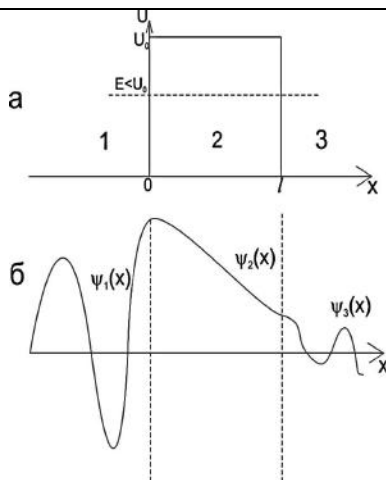


Рис. 18

Волновые функции в случае потенциального барьера

Классическая частица не может пройти сквозь барьер. Для микрочастицы, даже при условии $E > U_0$, имеется отличная от нуля вероятность того, что частица не пройдет барьер и будет двигаться в обратном направлении. При $E < U_0$ имеется также не равная нулю вероятность, что частица окажется в области 3 (рис. 18а), т. е. преодолеет барьер. Такие парадоксы есть выводы решений уравнения Шредингера для областей 1 и 3 и соответствуют выражению (100):

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi = 0,$$

а для области 2 принимает вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \Psi = 0. \quad (137)$$

Общие решения этих дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= A_1 e^{+i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x} \quad (\text{для области 1}); \\ \Psi_2 &= A_2 e^{+\beta x} + B_2 e^{-\beta x} \quad (\text{для области 2}); \\ \Psi_3 &= A_3 e^{+i\alpha x} + B_3 e^{-i\alpha x} \quad (\text{для области 3}), \end{aligned}$$

где

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}; \quad \beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}.$$

Решение $e^{+i\alpha x}$ соответствует волне вдоль оси x в положительном направлении, $e^{-i\alpha x}$ — волне в противоположном направлении. Решения $e^{+\beta x}$ — возрастающая экспонента, $e^{-\beta x}$ — убывающая.

Качественный характер Ψ -функций представлен на рисунке 18б. Можно наблюдать, что волновая функция не равна нулю и внутри барьера, а в области 3 вновь имеет вид волн де Бройля с той же длиной волны, но с меньшей амплитудой.

Используя граничные условия, можно определить коэффициенты A и B . Выполнение условия непрерывности требует на границах барьера:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0), \quad \Psi_2(l) = \Psi_3(l) \quad (138)$$

и

$$\frac{\partial \Psi_1(0)}{\partial x} = \frac{\partial \Psi_2(0)}{\partial x}; \quad \frac{\partial \Psi_2(l)}{\partial x} = \frac{\partial \Psi_3(l)}{\partial x}. \quad (139)$$

Откуда

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2; \\ A_2 e^{+\beta l} + B_2 e^{-\beta l} = A_3 e^{+i\alpha l}; \\ i\alpha A_1 - i\alpha B_1 = \beta A_2 - \beta B_2; \\ \beta A_2 e^{+\beta l} - \beta B_2 e^{-\beta l} = i\alpha A_3 e^{+i\alpha l}. \end{cases} \quad (140)$$

В третьей области волна распространяется только в положительном направлении — $B_3 = 0$.

Совместное решение системы (140) приводит к результату:

$$D = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}l\right\}, \quad (141)$$

где D — коэффициент прозрачности потенциального барьера, определяемого как отношение плотности потока прошедших частиц к плотности потока падающих частиц. Как вероятность прохождения D определяют отношением квадратов модулей амплитуд прошедшей и падающей волн:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}. \quad (142)$$

В случае потенциального барьера произвольной формы

$$D \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(U_0 - E)}dx\right\}. \quad (143)$$

5.3. ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ

При исследовании прохождения частиц потенциального барьера квантово-механический подход приводит к специфически квантовому явлению прохождения частицы через потенциальный барьер при $E < U_0$, которое получило название *туннельного эффекта* (рис. 19).

Прохождение сквозь барьер невозможно с классической точки зрения ($E < U$), так как частица в области барьера должна была бы обладать отрицательной кинетической энергией. Данное явление поясняется соотношением неопределенностей.

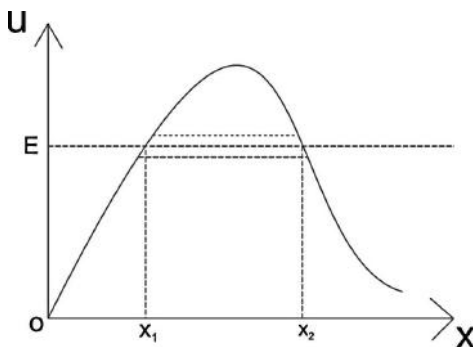


Рис. 19
Туннельный эффект

Неопределенность импульса ΔP на участке $\Delta x = l$ есть $\Delta P > h/l$. Соответствующая кинетическая энергия $(\Delta P)^2/2m$ может быть достаточной для того, чтобы полная энергия частицы оказалась больше потенциальной ($E > U$). Основы теории туннельного эффекта, заложенные в работах Л. И. Мандельштама и М. А. Леонтовича, нашли экспериментальное подтверждение в явлении автоэлектронной эмиссии электронов из металла, заключающемся в самопроизвольном выходе электронов из атома.

Этот эффект играет основную роль в явлениях радиоактивного α -распада. Большое число радиоактивных ядер, распадающихся с испусканием α -частиц, можно рассматривать как α -частицы, заключенные в ядрах как в потенциальной яме (рис. 20).

Внутри ямы шириной $r = R$ (R — радиус ядра) энергия имеет отрицательное значение вследствие наличия поля короткодействующих ядерных сил, а снаружи действуют кулоновские силы.

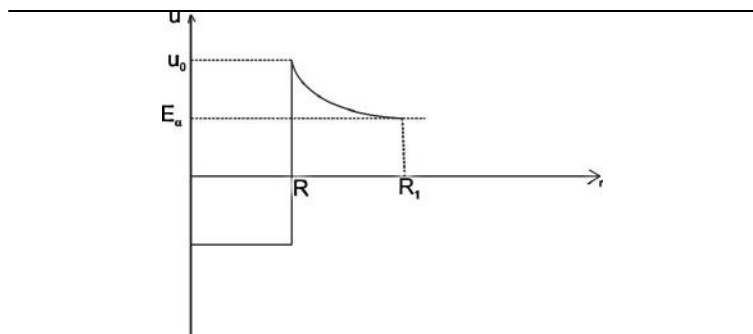


Рис. 20

Потенциальная яма для α -частицы в ядре

Если полагать, что энергия вылетающих α -частиц меньше высоты потенциального барьера, то с точки зрения классической физики α -распад в принципе невозможен. Туннельный эффект дает некоторую, не равную нулю, вероятность обнаружения α -частицы за пределами ядра.

Формула для коэффициента прозрачности (143) с учетом потенциальной энергии взаимодействия α -частицы и ядра $U(r) = \frac{qq_\alpha}{r}$, где $q_\alpha = 2e$, e — заряд α -частицы; $q = (z - 2)e$ — заряд ядра с порядковым номером z будет иметь вид:

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_R^{R_1} \sqrt{2m_\alpha \left(\frac{qq_\alpha}{r} - E_\alpha \right)} dr \right\}. \quad (144)$$

Используя определенные приближения в вычислениях из (144), можно получить:

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{4}{\hbar} \frac{qq_\alpha}{r} \sqrt{\frac{2m_\alpha}{E_\alpha}} \right\}. \quad (145)$$

5.4. ЛИНЕЙНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Под линейным гармоническим осциллятором будем понимать систему, совершающую одномерное движение под действием квазиупругой силы.

В классической механике примерами гармонических осцилляторов являются пружинный, физический и математический маятники.

Известно, что потенциальная энергия материальной точки, совершающей гармонические колебания под действием упругой силы, равна:

$$U = \frac{m\omega_0^2}{2}x^2, \quad (146)$$

где m — масса частицы; ω_0 — собственная частота колебаний осциллятора.

Величина полной энергии E частицы определяет амплитуду ее колебаний (рис. 21).

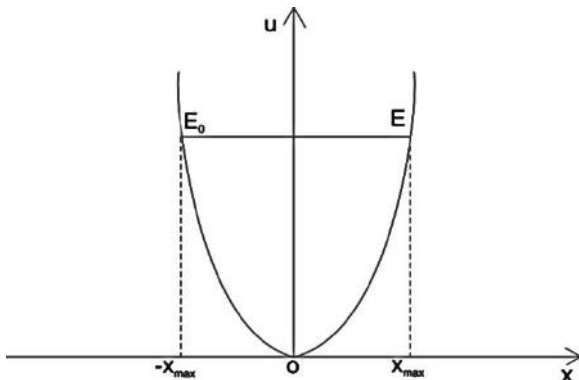


Рис. 21

Энергия линейного гармонического осциллятора

В точках максимального отклонения полная энергия частицы равна потенциальной энергии. Согласно классической теории частица не может выйти за пределы $(-x_{\max}, x_{\max})$, иначе это приведет к абсурдному результату, когда кинетическая энергия больше полной энергии частицы. То есть классическая частица оказывается в потенциальной яме без «права выхода из нее».

При одномерном движении уравнение Шредингера для гармонического квантового осциллятора при потенциальной энергии (146) имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 \right) \Psi = 0. \quad (147)$$

Найдем собственные функции Ψ и собственные значения E . Уравнение (147) при больших значениях x , пренебрегая значением E , можно переписать в виде:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \text{const} x^2 \Psi. \quad (148)$$

Решением такого уравнения является функция вида

$$\Psi = \exp(-\alpha x^2). \quad (149)$$

Продифференцировав (149) и подставив полученное выражение в (147), получим:

$$\Psi(-2\alpha + 4\alpha^2 x^2) = \left(-\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^2 \right) \Psi. \quad (150)$$

Равенство (150) выполняется при любых значениях x , если

$$2\alpha = \frac{2mE}{\hbar^2}; \quad 4\alpha^2 = \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2},$$

откуда

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}; \quad E = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Окончательно одной из собственных функций гармонического осциллятора является

$$\Psi_0(x) = \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right). \quad (151)$$

Функция

$$\Psi_1(x) = x\Psi_0(x) = x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$$

является также решением уравнения Шредингера, но при $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$.

Квантовый осциллятор может находиться в различных состояниях, характеризующихся набором волновых функций $\Psi_n(x)$. Каждой волновой функции соответствует свое значение энергии E , а весь дискретный набор энергий выражается формулой:

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (152)$$

где E_n — полная энергия; n — квантовое число.

То, что квантовый осциллятор принимает дискретные значения энергии, говорит о квантовании его энергии. Существование минимального значения энергии при $n = 0$ $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ — энергии нулевых колебаний — есть прямое следствие соотношения неопределенностей. Это противоречит выводам классической теории, согласно ко-

торой минимальная энергия осциллятора может быть равна нулю (частица находится в состоянии равновесия).

Из (152) следует, что расстояние между соседними энергетическими уровнями равно $\hbar\omega_0$, а минимальное значение энергии равно $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ (рис. 22).

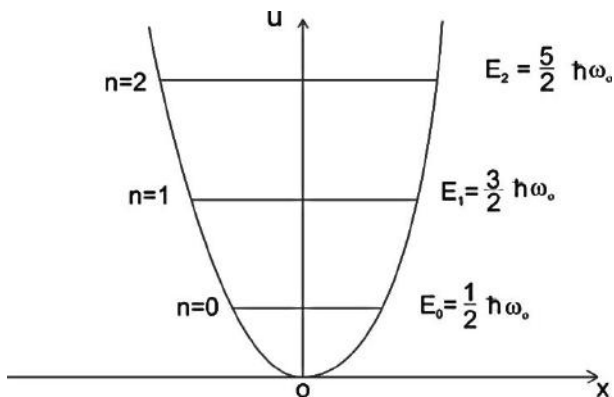


Рис. 22
Энергетические уровни осциллятора

Состояние с $n = 0$ называют основным (невозбужденным), остальные состояния возбужденные. При переходе осциллятора из одного состояния в другое происходит либо испускание, либо поглощение фотона, причем изменение квантового числа n в соответствии с правилом отбора меняется на ± 1 и вероятность перехода на несоседние уровни равна нулю.

