

16.2	Вращательный спектр . . . . .	202
16.3	Колебательный спектр . . . . .	204
16.4	Вращательно–колебательный спектр . . . . .	206
16.5	Комбинационное рассеяние . . . . .	206
16.6	Квантовая теория химических связей . . . . .	208
16.6.1	Основные свойства химических связей . . . . .	208
16.6.2	Основные типы химических связей . . . . .	210
16.6.3	Понятие о валентности . . . . .	215

# Глава 1

## Введение

Со времен Ньютона до начала 20-го столетия считалось, что классическая механика описывает все процессы происходящие в мире, от движения самых маленьких частиц до эволюции звезд и планет. Казалось, что в основе строения мироздания лежат простые и изящные законы и дело состоит в “малом” — научиться применять их к большим и сложным системам, состоящих из многих миллионов частиц.

Однако добравшись до изучения процессов, протекающих в столь малых системах, какими являются атомы (размеры последних составляют величины порядка  $10^{-10}$  м), физики убедились, что это не так. Здесь законы существенно меняются и возникает необходимость перехода к принципиально новой физической картине. Такая картина называется квантовой, а соответствующая ей вычислительная схема — квантовой механикой.

По мере роста технических возможностей физика планомерно продвигалась от атомных расстояний ко все более и более малым. Был открыт удивительный мир новых объектов природы и их взаимодействий. Так показано, что внутри атома существуют компактные образования — атомные ядра — с характерными размерами порядка  $10^{-15}$ – $10^{-14}$  м. При этом, если строение атомов и молекул определяется электромагнитным взаимодействием, которое хорошо исследовано в макром мире, то структура ядер оказалась связанной с принципиально новым типом взаимодействия, которое принято называть ядерным или сильным. Тем не менее, опыт показал, что хотя

характер взаимодействий меняется при переходе от атомов к ядрам, постулаты квантовой механики остаются справедливыми и для ядер.

Дальнейший прогресс в изучении микромира связан с исследованием структуры протона и нейтрона, частиц, из которых “построены” ядра. С этой целью построены уникальные устройства позволяющие ускорять электроны и ядра до скоростей близких к скорости света. Были сконструированы сложнейшие приборы для регистрации частиц и обработки данных. В результате открыто множество других частиц, которые принято называть элементарными, и исследована их структура. Стало возможным понять многие свойства взаимодействий, обеспечивающих стабильность протона и большинства других сильновзаимодействующих частиц. Оказалось, что эти взаимодействия весьма сложны и обладают рядом непривычных свойств. Тем не менее, все процессы присходящие в мире элементарных частиц, тоже описываются на основе квантовых представлений, правда уже переформулированных в соответствии с требованиями специальной теории относительности.

Не нужно думать, что квантовые законы проявляются только в микромире. И в макромире существует ряд явлений необъяснимых классической физикой, но прекрасно описываемых в рамках квантового подхода. Типичными представителями таких явлений являются сверхтекучесть и сверхпроводимость.

Основная трудность, с которой встречаются начинающие изучать квантовую физику, состоит в том, что квантовые законы не столь наглядны, как классические. Приходится сталкиваться с ощущением противоречивости постулатов квантовой механики со “здравым смыслом”. Но это противоречие кажущееся, оно происходит от того, что мы лишены “квантовой интуиции”, а само понятие “здорового смысла” подменям классическим представлением. Тем самым мы часто не в состоянии предстаить себе наглядной картины процессов, происходящих на квантовом уровне. Но, как писал известный английский ученый, один их “отцов” квантовой теории П.А.М. Дирак: “... главная задача физической науки состоит не в том, чтобы снабдить нас наглядными картинками, а в том, чтобы формулировать

законы, управляющие явлениями, и использовать эти законы для открытия новых явлений. Если наглядная картина существует, то тем лучше; однако, существует она или нет — это лишь второстепенный вопрос”<sup>1</sup>. Квантовая интуиция приходит лишь со временем, когда удастся преодолеть определенный психологический барьер и пройти определенную “адаптацию” к квантовым представлениям.

Несколько слов о масштабах в микромире таких физических величин, как энергия, масса, электрический заряд. О порядке линейных размеров атомов и их ядер мы уже говорили.

Начнем с энергии. В атомной, ядерной физике и в физике элементарных частиц обычно используют несистемные единицы — *электронвольты* (эВ) и их производные, килоэлектронвольты (КэВ), мегаэлектронвольты (МэВ), гигаэлектронвольты (ГэВ). Их связь с системными единицами задается соотношением  $1 \text{ эВ} = 1,6021892 \times 10^{-12} \text{ эрг}$ . Характерные энергии:

$10^{-1} \text{ эВ}$                       молекулярные связи

$1 \text{ эВ} - 1 \text{ КэВ} = 10^3 \text{ эВ}$       атомные переходы

$1 \text{ МэВ} = 10^6 \text{ эВ}$       ядерные переходы

$1 \text{ ГэВ} = 10^9 \text{ эВ}$       процессы рождения новых частиц

$1 \text{ ТэВ} = 10^{12} \text{ эВ}$       уровень энергий, достигаемый на крупнейших современных ускорителях

Масса самого легкого атома — водорода — приблизительно в 1836 раз больше массы электрона. Последняя, в свою очередь, равна  $M_e = 9,109534 \times 10^{-31} \text{ кг}$ . Часто массу частиц измеряют в несистемных единицах  $\text{МэВ}/c^2$ , где  $c = 2,99792458 \times 10^8 \text{ м./сек.}$  — скорость света в вакууме. В этих единицах массы электрона, про-

---

<sup>1</sup>П.А.М. Дирак, Принципы квантовой механики, Физматгиз, М. 1960 г.

тона и нейтрона равны, соответственно,  $m_e = 0,5110034 \text{ МэВ}/c^2$ ,  $M_p = 938,2796 \text{ МэВ}/c^2$  и  $M_n = 939,5731 \text{ МэВ}/c^2$ .

Электрический заряд электрона  $e = -q_0$ , где  $q_0$  — элементарный электрический заряд равный  $q_0 = 1,6021892 \times 10^{-19} \text{ Кл}$ . Электрический заряд протона  $e_p = q_0$ . Электрический заряд ядра равен  $Zq_0$ , где  $Z$  — порядковый номер элемента в периодической системе Менделеева. Часто его называют также атомным номером элемента.

Важнейшей величиной характеризующей переход от классической к квантовой физике является постоянная Планка  $h = 6,626176 \times 10^{-34} \text{ Дж.сек.}$ , которую сам Планк называл квантом действия ( $h$  имеет размерность действия). Она была введена им в 1900 г., когда для объяснения трудностей с излучением абсолютно черного тела, Планк допустил, что свет излучается и поглощается с энергией, кратной минимальной

$$E = h\nu, \quad (1.1)$$

где  $\nu$  частота света. Часто также используется “перечеркнутая” постоянная Планка  $\hbar \equiv h/(2\pi) = 1,054887 \times 10^{-34} \text{ Дж.сек.} = 6,582173 \times 10^{-22} \text{ МэВ сек.}$

## Глава 2

# Модель атома Бора и ее следствия

### 2.1 Опыты Резерфорда

В 1911 г. Эрнест Резерфорд со своими сотрудниками выполнил фундаментальные исследования, которые легли в основу современной картины о строении атома. Их суть заключалась в изучении прохождения пучка  $\alpha$ -частиц с энергией в несколько МэВ через тонкую золотую фольгу. Позднее были выполнены опыты по прохождению  $\alpha$ -частиц через другие металлы. Цель опытов состояла в “прощупывании” структуры атома посредством частиц, проникающих достаточно глубоко в его недра. В методическом плане эти опыты явились предвестниками всех последующих опытов по изучению структуры других микрообъектов. Меняются только объекты исследования (вместо атомов изучали их ядра и частицы) и энергии (от нескольких МэВ в опытах Резерфорда до ТэВ’ных энергий на современных ускорителях).

В опытах Резерфорда толщина фольги составляла по порядку величины  $10^{-7}$ — $10^{-6}$  м, что позволяло понизить эффекты перерасеяния  $\alpha$ -частиц на разных ядрах рассеивающего вещества.  $\alpha$ -частицы представляют собой результат радиоактивного распада некоторых тяжелых элементов, например, урана. Их электрический заряд равен  $+2q_0$ , а масса приблизительно в четыре раза больше массы атома водорода.

Схема опыта изображена на Рис. 2.1. Источник  $\alpha$ -частиц помещался внутри свинцового кожуха с узким отверстием и все  $\alpha$ -

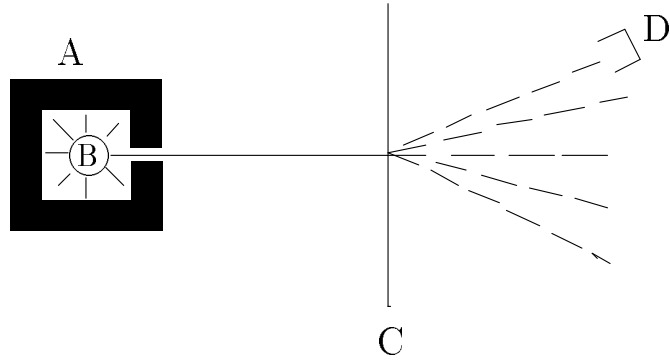


Рис. 2.1: Схема опыта Резерфорда:  $A$  — свинцовый кожух,  $B$  — радиактивное вещество,  $C$  — золотая фольга и  $D$  — сцинтилляционный счетчик  $\alpha$ -частиц.

частицы, кроме их узкого луча проходившего через отверстие кожуха, поглощались свинцом. Образовавшийся луч  $\alpha$ -частиц падал на золотую фольгу перпендикулярно ее поверхности. С помощью сцинтилляционного счетчика фиксировались рассеянные  $\alpha$ -частицы вплоть до углов рассеяния  $\theta = 150^\circ$ . По количеству вспышек на экране сцинтилляционного счетчика в единицу времени можно было судить об интенсивности рассеянного пучка  $\alpha$ -частиц под заданным углом  $\theta$ . По определению, отношение числа частиц  $dN_{\text{расс.}}$ , рассеянных в элементе телесного угла  $d\Omega$ , к потоку падающих частиц  $j_{\text{пад.}}$  называется *эффективным дифференциальным сечением реакции* (или просто *дифференциальным сечением реакции*)

$$d\sigma = \frac{dN_{\text{расс.}}}{j_{\text{пад.}}} . \quad (2.1)$$

Ввиду того, что в опыте Резерфорда поток падающих частиц постоянен, интенсивность вспышек на экране пропорциональна дифференциальному сечению реакции упругого рассеяния  $\alpha$ -частиц на атомах золота.

