

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО СВЯЗИ**  
**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение**  
**высшего образования**  
**«САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ**  
**ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЙ**  
**им. проф. М.А. БОНЧ-БРУЕВИЧА»**  
**(СПбГУТ)**

---

**А. Д. Андреев, Ф. Ф. Павлов, В. Б. Федюшин, Л. М. Черных,**

## **ФИЗИКА**

### **КВАНТОВАЯ ФИЗИКА**

**Учебное пособие**

**СПб ГУТ )))**

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГ**

**2020**

УДК 530.1(075.8)

ББК 22.3я73

А 65

Рецензенты:

д. ф-м. н., проф. каф. Экспериментальной физики СПбПУ  
В. В. Романов

*Утверждено редакционно-издательским советом СПбГУТ*

*в качестве учебного пособия*

**Андреев А.Д.**

А 65 Физика. Квантовая физика: учебное пособие/ А. Д. Андреев, Ф.Ф. Павлов, В. Б. Федюшин, Л. М. Черных; СПбГУТ. – СПб., 2020. – 52 с.

Написано в соответствии с рабочей программой дисциплины «Физика. Спец. главы». Содержит теоретический материал по разделу «Квантовая физика».

Рекомендуется для самостоятельной работы студентов при подготовке к упражнениям, коллоквиумам и экзаменам.

**УДК 530.1(075.8)**

**ББК 22.3я73**

© А. Д. Андреев, Ф. Ф. Павлов, В. Б. Федюшин, Л.М. Черных , 2020

©Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Санкт - Петербургский государственный  
университет телекоммуникаций  
им. проф. М. А. Бонч-Бруевича», 2020

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....	4
<b>1. КВАНТОВАЯ ОПТИКА</b> .....	4
1.1. Характеристики теплового излучения. Закон Кирхгофа.....	4
1.2. Законы излучения абсолютно черного тела.....	6
1.3. Гипотеза и формула Планка.....	8
1.4. Закономерности фотоэлектрического эффекта.....	10
1.5. Гипотеза и формула Эйнштейна.....	11
1.6. Коротковолновая граница тормозного рентгеновского излучения.....	12
1.7. Опыт Боте.....	14
1.8. Импульс фотона. Давление света.....	14
<b>2. АТОМНАЯ ФИЗИКА</b> .....	16
2.1. Закономерности в спектрах излучения атомов.....	16
2.2. Опыты Резерфорда. Планетарная модель атома.....	17
2.3. Постулаты Бора. Модель атома водорода.....	19
2.4. Опыт Франка-Герца.....	21
<b>3. КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ</b> .....	23
3.1. Корпускулярно-волновой дуализм света.....	23
3.2. Гипотеза де Броиля. Опыты по дифракции электронов.....	23
3.3. Особенности поведения частиц микромира.....	26
3.4. Соотношения неопределенностей Гейзенберга.....	27
<b>4. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА</b> .....	31
4.1. Волновая функция и её свойства.....	31
4.2. Уравнение Шредингера.....	32
4.3. Решение уравнения Шрёдингера для свободной частицы.....	34
4.4. Микрочастица в потенциальной яме с непроницаемыми стенками...	35
4.5. Потенциальный барьер бесконечной ширины.....	39
4.6. Потенциальный барьер конечной ширины. Туннельный эффект.....	41
4.7. Водородоподобный атом.....	44
4.8. Опыт Штерна-Герлаха. Спин электрона. Квантовые числа.....	47
<b>Список литературы</b> .....	50

## Введение

Свет состоит из совокупности электромагнитных волн различных частот, составляющих его спектр. Согласно теории электромагнитных волн, созданной Максвеллом во второй половине XIX столетия, теоретически определена скорость распространения электромагнитной волны, подтвержденная экспериментально. Представление об электромагнитной природе света лежит в основе объяснения многочисленных явлений волновой оптики [1].

Однако, в конце XIX века исследования явлений, связанных с процессами поглощения и испускания электромагнитных волн нагретыми телами, не могли быть объяснены в рамках электромагнитных представлений о природе света и приводили к противоречию с законом природы о сохранении энергии. В физике это противоречие получило название «ультрафиолетовой катастрофы», так как привело к принципиально новому пониманию явлений оптики и закономерностей взаимодействия излучения с веществом.