Квантово-механический расчет уравнения (147) показывает еще одно значительное отличие результатов от классической теории, заключающееся в том, что частицы можно обнаружить за пределами области $(-x_{\max}, x_{\max})$. То есть существует отличная от нуля вероятность обнаружения частицы в классической запрещенной области (рис. 23).

Из рисунка 23 видно, что квантовая вероятность обнаружения осциллятора для состояния $n = 1$ имеет конечные значения за пределами $|x| \leq x_{\max}$. Следовательно, есть вероятность обнаружения частиц за пределами «классической» ямы вследствие туннельного эффекта.

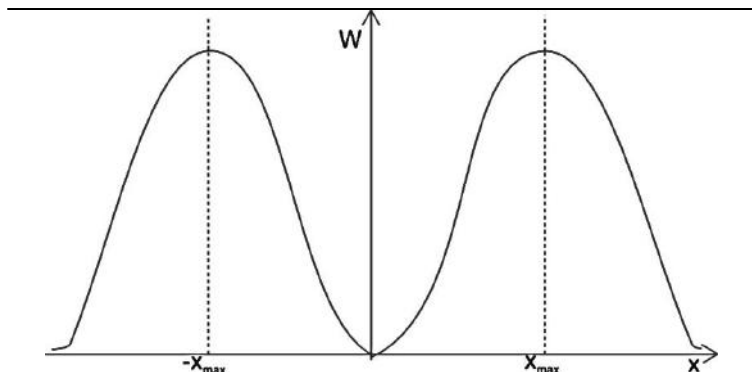


Рис. 23

Распределение плотности вероятности для состояния $n = 1$

ПРИМЕРЫ РАСЧЕТОВ

Пример. Найти вероятность прохождения частицей массой m и энергией E сквозь потенциальный барьер, имеющий вид

$$U(x) = U_0 \left(1 - \frac{\lambda^2}{l^2} \right).$$

Решение.

Используем основную формулу для туннельного эффекта — формулу для прозрачности потенциального барьера:

$$D = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right].$$

Перепишем с $U(x)$:

$$\begin{aligned} D &= \exp \left[-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U_0 l^2 - U_0 x^2 - E l^2} dx \right] = \\ &= \exp \left[\frac{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 - \frac{U_0 x^2}{l^2(U_0 - E)}} dx \right]. \end{aligned}$$

Замена переменной:

$$\frac{U_0 x^2}{l^2(U_0 - E)} = \sin^2 \varphi,$$

откуда

$$x = \sqrt{\frac{U_0 - E}{U_0}} l \sin \varphi \Rightarrow dx = \sqrt{\frac{U_0 - E}{U_0}} l \cos \varphi d\varphi.$$

Пределы x_1 и x_2 выразим из равенства $U(x) = E$:

$$U_0 \left(1 - \frac{x^2}{l^2} \right) = E \Rightarrow x_{1,2} = \pm l \sqrt{1 - \frac{E}{U_0}}.$$

Учтем, что $\sin \varphi = \frac{x}{l \sqrt{\frac{U_0}{U_0 - E}}}$ при $\varphi_1 = -\frac{\pi}{2}$ и $\varphi_2 = \frac{\pi}{2}$.

Тогда коэффициент прозрачности D , или вероятность прохождения частицы сквозь потенциальный барьер:

$$D = \exp \left[- \frac{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} \sqrt{\frac{U_0 - E}{U_0}} l \cos \varphi d\varphi \right],$$

что после интегрирования дает:

$$D = \exp \left[- \frac{(U_0 - E)l\pi}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{U_0}} \right].$$

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАЧИ

1. В чем состоит различие в подходах классической и квантовой теорий при рассмотрении задачи с потенциальным барьером?

2. Что такое туннельный эффект?

3. Что показывает коэффициент прозрачности D ?

4. Чем отличается смысл нулевой энергии в квантовой механике от смысла нулевой энергии в классической теории?

5. Определить наименьшее значение энергии, которую может иметь электрон, находящийся в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной $l = 10^{-9}$ м. Стенки ямы считать непроницаемыми.

6. Вычислить наименьшую разность двух соседних энергетических уровней нейтрона в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме с непроницаемыми стенками. Ширина потенциальной ямы $l = 10^{-14}$ м.

7. Частица массой m находится в двумерной бесконечно глубокой потенциальной яме $0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$. Определить Ψ -функцию и энергии частицы.

8. Вычислить коэффициент прозрачности D волн де Бройля для прямоугольного потенциального барьера высотой $U = 3,0$ эВ, если на него падают электроны с энергией $E = 15,0$ эВ.

9. Определить вероятность местонахождения частицы в основном состоянии ($n = 1$) в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной l ($0 < x < l$) для интервала $(l/3, 2l/3)$.

10. Некоторая частица массой m падает на одномерную потенциальную яму шириной l . Вычислить длину ямы l , при которой коэффициент отражения D максимален, если энергия частицы вне ямы равна E .

11. Вычислить собственные значения энергии частицы массой m в одномерном потенциальном поле $U(x) = \frac{kx^2}{2}$ при $x > 0$ и $U = \infty$ при $x \leq 0$, если известны собственные функции и собственные значения энергии квантового гармонического осциллятора.

6. ОДНОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

6.1. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА

Квантово-механический расчет систем, для которых может быть найдено точное решение уравнения Шредингера, имеет фундаментальное значение.

К таким системам относится атом водорода и его изотопы.

Полученные результаты могут быть использованы при изучении многоэлектронных атомов и молекул.

Для атома водорода потенциальная энергия $U(r)$ есть энергия кулоновского взаимодействия ядра с зарядом z_e (для водорода $z_e = 1$) и электрона (заряд $-e$)

$$U(r) = -\frac{Z_e e^2}{r}. \quad (153)$$

При рассмотрении движения электрона вокруг ядра необходимо исходить из того, что кулоновский потенциал сферически симметричен (потенциал центральных сил) и зависит только от расстояния между взаимодействующими телами. Задачу целесообразно решать в сферических координатах, связь которых с декартовыми представлена на рисунке 14.

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad 0 \leq r < \infty;$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi \quad 0 \leq \theta < \pi;$$

$$z = r \cos \theta \quad 0 \leq \varphi < 2\pi;$$

$$dV = dx \cdot dy \cdot dz = r^2 \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi \cdot dr,$$

где dV — элементарный объем.

Решение уравнения Шредингера (62) в сферических координатах создает возможность разделения переменных. Этого нельзя достичь в декартовых координатах.

Оператор Лапласа (59) в сферических координатах имеет вид:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (154)$$

Подставив выражение (154) в уравнение Шредингера для стационарного состояния (61), получим:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \\ & + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{rm}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) \Psi = 0, \end{aligned} \quad (155)$$

где m — масса электрона.

Для разделения переменных в дифференциальном уравнении в частных производных (155) Ψ -функцию представим в виде:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi). \quad (156)$$

Подставляя (156) в (155) и умножая полученное выражение на $\frac{r^2}{R\Theta\Phi}$, получаем:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) = \\ & = -\frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\Phi \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}. \end{aligned} \quad (157)$$

В выражении (157) левая часть зависит только от переменной r , а правая от переменных θ и φ . Равенство этих частей имеет место только тогда, когда значения сторон, зависящие от разных переменных, равны некоторому постоянному числу C .

То есть для R получаем уравнение:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) R - CR = 0. \quad (158)$$

Аналогичное разделение переменных θ и φ правой части уравнения (157) дает:

$$-\frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = C$$

или

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + C \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}. \quad (159)$$

Правая часть (159) зависит только от φ , а левая часть уравнения — от θ . Следовательно, каждая из них равна постоянной m^2 .

Выбор положительного числа для постоянной следует из того, что функция Φ отвечает физическим требованиям только тогда, когда константа положительна.

Полученные два уравнения

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} &= m^2; \\ \frac{\sin \theta}{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + C \sin^2 \theta &= m^2 \end{aligned} \quad (160)$$

переписываем в виде:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + m^2 \Phi = 0; \quad (161)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \left(C - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0. \quad (162)$$

Мы не будем воспроизводить этапы решения уравнений (158), (161) и (162), поскольку они слишком громоздки. Остановимся на анализе окончательных результатов.

В процессе решения обнаруживается, что Ψ -функция отвечает требованиям однозначности, конечности и непрерывности при любых положительных значениях E , но в области отрицательных значений E — только при дискретных значениях энергии (рис. 24):

$$E_n = -\frac{me^2}{2\hbar^2} \frac{z^2}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (163)$$

Отрицательные значения энергии ($E < 0$) соответствуют электрону, связанному с ядром.

Из рисунка 24 видно, что E_1 — минимально возможный энергетический уровень (основной), все остальные — возбужденные.

$E > 0$ — движение электрона свободное, что соответствует ионизированному атому.

Таким образом, последовательное решение уравнения Шредингера приводит в случае $E < 0$ к формуле (163) для энергетических уровней без использования каких-либо дополнительных постулатов (в отличие от теории Бора) и совпадает с формулой Бора для дозволённых дискретных значений энергии электрона в атоме. Различие в интерпретации относится к состояниям электрона. В теории Бора электрон движется по стационарным орбитам, теперь же понятие орбиты теряет физический смысл. Состояние электрона описывает Ψ -функция.

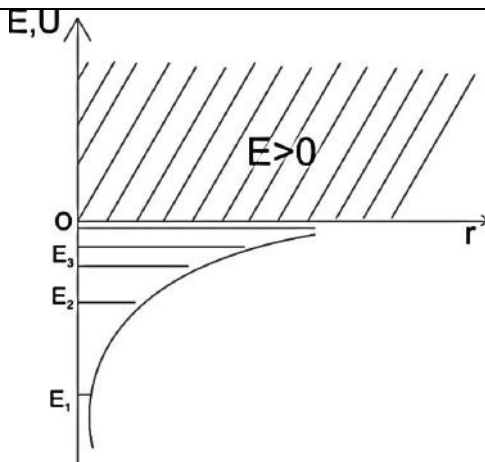


Рис. 24

Дискретные энергетические уровни в атоме водорода

Собственные функции уравнения Шредингера содержат три целочисленных параметра n, l, m (квантовые числа):

$$\Psi = \Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi), \quad (164)$$

где n называют *главным квантовым числом*; l — *орбитальным квантовым числом*; m — *магнитным квантовым числом*.

Главное квантовое число n принимает значения $n = 1, 2, 3, \dots$

Из решения уравнения Шредингера вытекает, что момент импульса электрона (механический орбитальный момент) квантуется, т. е. принимает не произвольные значения, а дискретные в соответствии с формулой:

$$L_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad (165)$$

где l — орбитальное квантовое число, при заданном n принимает значения $l = 0, 1, \dots, (n-1)$.

Момент импульса квантуется не только по величине, но и по направлению. Вектор \vec{L}_l электрона имеет лишь те ориентации в пространстве, при которых проекция L_{lz} на ось z имеет квантовые значения, кратные \hbar :

$$L_{lz} = \hbar m_l, \quad (166)$$

где m_l — магнитное квантовое число, которое при заданном l принимает значения $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$.

Квантовое число m_l отвечает за проекцию момента импульса на определенное направление и имеет $(2l + 1)$ ориентаций. Наличие m_l приводит к расщеплению уровня с главным квантовым числом n на $(2l + 1)$ подуровней в магнитном поле. Другими словами, *атомные спектры расщепляются*. Это явление было обнаружено в 1896 г. П. Зееманом и носит его имя. Расщепление энергетических уровней атома во внешнем электрическом поле доказал немецкий физик Й. Штарк.

Итак, главное квантовое число n показывает энергетический уровень, на котором находится электрон. Ему соответствует собственное значение энергии E_n (кроме E_l). А каждому собственному значению E_n соответствуют собственные функции Ψ_{n,l,m_l} . Значения функций Ψ_{n,l,m_l} различаются l и m_l .