Опыт показал, что в подавляющем большинстве случаев  $\alpha$ -частицы сохраняют направление своего движения после прохождения через фольгу или отклоняются от него на небольшие углы  $\theta$ .

Такое поведение целиком объясняется тем, что  $\alpha$ -частица, которая имеет массу почти в 8000 раз больше, чем электрон, практически не должна испытывать влияния от столкновения с ним. Однако были зарегистрированы отдельные, весьма редкие события, в которых  $\alpha$ -частицы летели под большими углами и даже попадали в заднюю полусферу  $\theta > 90^\circ$ . Объяснить такие события можно только допустив, что в центре атома имеется весьма компактная сердцевина (*ядро*), масса которой практически совпадает с массой атом. Так как атом в целом электрически нейтрален, то логично думать, что ядро имеет положительный заряд, абсолютное значение которого совпадает с абсолютным значением полного заряда электронов. Иными словами выходит, что атом представляет систему с *планетарной структурой*, стабильность которой обеспечивается не гравитационным притяжением (как в солнечной системе), а силами кулоновского притяжения между положительно заряженным ядром и отрицательно заряженными электронами.

Такая модель атома, предложенная Резерфордом в 1911 г. для интерпретации результатов его опытов, сыграла фундаментальную роль в становлении современных понятий о микромире.

Рассмотрим более подробно, как происходит прохождение  $\alpha$ -частиц через атом в рамках планетарной модели Резерфорда.

Допустим, что  $\alpha$ -частица испускается очень далеко от центра рассеивающего ее атома (Рис. 2.2). Пусть  $b$  расстояние между рассеивающим центром и линией начального движения  $\alpha$ -частицы (см. Рис. 2.2). Величину  $b$  называют *прицельным параметром*. Будем сначала полагать, что прицельный параметр намного больше размера ядра  $R_{\text{ядра}}$

$$R_{\text{ядра}} \ll b. \quad (2.2)$$

Как уже говорилось выше, электроны практически не влияют на траекторию  $\alpha$ -частицы. Поэтому  $\alpha$ -частица может отклоняться от прямолинейного пути только за счет кулоновского отталкивания ядра. Ввиду того, что  $R_{\text{ядра}}$  намного меньше размера атома  $R_{\text{атом}}$ , отклонение должно быть незначительным. Что и действительно наблюдалось на эксперименте.



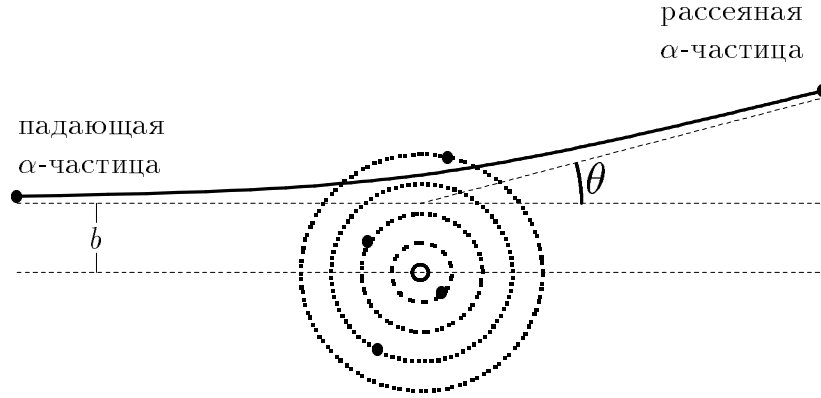


Рис. 2.2: Рассеяние  $\alpha$ -частицы на атоме в случае, когда прицельный параметр  $b \sim R_{\text{атом}}$ .

Совсем иная картина имеет место, когда

$$R_{\text{ядра}} \geq b. \quad (2.3)$$

В этом случае  $\alpha$ -частица, имеющая массу значительно меньше, чем ядро золота, отскочит назад (Рис. 2.3). Однако число таких событий должно быть невелико, порядка

$$N \sim \left( \frac{R_{\text{ядра}}}{R_{\text{атом}}} \right)^2. \quad (2.4)$$

Из классических соображений Резерфорд рассчитал движение  $\alpha$ -частицы в поле ядра и получил следующее выражение для зависимости дифференциального сечения от угла рассеяния  $\theta$  (*формула Резерфорда*)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[ \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2\mu v^2 \sin^2(\theta/2)} \right]^2, \quad (2.5)$$

где  $Z_1$  и  $Z_2$  — отношения зарядов  $\alpha$ -частицы и ядра золота к элементарному  $q_0$ ,  $\mu$  — приведенная масса системы  $\alpha$ -частица–ядро золота

$$\mu = \frac{m_\alpha m_{\text{ядр.}}}{m_\alpha + m_{\text{ядр.}}}, \quad (2.6)$$

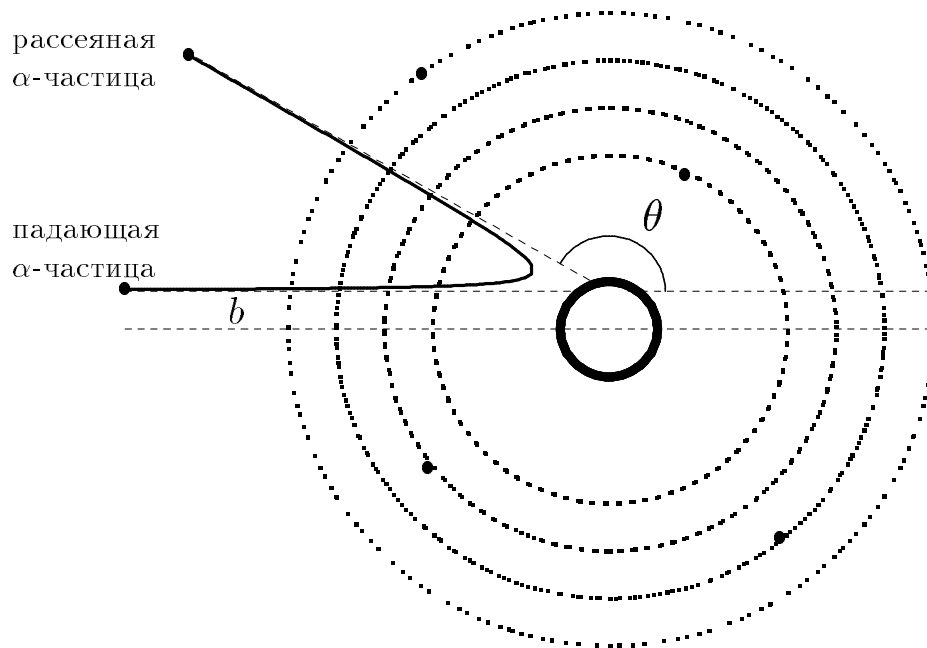


Рис. 2.3: Рассеяние  $\alpha$ -частицы на атоме в случае, когда прицельный параметр  $b \sim R_{\text{ядро}} \gg R_{\text{атом}}$ .

а  $v$  — относительная скорость  $\alpha$ -частицы и рассеивающего ядра.

Следует отметить, что хотя сам Резерфорд вывел свою формулу из чисто классических представлений, впоследствии оказалось, что и в рамках квантовой механики получается точно такая формула. Такое совпадение чисто случайное и имеет место только тогда, когда между рассеивающимися частицами действуют кулоновские силы.

Анализ данных, полученных в опытах Резерфорда, показал, что зависимость вероятности отклонения траектории  $\alpha$ -частицы от угла рассеяния блестяще согласуется с формулой (2.5). Позднее было показано, что это имеет место и для других элементов.

Более того, оказалось возможным определить и верхний предел “радиуса” ядра. Из закона сохранения энергии вытекает, что на расстояниях наибольшего сближения с ядром  $d$  кинетическая энергия  $\alpha$ -частицы  $E_\alpha$  полностью переходит в потенциальную энергию

их электростатического отталкивания

$$E_\alpha = \frac{m_\alpha v^2}{2} = \frac{(2q_0)(Zq_0)}{d}, \quad (2.7)$$

Тогда

$$d = \frac{(2q_0)(Zq_0)}{E_\alpha} = \frac{(4q_0)(Zq_0)}{m_\alpha v^2}. \quad (2.8)$$

Энергия  $\alpha$ -частицы, испущенной радиоактивным ураном, составляет 4,05 МэВ. Отсюда вытекает, что  $d \approx 3 \times 10^{-14}$  м. Если вспомним, что размер атома составляет  $10^{-10}$  м, то убедимся, что размер атомного ядра по крайней мере на четыре порядка меньше размера атома.

Как следует из (2.8), размер области “прощупываемой” в атоме  $\alpha$ -частицей обратно пропорционален энергии бомбардирующей частицы. Это обстоятельство наводит на мысль, что увеличивая энергию столкновения можно получать информацию о структуре микрообъектов все на более малых расстояниях. Это действительно так и в общем случае следует из фундаментальных квантовых законов. (Здесь мы пока эти выводы сделали на уровне классических рассуждений.)

Однако планетарная модель Резерфорда сталкивается с рядом серьезных затруднений. Главное из них состоит в следующем. Согласно модели, электроны в атоме не могут покоиться. Иначе они бы просто упали на ядро. Мы же знаем, что атомы весьма устойчивые образования. Однако если электрон в атоме движется по круговым орбитам, то, согласно с классическими представлениями, он должен непрерывно терять энергию на излучение электромагнитных волн. В результате электрон должен тормозиться постепенно и спектр его электромагнитного излучения должен меняться непрерывно. Этот вывод находится в прямом противоречии с опытом утверждающим, что свет, излученный атомами, имеет дискретный характер. Как мы увидим далее, это обстоятельство имеет принципиальное значение.