Оптические явления, не имеющие объяснения в рамках волновых представлений о природе света, стали предметом квантовой оптики, исходящей из предположения о том, что свет – поток частиц, корпускул. В настоящем учебном пособии на примере явлений квантовой оптики изложена суть корпускулярной теории природы света и, в рамках исторического осмысливания, сформулирован феномен универсальности «корпускулярно-волнового дуализма», характерный не только для света, но и для любых объектов микромира.

Современное понимание термина «корпускулярно-волнового дуализма» сформировалось в XX столетии и связано с появлением квантовой механики. При этом, как оказалось, закономерности, характерные для объектов микромира, не противоречат законам классической физики.

## 1. КВАНТОВАЯ ОПТИКА

### 1.1. Характеристики теплового излучения. Закон Кирхгофа.

Тепловое излучение, обычно, ассоциируется с понятием тепла, исходящего от нагретых тел, т.е. излучения, расположенного в невидимой инфракрасной части спектра. В общем случае, под тепловым излучением

понимают, строго говоря, испускание телом электромагнитных волн за счет его внутренней энергии во всем диапазоне частот.

Тепловое излучение не следует путать с люминесценцией, при которой свечение происходит не за счет внутренней энергии, а связано с другими источниками энергии (химическая реакция, разряд и т.п.).

Для описания закономерностей теплового излучения используют такие характеристики теплового излучения как энергетическая светимость, испускательная способность и поглощательная способность тела.

**Энергетическая светимость** тела характеризует интенсивность (плотность потока энергии) излучения тела за счет его внутренней энергии по всем направлениям во всем диапазоне частот:

$$R_T = \frac{dW}{dS \cdot dt}, \quad (1.1)$$

где  $dW$  – энергия, излучаемая телом с поверхности  $dS$  за время  $dt$ , т.е. мощность, излучаемая единицей поверхности тела во всем диапазоне частот.

**Испускательная способность** тела или **спектральная плотность** излучения – более детальная энергетическая характеристика, так как равна мощности излучения единицей поверхности в единичном интервале частот  $\omega$ :

$$r_{\omega T} = \frac{dW}{dS \cdot dt \cdot d\omega}. \quad (1.2)$$

Испускательная способность тела зависит от температуры тела и частоты излучения. По определению, энергетическая светимость – интегральная характеристика и связана с испускательной способностью соотношением:

$$R_T = \int_0^{\infty} r_{\omega T} d\omega. \quad (1.3)$$

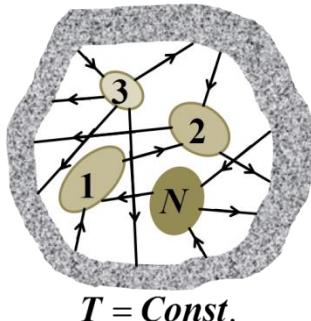
**Поглощательная способность** тела равна доле поглощенной относительно падающей на тело энергии:

$$a_{\omega T} = \frac{d\Phi_{\text{погл}}}{d\Phi_{\text{пад}}}, \quad (1.4)$$

где  $d\Phi_{\text{погл}}$  – поток энергии в интервале частот  $d\omega$ , поглощенной телом, а  $d\Phi_{\text{пад}}$  – поток энергии в том же интервале частот, падающий на тело.

Поглощательная способность тела – безразмерная величина, меньшая либо равная единице, зависящая от температуры тела и частоты излучения. Рассмотрим систему  $N$  тел (рис.1.1), помещенных внутри замкнутой оболочки, непроводящей тепло, температура которой постоянна (термостат). В пространстве внутри оболочки – вакуум, так что тела под номерами: 1, 2, 3...  $N$  и оболочка могут обмениваться между собой энергией только путем поглощения и испускания электромагнитных волн.