Таким образом, при одном значении энергии атом может находиться в различных состояниях. Этот вывод является квантово-механическим следствием решений уравнения Шредингера и условий, налагаемых на волновую функцию Ψ . Такие состояния определяют как *вырожденные*. Кратность вырождения энергетического уровня выясняется исходя из возможных значений l и m_l .

6.2. ПРАВИЛО ОТБОРА И СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА

Атомная физика вводит обозначения для состояний электрона с различными значениями квантовых чисел. Состояние с моментом импульса $l = 0$ называют s -состоянием; $l = 1$ — p -состоянием; $l = 2$ — d -состоянием; $l = 3$ — f -состоянием. Далее $n = 1, l = 0$ — $1s$ -состояние электрона; $n = 2, l = 0, 1$ — $2s$ -, $2p$ -состояния электрона соответственно; $n = 3, l = 0, 1, 2$ — $3s$ -, $3p$ -, $3d$ -состояния электрона соответственно и т. д.

Квантовая механика устанавливает правило отбора, которое ограничивает число возможных переходов в атоме, связанных с испусканием и поглощением света. Доказано, что для электрона в центрально-симметричном поле ядра разрешены такие переходы, для которых:

- Δl удовлетворяет условию

$$\Delta l = \pm 1, \quad (167)$$

т. е. возможны такие переходы, для которых l изменяется на единицу;

• изменение магнитного квантового числа m_l удовлетворяет условию

$$\Delta m_l = 0, \pm 1. \quad (168)$$

В этой терминологии спектральные линии атома водорода (рис. 25) отвечают переходам:

- для серии Лаймана $np \rightarrow 1s$ ($n = 2, 3, \dots$);
- для серии Бальмера $np \rightarrow 2s$, $ns \rightarrow 2p$, $nd \rightarrow 2p$ ($n = 3, 4, \dots$)

и т. д.

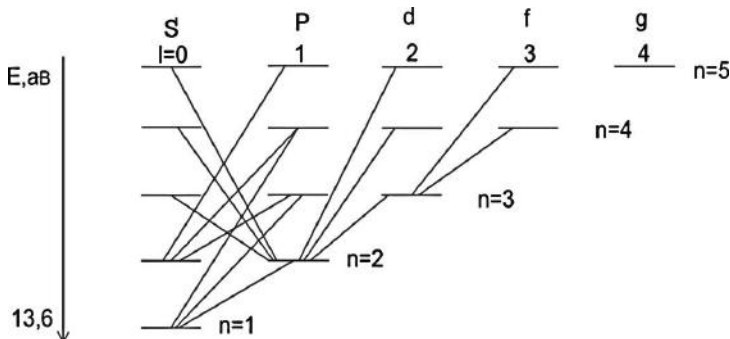


Рис. 25
Спектр атома водорода

Отказываясь от классического представления об электронных орбитах, квантовая механика для каждого энергетического состояния определяет волновую функцию, квадрат модуля которой есть вероятность обнаружения электрона в данной единице объема.

Поскольку вероятность обнаружения электрона в различных частях атома различна, его представляют «размазанным» в своем движении по всему объему как электронное облако, плотность которого характеризует вероятность нахождения электрона в различных точках объема атома.

6.3. 1s-СОСТОЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА В АТОМЕ

Волновая функция Ψ электрона для атома водорода в 1s-состоянии зависит только от расстояния r электрона до ядра, так как сферическая симметрия состояния 1s не зависит от углов θ и ϕ , а волновая функция для $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$ равна

$$\Psi = \Psi_{100}(r), \quad (169)$$

и уравнению Шредингера в этом случае соответствует решение:

$$\Psi = C e^{-r/a}, \quad (170)$$

где $a = \hbar^2 4\pi\epsilon_0 / m e^2$ — первый боровский радиус.

Константу C определяют из условия нормировки:

$$\int_0^{\infty} |\Psi|^2 dV = \int_0^{\infty} C^2 e^{-2r/a} 4\pi r^2 dr = 1,$$

откуда следует:

$$C = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}. \quad (171)$$

Нормированная волновая функция для $1s$ -состояния с учетом выражений (169)–(171) имеет вид:

$$\Psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}. \quad (172)$$

Формула для вероятности в этом случае:

$$dW = \int_0^{\infty} |\Psi|^2 dV = |\Psi|^2 4\pi r^2 dr, \quad (173)$$

которая с учетом (172) примет вид:

$$dW = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a} 4\pi r^2 dr. \quad (174)$$

Исследование выражения $\frac{dW}{dr}$ на максимум дает $r_{\max} = a$, т. е. в основном состоянии атома водорода наиболее вероятное расстояние от электрона до ядра есть расстояние, равное боровскому радиусу.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАЧИ

1. Записать уравнение Шредингера для электрона в атоме водорода.
2. Что характеризуют квантовые числа n, l, m ?
3. Каковы правила отбора и состояния электрона?
4. Что такое $1s$ -состояние электрона в атоме?
5. Чему равен первый боровский радиус?
6. Что вместо классической электронной орбиты вводит квантовая теория?

7. Что такое вырожденные состояния?

8. Состояние электрона в атоме водорода описывается волновой функцией $\Psi(r) = Ae^{-\alpha r}$, где A — поправочный коэффициент и α — некоторые постоянные. Найти значение энергии электрона E .

9. Ψ -функция, задающая состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\Psi(r) = B(1 + br)e^{-\beta r}$, где B , b , β — некоторые постоянные. Вычислить энергию электрона в атоме.

10. Электрон находится в основном состоянии в атоме водорода с волновой функцией $\Psi(r) = A \exp(-r/r_0)$, где $A = 1/\sqrt{\pi r_0^3}$, r_0 — первый боровский радиус. Вычислить электростатический потенциал ϕ_0 , создаваемый электроном в центре атома.

11. Определить волновую Ψ -функцию для свободной частицы в s -состоянии.

12. Определить наиболее вероятное расстояние от ядра для $2p$ - и $3d$ -электронов.

13. Вычислить, во сколько раз орбитальный момент импульса электрона, находящегося в f -состоянии, больше, чем для электрона в p -состоянии.

7. АТОМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

7.1. ОПЫТ ШТЕРНА — ГЕРЛАХА. СПИН ЭЛЕКТРОНА

Наличие у атомов магнитных моментов и их квантование было доказано опытами О. Штерна и В. Герлаха в 1922 г. Пучок атомов исследуемого элемента, испаряющегося в печи, проходил через сильное магнитное поле между полюсными наконечниками N и S электромагнита. Один из наконечников имел вид призмы с острым ребром, а вдоль другого была выточена канавка. Такая конфигурация делала магнитное поле сильно неоднородным (рис. 26).



Рис. 26
Опыт Штерна — Герлаха

Пройдя через магнитное поле, пучок атомов попадал на стеклянную фотопластинку и оставлял на ней след в виде двух резких полос. Это означало, что узкий пучок атомов водорода, заведомо находящихся в s -состоянии, в неоднородном магнитном поле расщеплялся на два пучка. Это противоречило классическим представлениям, согласно которым расщепления не должно быть, так как магнитное поле не должно влиять на движение электрона по стационарной орбите с нулевым магнитным моментом (основное состояние). Наличие двух пучков связывали с тем, что у электрона в атоме существует еще один момент импульса, который может иметь только два значения.

Позже с помощью спектральных приборов большой разрешающей способности было доказано, что спектральные линии атома водорода являются дублетами даже в отсутствие магнитного поля. Для

описания близко расположенных уровней трех квантовых чисел оказалось недостаточно.

В 1925 г. существование тонкой структуры спектральных линий Дж. Уленбек и С. Гаудсмит объяснили наличием у электрона собственного механического момента импульса — *спина*, квантовой величины, не имеющей классического аналога и связанного с ним магнитного момента.

Спин квантуется по закону:

$$M_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}, \quad (175)$$

где s — спиновое квантовое число.

Проекция M_{sz} спина квантуется так, что вектор \vec{M}_s может принимать $(2s + 1)$ ориентаций.

В опытах Штерна и Герлаха обнаружилось две ориентации:

$$2s + 1 = 2 \Rightarrow s = 1/2.$$

Проекция спина на направление внешнего магнитного поля определяется выражением:

$$M_{sz} = \hbar m_s, \quad (176)$$

где m_s — магнитное спиновое квантовое число, имеющее только два значения $\pm 1/2$.

Принято говорить, что спин электрона имеет только два направления: по полю и против поля.

Таким образом, состояние электрона в атоме задают четыре квантовых числа: главное, орбитальное, магнитное и спиновое.

В дальнейшем выяснилось, что спином обладают и другие элементарные частицы (нуклоны, фотоны и др.).

7.2. ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ

Рассмотрение движения системы одинаковых частиц в рамках квантовой механики обнаруживает новые особые свойства частиц, не имеющие аналогов в классической физике.

Под одинаковыми (тождественными) частицами будем понимать частицы, имеющие одинаковые массу m , заряд e , спин s , так, что при одинаковых условиях эти частицы ведут себя одинаковым образом. Например, система, состоящая из электронов с одинаковым зарядом, массой, спином, — это *система из тождественных частиц*.

Возникающий вопрос о том, тождественны ли друг другу все представители частиц одного рода или нет, можно решать, опираясь на квантовую механику и опыт. Для рассмотрения этого вопроса нужно изучить наиболее простые особенности совокупностей, состоящих из одинаковых частиц.

Для системы, состоящей из N одинаковых частиц, положение каждой k -й частицы задается тремя координатами x_k, y_k, z_k , и, если частица обладает спином, — еще и четвертой координатой s_k . Энергия частицы массой m во внешнем поле обозначается $U(q_k, t)$, а энергия взаимодействия k -й и j -й частиц системы — $W(q_k, q_j)$. Оператор Гамильтона для такого случая равен:

$$\begin{aligned} \hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_i, \dots, q_N, t) = \\ = \sum_{k=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k^2 + U(q_k, t) \right] + \sum_{k>j=1}^N W(q_k, q_j). \end{aligned} \quad (177)$$

Поскольку на одинаковые частицы любое внешнее поле действует одинаковым образом, то в выражении (177) массы частиц, энергия во внешнем поле U и энергия взаимодействия W для всех частиц одинаковы. Если в выражении (177) переставить местами координаты k -й и j -й частиц, то гамильтониан не изменится:

$$\begin{aligned} \hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \\ = \hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N, t). \end{aligned} \quad (178)$$

Если среди N частиц будет иметься хотя бы одна отличная, то равенство (178) не будет иметь места. Для совокупности одинаковых частиц общее свойство гамильтониана формулируется следующим образом:

гамильтониан системы одинаковых частиц инвариантен (симметричен) относительно перестановки координат любой пары частиц.

В квантовой механике для рассмотрения перестановки вводят оператор перестановки частиц \hat{P}_{kj} , который действует на функцию следующим образом:

$$\hat{P}_{kj} f(\dots, q_k, \dots, q_j, \dots) = f(\dots, q_j, \dots, q_k, \dots). \quad (179)$$

Оператор перестановки является линейным оператором, и его действие на гамильтониан (178) имеет вид:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{kj}\hat{H}(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \\ = \hat{H}(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)\hat{P}_{kj}, \end{aligned} \quad (180)$$

т. е. оператор \hat{P}_{kj} коммутирует с гамильтонианом системы одинаковых частиц:

$$\hat{P}\hat{H}\Psi = \hat{H}\hat{P}\Psi. \quad (181)$$

Согласно условию (178) волновая функция для системы N одинаковых частиц равна $\Psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$. Она должна удовлетворять уравнению Шредингера:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \\ = \hat{H}(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) \Psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t). \end{aligned} \quad (182)$$

Если подействуем оператором перестановки на уравнение (182), что приведет к перестановке координат k -й и j -й частиц, получим:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{P}_{kj}\Psi) = \hat{P}_{kj}(\hat{H}\Psi). \quad (183)$$

Симметричность гамильтониана для одинаковых частиц относительно перестановки частиц позволяет переставить операторы \hat{P}_{kj} и \hat{H} в (183) так, что

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{P}_{kj}\Psi) = \hat{H}(\hat{P}_{kj}\Psi). \quad (184)$$

Таким образом, если $\Psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$ является решением уравнения Шредингера (182), то и функция Ψ' , являющаяся результатом действия оператора перестановки \hat{P}_{kj} на волновую функцию:

$$\Psi' = \hat{P}_{kj}\Psi = \Psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) \quad (185)$$

является решением этого уравнения.