## 2.2 Линейчастый спектр атома водорода. Комбинационный принцип Ритца

Теперь следует ознакомиться со свойствами атомных спектров более подробно. Известно, что светящиеся газы дают спектры испускания, состоящие из отдельных линий. Такие спектры называются *линейчастыми спектрами*. В свою очередь свет, проходя через этот же газ, дает точно такие линии поглощения.

В 1885 г. Бальмер установил эмпирическую формулу, которая блестяще описывала девять известных на то время линий атома водорода в видимой части спектра

$$\lambda = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 4}, \quad (2.9)$$

где  $\lambda_0 = 3646,13 \text{ \AA}$ ,  $n = 3, 4, \dots$  — целые числа, а  $\lambda$  — длина волны соответствующей линии. Эту формулу можно переписать в виде

$$\nu^* \equiv \frac{1}{\lambda} = 4R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (2.10)$$

где  $R \equiv 1/\lambda_0 = 10967758 \text{ м}^{-1}$  принято называть *постоянной Ридберга*. Величина  $\nu^*$  показывает сколько длин волн укладывается на единице длины и  $\nu^*$  называется *волновым числом*. Формулу (2.10) называют *формулой Ридберга*.

Можно также переписать формулу (2.10) для частоты соответствующей линии

$$\nu = c\nu^* = \frac{c}{\lambda} = R' \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (2.11)$$

Постоянную  $R' = Rc \approx 3,29 \times 10^{15} \text{ сек}^{-1}$  тоже называют постоянной Ридберга.

Позднее было открыто множество других линий в атоме водорода, которые с большой точностью описывались формулой Бальмера-Ридберга (2.9)-(2.11) и с увеличением числа  $n$  стремились к граничной линии с длиной волны

$$\lambda_{\text{асимпт}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n = \lambda_0. \quad (2.12)$$

Эту серию линий называют *серией Бальмера*.

Кроме серии Бальмера обнаружен и ряд других серий линейчатого спектра атома водорода. Причем все они описываются простыми зависимостями. Так, в инфракрасной области открыты следующие серии

$$\begin{aligned} \text{серия Пашена } \nu &= R' \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 4, 5, \dots \\ \text{серия Брэкета } \nu &= R' \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 5, 6, \dots \end{aligned} \quad (2.13)$$

и ряд других.

В ультрафиолетовой области спектра была открыта серия Лаймана

$$\begin{aligned} \text{серия Лаймана } \nu &= R' \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \\ n &= 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (2.14)$$

В общем случае частоты из любой серии описываются формулой

$$\begin{aligned} \nu &= R' \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \\ n &= m + 1, m + 2, \dots \end{aligned} \quad (2.15)$$

Очевидно, что каждая из спектральных частот атома водорода (2.15) может быть легко выражена через разности частот серии Лаймана

$$\nu = \nu_{n_2} - \nu_{n_1}, \quad (2.16)$$

где  $\nu_n$  задается формулой (2.14).

Экспериментально установлено, что спектры других атомов не описываются такими простыми зависимостями. Однако показано, что для любого атома можно подобрать серию таких частот  $\nu_n$ , что спектральные частоты будут выражаться по формуле (2.16). Такая закономерность называется *комбинационным принципом Ритца*, а частоты  $\nu_n$  называют *спектральными термами*.

Описанные в этом параграфе закономерности атомных спектров были получены эмпирическим путем. Они показали, что целые числа играют исключительно важную роль в спектре атома водорода,

однако до конца осмыслить их роль удалось только в рамках квантовой механики. Первый радикальный шаг в этом направлении был сделан одним из выдающихся физиков нашего столетия Нильсом Бором.

## 2.3 Постулаты Бора

В 1913 г. Н. Бору удалось связать воедино имеющиеся к тому времени экспериментальные факты о строении атома и характере его спектров излучения и поглощения. Но для этого ему пришлось отказаться от классических представлений и перейти к квантовым. Правда, забегаая вперед следует сказать, что окончательную формулировку проблема нашла только после написания уравнения Шредингера. Боровская модель была только первым шагом в этом направлении. Тем не менее важнейшая заслуга Бора состояла в том, что он реально показал необходимость отказа от классических представлений при описании атомной структуры и тем приготовил путь к последовательной формулировке квантовых принципов.

Модель атома Бора основывается на трех принципах называемых *постулатами Бора*.

- 1-й постулат (*постулат стационарных состояний*): в атоме существуют некоторые стационарные состояния, не изменяющиеся со временем без внешних воздействий; в этих состояниях атом не излучает электромагнитных волн.
- 2-й постулат (*правило квантования*): в стационарных состояниях атома электрон, двигаясь по круговой орбите, имеет дискретные значения момента импульса

$$L_n = M_e v r = n \hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.17)$$

Здесь  $M_e$  — масса электрона,  $v$  — его скорость,  $r$  — радиус орбиты,  $\hbar$  — постоянная Планка.

- 3-й постулат (*правило орбит*): при переходе атома из одного стационарного состояния на другое испускается или поглощается

один квант световой энергии

$$\Delta E_{nm} = E_n - E_m, \quad (2.18)$$

где  $E_n$  и  $E_m$  — энергии начального и конечного состояний атома.

Отметим, что третий постулат автоматически приводит к комбинационному принципу Ритца (2.16). Действительно, если при переходе испускается или поглощается только один квант света, то из формулы Планка

$$\Delta E_{nm} = h\nu_{nm} \quad (2.19)$$

следует

$$\nu_{nm} = \frac{1}{h} \Delta E_{nm} = \frac{E_n}{h} - \frac{E_m}{h} = \nu_n - \nu_m. \quad (2.20)$$

Согласно с формулами из предыдущего параграфа для энергетических уровней в атоме водорода имеем

$$E_n = -\frac{R'h}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.21)$$

Целое число  $n$ , через которое определяется энергетический спектр атома водорода, называют *главным квантовым числом*. Низайший уровень  $E_1$  называют *основным состоянием*, а уровни с  $n > 1$  называют *возбужденными состояниями* атома.

Обратим внимание на то, что энергия  $E_n$  отрицательна. Этот факт выражает то обстоятельство, что электрон притягивается ядром. Для того, чтобы удалить электрон из  $n$ -го уровня в атоме необходимо выполнить работу, численно равную  $|E_n|$ . Последнюю называют *энергией связи* электрона в атоме.

## 2.4 Расчет энергетического спектра и постоянной Ридберга

Постулаты Бора позволили не только качественно понять квантовый принцип структуры атома, но и позволили количественно описать его спектр и рассчитать постоянную Ридберга.

На электрон, движущийся по круговой орбите, действуют две силы: центробежная сила  $\frac{M_e v^2}{r}$  и сила кулоновского притяжения  $\frac{q_0^2}{r^2}$ . Из баланса сил следует, что

$$\frac{M_e v^2}{r} = \frac{q_0^2}{r^2}. \quad (2.22)$$

Выражая скорость электрона через его угловую скорость  $v = \omega r$  получим

$$r^3 = \frac{q_0^2}{M_e \omega^2}. \quad (2.23)$$

Воспользовавшись вторым постулатом Бора

$$M_e v r = n \hbar, \quad (2.24)$$

и используя (2.23) получим квантование радиуса орбит

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{M_e q_0^2}. \quad (2.25)$$

При  $n = 1$  радиус орбиты называют *боровским радиусом*

$$a_0 \equiv r_1 = \frac{\hbar^2}{M_e q_0^2} = 5,28 \text{ \AA}. \quad (2.26)$$

Зная радиус орбиты можно на основании формулы (2.22) определить скорость электрона и рассчитать его кинетическую  $T$  и потенциальную  $U$  энергии. При этом полная энергия представляет энергию терма

$$E_n = T + U = -\frac{q_0^4 M_e}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{h}{n^2} R'. \quad (2.27)$$

Из правой части (2.27) получим выражение для постоянной Ридберга

$$R' = \frac{q_0^4 M_e}{4\pi \hbar^3}. \quad (2.28)$$

В этом расчете мы считали, что ядро атома имеет бесконечно большую массу. Такую идеальную постоянную Ридберга (деленную на скорость света  $c$ ) обозначают  $R_\infty$ . Ее значение равно

$$R_\infty = \frac{q_0^4 M_e}{4\pi c \hbar^3} = 1.0973731 \times 10^7 \text{ м}^{-1}. \quad (2.29)$$



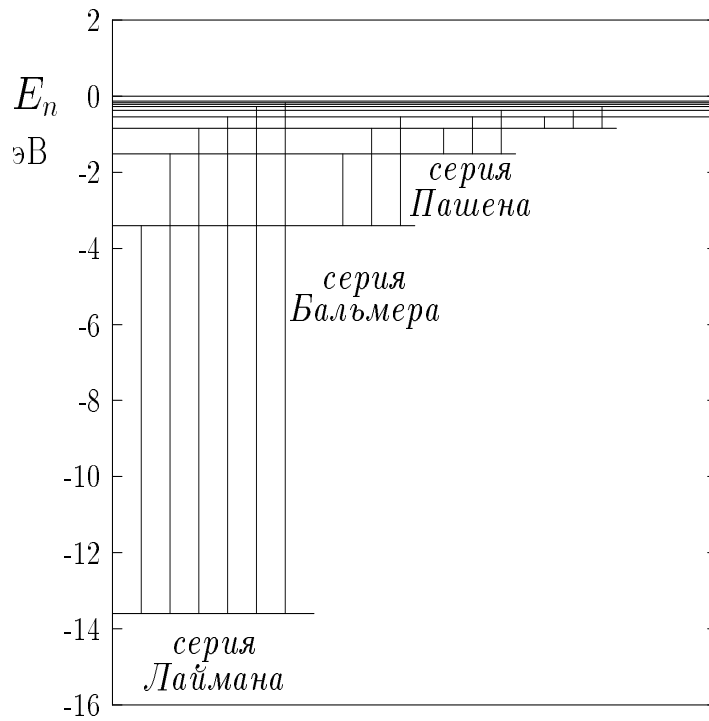


Рис. 2.4: Спектр уровней и переходов в атоме водорода.