Очевидно, при термодинамическом равновесии температура всех тел



$T = \text{Const.}$

Рис.1.1

системы будет одинаковой и равна температуре оболочки  $T$ . Электромагнитное излучение, как говорят, находится в равновесии с излучающими и поглощающими энергию телами системы. При этом тело, испускающее больше энергии в единицу времени по сравнению с другими телами должно больше поглощать энергии в единицу времени для сохранения теплового равновесия в системе. Следовательно, чем больше испускательная способность тела, тем больше его поглощательная

способность. Отсюда следует **закон Кирхгофа**: *отношение испускательной способности тела к его поглощательной способности не зависит от природы тела, одинаково для всех тел, находящихся в термодинамическом равновесии, и равно одной и той же универсальной функции частоты и температуры.*

Таким образом, для тел системы, находящихся в термодинамическом равновесии друг с другом и со стенками полости, справедливы соотношения:

$$\left( \frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} \right)_1 = \left( \frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} \right)_2 = \dots = \left( \frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} \right)_N = f(\omega, T), \quad (1.5)$$

где  $1, 2, \dots, N$  – индексы тел системы, а  $f(\omega, T)$  – универсальная функция в законе Кирхгофа, определение которой в явном виде имеет большое практическое и теоретическое значение. Действительно, если известна универсальная функция в законе Кирхгофа, то исследуя, например, испускательную способность тела, можно определить его поглощательную способность, что представляет интерес при изучении свойств удаленных объектов.

Тело, полностью поглощающее падающее на него излучение во всем диапазоне частот, и поглощательная способность которого равна единице, называется **абсолютно черным телом (а.ч.т.)**. Из закона Кирхгофа следует, что универсальная функция  $f(\omega, T)$  равна испускательной способности абсолютно черного тела:

$$f(\omega, T) = r_{\omega T}^{\text{а.ч.т.}}. \quad (1.6)$$

Как следует из равенства (1.6), исследование спектральной плотности излучения а.ч.т. представляет большой научный и практический интерес.

## 1.2. Законы излучения абсолютно черного тела.

Некоторые вещества, такие как сажа, могут иметь поглощательную способность близкую к единице, но в ограниченном интервале частот.

В качестве модели абсолютно черного тела можно рассматривать небольшое отверстие в замкнутой полости (рис.1.2).

Излучение всех частот, проникающее через отверстие внутрь полости, в результате многократных отражений полностью поглощается её стенками и остаётся в полости. Таким образом, поглощающая способность отверстия полости равна единице.

Излучение же, исходящее из отверстия, следует рассматривать как излучение а.ч.т. при температуре стенок полости.

Спектральный состав излучения а.ч.т. может быть исследован при помощи спектральных приборов. Экспериментальные зависимости спектральной плотности излучения а.ч.т. от частоты и от длины волны при разных температурах представлены на рис. 1.3 и на рис.1.4 соответственно. Графики представляют собой кривые с максимумом. Площади под кривыми рис.1.3, в соответствии с выражением (1.3), равны энергетической светимости а.ч.т. и, как следует из опыта, пропорциональны четвертой степени абсолютной температуры:

$$R_T = \int_0^{\infty} r_{\omega T}^{a.c.t.} d\omega = \int_0^{\infty} f(\omega, T) d\omega = \sigma T^4. \quad (1.7)$$

Закон установлен экспериментально и называется **законом Стефана – Больцмана**. Коэффициент пропорциональности  $\sigma$  – постоянная Стефана – Больцмана:

$$\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}^4}. \quad (1.8)$$

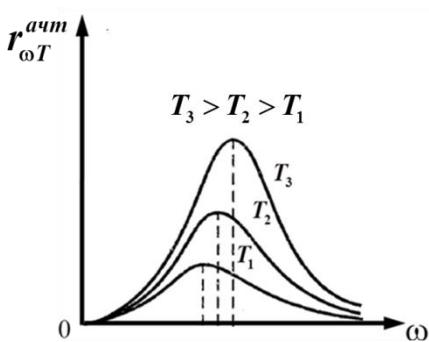


Рис. 1.3

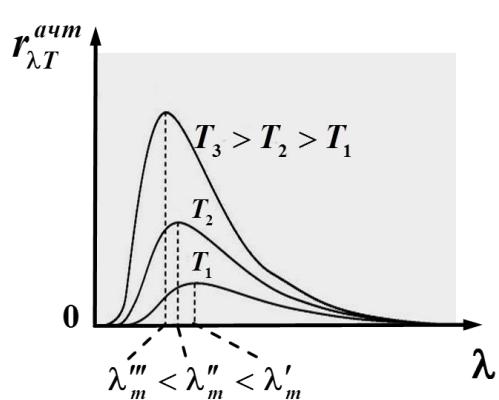


Рис. 1.4

Положение максимумов спектральной плотности излучения а.ч.т., как видно из рис. 1.3 и рис. 1.4, зависит от температуры. Увеличение температуры приводит к смещению максимума испускательной способности а.ч.т. в область больших частот (рис.1.4) и меньших длин волн (рис.1.5). Эта закономерность называется **законом «смещения» Вина**.

Длина волн, при которой наблюдается максимум испускательной способности а.ч.т., обратно пропорциональна абсолютной температуре тела:

$$\lambda_m = \frac{b}{T}, \quad (1.9)$$

где коэффициент пропорциональности  $b = 2,90 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$ .

### 1.3. Гипотеза и формула Планка.

Исходя из представлений классической физики о равнораспределении энергии по степеням свободы, физики Рэлей и Джинс, предприняли попытку теоретического объяснения закономерностей излучения абсолютно черного тела. В предположении, что на каждое электромагнитное колебание приходится в среднем одинаковая электрическая и магнитная компоненты энергии в электромагнитной волне [2], была получена формула для испускательной способности абсолютно черного тела:

$$f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT, \quad (1.10)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана;  $c$  – скорость света в вакууме.

Безупречная с теоретической точки зрения формула Рэлея – Джинса (1.10) приводила к парадоксальному результату, получившему в физике название «ультрафиолетовой катастрофы», и которая заключалась в том, что спектральная плотность излучения стремилась к бесконечности с увеличением частоты излучения. Это противоречило экспериментальным данным (рис.1.4) и, таким образом, подвергало сомнению существовавшее в то время фундаментальное представление о природе излучения, как совокупности электромагнитных волн. В конце XIX века это звучало сенсационно. Отсюда и название расхождения теории с экспериментом – «ультрафиолетовая катастрофа», ставшая одной из тем научно-художественной литературы по истории развития науки, и появления в физике понятия «кванта энергии».

Вот как писатель Данин Д. С. [3] описывает историю появления гипотезы Макса Планка: «Слово «квант» родилось на свет вместе с XX веком. В декабре 1900 года профессор Планк докладывал берлинским физикам о вынужденном введении понятия «квант». На протяжении шести лет он искал формулу, как распределена энергия в спектре электромагнитного излучения нагретого тела, пока он не увидел, что успех достигается при странном предположении: **свет испускается чередою отдельных порций, квантов энергии**». В этом суть гипотезы Планка, которую он сам называл «чисто формальной» и искал способ, как обойтись без неё.

Однако, последующие открытия в области физики только подтвердили справедливость гипотезы Планка.

В основе теории Планка лежит утверждение, что энергия одного кванта пропорциональна частоте излучения:

$$\varepsilon = h\nu = \hbar\omega, \quad (1.11)$$

где  $\omega = 2\pi\nu$  - циклическая частота, а  $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$  Дж·с и  $\hbar = h/2\pi = 1,055 \cdot 10^{-34}$  Дж·с - коэффициенты пропорциональности, получившие впоследствии название постоянной Планка [2].

Применяя статистический закон распределения колебаний по значениям энергии для системы, находящейся в состоянии равновесия, Планк определил вид универсальной функции (1.10), совпадающей с испускательной способностью абсолютно черного тела [2]:

$$f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (1.12)$$

Выражение (1.12) называется формулой Планка и находится в полном согласии с экспериментальными данными (рис. 1.3 и 1.4).

В диапазоне малых частот, когда  $\hbar\omega \ll kT$  и  $e^{\hbar\omega/kT} \approx 1 + \hbar\omega/kT$ ,

формула Планка переходит в формулу Рэлея-Джинса (1.10). Теория Рэлея-Джинса, как видно из рис. 1.5, совпадает с теорией Планка в диапазоне малых частот.