Другими словами, Ψ' представляет собой одно из возможных состояний системы. Отличие в том, что k -я частица теперь занимает положение j -й частицы, а та, в свою очередь, занимает состояние k -й. Рассуждая подобным образом, можно получить новые возможные состояния системы Ψ'' , Ψ''' , которые отличаются друг от друга распределением частиц по состояниям.

Единственное различие одинаковых частиц — это различие по состояниям, которое в квантовой теории не работает. Можно гово-

речь лишь о состоянии всей совокупности в целом, а не о распределении одинаковых частиц по состояниям. Фундаментальный принцип квантовой механики — это *принцип неразличимости тождественных частиц*:

невозможно экспериментально различить тождественные частицы.

Другими словами, в совокупности одинаковых частиц реализуются такие состояния, которые не меняются при обмене одинаковых частиц.

Симметричные и антисимметричные состояния.

Принцип тождественности утверждает, что если для N одинаковых частиц $\Psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$ есть волновая функция, описывающая состояние системы, то и $\Psi'(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$ описывает состояние той же системы, если оно получено обменом k -го и j -го состояний. Фактически Ψ и Ψ' описывают одно и то же состояние.

Две волновые функции, описывающие одно и то же состояние, отличаются постоянным множителем так, что из принципа тождественности вытекает:

$$\Psi'(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \lambda \Psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t), \quad (186)$$

где λ — постоянный множитель.

Выражение (186) может быть представлено в операторном виде:

$$\hat{P}_{kj} \Psi = \lambda \Psi, \quad (187)$$

которое есть уравнение для собственных функций Ψ и собственных значений λ оператора перестановки \hat{P}_{kj} .

Решение уравнения (187) состоит в применении к нему еще раз оператора перестановки:

$$\hat{P}_{kj}^2 \Psi = \lambda \hat{P}_{kj} \Psi. \quad (188)$$

Используя формулы (185) и (187), получаем:

$$\Psi = \lambda^2 \Psi,$$

т. е.

$$\lambda^2 = 1$$

или

$$\lambda = \pm 1$$

— собственные значения оператора \hat{P}_{kj} .

Собственные функции определяются уравнениями:

$$\hat{P}_{kj}\Psi = +\Psi, \quad \lambda = 1; \quad (189)$$

$$\hat{P}_{kj}\Psi = -\Psi, \quad \lambda = -1. \quad (190)$$

Получились собственные функции оператора перестановки:

(189) — при перестановке координат k -й и j -й частиц Ψ не меняется;

(190) — при такой же перестановке Ψ меняет знак на противоположный.

Функции (189) называют *симметричными*, (190) — *антисимметричными* относительно перестановки.

Принцип тождественности частиц накладывает условие, что возможны только два класса состояний для одинаковых частиц:

$$\hat{P}_{kj}\Psi_s = \Psi_s \quad (k, j — \text{любые}) \quad (191)$$

— симметричные во всех частицах и

$$\hat{P}_{kj}\Psi_a = -\Psi_a \quad (k, j — \text{любые}) \quad (192)$$

— антисимметричные во всех частицах.

Для одной и той же системы частиц переходов между этими состояниями не может быть. Это утверждение можно подтвердить, если воспользоваться уравнением Шредингера — положением о том, что гамильтониан симметричен относительно одинаковых частиц:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \quad (193)$$

Учитывая приращение волновой функции за время dt , перепишем выражение (193):

$$d_t\Psi = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\Psi dt. \quad (194)$$

Пусть в момент $t = 0$ $\Psi = \Psi_s$ — симметричная функция. Тогда произведение $\hat{H}\Psi_s$ дает симметричную функцию координат частиц, так как \hat{H} симметричен. Следовательно, приращение функции $d_t\Psi$ будет симметричным.

В операторном виде имеем:

$$\hat{P}_{kj}(\hat{H}\Psi_s) = \hat{H}(\hat{P}_{kj}\Psi_s) = \hat{H}\Psi_s, \quad (195)$$

откуда с учетом (194):

$$\hat{P}_{kj}(d_t\Psi_s) = d_t\Psi_s. \quad (196)$$

Симметрия функции остается неизменной для всех моментов времени от $t = -\infty$ до $t = +\infty$.

Для антисимметричной функции аналогично:

$$\hat{P}_{kj}\Psi_a = -\Psi_a.$$

Тогда

$$\hat{P}_{kj}(\hat{H}\Psi_a) = \hat{H}(\hat{P}_{kj}\Psi_a) = -\hat{H}\Psi_a.$$

Откуда

$$\hat{P}_{kj}(d_t\Psi_a) = -d_t\Psi_a \quad (197)$$

— приращение антисимметричной функции стало антисимметричным.

Приведенные доказательства подтверждают положение о том, что деление состояний на два класса носит «абсолютный» характер: если какая-либо система в какой-либо момент обнаружена в состоянии класса Ψ_s или Ψ_a , то она никогда не перейдет из одного класса в другой даже при изменении внешнего поля. Следовательно, при любом изменении внешнего поля гамильтониан остается симметричным.

7.3. ЧАСТИЦЫ БОЗЕ И ЧАСТИЦЫ ФЕРМИ. ПРИНЦИП ПАУЛИ

Принцип тождественности одинаковых частиц в квантовой механике ведет к определению двух классов состояний. На выбор того или иного класса состояния для какой-либо системы частиц влияет только сама природа частиц.

Экспериментально установлено, что в природе существуют частицы, которые не принадлежат ни одному из данных классов. Частицы с нулевым или целочисленным спином, описываемые симметричными волновыми функциями, подчиняющимися статистике Бозе — Эйнштейна, называются *бозонами*. Для них спин равен:

$$s = \hbar m, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (198)$$

Частицы с полуцелым спином, описываемые антисимметричными волновыми функциями, согласно статистике Ферми — Дирака называют *фермионами*:

$$s = \hbar m, \quad m = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \quad (199)$$

Все простейшие «элементарные» частицы обладают спином 0, $\frac{1}{2}$ или 1.

Электроны, протоны, нейтроны, гипероны, μ -мезоны, нейтрино и их античастицы обладают спином $\frac{1}{2}$. Их называют *частицами Ферми*.

π - и K -мезоны — частицы Бозе со спином 0.

Фотон — единственная элементарная частица со спином 1 — подчиняется статистике Бозе.

Принадлежность сложной системы к тому или иному классу элементарных частиц устанавливается числом и классом простых частиц, являющихся составной частью сложной системы.

Если тождественные частицы имеют одинаковые квантовые числа, то их волновая функция симметрична относительно перестановки частиц. Следовательно, два одинаковых фермиона, входящих в одну систему, не могут находиться в одинаковых состояниях, так как для фермионов волновая функция должна быть антисимметричной. Обобщая опытные данные, В. Паули сформировал **принцип исключения**, согласно которому *системы фермионов встречаются в природе только в состояниях, описываемых антисимметричными волновыми функциями* (квантово-механическая формулировка принципа Паули).

Самая простая формулировка принципа Паули:

в одном и том же атоме не может быть более одного электрона с одинаковым набором четырех квантовых чисел:

$$z(n, l, m_l, m_s) = 0 \text{ или } 1.$$

Известно, что квантовому числу n соответствует n^2 состояний с различными l и m_l . Спиновое квантовое число m_s принимает значения лишь $\pm 1/2$. Число электронов, находящихся в состояниях, определяемых значением главного квантового числа n , равно $2n^2$.

Число электронов в атоме, имеющих одно и то же n , называют *электронным слоем*. Слои подразделяются на *оболочки* с одинаковым l .

Поскольку l принимает значения от 0 до $n - 1$, число оболочек равно n . Количество электронов в оболочке определяется магнитным и спиновым квантовыми числами. В таблице 1 представлены максимальные числа электронов в состояниях с различными главным и орбитальным квантовыми числами.

**Распределение электронов
по электронным слоям и оболочкам**

Главное квантовое число n	1		2		3			4				5				
Символ слоя	K		L		M			N				O				
Максимальное число электронов в слое	2		8		18			32				50				
Орбитальное квантовое число l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	4	
Символ оболочки	$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$	$4p$	$4d$	$4f$	$5s$	$5p$	$5d$	$5f$	$5g$	
Максимальное число электронов в оболочке	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	18	

7.4. ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА

В 1869 г. Д. И. Менделеев открыл периодический закон изменения химических и физических свойств элементов в зависимости от их атомных масс. Графическим выражением периодического закона является Периодическая система элементов Д. И. Менделеева (табл. 2).

Принцип Паули, лежащий в основе систематического заполнения электронных состояний в атомах, позволяет объяснить расположение элементов в таблице Менделеева.

Если начать с первого элемента — водорода, то каждый последующий атом можно получать, увеличивая заряд ядра на один протон и добавляя один электрон, который помещается, согласно принципу Паули, в соответствующий слой с наименьшей энергией.

Единственный электрон атома водорода находится в состоянии $1s$, характеризующимся квантовыми числами $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$, $m_s = \pm 1/2$ (ориентация его спина произвольна). Энергия связи (ионизации) для водорода составляет 13,6 эВ.

Оба электрона атома гелия He находятся в состоянии $1s$. Спины этих электронов ориентированы в противоположных направлениях. На атоме He заканчивается заполнение K -слоя.

Структура Периодической системы Д. И. Менделеева

Элемент z	K		L		M		N		Основной терм
	$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$	$4p$	
1H	1	—	—	—	—	—	—	—	$2s_{1/2}$
2He	2	—	—	—	—	—	—	—	$1s_0$
3Li	2	1	—	—	—	—	—	—	$2s_{1/2}$
4Be	2	2	—	—	—	—	—	—	$1s_0$
5B	2	2	1	—	—	—	—	—	$2p_{1/2}$
6C	2	2	2	—	—	—	—	—	$3p_0$
7N	2	2	3	—	—	—	—	—	$4s_{3/2}$
8O	2	2	4	—	—	—	—	—	$3p_2$
9F	2	2	5	—	—	—	—	—	$2p_{3/2}$
10Ne	2	2	6	—	—	—	—	—	$1s_0$
11Na	2	2	6	1	—	—	—	—	$2s_{1/2}$
12Mg	2	2	6	2	—	—	—	—	$1s_0$
13Al	2	2	6	2	1	—	—	—	$2p_{1/2}$
14Si	2	2	6	2	2	—	—	—	$3p_0$
15P	2	2	6	2	3	—	—	—	$4s_{3/2}$
16S	2	2	6	2	4	—	—	—	$3p_2$
17Cl	2	2	6	2	5	—	—	—	$2p_{3/2}$
18Ar	2	2	6	2	6	—	—	—	$1s_0$
19K	2	2	6	2	6	—	1	—	$2s_{1/2}$
20Ca	2	2	6	2	6	—	2	—	$1s_0$
21Sc	2	2	6	2	6	1	2	—	$2D_{3/2}$
22Ti	2	2	6	2	6	2	2	—	$3F_2$

Для лития $\text{Li } z = 3$. В атоме Li третий электрон, согласно принципу Паули, располагается в L -слое с $n = 2$ ($2s$ -состояние). Электронная конфигурация для атома Li : $1s^2 2s^1$.

Достройка L -слоя идет до Ne . У него полностью заполнены K - и L -слои. He и Ne — инертные газы с высоким ионизационным потенциалом.