Для того, чтобы учесть конечность массы ядра необходимо в (2.29) массу электрона заменить на приведенную массу (2.6). В результате для водорода получаем  $R = 1,0967758 \times 10^7 \text{ м}^{-1}$ , что блестяще согласуется с экспериментом.

На Рис. 2.4 приведен спектр уровней энергии в атоме водорода, рассчитанный на основании формулы (2.27). Вертикальные линии показывают соответствующие переходы. Переходы на уровень  $E_1$  со всех высших уровней дают серию Лаймана, переходы на уровень  $E_2$  со всех уровней с  $n > 2$  дают серию Бальмера и т.д.

## 2.5 Опыт Франка-Герца

Вскоре после создания теории атома водорода был экспериментально подтвержден первый постулат Бора (Франк и Герц, 1913 г.).

Для этого изучалось прохождение пучка электронов через пары

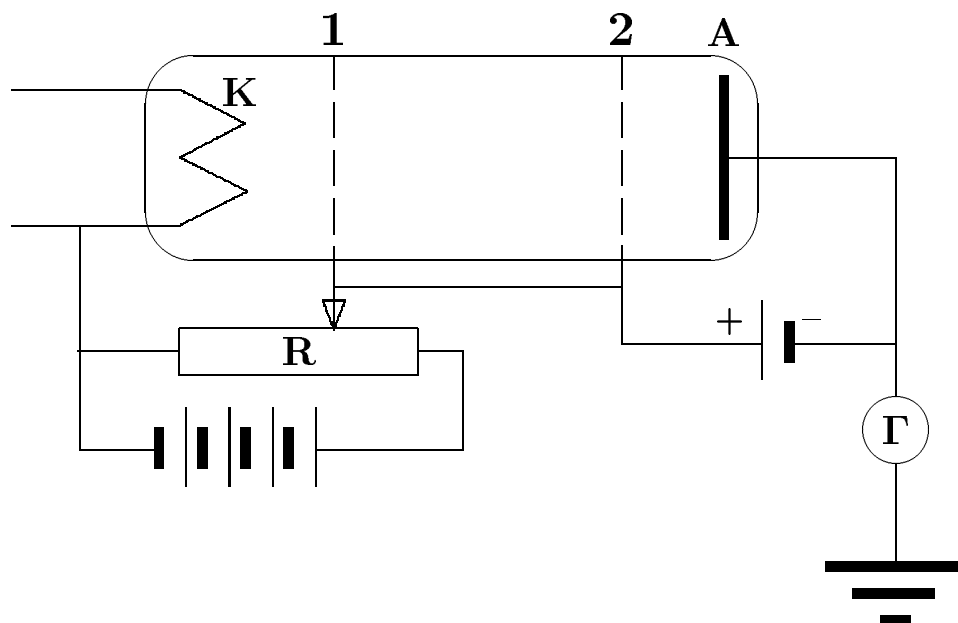


Рис. 2.5: Схема опыта Франка-Герца.

ртути. Схема опыта приведена на Рис. 2.5. Пары ртути низкого давления находятся в колбе, между катодом **К** и сеткой **1** которой подается напряжение  $V$  ускоряющее электроны. Это напряжение можно плавно менять с помощью реостата  $R$ . Между сеткой **2** и анодом **А** подано постоянное напряжение  $-0,5$  В замедляющее движение электронов. Гальванометр **Г** измеряет зависимость анодного тока  $I$  от напряжения  $V$ .

Между сетками **1** и **2** электроны движутся без ускорения и испытывают с атомами паров ртути упругие и неупругие соударения. В случае упругих столкновений энергия электронов не меняется и поэтому они не препятствуют протеканию тока через трубку. В результате ток  $I$  возрастает с увеличением напряжения  $V$ .

При неупругих столкновениях электроны теряют часть своей энергии и поэтому вольт-амперная зависимость получается более сложной. Действительно, электрон потерявший определенную энергию уже не сможет преодолеть отрицательную разность потенциа-

лов между сеткой **2** и анодом и ток будет уменьшаться. Если бы при неупругих столкновениях атомы ртути поглощали энергию электронов непрерывным образом, то вольт-амперная характеристика была бы монотонной. Другое дело, если атомы поглощают энергию только определенными порциями. В этом случае вольт-амперная характеристика должна иметь немонотонную зависимость.

Именно такой немонотонный характер вольт-амперной зависимости обнаружен на опыте: оказалось, что ток  $I$  в зависимости от напряжения  $V$  имеет отчетливые максимумы и минимумы, повторяющиеся через каждые 4,86 В (см. Рис. 2.6). Пока напряжение не достигает 4,86 В электроны не обладают достаточной энергией, чтобы возбудить атом и поэтому испытывают только упругие столкновения. При достижении напряжения 4,86 В они начинают неупругие столкновения и электроны теряют энергию. Поэтому ток уменьшается. Повторение минимумов связано с многократными неупругими взаимодействиями, в результате чего электроны теряют энергию, кратную энергии, которую они теряют в одном неупругом столкновении.

Таким образом постулат Бора о том, что электроны в атомах находятся на строго определенных энергетических уровнях, получил прямое экспериментальное подтверждение.

## 2.6 Недостатки боровской теории атома водорода

Несомненным успехом теории Бора явились описание дискретного спектра атома водорода и расчет постоянной Ридберга. Кроме того, в опыте Франка-Герца был экспериментально подтвержден постулат стационарных состояний. Все это заставляло серьезным образом считаться с боровской теорией.

Тем не менее успех теории был достигнут за счет разрушения логической последовательности. Действительно, постулаты Бора находятся в противоречии с классической электродинамикой, а все расчеты производятся на уровне классических представлений. Непонятен сам “механизм” переходов между энергетическими уровнями. Кро-

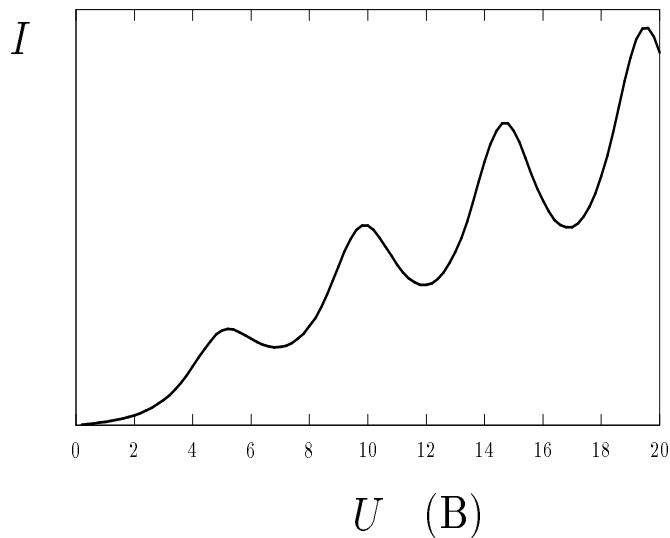


Рис. 2.6: Вольт-амперная характеристика в опыте Франка-Герца.

ме того, теория Бора оказалась неприменимой к описанию других атомов, равно как и к описанию молекулярных взаимодействий.

Забегая вперед скажем, что достаточно быстро все эти трудности удалось преодолеть в последовательной формулировке квантовых законов. Кроме перечисленных выше проблем квантовая механика решила множество других задач, равно как позволила сделать многие предсказания, которые затем были успешно подтверждены экспериментом. Главная же заслуга Бора была в том, что он впервые показал необходимость пересмотра классических представлений при переходе на уровень атомных систем.

## Глава 3

# Корпускулярно–волновой дуализм

### 3.1 Двойственная природа света

Напомним, что впервые понятие порции (*кванта*) света ввел в 1900 г. немецкий ученый М. Планк для объяснения парадокса с излучением абсолютно черного тела. Планк заметил, что все трудности решаются, если допустить, что свет частоты  $\nu$  излучается и поглощается веществом с энергией, кратной величине

$$E = h\nu = \left(\frac{h}{2\pi}\right)(2\pi\nu) = \hbar\omega. \quad (3.1)$$

Важно подчеркнуть, что Планк ничего не говорил о природе света. Он говорил только о свойствах его излучения и поглощения веществом.

Важнейший шаг к пониманию квантовой природы света сделал в 1905 г. А. Эйнштейн. Он пришел к выводу, что для объяснения наблюдаемых на опыте свойств фотоэффекта необходимо дополнить гипотезу Планка тем, что свет не только излучается и поглощается квантами, но и распространяется в пространстве как поток отдельных частиц, каждая из которых имеет энергию, даваемую формулой Планка (3.1). Квант (корпускулу) света принято называть *фотоном*.

Конечно, уже тогда Эйнштейна мучил вопрос о совмещении таких казалось бы несовместимых понятий о свете, как об электромагнитной волне и потоке корпускул. Во введении к своей исторической статье “Об одной эвристической точке зрения, касающейся возник-

новения и превращения света” он писал<sup>1</sup> “Волновая теория света, оперирующая с непрерывными функциями точки, прекрасно оправдывается при описании чисто оптических явлений и, вероятно, едва ли будет заменена какой-либо иной теорией. Но все же не следует забывать, что оптические наблюдения относятся не к мгновенным, а к средним по времени величинам. Поэтому, несмотря на полное подтверждение экспериментом теории дифракции, отражения, преломления, дисперсии и т.д., может оказаться, что теория света, оперирующая непрерывными пространственными функциями, приведет к противоречию с опытом, когда ее будут применять к явлениям возникновения и превращения света.” И далее он пишет: “Я и в самом деле думаю, что опыты, касающиеся “излучения черного тела”, фотолюминисценции,... лучше объясняются предположением, что энергия света распространяется по пространству дискретно”.

Таким образом опыт говорит, что свет имеет и волновую природу, и корпускулярную. При этом та или иная его природа проявляется в зависимости от конкретной ситуации: если мы изучаем усредненные характеристики, то свет проявляет себя как волна. Если говорим о процессах его взаимодействия с отдельными частицами, то его следует рассматривать как поток частиц.

### 3.2 Несколько слов о специальной теории относительности и корпускулярных свойствах света

Прежде, чем перейти к более подробному обсуждению корпускулярных свойств света необходимо сказать несколько слов о *релятивистских* (вытекающих из специальной теории относительности) соотношениях между массой частицы  $m$ , ее энергией  $E$  и импульсом  $\vec{p}$ :

$$E = \gamma mc^2 = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}, \quad (3.2)$$

$$p = |\vec{p}|, \quad \vec{p} = \gamma m \vec{v}, \quad (3.3)$$

---

<sup>1</sup>Ann. Phys., 1905, **17**, p.132-148. Имеется русский перевод в Альберт Эйнштейн, *Собрание научных трудов*, т.3, “Наука”, М. 1966.

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \beta = \frac{|\vec{v}|}{c}. \quad (3.4)$$

Отметим, что для фотона  $v = c$  и  $\gamma = \infty$ . Тогда для того, чтобы его энергия была конечна, следует положить  $m_{\text{фотона}} = 0$ .

В системе покоя частицы  $\vec{v} = 0$  и

$$E_0 = mc^2. \quad (3.5)$$

Придадим этим формулам *релятивистски-инвариантный* вид, т.е. вид независимый от выбора конкретной системы отсчета.

В *релятивистской физике*, в отличие от *нерелятивистской*, важными объектами являются 4-векторы:

$$F = (A_0, A_1, A_2, A_3) \equiv (A_0, \vec{A}). \quad (3.6)$$

При этом релятивистски-инвариантной величиной является скалярное произведение двух 4-векторов, которое определяется согласно

$$AB = A_0B_0 - \vec{A}\vec{B} \quad (3.7)$$

где  $\vec{A}\vec{B}$  — обычное скалярное произведение двух 3-векторов.

Характерными примерами 4-векторов являются *4-координата*, объединяющая время  $t$  и обычную координату  $\vec{x}$

$$x = (ct, \vec{x}), \quad (3.8)$$

и *4-импульс*, объединяющий энергию частицы  $E$  и ее 3-импульс  $\vec{p}$  (поэтому часто этот вектор называют *вектором энергии-импульса*)

$$p = \left( \frac{E}{c}, \vec{p} \right). \quad (3.9)$$

На основании (3.7) следует заключить, что  $p^2 \equiv pr$  является релятивистским инвариантом. Кроме того, в связи с тем, что скорость света  $c$  одинакова в любой системе, то релятивистской величиной будет также  $\frac{1}{c^2}p^2$ . В свою очередь, согласно (3.2), получаем

$$\frac{1}{c^2}p^2 \equiv \frac{1}{c^2} \left( \frac{1}{c^2}E^2 - \vec{p}^2 \right) = m^2 \quad (3.10)$$

или

$$m = \frac{1}{c} \sqrt{p^2}. \quad (3.11)$$

Иными словами, масса частицы является релятивистским инвариантом и выражается через 4-импульс по формуле (3.11).

Для фотона  $m_{\text{фотона}} = 0$  и из (3.10) следует, что

$$|\vec{p}| = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}. \quad (3.12)$$

Таким образом можно определить модуль значения (обычного, трехмерного) импульса фотона. Чтобы определить сам импульс следует задать его направление. С этой целью необходимо ввести понятие *волнового вектора*  $\vec{k}$ , модуль которого равен *волновому числу*  $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$ , а направление совпадает с направлением распространения света. Тогда энергия и импульс фотона выражаются следующим образом

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}. \quad (3.13)$$

Эти соотношения учат нас, что корпускулярные (энергия  $E$  и импульс  $\vec{p}$ ) и волновые (частота  $\omega$  и волновой вектор  $\vec{k}$ ) характеристики фотона связаны друг с другом, причем коэффициентом пропорциональности оказывается одна и та же величина — постоянная Планка  $\hbar$ !

### 3.3 Экспериментальное подтверждение корпускулярно–волнового дуализма. Опыт Комптона

Как ни кажется странным (с точки зрения “здорового смысла”) корпускулярно-волновой дуализм, но природа света действительно оказалась двойственной: очень скоро (1922 г.) в опытах американского физика А. Комптона было экспериментально подтверждено, что свет обладает свойствами частиц. Это неоспоримо следовало



из анализа частот рентгеновских лучей после их прохождения через кристалл. Оказалось, что наряду с излучением исходной частоты света  $\omega$  образуется свет с частотой  $\omega' < \omega$ . Это явление называют *эффектом Комптона*.

Рассмотрим сначала механизм рассеяния света на электронах с точки зрения классической физики. Электромагнитная волна света взаимодействует с зарядом электрона и раскачивает последний. Очевидно, что последний будет испытывать вынужденные колебания с частотой вынуждающей силы, т.е. с частотой электромагнитной волны  $\omega$ . Далее, согласно представлениям классической электродинамики, электрон, как и всякий ускоряемый или замедляемый заряд, будет излучать электромагнитное поле — рассеянную электромагнитную волну. Опять таки частота последней будет в точности совпадать с частотой колебаний электрона. Такой механизм называют *томсоновским рассеянием света*.

Итак, в рамках классического (томсоновского) подхода к рассеянию нет никакой возможности для рассеянного света иметь частоту отличную от частоты падающего света. Это находится в противоречии с наблюдением Комптона.

Однако если допустить, что фотон — частица, то его взаимодействие со слабо связанными электронами кристалла происходит по законам упругого удара (см. Рис. 3.1). До столкновения 4-импульсы фотона и электрона равны

$$p_{\text{фото}} = \left( \frac{\hbar}{c}\omega, \hbar\vec{k} \right), \quad p_e = (M_e c, \vec{0}), \quad (3.14)$$

где  $|\vec{k}| = \frac{1}{c}\omega$ . После столкновения их 4-импульсы становятся

$$p'_{\text{фото}} = \left( \frac{\hbar}{c}\omega', \hbar\vec{k}' \right), \quad p'_e = \left( \frac{1}{c}E', \vec{p}' \right), \quad (3.15)$$

где  $|\vec{k}'| = \frac{1}{c}\omega'$  и  $E' = \sqrt{M_e^2 c^4 + c^2 \vec{p}'^2}$ . Из законов сохранения энергии и импульса теперь следуют четыре уравнения

$$p_{\text{фото}} + p_e = p'_{\text{фото}} + p'_e \quad (3.16)$$

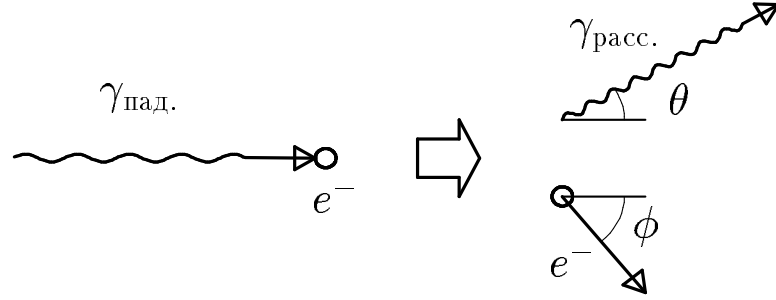


Рис. 3.1: Комптоновское рассеяние света. До столкновения (левый рисунок) электрон покоится, а фотон налетает с 4-импульсом  $p_{\text{фото}} = (\frac{\hbar\omega}{c}, \hbar\vec{k})$ . После рассеяния (правый рисунок) и электрон, и фотон движутся.

или по компонентам

$$\hbar\omega + M_e c^2 = \hbar\omega' + \sqrt{M_e^2 c^4 + c^2 \vec{p}'^2} \quad (3.17)$$

$$\hbar(\vec{k} - \vec{k}') = \vec{p}'. \quad (3.18)$$

Из (3.18), с учетом соотношения между волновым числом и частотой, получим

$$\vec{p}'^2 = \frac{\hbar^2}{c^2} (\omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega' \cos \theta), \quad (3.19)$$

где  $\theta$  — угол между направлением движения падающего и рассеяного фотонов. Далее подставляя (3.19) в (3.17) получаем уравнение для частоты  $\omega'$ , решая которое получим

$$\omega' = \omega \frac{M_e c^2}{M_e c^2 + \hbar\omega(1 - \cos \theta)}. \quad (3.20)$$

Ввиду того, что при  $\theta \neq 0^\circ$  знаменатель в (3.20) больше числителя, заключаем, что частота рассеяного света должна быть меньше

частоты падающего света. Это и наблюдалось в опыте Комптона. Кроме того, если перейти к классическому пределу ( $\hbar \rightarrow 0$ ) получим, что частота рассеянного света должна стремиться к частоте падающего света. Как уже говорилось, такое значение  $\omega'$  и получается из классического рассмотрения. Этот же результат получается, если частота света очень мала или масса  $M$  частицы, на которой происходит рассеяние, очень велика. Иными словами, в зависимости от конкретной ситуации (в данном случае соотношение между величинами  $Mc^2$  и  $\hbar\omega(1 - \cos\theta)$ ) свет проявляет себя как частица или как волна.

То обстоятельство, что в пределе  $\hbar \rightarrow 0$  мы получили классический результат, означает выполнение одного из фундаментальнейших эвристических принципов науки (*принцип соответствия*): всегда старая теория должна получаться как предельный случай новой.

Определим теперь длину волны рассеянного света

$$\Delta\lambda = \lambda_{\text{Комп.}}(1 - \cos\theta), \quad (3.21)$$

где  $\lambda_{\text{Комп.}} \equiv \frac{h}{M_{ec}}$  называют *комптоновской длиной волны* электрона, а  $\Delta\lambda \equiv \lambda' - \lambda$  — разность длин волн рассеянного и падающего света. Формула (3.21) называется *формулой Комптона*. Из нее следует, что величина изменения длины волны не зависит от длины волны падающего света. Кроме того, в случае рассеяния на нулевой угол, длина волны не меняется.

Впервые правильное истолкование эффекта Комптона с квантовых позиций было сделано самим Комптоном и независимо от него голландским физиком П. Дебаем.