Начиная с Na до Ar заполняется M -слой (в нем 18 вакансий). Следующий элемент с $z = 19$ калий K получается добавлением одного заряда к ядру Ar и одного электрона (19-го). Он уже помещается в N -слое, так как состояние с недостроенным M -слоем из-за взаимодействия электронов обладает меньшей энергией, чем достройка M -слоя до конца. Кроме того, энергия электронов определяется не только главным квантовым числом, но и вкладом всех остальных квантовых

чисел. Такой принцип заполнения электронных слоев соблюдается и в дальнейшем.

Таким образом, периодичность химических и физических свойств элементов связана с повторяемостью электронных конфигураций во внешних электронных слоях атомов родственных элементов.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАЧИ

1. Что такое спин электрона? Что он выражает? Есть ли у него классический аналог?

2. Пояснить схему опыта Штерна и Герлаха.

3. Что выражает принцип Паули?

4. Как объясняется Периодическая система Д. И. Менделеева и принцип заполнения электронами энергетических уровней в атоме с позиций квантовой теории?

5. С чем связана периодичность физических и химических свойств элементов Периодической системы Д. И. Менделеева?

6. Определить, какой это элемент, если конфигурация электронной структуры атома описывается формулой $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$.

7. Электрон имеет набор квантовых чисел: $n = 3$, $l = 1$, $m_l = -1$. Найти, на каком энергетическом уровне находится электрон. Определить форму орбитали, если $m_s = +1/2$.

8. Определить квантовые числа для всех электронов атома углерода.

9. Написать электронные формулы ионов Sn^{+4} , S^{-2} , Cr^{+3} .

10. Электронный слой, характеризуемый главным квантовым числом 3, полностью заполнен. Какое количество электронов имеет одинаковые магнитные квантовые числа, равные $m_l = 2$?

8. ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

8.1. СОСТАВ И ЗАРЯД АТОМНОГО ЯДРА. МАССОВОЕ И ЗАРЯДОВОЕ ЧИСЛА

Предложенная Резерфордом в 1911 г. ядерная модель атома привела к появлению и развитию ядерной физики как науки о строении, свойствах и превращениях атомных ядер.

Само ядро — положительно заряженная центральная часть атома, в которой сосредоточена почти вся масса атома. Протонно-нейтронная модель ядра была предложена российским физиком Д. Д. Иваненко. Протон (p) имеет положительный заряд, равный заряду электрона, и массу покоя $m_p = 1,672 \cdot 10^{-27}$ кг $\sim 1836 m_e$, где m_e — масса электрона. Нейтрон (n) — нейтральная частица с массой покоя $m_n = 1,6749 \cdot 10^{-27}$ кг $\sim 1839 m_e$. Протоны и нейтроны называют *нуклонами* (от лат. *nucleus* — ядро). Их общее число называют массовым числом A . Заряд ядра ze , где e — заряд протона, z — число протонов. Атом в целом нейтрален, потому заряд ядра определяет число электронов в атоме.

Массовое число равно:

$$A = z + N, \quad (200)$$

где N — число нейтронов.

Ядро атома химического элемента обозначается ${}_z^AX$.

Ядра с разными A , но с одинаковыми z (с разным числом нейтронов $N = A - z$) называют *изотопами*. Например, ${}_{14}^{28}\text{S}$ и ${}_{14}^{29}\text{S}$.

Ядра с одинаковыми A , но разными z называют *изобарами* (${}_{4}^{10}\text{Be}$, ${}_{5}^{10}\text{Be}$, ${}_{6}^{10}\text{C}$ — *изобары* с $A = 10$).

Атомы изотопов обладают близкими физико-химическими свойствами, за исключением трех изотопов водорода: ${}_1^1\text{H}$, ${}_1^2\text{H}$, ${}_1^3\text{H}$, имеющих названия протий, дейтерий и тритий соответственно.

Эмпирическая формула радиуса ядра имеет вид:

$$R = R_0 A^{1/3}, \quad (201)$$

где

$$R_0 = (1,3 - 1,7) \cdot 10^{-15} \text{ м.}$$

Диаметр ядра в 100 тыс. раз меньше диаметра атома.

8.2. МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ ЯДРА И ЕГО СПИН

Собственный момент импульса ядра — спин ядра — складывается из спинов нейтронов и протонов, поэтому при нечетном количестве нуклонов принимает полуцелое значение, при четном — целое или нулевое.

Спин ядра квантуется:

$$L_{\text{я}} = \hbar \sqrt{I(I+1)}, \quad (202)$$

где I — спиновое ядерное квантовое число.

Магнитный момент ядра связан со спином ядра:

$$P_{\text{тя}} = g_{\text{я}} L_{\text{я}}, \quad (203)$$

где $g_{\text{я}}$ — коэффициент пропорциональности, называемый *ядерным гиромагнитным отношением*.

Единицей магнитных моментов ядер служит ядерный магнетон:

$$\mu_{\text{я}} = \frac{e\hbar}{2m_p}, \quad (204)$$

где m_p — масса протона.

Ядерный магнетон в 1836 раз меньше магнетона Бора, из чего следует, что магнитные свойства атомов определяются, в основном, магнитными свойствами их электронов.

Во внешнем магнитном поле наблюдается расщепление уровней энергии атома на близко расположенные подуровни. Это обусловлено взаимодействием магнитного момента ядра с магнитным полем электронов в атоме.

Метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР), позволяющий определить магнитные моменты ядер, заключается в следующем. На вещество, находящееся в сильном постоянном магнитном поле, действуют слабым радиочастотным магнитным полем, частотами, соответствующими частотам переходов между ядерными подуровнями. При этом возникает резкий (резонансный) максимум поглощения. То есть ЯМР обусловлен происходящими под влиянием переменного магнитного поля квантовыми переходами между ядерными энергетическими подуровнями. Это явление используется в ЯМР-томографии.

8.3. ЯДЕРНЫЕ СИЛЫ. МОДЕЛИ ЯДРА

Ядерными называют силы, действующие между нуклонами. Они значительно превышают кулоновские силы отталкивания, гравитационные и магнитные. Ядерные силы относят к классу сильных взаимодействий. Они являются короткодействующими силами притяжения.

Ядерные силы проявляют зарядовую независимость, т. е. притяжения n – n , p – p и n – p одинаковы по величине. Это говорит о том, что ядерные силы имеют неэлектрическую природу и зависят от взаимной ориентации спинов взаимодействующих нуклонов. Этот тип взаимодействий не является центральным.

Существуют следующие модели ядра.

1. *Капельная модель* — по аналогии между поведением нейтронов и протонов в ядре и поведением молекул в капле жидкости. Модель объяснила механизм ядерных реакций, например реакции деления ядер. Но данная теория не смогла объяснить повышенную устойчивость некоторых ядер.

2. *Оболочечная модель*. Предполагает распределение нуклонов в ядре по дискретным энергетическим уровням (оболочкам). Заполнение уровней подчиняется принципу Паули. Ядра с полностью заполненными оболочками наиболее устойчивы. Такие ядра называют магическими. Эта модель хорошо описывает легкие и средние ядра, а также ядра, находящиеся в основном (невозбужденном) состоянии.

8.4. МАССА И ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ЯДРА

Существование определенной связи между нуклонами обеспечивает устойчивость атомного ядра.

Масса ядра определяется с помощью специальных приборов — масс-спектрометров, которые показывают, что масса ядра меньше, чем сумма масс составляющих его нуклонов. Связано это с тем, что при образовании ядра выделяется определенное количество энергии. И наоборот, для полного разделения ядра на отдельные нуклоны нужно произвести работу, равную энергии связи ядра $E_{\text{св}}$. Тогда энергия связи есть разность между энергией связанных нуклонов в ядре и их энергией в свободном состоянии:

$$E_{\text{св}} = (z_{\text{пр}} + (A - z)m_n - m_{\text{я}})c^2, \quad (205)$$

где $\Delta m = (z_{\text{пр}} + (A - z)m_n - m_{\text{я}})$ — дефект массы ядра.

Удельной энергией *связи* $\Delta E_{\text{св}}$ называют энергию связи, приходящуюся в среднем на один нуклон. Она характеризует устойчивость

ядра. Чем больше $\Delta E_{\text{св}} = E_{\text{св}}/A$, тем устойчивее ядро. $\Delta E_{\text{св}}$ зависит от массового числа A . Нуклоны сильнее всего связаны в ядрах с массовым числом в интервале 50–60. Дальнейшее возрастание A приводит к увеличению числа протонов в ядре и возрастанию вследствие этого кулоновского отталкивания. Поэтому энергетически выгодно:

- деление тяжелых ядер на более легкие;
- слияние легких ядер в более тяжелые (термоядерный синтез).

Эти процессы протекают с выделением большого количества энергии.

Есть наиболее устойчивые ядра, которые называют магическими. У них число протонов или число нейтронов равны одному из магических чисел: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. Особенно стабильны дважды магические ядра, у которых и число протонов, и число нейтронов из магических чисел (${}^4_2\text{He}$, ${}^{16}_8\text{O}$, ${}^{40}_{20}\text{Ca}$, ${}^{48}_{20}\text{Ca}$, ${}^{208}_{82}\text{Pb}$).

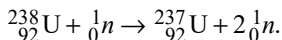
8.5. ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ И ИХ ОСНОВНЫЕ ТИПЫ

Ядерные реакции — это превращения атомных ядер при взаимодействии с частицами или друг с другом. Символически ядерная реакция записывается следующим образом:



где X и Y — исходное и конечное ядра; a и b — бомбардирующая и испускаемая частицы.

Например,



Эффективность взаимодействия характеризуется эффективным сечением σ , которое имеет разные значения для разных видов взаимодействия. Эффективное сечение рассеяния определяет процессы рассеяния, эффективное сечение поглощения — процессы поглощения.

Выражение, определяющее эффективное сечение ядерной реакции, имеет вид:

$$\sigma = \frac{dN}{nNd\Omega}, \quad (207)$$

где N — число частиц, падающих за единицу времени на единицу площади поперечного сечения вещества; n — число ядер в единице

объема; dN — число этих частиц, вступающих в ядерную реакцию в слое толщиной dx .

σ характеризует вероятность того, что при падении пучка частиц на вещество произойдет реакция, и имеет размерность площади.

В любой ядерной реакции выполняются законы сохранения электрических зарядов и массовых чисел:

сумма зарядов (и сумма массовых чисел) ядер и частиц, вступающих в ядерную реакцию, равна сумме зарядов (и сумме массовых чисел) конечных продуктов (ядра частиц) реакции.

Законы сохранения энергии, импульса и момента импульса также выполняются.

В отличие от радиоактивного распада, который всегда протекает с выделением энергии, ядерные реакции могут быть как экзотермическими (с выделением энергии), так и эндотермическими (с поглощением энергии).

Предположение Н. Бора о том, что ядерные реакции протекают в две стадии по схеме:



дало возможность объяснения механизма многих ядерных реакций.

Первая стадия данного механизма — это захват ядром X частицы α , приблизившейся к нему на расстояние $2 \cdot 10^{-15}$ м (расстояние действия ядерных сил), и образование промежуточного ядра C (составное ядро). Энергия влетевшей в ядро частицы распределяется между нуклонами составного ядра, в результате чего оно оказывается в возбужденном состоянии. При столкновении нуклонов составного ядра один из нуклонов или α -частица может получить энергию, достаточную для вылета из ядра и начала второй стадии ядерной реакции — распада составного ядра на Y -ядро и частицу b .

Время, необходимое частице для преодоления расстояния, равного диаметру ядра (10^{-15} м), называют *характерным ядерным временем* τ . Например, для частицы с энергией 1 МэВ (скорость $\approx 10^7$ м/с) $\tau = 10^{-15}$ м/ 10^7 м/с $\approx 10^{-22}$ с.

С другой стороны, время жизни составного ядра равно 10^{-16} – 10^{-12} с, составляя $(10^6$ – $10^8)\tau$. За время жизни составного ядра может произойти много столкновений нуклонов, и энергия может перераспределиться между ними. Характер второй стадии ядерной реак-

ции (испускаемая частица b) не зависит от способа образования составного ядра.