Эффект Комптона имеет место не только для электрона, но и для любой заряженной частицы, например, протона. В этом случае заметный сдвиг частоты будет, если длина волны падающего света  $\lambda$  становится сравнимой с комптоновской длиной волны протона

$$\lambda_{p,\text{Комп.}} = \frac{h}{M_p c}, \quad (3.22)$$

где  $M_p$  — масса протона. В этом легко убедиться, если переписать

формулу (3.20) в виде

$$\omega' = \frac{\omega}{1 + \frac{\lambda_{p, \text{Комп}}}{\lambda}(1 - \cos \theta)}. \quad (3.23)$$

Ввиду того, что масса протона почти в 2000 раз больше массы электрона, комптоновская длина волны протона в 2000 раз меньше комптоновской длины волны электрона. Следовательно, эффект Комптона на протоне становится заметен, если длина волны падающего света на три порядка (или более) меньше, чем у рентгеновских лучей.

В случае рассеяния света на электронах, движущихся с релятивистской скоростью, может иметь место и *обратный Комптон эффект*, когда частота рассеянного света увеличивается, по сравнению с частотой падающего света. Подробно это рассмотрено в *Задаче 3.3*.

### 3.4 Универсальность корпускулярно-волнового дуализма. Волны де Бройля

Одним из фундаментальных положений боровской теории атома водорода было то, что абсолютное значение энергии электронов в атоме (2.21) связано с частотой  $\omega_n$  согласно

$$|E_n| = \hbar \omega_n \quad (3.24)$$

Эта формула полностью совпадает с формулой Планка (3.1) для энергии фотона, причем коэффициент пропорциональности  $\hbar$  в обеих формулах один и тот же. Частоты  $\omega_n$  не могут быть объяснены в рамках классических понятий. Эти наблюдения наталкивают на мысль, что частоты  $\omega_n$  характеризуют некоторые волны, которые присущи электронам. Таким образом получается, что частицы (которыми несомненно являются электроны) имеют волновые свойства.

Такая универсальность между электроном и фотоном становится еще более очевидной, если вспомнить, что и фотон (который несомненно является электромагнитной волной) имеет также свойства частиц.

В 1924 г. французский ученый Луи де Бройль выдвинул смелую гипотезу, что формулы (3.13) имеют универсальный характер и справедливы не только для фотона, но и для частиц имеющих ненулевую массу. Например, для электрона. Таким образом де Бройль пришел к концепции *корпускулярно-волнового дуализма*, согласно которому *любой объект обладает как свойствами частицы, так и свойствами волнового поля: его энергия пропорциональна частоте его волны, а импульс пропорционален волновому вектору. При этом оба коэффициента пропорциональности равны между собой, не зависят от природы объекта и равны  $\hbar$ .*

Эти волны, присущие всем без исключения частицам, принято называть *волнами де Бройля*. Соответствующую длину волны называют *де-бройлевской длиной волны*.

Отметим, что если классическим пределом считать предел, когда  $\hbar \rightarrow 0$ , то в классической физике длина волны электрона пропадает  $\lambda = 2\pi\hbar/p \rightarrow 0$ , а частота  $\omega \rightarrow \infty$ . Следовательно, *квантовая физика содержит в себе классическую как предел, формально получаемый, когда постоянная Планка полагается равной нулю.*

### 3.5 Экспериментальное подтверждение существования волн де Бройля

В 1927 г. К. Дэвиссон и Л. Джермер выполнили опыты по изучению рассеяния электронов на монокристалле никеля, в которых было экспериментально обнаружено явление интерференции электронов. Это полностью подтвердило гипотезу Л. де Бройля о наличии у частиц волновых свойств.

В опыте Дэвиссона–Джермера пучок ускоренных электронов отражался от кристаллографических поверхностей кристалла никеля. Рассеянные электроны улавливались ловушкой соединенной с гальванометром. Об интенсивности пучка отраженных электронов можно было судить по отклонению стрелки гальванометра. Кристалл вращался и поэтому можно было плавно менять угол между пучком падающих электронов и отражающими кристаллографическими по-

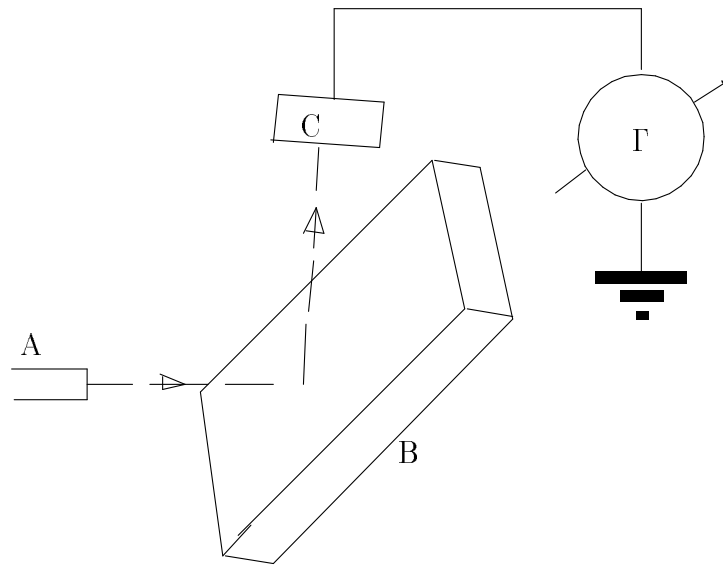


Рис. 3.2: Схема опыта Дэвиссон–Джермера:  $A$  — электронная пушка,  $B$  — вращающийся монокристалл никеля,  $C$  — ловушка рассеянных электронов и  $\Gamma$  — гальванометр.

верхностями никеля (Рис. 3.2).

Как и в случае любых волн, условием диффракции должна быть соизмеримость длины де-бройлевской волны электрона  $\lambda$  с расстоянием между рассеивающими центрами. В случае диффракции рентгеновских лучей на кристаллах этим условием является *условие Вульфа–Брэггов*

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (3.25)$$

где  $d$  — расстояние между кристаллографическими поверхностями,  $\theta$  — угол падения лучей (Рис. 3.3), а  $n$  — целое число. В случае, если диффракция электронов действительно имеет место, это же условие будет условием максимума потока электронов, отраженных от кристалла.

В опыте Дэвиссона–Джермера электроны ускорялись полем  $V \sim 100$  В и, следовательно, имели кинетическую энергию  $E \sim 100$  эВ.

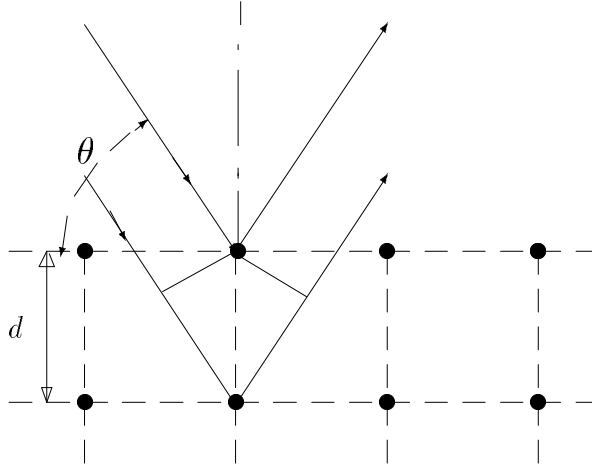


Рис. 3.3: Условие диффракции электронов при отражении их от кристаллографических плоскостей.

Нетрудно рассчитать их импульс и де-бройлевскую длину волны:

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{2M_e E} \sim \sqrt{2 \times (0,5 \text{ МэВ} \cdot c^{-2}) \times 100 \text{ эВ}} = \\ &= 10^4 \text{ эВ} \cdot c^{-1}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\lambda = \frac{h}{p} \sim 10^{-1} \text{ \AA}. \quad (3.27)$$

Постоянная кристаллографической решетки никеля  $d$  порядка нескольких  $\text{\AA}$ . Поэтому условия (3.25) легко выполняются.

В опыте было зарегистрировано, что при определенных положениях кристалла показания гальванометра имеют резкие максимумы. Причем их положение прекрасно описывалось формулой Вульфа–Брэггов (3.25).

Через несколько лет удалось обнаружить диффракционную картину при прохождении электронов через тонкие пленки вещества. В 30-е годы были также доказаны волновые свойства у атомов и молекул, а несколько позднее изучена диффракция протонов и нейтронов. Тем самым был доказан факт существования волн де Бройля у

всех микрочастиц.

### 3.6 Физический смысл волн де Бройля

Для того, чтобы яснее понять суть физической картины, приводящей к интерференции электронов, перейдем от реального опыта Дэвиссона-Джермера к мысленному опыту с двумя щелями (Рис. 3.4).

Поток электронов испускается пушкой  $A$ , проходит через две узких щели в экране  $B$  и затем регистрируется экраном  $C$ . В результате интерференции на регистрирующем экране наблюдаются чередующиеся максимумы и минимумы интенсивности потока электронов. Обозначим через  $x$  координату точки вдоль экрана  $C$ . Тогда интенсивность регистрируемых электронов можно описать функцией  $P_{12}(x)$ .

Если считать, что каждый отдельный электрон, испущенный пушкой  $A$ , пролетает только через одно из отверстий экрана  $B$ , то функцию  $P_{12}(x)$  можно получить, если половину электронов пропускать только через верхнюю щель (Рис. 3.5), а вторую половину — через нижнюю (Рис. 3.6). Однако интенсивности электронов будут в этих случаях гладкими с одним максимумом, расположенным напротив щели. Обозначим их  $P_1(x)$  и  $P_2(x)$ , соответственно. При этом очевидно, что

$$P_{12}(x) \neq P_1(x) + P_2(x). \quad (3.28)$$

Отсюда заключаем, что в случае пропускания электрона через экран с двумя щелями, нельзя говорить о том, что отдельный электрон проходит через ту или иную щель: как и при прохождении любой волны через экран с двумя щелями, электрон проходит сразу через две щели! Иначе не будет никакой интерференционной картины. Следовательно, мы в принципе не в состоянии говорить о траектории электрона, так как в принципе не знаем, через которую из щелей пролетел тот или иной электрон. В этом состоит одно из кардинальных положений квантовой механики.



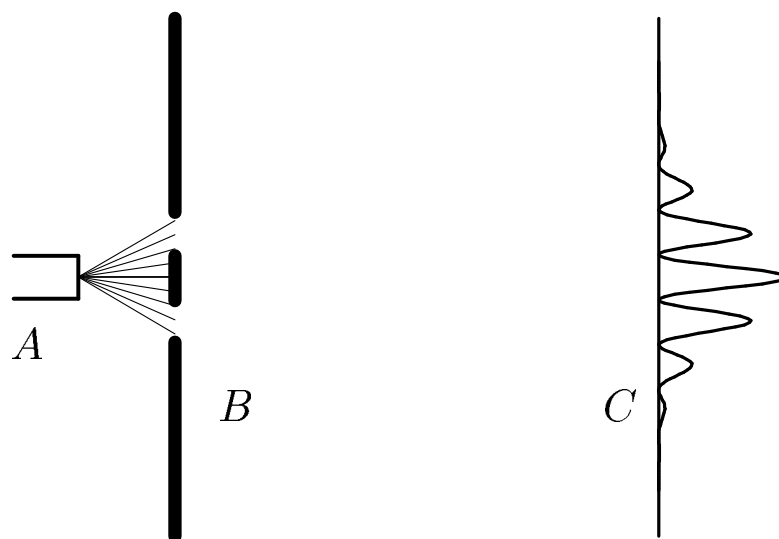


Рис. 3.4: Прохождение электрона через две узкие щели.  $A$  — электронная пушка,  $B$  — экран с двумя узкими щелями и  $C$  — регистрирующий экран.

Совсем иная картина возникает, когда одна из щелей закрыта. В этом случае мы локализуем возможные траектории электрона так, что они обязательно проходят через открытую щель. Иными словами, мы производим измерение траектории. В результате измерения изменяется состояние, в котором находится электрон. Это в корне отличается от классических представлений, где полагается, что любая частица движется по строго определенной траектории, задаваемой уравнениями движения, независимо от того, следим мы, или не следим за ее движением.

Приведенные выше рассуждения представляют частный случай одного из главных постулатов квантовой механики: *Если мы в принципе не знаем, в каком из состояний находится квантовая система, то необходимо учесть все ее состояния; производя любое измерение над квантовой системой, мы тем самым отсекаем часть возможных состояний и, следовательно, изменяем саму систему.*

Далее уточним формулировку этого принципа придав ему точную

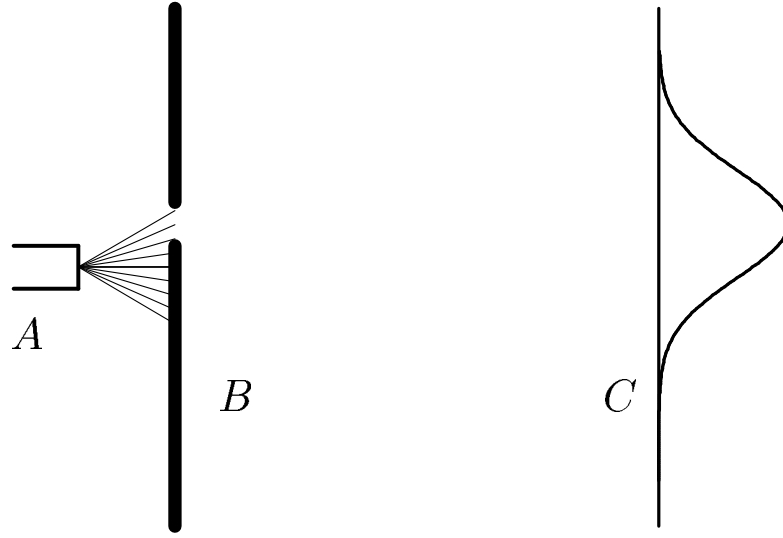


Рис. 3.5: Прохождение электрона через верхнюю щель.  $A$  — электронная пушка,  $B$  — экран с одной узкой щелью и  $C$  — регистрирующий экран.

математическую форму. Дело в том, что пока не ясно, как конкретно “учесть все состояния” при квантовом описании системы. Для этого необходимо ввести новое понятие — *волновую функцию квантового состояния*.

### 3.7 Амплитуда вероятности или волновая функция

Рассмотрим сначала случай с одной щелью, например, изображенный на Рис. 3.5. Пусть  $R$  — расстояние между экранами  $B$  и  $C$ , а  $x_0$  — расстояние щели от осевой линии проходящей через электронную пушку перпендикулярно экранам. Введем, сначала формально, комплексную функцию

$$\begin{aligned}\Psi_1(x) &= \phi_1(x)\sqrt{P_1(x)}, \\ \phi_1(x) &= \exp[i2\pi l_1/\lambda],\end{aligned}\tag{3.29}$$

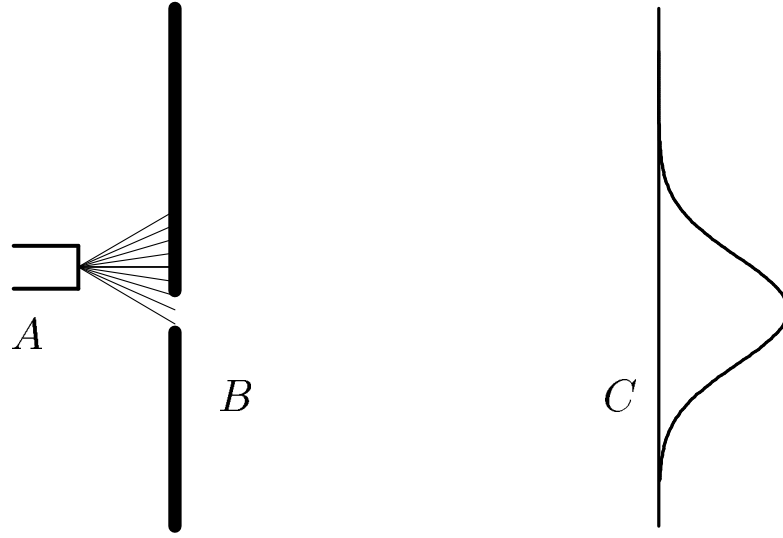


Рис. 3.6: Прохождение электрона через нижнюю щель.  $A$  — электронная пушка,  $B$  — экран с одной узкой щелью и  $C$  — регистрирующий экран.

где  $\lambda$  — длина де-бройлевской волны, а  $l_1 = \sqrt{R^2 + (x - x_0)^2}$  — расстояние от щели до точки  $x$  на экране  $C$ . Фазовый множитель  $\phi_1(x)$  введен для того, чтобы учесть волну де Бройля электрона;  $P_1(x)$ , как и в предыдущем параграфе, представляет распределение интенсивности электронов, зафиксированных на экране  $C$ . Для конкретности далее будем использовать гауссовое распределение для  $P_1(x)$

$$P_1(x) = A \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{b^2} \right]. \quad (3.30)$$

Далее вместо “интенсивности распределения электронов” будем говорить о вероятности зафиксировать электрон в точке  $x$  на экране  $C$ . Очевидно, что комплексная функция  $\Psi_1(x)$  простым образом связана с вероятностью  $P_1(x)$

$$|\Psi_1(x)|^2 = P_1(x) \quad (3.31)$$

и может быть интерпретирована как амплитуда вероятности. В квантовой механике ее чаще называют волновой функцией.

Можно ввести волновую функцию и для случая, изображенного на Рис. 3.6

$$\begin{aligned}\Psi_2(x) &= \phi_2(x)\sqrt{P_2(x)}, \\ \phi_2(x) &= \exp[i2\pi l_2/\lambda],\end{aligned}\tag{3.32}$$

где  $l_2 = \sqrt{R^2 + (x + x_0)^2}$ , а

$$P_2(x) = A \exp\left[-\frac{(x + x_0)^2}{b^2}\right].\tag{3.33}$$

При этом вероятность и волновая функция должны быть связаны точно так же, как и в предыдущем случае

$$|\Psi_2(x)|^2 = P_2(x).\tag{3.34}$$

Нетривиальный момент состоит в построении волновой функции для электрона, проходящего через экран с двумя щелями. Именно для этого и придется дать математическую формулировку принципа из предыдущего параграфа:

*Если мы в принципе не можем узнать, в каком из квантовых состояний находится система, то следует сложить все волновые функции, описывающие возможные квантовые состояния ее.*

Этот принцип называют *принципом суперпозиции*.

В данном конкретном случае принцип суперпозиции говорит, что для того, чтобы построить волновую функцию электрона, пролетающего через экран с двумя щелями, необходимо сложить волновые функции  $\Psi_1(x)$  и  $\Psi_2(x)$

$$\Psi_{12}(x) = \Psi_1(x) + \Psi_2(x).\tag{3.35}$$

При этом, конечно, вероятность обнаружить электрон в точке  $x$  не будет равна сумме вероятностей  $P_1(x)$  и  $P_2(x)$  так как возникает интерференция между состояниями 1 и 2

$$\begin{aligned}|\Psi_{12}(x)|^2 &= P_{12}(x) = \\ &= |\Psi_1(x)|^2 + |\Psi_2(x)|^2 + \\ &\quad + \Psi_1(x)^*\Psi_2(x) + \Psi_1(x)\Psi_2(x)^* = \\ &= P_1(x) + P_2(x) + \text{интерференция}\end{aligned}\tag{3.36}$$

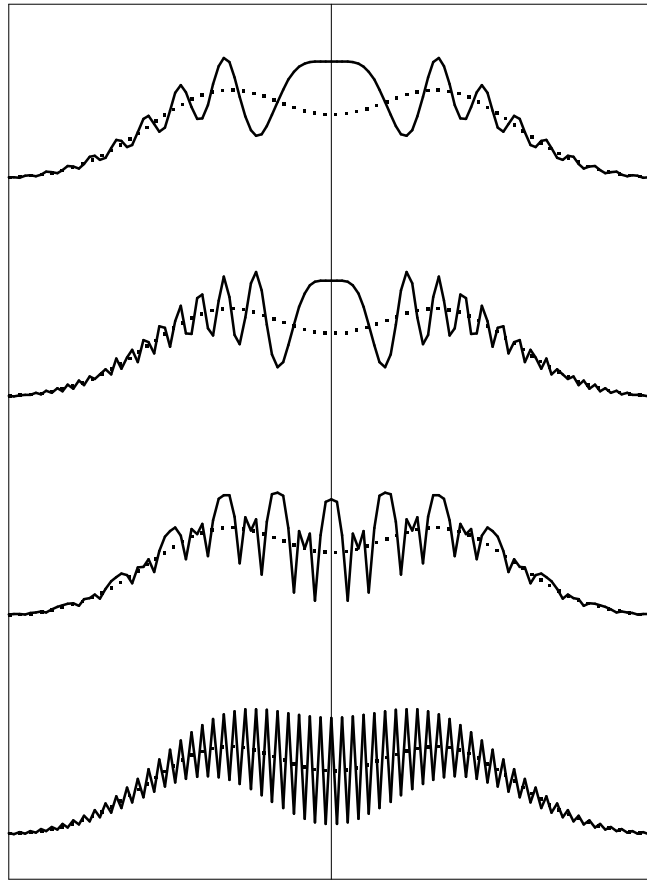


Рис. 3.7: Интерференционная картина на экране  $S$  в случае прохождения электрона через две щели при различных значениях длины волны де Бройля  $\lambda$ , рассчитанная на основе формулы (2.36).