Если испущенная частица тождественна захваченной ($b = a$), то схема (160) описывает рассеивание частицы, если $b \neq a$ — испущенная частица не тождественна захваченной, то происходит ядерная реакция.

Возможны ядерные реакции без составного ядра, они называются *прямыми ядерными взаимодействиями* (реакции на быстрых нуклонах).

Ядерные реакции классифицируют по:

- роду участвующих в них частиц — реакции под действием заряженных и незаряженных частиц и γ -квантов;
- энергиям, вызывающим ядерные реакции, — реакции при 1) малых энергиях, в основном происходящие с нейтронами; 2) средних энергиях (до нескольких МэВ), происходящие с участием γ -квантов и заряженных частиц (протонов); 3) высоких энергиях (тысячи МэВ), приводящие к рождению элементарных частиц;
- роду участвующих в них ядер — реакции на легких ($A < 50$), средних ($50 < A < 100$) и тяжелых ядрах ($A > 100$);
- характеру ядерных превращений — реакции с испусканием нейтронов, реакции с испусканием заряженных частиц, реакции захвата.

8.6. ЦЕПНАЯ РЕАКЦИЯ ДЕЛЕНИЯ

При делении ядер испускаемые вторичные нейтроны могут вызывать новые акты деления, в которых вызывающие реакцию частицы образуются как продукты этих реакций.

Такие цепные реакции деления характеризуются коэффициентом размножения k нейтронов — отношением числа нейтронов в данном поколении к их числу в предыдущем поколении. Условием развития цепной реакции является $k > 1$.

Не все вторичные нейтроны вызывают последующее деление ядер из-за различных причин.

Во-первых, конечные размеры пространства, где происходит цепная реакция, и большая проникающая способность нейтронов позволяют части из них покинуть активную зону раньше, чем они будут захвачены ядром.

Во-вторых, часть нейтронов захватывается ядрами неделящихся примесей в активной зоне. Минимальные размеры активной зоны, при которых возможна цепная реакция, называются *критическими размерами*. Минимальная масса делящегося вещества, необходимая для осуществления цепной реакции, называется *критической массой*.

Скорость нарастания цепной реакции определяется выражением

$$\frac{dN}{dt} = \frac{N(k-1)}{T}, \quad (209)$$

интегрирование которого даст

$$N = N_0 e^{(k-1)t/T}, \quad (210)$$

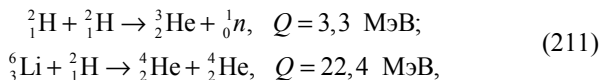
где N_0 — число нейтронов в начальный момент времени.

При $k > 1$ идет *развивающаяся реакция*, число делений растет. При $k < 1$ протекает *затухающая реакция*.

Цепные реакции делятся на *управляемые* и *неуправляемые*. Взрыв атомной бомбы — пример неуправляемой цепной реакции. Управляемые цепные ядерные реакции осуществляются на атомных электростанциях, в ядерных реакторах с помощью замедлителя, например графита.

8.7. СИНТЕЗ АТОМНЫХ ЯДЕР

Образование тяжелых ядер из более легких сопровождается выделением большого количества энергии. Этот процесс называют синтезом ядер. Например,



где Q — энергосодержание.

Синтез атомных ядер отличается от деления тяжелых ядер тем, что выделяемая в них энергия на один нуклон значительно больше. Например, при делении ядра выделяется энергия 200 МэВ, что составляет 0,84 МэВ на один нуклон, а в реакции синтеза (163) эта величина равна 3,5 МэВ.

Исследуем температуру, при которой протекает синтез ядер дейтерия ${}^2_1\text{H}$. Преодолевая потенциальную энергию отталкивания 0,7 МэВ, ядра дейтерия нужно сблизить до расстояния $2 \cdot 10^{-15}$ м. То-

гда на долю каждого сталкивающегося ядра будет приходится 0,35 МэВ — энергия теплового движения, что соответствует температуре $2,6 \cdot 10^9$ К. Отсюда следует, что реакция синтеза ядер дейтерия может происходить лишь при температуре, превышающей на два порядка ($1,3 \cdot 10^7$ К) температуру центральных областей Солнца.

Но на практике реакция синтеза атомных ядер происходит при температуре 10^7 К. Это связано с тем, что при температурах ядерного синтеза любое вещество находится в состоянии плазмы, распределение частиц которой подчиняется закону Максвелла.

Кроме того, синтез ядер может происходить за счет туннельного эффекта.

Синтез тяжелых ядер из легких при температурах выше 10^7 К называют *термоядерным синтезом*, или *термоядерной реакцией*. Именно термоядерные реакции являются одним из источников энергии Солнца и звезд. Они дают огромный выход энергии на единицу массы «горючего» по сравнению с другими превращениями, в том числе делением тяжелых ядер.

8.8. РАДИОАКТИВНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ И РАДИОАКТИВНОСТЬ

Явление самопроизвольного (спонтанного) распада ядер с превращением в другие ядра с испусканием частиц получило название *радиоактивности*. Это явление впервые обнаружил французский физик А. Беккерель в 1896 г. при изучении люминесценции солей урана.

Излучение, которое испускается при распаде ядер, называют радиоактивным излучением. Радиоактивность подразделяют на естественную (наблюдается у неустойчивых природных изотопов) и искусственную (проявляют изотопы, полученные в ядерных реакциях).

Закон радиоактивного распада

$$N = N_0 e^{-\lambda t}, \quad (212)$$

где N_0 — начальное число нераспавшихся ядер в момент $t = 0$; N — число нераспавшихся ядер в момент t ; λ — постоянная радиоактивного распада.

Период полураспада T — время, за которое число нераспавшихся ядер уменьшается вдвое:

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}. \quad (213)$$

Периоды полураспада для естественно-радиоактивных элементов колеблются от десятиллионных долей секунды до многих миллиардов лет.

Среднее время жизни τ радиоактивного ядра есть величина, обратная постоянной радиоактивного распада λ :

$$\tau = \frac{1}{\lambda}. \quad (214)$$

8.9. α - И β -РАСПАД, γ -ИЗЛУЧЕНИЕ

α -распад ядер сопровождается испусканием α -частицы. α -излучение — поток ядер гелия, поляризуемых электрическим и магнитным полями, с высокой ионизирующей и малой проникающей способностями (поглощается слоем толщиной 0,05 мм).

Радиоактивный распад происходит в соответствии с правилами смещения, позволяющими установить, какое ядро возникает в результате распада материнского ядра. Для α -распада



где A_ZX — материнское ядро; ${}^{A-4}_{Z-2}Y$ — дочернее ядро; ${}^4_2\text{He}$ — ядро гелия (α -частица). Правило смещения есть следствие двух законов:

- закона сохранения электрического заряда;
- закона сохранения массового числа: сумма зарядов (массовых чисел) возникающих ядер и частиц равна заряду (массовому числу) исходного ядра.

Квантовая механика объясняет α -распад туннельным эффектом — проникновением α -частицы сквозь потенциальный барьер.

β -распад — самопроизвольный процесс превращения радиоактивного ядра в другое ядро без изменения массового числа, но с изменением зарядового числа на $\Delta z = \pm 1$ с испусканием электрона и антинейтрино. β -излучение отклоняется электрическим и магнитным полями. Его ионизирующая способность меньше, чем в случае α -излучения, но проникающая способность значительно больше. Рождаются β -электроны внутри ядра при превращении нейтрона в протон:

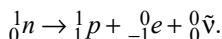
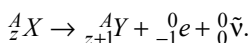
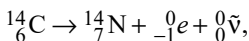


Схема β -распада:



Пример β -распада:



где нейтрино ν — электрически нейтральная частица со спином $\frac{1}{2}$ и нулевой массой покоя; $\bar{\nu}$ — антинейтрино.

Нейтрино участвует только в слабом взаимодействии. Ионизирующая способность нейтрино столь мала, что может произойти один акт ионизации в воздухе на 500 км пути. Его проникающая способность огромна (пробег с энергией 1 МэВ в свинце порядка 10^{18} м).

γ -излучение ядер — коротковолновое электромагнитное излучение, сопровождающее α - и β -распады, а также возникающее при ядерных реакциях. Обладает большой проникающей и слабой ионизирующей способностями и практически не отклоняется в электрическом и магнитном полях. Обладает малой длиной волны $\lambda < 10^{-10}$ м с ярко выраженными корпускулярными свойствами. При прохождении γ -излучения через вещество проявляются фотоэффект, эффект Комптона, ядерный фотоэффект и т. д.

ПРИМЕРЫ РАСЧЕТОВ

Пример. Найти энергию связи ядра $E_{\text{св}}$ изотопа лития ${}^7_3\text{Li}$.

Р е ш е н и е.

Для энергии связи применим формулу:

$$E_{\text{св}} = \Delta m c^2,$$

где $\Delta m = (Zm_p + (A - Z)m_n - m_{\text{я}})$ — дефект массы ядра.

Используя таблицу масс некоторых изотопов, получим:

$$\Delta m = 3 \cdot 1,00783 + 4 \cdot 1,00867 - 7,01600 = 0,04217 \text{ а. е. м.}$$

Учитывая, что 1 а. е. м. соответствует энергии 931 МэВ, то для энергии связи ядра ${}^7_3\text{Li}$ получим:

$$E_{\text{св}} = 0,04217 \cdot 931 = 39,3 \text{ МэВ.}$$

Эту энергию нужно затратить, чтобы расщепить ядро на нуклоны.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАЧИ

1. Какие частицы входят в состав атомного ядра? Их характеристика.
2. Что такое изотопы?

-
3. Что такое изобары?
 4. Что такое ядерное гиромангнитное отношение?
 5. Какие силы действуют в ядре?
 6. Различия между моделями ядра.
 7. Как рассчитать энергию связи ядра?
 8. Что такое радиоактивность?
 9. Что такое α - и β -распад, γ -излучение ядер?
 10. Найти энергию связи $E_{\text{св}}$ ядра дейтерия ${}^2_1\text{H}$.
 11. Вычислить энергию связи, приходящуюся на один нуклон, в ядре ${}^9_4\text{Be}$.
 12. Вычислить постоянную распада λ радона, если за одни сутки число его атомов уменьшается на 18%.
 13. Какое число ядер распадается за 1 с в куске урана ${}^{238}_{93}\text{U}$ массой 1 кг?
 14. При радиоактивном распаде ядра атома радия вылетают α -частицы с кинетической энергией $E_{\text{к}} = 4,78 \text{ МэВ}$. Определить скорость α -частицы и полную энергию E , выделяющуюся при вылете α -частицы.

9. ЭЛЕМЕНТЫ ФИЗИКИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

9.1. ТИПЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

К элементарным частицам относятся электрон, протон, нейтрон и т. д., т. е. частицы, ведущие себя как единое целое, не имеющие составных частей. Они могут рождаться и превращаться друг в друга, но не расщепляться на составляющие.

Элементарные частицы ведут себя как единое целое и обладают способностью к рождению и взаимопревращению. Например, распад нейтрона протекает по схеме:

$$n \rightarrow p + e^{-} + \nu,$$

где нейтрон n превращается в протон p , электрон e^{-} и нейтрино ν .

Нужно отметить, что продукты распада элементарной частицы возникают только в самом этом процессе. До процесса распада их не было совсем, и они не входили в состав нейтрона.

На сегодняшний день открыто несколько сотен элементарных частиц, большинство из которых нестабильно. Источниками частиц высоких энергий, которые позволяют исследовать процессы их преобразования и взаимодействия, являются ускорители. Поэтому физику элементарных частиц называют физикой высоких энергий.

По современным представлениям в природе существует четыре типа фундаментальных взаимодействий: сильное, электромагнитное, слабое и гравитационное. Сравнительный анализ этих типов взаимодействий проводят по скорости процессов при энергиях сталкивающихся частиц около 1 ГэВ.

В таблице 3 приводятся данные по типу взаимодействия и сравнительные характеристики интенсивности взаимодействия в сравнении с сильным взаимодействием, принятым за единицу.

Характеристики фундаментальных взаимодействий

Взаимодействия	Интенсивность	Длительность процессов, с	Радиус действия, см
Сильное	1	10^{-23}	10^{-13}
Электромагнитное	10^{-2}	10^{-20}	∞
Слабое	10^{-14}	10^{-9}	10^{-16}
Гравитационное	10^{-31}	—	∞

• *Сильное, или ядерное, взаимодействие* обеспечивает связь нуклонов в ядрах. Элементарные частицы, подверженные этому типу взаимодействия, относят к классу адронов (протон, нейтрон, гиперон, мезон и др.). На расстояниях больше 10^{-13} см данный тип взаимодействий прекращает свое действие, поэтому они не способны создавать структуры макроскопических размеров.

• Второй тип — *электромагнитные взаимодействия*, осуществляемые посредством электромагнитного поля. Они значительно слабее сильных взаимодействий, но действуют на значительных расстояниях, что делает их главными во многих случаях. Эти силы ответственны за все электрические и магнитные явления, которые мы наблюдаем. Электромагнитное взаимодействие отвечает за взаимодействие положительных ядер и отрицательно заряженных электронов.

• *Слабое взаимодействие* слабее сильного и электромагнитного, но сильнее гравитационного. Слабое взаимодействие является короткодействующим. Оно проявляется на расстояниях значительно меньше размера атомного ядра. Этот тип взаимодействий отвечает за взаимодействие частиц с участием нейтрино и антинейтрино (β - и μ -распад).

Стандартная модель физики элементарных частиц описывает электромагнитные и слабые взаимодействия как разные проявления единого электрослабого взаимодействия, теорию которого разработали в 1968 г. Ш. Глэшоу, А. Салам и С. Вайнберг.

• *Гравитационное взаимодействие* присуще всем частицам, но в силу малости масс оно ничтожно мало. Поэтому современная физика элементарных частиц — это физика без гравитации.

Практически все элементарные частицы являются нестабильными, кроме фотона, электрона и трех нейтрино. Время их жизни варьируется в пределах 10^{-18} – 10^{-11} с.

9.2. КЛАССИФИКАЦИЯ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Все известные частицы подразделяют на бозоны и фермионы.

Бозоны — это частицы с нулевым или целочисленным спином (фотоны, мезоны).

Фермионы — это частицы с полуцелым спином (электрон, мюон, нейтрино, протон, нейтрон).

Поскольку все элементарные частицы являются нестабильными, по времени жизни τ их делят на стабильные, квазистабильные и резонансы.

Резонансы — это частицы, распадающиеся под влиянием сильного взаимодействия со временем жизни 10^{-23} с.

Нестабильные частицы, распадающиеся под воздействием электромагнитного и слабого взаимодействия, со временем жизни 10^{-20} с называют *квазистабильными*.

Стабильными являются частицы, время жизни которых $\tau \rightarrow \infty$ (фотон, электрон, нейтрон, протон).

Существует группа элементарных частиц, являющихся переносчиками взаимодействий:

- фотоны — переносчики электромагнитного взаимодействия;
- W - и Z -бозоны — переносчики слабого взаимодействия;
- глюоны — переносчики сильного взаимодействия;
- гипотетические гравитоны.

Остальные частицы по характеру взаимодействия делят на адроны и лептоны.

Частицы, участвующие только в слабых и электромагнитных взаимодействиях и имеющие спин $1/2$, называют *лептонами*. К ним относятся электроны, мюоны, таоны, нейтрино. В отличие от адронов у лептонов не обнаружена внутренняя структура.

Частицы, участвующие в сильных взаимодействиях, относят к классу *адронов*. Они могут участвовать и в электромагнитных, и в слабых взаимодействиях. Это самый многочисленный класс частиц.

Мезоны — адроны со спином 0 или 1 (бозоны) — π -, K -, μ -мезоны со временем жизни $\sim 10^{-23}$ с.

Барионы — адроны со спином $1/2$ (фермионы) и массой не меньше массы протона. Это протоны и нейтроны (нуклоны), гипероны и множество барионных резонансов.

Гипероны — барионы со временем распада 10^{-10} – 10^{-19} с и спином $1/2$. Распадаются на электроны, π -мезоны, нейтрино.

Систематика элементарных частиц приведена в таблице 4.

Элементарные частицы

Фотоны	Лептоны	Адроны		
		Мезоны	Барионы	
			нуклоны	гипероны
γ	e, μ, τ, ν	π, K, η и резонансы	p, n	$\Lambda, \Sigma, \Xi, \Omega$ и резонансы

9.3. АНТИЧАСТИЦЫ

Гипотезу о существовании античастицы впервые высказал П. Дирак в 1928 г. при рассмотрении релятивистского волнового уравнения. Существование позитрона подтвердил К. Андерсон, изучая космическое излучение. Электрон e^- и позитрон e^+ не являются единственной парой (частица — античастица). Обнаружены также пары протон P^+ — антипротон P^- , нейтрон n — антинейтрон \bar{n} и др.

Релятивистская квантовая теория предполагает, что каждая элементарная частица должна иметь античастицу (кроме фотона и π -мезона). Квантовая теория утверждает, что частицы и античастицы должны иметь одинаковые массы, время жизни в вакууме и одинаковые по модулю, но противоположные по знаку электрические заряды, одинаковые и изотонические спины, а также одинаковые остальные квантовые числа.

Если сталкиваются частица и античастица, то это приводит к их взаимной аннигиляции, в результате чего возникают другие элементарные частицы и фотоны. Энергия пары электрон — позитрон превращается в энергию γ -квантов.

Существует процесс, обратный аннигиляции, — рождение пар: γ -квант может породить пару e^+e^- , если его энергия больше собственной энергии пары $2m_e c^2$. Этот процесс происходит в поле атомного ядра, иначе нарушается закон сохранения импульса.

9.4. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Для всех типов взаимодействия элементарных частиц выполняются законы сохранения энергии, импульса, момента импульса и электрического заряда. Установлено пять зарядов:

- электрический Q ;
- барионный B ;
- три лептонных заряда L_e, L_μ, L_τ .

У всех элементарных частиц эти заряды имеют целочисленные значения.

Есть определенные схемы, при рассмотрении которых суммарный электрический заряд не сохраняется. Многочисленные экспериментальные факты допускают существование зарядов неэлектрической природы, которые также сохраняются.

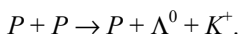
Барионный заряд (от греч. *barys* — тяжелый). К барионам относятся нуклоны и гипероны. Для всех процессов с участием барионов барионный заряд сохраняется. При этом барионам приписывается заряд $+1$, антибарионам — -1 , заряд всех остальных частиц равен нулю.

Лептонный заряд. Частицам этой группы приписывают лептонное число (заряд) $+1$, для антилептонов — -1 . Для всех остальных частиц — ноль.

В замкнутой системе при всех взаимопревращениях элементарных частиц лептонное число сохраняется.

При столкновении адронов высоких энергий рождаются гипероны с теоретически рассчитанным временем жизни $\sim 10^{-23}$ с. Их рождение связано с сильным взаимодействием. Но на опыте установлено, что время их жизни в 10^{13} раз больше. Такое поведение частиц гиперонов представлялось странным.

Оказалось, что в этих процессах гипероны рождаются не поодиночке, а парами:



При столкновении протонов рождается гиперон Λ^0 с K^+ -мезоном или Σ^+ -гипероном, но никогда не появляется с K^- -мезоном или Σ^- -гипероном.

Гипероны и K -мезоны называли странными частицами. Родившись, эти частицы медленно и независимо друг от друга распадаются за счет слабого взаимодействия. Для количественного описания этого процесса введено квантовое число S -странность, которое сохраняется в сильных и электромагнитных взаимодействиях, а в слабых может принимать значения ± 1 .

9.5. КВАРКИ

Гипотеза о том, что все адроны построены из специфических субъединиц, была впервые выдвинута в 1964 г. М. Гелл-Манном и Дж. Цвейгом. Данные частицы называли кварками.

Кварк — фундаментальная частица, обладающая электрическим зарядом, кратным $e/3$. Спин кварка равен $1/2$. Он входит в состав ад-

ронов. Кварки являются бесструктурными частицами, что проверено до масштаба 10^{-16} см.

Кварковая гипотеза адронов получила косвенное подтверждение. Однако попытки обнаружить кварки в свободном состоянии оказались безуспешными. Возможно, что свободных кварков не существует в природе, и энергия связи кварков в адронах велика. Такие энергии пока не доступны современным ускорителям.

ПРИМЕРЫ РАСЧЕТОВ

Пример. Подтвердить, что фотон, сталкиваясь со свободным электроном, не передает всю свою энергию электрону.

Решение.

Закон сохранения энергии в случае передачи фотоном своей энергии электрону можно записать в виде:

$$h\nu + m_0c^2 = \sqrt{P_3^2 c^2 + m_0^2 c^4}.$$

Выразим из этого выражения импульс электрона:

$$P_3 = \frac{h\nu}{c} \sqrt{1 + 2 \frac{m_0 c^2}{h\nu}}.$$

Введем обозначение $P_\gamma = \frac{h\nu}{c}$ — импульс фотона.

Тогда

$$P_3 = P_\gamma \sqrt{1 + 2 \frac{m_0 c^2}{h\nu}} > P_\gamma,$$

что противоречит закону сохранения импульса.

Следовательно, фотон не может передавать всю свою энергию электрону при столкновении.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАЧИ

1. Дайте определение элементарности частиц.
2. Что такое синтез ядер?
3. При каких температурах происходит синтез ядер?
4. Что такое термоядерная реакция?
5. По каким признакам классифицируются ядерные реакции?
6. Что такое составное ядро?
7. Что понимают под эффективным сечением ядерной реакции?

8. Схема возникновения пары электрон — позитрон

$$\nu + \nu \rightarrow e^- + e^+.$$

Какова скорость возникающих частиц, если энергия протона $E = 3 \text{ МэВ}$?

9. Установить массу m ядер замедляющего вещества, если при упругом центральном соударении нейтрона с неподвижным ядром замедлителя его кинетическая энергия уменьшается в 1,4 раза.

10. Определить суммарную кинетическую энергию частиц, возникающих в процессе распада свободного нейтрона:

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}.$$

Кинетической энергией нейтрона и массой покоя антинейтрино пренебречь.

11. Найти энергию каждого из двух фотонов, образовавшихся при распаде неподвижного нейтрального π -мезона. Масса покоя π -мезона: $m_0(\pi) = 264,2m_0$, где m_0 — масса покоя электрона.

12. Определить длину волны λ двух фотонов, образованных в результате соединения электрона и позитрона. Найти энергию $h\nu$ каждого из фотонов, пренебрегая ничтожно малой начальной энергией частиц.

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. *Заградник, Р.* Основы квантовой химии / Р. Заградник, Р. Полак. — М. : Мир, 1979. — 504 с.
2. *Иродов, И. Е.* Квантовая физика. Основные законы. — М. : Лаборатория базовых знаний, 2002. — 272 с.
3. *Степанов, Н. С.* Квантовая механика молекул и квантовая химия / Н. С. Степанов, В. И. Пупышев. — М. : Изд-во МГУ, 1991. — 384 с.
4. *Минкин, В. И.* Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. — Ростов-на-Дону : Феникс, 1997. — 560 с.
5. *Блохинцев, Д. И.* Основы квантовой механики. — М. : Наука, 1971. — 664 с.
6. *Бейдер, Р.* Атомы в молекулах: квантовая теория. — М. : Мир, 2001. — 532 с.
7. *Гиллеспи, Р.* Модель отталкивания электронных пар валентной оболочки и строение молекул / Р. Дж. Гиллеспи, И. Харгиттаи. — М. : Мир, 1992. — 296 с.
8. *Фларри, Р.* Квантовая химия. — М. : Мир, 1985. — 472 с.
9. *Atkins, P. W.* Solutions Manual for Molecular Quantum Mechanics / P. W. Atkins, R. S. Friedman. — Oxford ; N. Y. : Oxford University Press, 1997. — 258 p.
10. *Сивухин, Д. В.* Атомная и ядерная физика. В 2-х ч. — М. : Наука, 1986.
11. Физический энциклопедический словарь / под ред. А. М. Прохорова. — М. : Сов. энциклопедия, 1984. — 944 с.
12. *Савельев, И. В.* Курс общей физики. В 3-х т. — М. : Наука, 1979.
13. Сборник задач по общему курсу физики. Атомная физика, физика ядра и элементарных частиц / под ред. Д. В. Сивухина. — М. : Наука, 1981. — 224 с.
14. *Ландсберг, Г. С.* Оптика. — М. : Наука, 1976. — 928 с.