На Рис. 3.7 приведены результаты расчета для вероятности  $P_{12}(x)$ . Разные кривые для вероятности соответствуют (сверху вниз) разной длине волны де Бройля  $\lambda = 2, 1, 0,1$  и  $0,01$  (в соответствующих единицах). Таким образом нижняя кривая, представляющая результат для очень маленькой длины волны, сильно осциллирует возле кривой, задаваемой суммой вероятностей  $P_1(x)$  и  $P_2(x)$ . В эксперименте всегда измеряется среднее значения кривой на определенном ее участке. Если осцилляции очень сильные, то производится измерение на участке захватывающем несколько длин волн. В этом случае осцилляции взаимно уничтожаются и получается классическая кри-

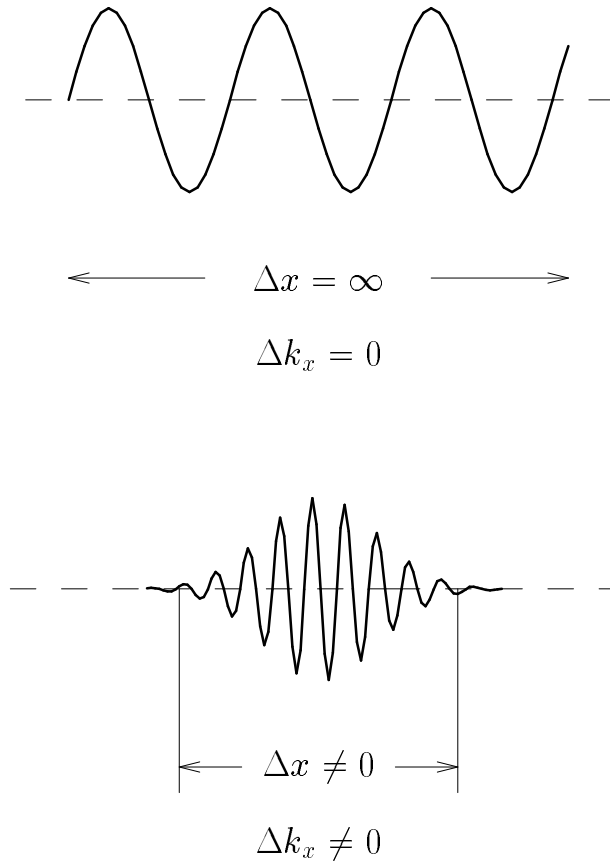


Рис. 3.8: Плоская волна (верхний рисунок) и волновой пакет (нижний рисунок).

вая  $P_1(x) + P_2(x)$ , изображенная на рисунке точечной линией.

Совсем иная картина будет, если удастся, пусть даже только в принципе, узнать каким путем шел процесс: в этом случае необходимо сначала вычислить вероятности протекания соответствующих процессов, а потом их сложить. В результате такой процедуры интерференция отсутствует и результирующее распределение представляет сумму отдельных распределений.

### 3.8 Плоские волны и волновые пакеты

Возникает законный вопрос, какой тип амплитуды вероятности следует сопоставить свободной микрочастице? Один из возможных выборов соответствует плоской волне де Бройля

$$\phi_{\text{своб.}} = A \exp \left\{ -i(\omega t - \vec{k}\vec{r}) \right\}. \quad (3.37)$$

В этом случае можно говорить, что микрочастица имеет определенные значения энергии  $E = \hbar\omega$  и импульса  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ . Однако такая волна неограничена, как в пространстве, так и во времени и мы ничего не можем сказать о ее местонахождении в пространстве-времени (верхняя часть Рис. 3.8).

С другой стороны, можно сопоставить микрочастице модулированную волну, изображенную на нижней части Рис. 3.8. Теперь уже можно говорить, что местоположение такой частицы определено с точностью до  $\Delta x \neq 0$ . Однако в этом случае нельзя говорить об определенной длине волны такого объекта, т.к. он уже представляет *пакет плоских волн* де Бройля с частотами, разбросанными в интервале  $\Delta\omega \neq 0$  от несущей частоты, и волновыми векторами, разбросанными в интервале  $\Delta k_x \neq 0$  (см. *Задачу 3.4*). Ввиду того, что все волны, составляющие волновой пакет, имеют различные скорости, последний не может существовать бесконечно долго и рассыпается на плоские волны за конечное время  $\Delta t$ .

### 3.9 Принцип неопределенностей

Подведем итоги изучения корпускулярно-волновых свойств микрочастиц:

1. Эксперимент полностью подтверждает идею де Бройля о волновых свойствах микрочастиц с  $m \neq 0$ .
2. Микрочастице может быть сопоставлен узкий волновой пакет координата, частота и волновой вектор которого определены с конечной точностью  $\Delta\vec{x}$ ,  $\Delta\omega$  и  $\Delta\vec{k}$ .
3. Волновой пакет “живет” конечное время  $\Delta t$ , после которого он расплывается на плоские волны.

Вспоминая, что частота и волновой вектор связаны с энергией и импульсом микрочастицы, мы из п.2 заключаем, что последние имеют конечную неопределенность. В квантовой механике эта неопределенность имеет фундаментальный смысл. Существование такого рода неопределенностей называется *принципом неопределенностей*. Наличие их в микромире как фундаментального закона природы,

впервые было сформулировано в 1927 г. В. Гайзенбергом.

На основании решения *Задачи 3.4* получаем, что неопределенность между координатой  $x$  и импульсом  $p_x$  имеет вид

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim \hbar. \quad (3.38)$$

Аналогичные соотношения имеют место и для других компонент

$$\Delta y \Delta p_y \gtrsim \hbar, \quad (3.39)$$

$$\Delta z \Delta p_z \gtrsim \hbar. \quad (3.40)$$

Более того, хотя в *Задаче 3.4* эти соотношения выведены на основании конкретной волновой функции, они остаются справедливыми и в общем случае.

Из соотношений неопределенностей (3.38-3.40) следует, что в любом эксперименте точности одновременного измерения координаты частицы и ее импульса не могут быть в принципе нулевыми. Так, если волновая функция представляет плоскую волну, то  $\Delta \vec{p} = 0$  и из (3.38-3.40) следует, что  $\Delta \vec{x} = \infty$ .

Второе важное соотношение неопределенностей связывает неопределенность энергии и времени

$$\Delta t \Delta E \gtrsim \hbar. \quad (3.41)$$

Отсюда, например, следует, что если система нестабильна (атом в возбужденном состоянии, радиоактивное ядро и др.), то ее энергия всегда имеет конечную неопределенность

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau}, \quad (3.42)$$

где  $\tau$  — время жизни квантовой системы.

Физический смысл принципа неопределенностей представляет одно из наиболее сложных и нетривиальных положений квантовой механики и служил в свое время предметом спора между такими классиками физики, как А. Эйнштейн и Н. Бор.

Принцип неопределенностей для координаты и импульса тесным образом связан с тем обстоятельством, что в квантовой механике



теряет понятие траектории частицы. Действительно, знание траектории означает, что нам известно значение координаты частицы, как функции времени  $\vec{x}(t)$ . Ввиду того, что скорость выражается как производная от координаты по времени  $\vec{v} = \frac{d\vec{x}}{dt}$ , мы всегда, зная траекторию, знаем и скорость (а, значит, и импульс  $\vec{p} = m\vec{v}$ ) частицы в любой момент времени  $t$ . А это как раз и запрещает принцип неопределенностей.

Соотношение неопределенностей позволяет по новому взглянуть на проблему стабильности атома. С одной стороны, вследствие кулоновского притяжения электрон падает на ядро атома. Это приводит к уменьшению неопределенности его координаты. С другой стороны, уменьшение неопределенности координаты электрона приводит, вследствие принципа неопределенностей, к увеличению неопределенности его импульса, а, значит, и кинетической энергии электрона. Это приводит к отталкиванию электрона. Таким образом электрон будет “болтаться” вокруг некоторой стабильной траектории. Далее это покажем строго на основании уравнения Шредингера.

### 3.9.1 Интегралы по траекториям

Тот факт, что в квантовой механике отсутствует понятие траектории, послужил основой к одному из возможных способов описания процессов, происходящих в микромире<sup>2</sup>. Суть его состоит в следующем. Например, мы задаемся задачей рассчитать вероятность попадания частицы из точки  $A$  в точку  $B$ . В классическом случае эта вероятность равна единице, если обе точки лежат на одной траектории, задаваемой экстремумом действия совместно с начальными условиями

$$\left. \begin{aligned} \delta S = \delta \int_{t_A}^{t_B} \mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) dt = 0 \\ \vec{x}(t_A) = \vec{x}_A, \quad \dot{\vec{x}}(t_A) = \vec{v}_A \end{aligned} \right\} \Rightarrow \vec{x}_{\text{кл.}}(t), \quad (3.43)$$

где  $\mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}})$  — лагранжиан. Если же эти точки не лежат на кривой  $\vec{x}_{\text{кл.}}(t)$ , то вероятность равна нулю.

---

<sup>2</sup>Р. Фейнман и Ф. Хиббс, *Квантовая механика и интегралы по траекториям*. Мир, М., 1968 г.