15. Кон, В. Электронная структура вещества, волновые функции и функционалы плотности // Успехи физических наук. — 2002. — Т. 172. — № 3. — С. 336–348.

16. Bagrov, V. G. Synchrotron radiation of charge distributed in space / V. G. Bagrov, R. A. Bedanokov, G. I. Flesher // Russian Physics Journal. — 1993. — V. 36. — № 1. — P. 18–20.

17. Bedanokov, R. A. Synchrotron radiation of a system with spherical symmetry / R. A. Bedanokov, G. I. Flesher // Russian Physics Journal. — 1993. — V. 36. — № 9. — P. 817–820.

18. Bedanokov, R. A. Emission of linear current pulse of an arbitrary shape / R. A. Bedanokov, G. I. Flesher // Russian Physics Journal. — 1992. — V. 35. — № 6. — P. 503–507.

19. Bedanokov, R. A. Synchrotron radiation of charge evenly distributed throughout a ball volume / R. A. Bedanokov, G. I. Flesher // Russian Physics Journal. — 1991. — V. 34. — № 9. — P. 774–777.

20. Беданокров, Р. А. О возможном захвате нейтрино электромагнитным полем / Р. А. Беданокров, Г. И. Флешер // Известия высших учебных заведений. Физика. — 1993. — Т. 36. — № 9. — С. 16–20.

21. Bedanokov, R. A. Possible neutrino capture in an electromagnetic field / R. A. Bedanokov, G. I. Flesher // Russian Physics Journal. — 1993. — V. 36. — № 9. — P. 821–825.

22. Багров, В. Г. О синхротронном излучении пространственно разделенных зарядов / В. Г. Багров, Р. А. Беданокров, Г. И. Флешер // Известия высших учебных заведений. Физика. — 1993. — Т. 36. — № 1. — С. 23–25.

23. Беданокров, Р. А. Синхротронное излучение системы, обладающей сферической симметрией / Р. А. Беданокров, Г. И. Флешер // Известия высших учебных заведений. Физика. — 1993. — Т. 36. — № 1. — С. 12–15.

24. Беданокров, Р. А. Излучение линейного импульса тока произвольной формы / Р. А. Беданокров, Г. И. Флешер // Известия высших учебных заведений. Физика. — 1992. — Т. 35. — № 6. — С. 14–18.

25. Беданокров, Р. А. Синхротронное излучение заряда, равномерно распределенного по объему шара / Р. А. Беданокров, Г. И. Флешер // Известия высших учебных заведений. Физика. — 1991. — Т. 34. — № 9. — С. 40–42.

26. Беданокров, Р. А. Численный анализ влияния радиационного торможения на угловое распределение синхротронного излучения отдельных гармоник спектра / Р. А. Беданокров, С. Е. Бойченко, Г. С. Феклистов // Вестник Адыгейского государственного универси-

тета. Сер. 4 : Естественно-математические и технические науки. — 2016. — № 4 (191). — С. 68–72.

27. Беданов, Р. А. Потенциал электрического поля в двойном слое на границе М/Л. — В сб. : XXXV Неделя науки МГТУ. Министерство образования и науки РФ, Майкопский государственный технологический университет. — 2017. — С. 176–177.

28. Беданов, Р. А. Распределение зарядов в модельных системах. — В сб. : XXXV Неделя науки МГТУ. Министерство образования и науки РФ, Майкопский государственный технологический университет. — 2017. — С. 177–179.

29. Шамсиев, Р. С. Квантово-химическое моделирование образования никелевых интермедиатов в условиях каталитического циклоприсоединения этилакрилата с норборнадиеном / Р. С. Шамсиев, Д. В. Дмитриев, В. Р. Флид // Бутлеровские сообщения. — 2011. — Т. 25. — № 5. — С. 38–44.

30. Козлов, А. А. Механизм спектральных сдвигов в материалах химических сенсоров на основе фотонных кристаллов / А. А. Козлов, С. Д. Абдуллаев, И. А. Грицкова [и др.] // Тонкие химические технологии. — 2015. — Т. 10. — № 6. — С. 58–63.

31. Shamsiev, R. S. Quantum chemical study of the mechanism of catalytic $[2 + 2 + 2]$ cycloaddition of acrylic acid esters to norbornadiene in the presence of nickel (0) complexes / R. S. Shamsiev, V. R. Flid // Russian Chemical Bulletin. — 2013. — V. 62. — № 11. — P. 2301–2305.

32. Egorova, V. V. Quantum chemical modeling of ligand substitution in square-planar palladium aqua chloride complexes / V. V. Egorova, A. V. Krylov, V. R. Flid, N. I. Tigina // Russian Chemical Bulletin. — 2012. — V. 61. — № 10. — P. 1845–1849.

33. Попова, А. А. О возможных причинах взаимосвязи потенциалов нулевого заряда и критических потенциалов пассивации переходных металлов IV–VI и VIII групп Периодической системы в нейтральных органических средах / А. А. Попова, Р. А. Беданов // Коррозия: материалы, защита. — 2018. — № 10. — С. 1–8.

34. Popova, A. A. Photoelectric polarization and quantum-chemical data about electrochemical films formed in perchlorate alcohol solutions. — В кн. : Chenneling, 2016 ; Books of Abstracts, 2016. — С. 39.

35. Grigor'ev, V. P. Relationship between zero-charge potentials, critical passivation potentials and flat band potentials for transition metals of groups IV–VI of Periodic table in neutral alcohol media / V. P. Grigor'ev, A. A. Popova // Protection of metals and physical chemistry of surface. — 2011. — V. 47. — № 7. — P. 850–855.

36. Григорьев, В. П. О взаимосвязи потенциалов нулевого заряда, критических потенциалов пассивации и потенциалов плоских зон для переходных металлов IV–VI групп Периодической системы в нейтральных спиртовых средах / В. П. Григорьев, А. А. Попова // Коррозия: материалы, защита. — 2010. — № 5. — С. 6–11.

37. Попова, А. А. Расчет кривых дифференциальной емкости при адсорбции насыщенных спиртов из нейтральных растворов на поверхности некоторых переходных металлов / А. А. Попова, Л. Ж. Паланджянц // Конденсированные среды и межфазные границы. — 2010. — Т. 12. — № 4. — С. 386–393.

38. Попова, А. А. Кинетика и механизм анодного поведения титана и циркония в перхлоратных неводных средах // Электрохимическая энергетика. — 2009. — Т. 9. — № 1. — С. 30–36.

39. Каликинский, И. И. Об электромагнитном поле при мгновенном появлении точечного заряда // Вычисл. мат. и мат. физ. — М., 1985. — С. 63–65.

40. Новикова, Г. П. Об излучении при классической аннигиляции зарядов / Г. П. Новикова, В. Л. Коньков // Известия высших учебных заведений. Физика. — 1976. — Т. 19. — № 11. — С. 143–144.

41. Parr, R. G. Density functional theory of atoms and molecules / R. G. Parr, W. Yang. — Oxford ; N. Y. : Oxford University Press, 1989. — 352 p.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1. ТЕПЛОВОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ	5
1.1. Закономерности теплового излучения	5
1.2. Формула Планка	11
1.3. Фотоэффект	13
1.4. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта. Фотоны	16
1.5. Эффект Комптона	17
Примеры расчетов	19
Контрольные вопросы и задачи	19
2. АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА	21
2.1. Развитие идеи атомизма	21
2.2. Линейчатый спектр излучения атома	22
2.3. Ядерная (планетарная) модель Резерфорда	23
2.4. Боровская теория	26
Постулаты Бора	26
2.5. Боровская теория для атома водорода	27
Примеры расчетов	30
Контрольные вопросы и задачи	31
3. КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ	33
3.1. Гипотеза де Бройля	33
3.2. Соотношение неопределенностей Гейзенберга	35
Примеры расчетов	36
Контрольные вопросы и задачи	37
4. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ	38
4.1. Ψ -функция и ее статистический смысл	38
4.2. Принцип суперпозиции состояний	39
4.3. Основное уравнение (нерелятивистской) квантовой механики	41
4.4. Операторы	42
4.5. Операторы физических величин квантовой механики. Гамильтониан	46
Примеры расчетов	56
Контрольные вопросы и задачи	57
5. ФИЗИКА АТОМОВ И МОЛЕКУЛ	58
5.1. Частица в потенциальной яме	58
5.2. Прохождение частицы через потенциальный барьер	61
5.3. Туннельный эффект	64
5.4. Линейный гармонический осциллятор в квантовой механике	65
Примеры расчетов	69
Контрольные вопросы и задачи	70

6. ОДНОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ	72
6.1. Решение уравнения Шредингера для атома водорода	72
6.2. Правило отбора и состояния электрона	76
6.3. 1s-состояние электрона в атоме	77
Контрольные вопросы и задачи	78
7. АТОМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ	80
7.1. Опыт Штерна — Герлаха. Спин электрона	80
7.2. Тожественность частиц	81
7.3. Частицы Бозе и частицы Ферми. Принцип Паули	86
7.4. Периодическая система элементов Д. И. Менделеева	88
Контрольные вопросы и задачи	90
8. ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА	91
8.1. Состав и заряд атомного ядра. Массовое и зарядовое числа	91
8.2. Магнитный момент ядра и его спин	92
8.3. Ядерные силы. Модели ядра	93
8.4. Масса и энергия связи ядра	93
8.5. Ядерные реакции и их основные типы	94
8.6. Цепная реакция деления	96
8.7. Синтез атомных ядер	97
8.8. Радиоактивное излучение и радиоактивность	98
8.9. α - и β -распад, γ -излучение	99
Примеры расчетов	100
Контрольные вопросы и задачи	100
9. ЭЛЕМЕНТЫ ФИЗИКИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ	102
9.1. Типы взаимодействий	102
9.2. Классификация элементарных частиц	104
9.3. Античастицы	105
9.4. Законы сохранения	105
9.5. Кварки	106
Примеры расчетов	107
Контрольные вопросы и задачи	107
ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА	109

Рамазан Асланович БЕДАНОКОВ
**КВАНТОВАЯ ФИЗИКА
И ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ**
У ч е б н и к

Редакция
естественнонаучной литературы
Ответственный редактор *Т. С. Спирина*
Корректор *Т. С. Симонова*
Выпускающий *Е. Е. Егорова*

ЛР № 065466 от 21.10.97
Гигиенический сертификат 78.01.10.953.П.1028
от 14.04.2016 г., выдан ЦГСЭН в СПб
Издательство «ЛАНЬ»
lan@lanbook.ru; www.lanbook.com
196105, Санкт-Петербург, пр. Юрия Гагарина, д. 1, лит. А
Тел./факс: (812) 336-25-09, 412-92-72
Бесплатный звонок по России: 8-800-700-40-71

Подписано в печать 24.10.19.
Бумага офсетная. Гарнитура Школьная. Формат 84×108^{1/32}.
Печать офсетная. Усл. п. л. 6,09. Тираж 100 экз.

Заказ № 717-19.

Отпечатано в полном соответствии
с качеством предоставленного оригинал-макета
в АО «Т8 Издательские Технологии».
109316, г. Москва, Волгоградский пр., д. 42, к. 5.