Подстановка (1.12) в выражение для энергетической светимости абсолютно черного тела (1.7) приводит к выражению:

$$R_T = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} T^4 = \sigma T^4. \quad (1.13)$$

Коэффициент пропорциональности  $\sigma$  можно вычислить и убедиться, что он совпадает с постоянной Стефана – Больцмана, определенной экспериментально (1.8):

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} = \frac{3,14^2 (1,38 \cdot 10^{-23})^4}{60 (3 \cdot 10^8)^2 (1,05 \cdot 10^{-34})^3} = 5,7 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}^4}. \quad (1.14)$$

Закон «смещения» Вина (1.9) также можно получить из формулы Планка, исследуя выражение (1.12) на экстремальное значение [2].

Гипотеза Планка об излучении света отдельными порциями энергии не только объяснила закономерности равновесного теплового излучения, но оказалась также плодотворной для понимания закономерностей фотоэлектрического эффекта.

#### 1.4. Закономерности фотоэлектрического эффекта.

Явление фотоэлектрического эффекта было открыто в 1887 году немецким физиком Генрихом Герцем случайно, когда он, исследуя электрические колебания в искровом разряде (вибратор Герца), обнаружил, что сопровождающее его ультрафиолетовое свечение, уменьшает заряд в приемнике, состоявшем из двух металлических электродов. При этом эффективным оказывался свет, падающий на отрицательно заряженный электрод.

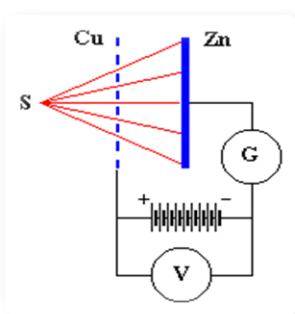


Рис. 1.6.

Более обстоятельными представляются исследования, выполненные профессором Московского Государственного Университета Столетовым А. Г. Установка, состояла из двух металлических дисков, установленных вертикально и параллельно друг другу [5]. Один из дисков был изготовлен из металлической сетки, а другой в виде сплошной пластины из цинка (рис.1.6). Оба диска соединялись с полюсами гальванической батареи через гальванометр. Сплошной диск с внутренней стороны освещался лучами вольтовой дуги, в спектре излучения которой есть ультрафиолетовая компонента. Эффект наблюдался лишь при освещении отрицательно заряженной пластины. Введение на пути светового потока стеклянной пластинки, поглощающей ультрафиолет, приводило к исчезновению тока в гальванометре. Столетов тщательно и подробно исследовал фотоэффект. Однако до открытия электронов он, естественно, не мог еще раскрыть подлинную сущность явления. Тем более поразительно, что в самом первом пункте своих выводов он пишет: «Лучи вольтовой дуги, падая на поверхность отрицательно заряженного тела, уносят с него заряд».

Как позже выяснилось, таким зарядом оказались электроны, открытые в 1897 году профессором Кембриджского Университета Джозефом Джон Томсоном. Дальнейшие исследования доказали, что фототок есть поток электронов, испускаемых отрицательно заряженным металлом при его облучении светом.

На рис.1.7 приведена схема установки для исследования вакуумного

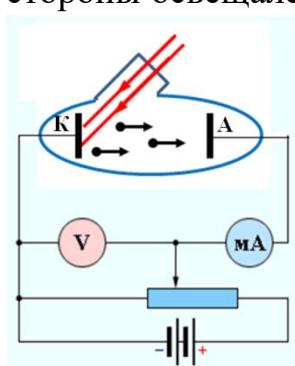


Рис. 1.7.

вольтовой дуги, падая на поверхность отрицательно заряженного тела, уносят с него заряд».

фотоэлемента, состоящего из освещаемого монохроматическим светом фотокатода  $K$  и анода  $A$ , на который подается положительный потенциал от источника постоянного тока. Разность потенциалов  $U$  между анодом и катодом изменяется при помощи реостата. Измеряя ток  $I$  в цепи в зависимости от подаваемого на анод напряжения, получим вольтамперную характеристику фотоэлемента, вид которой для двух значений светового потока  $\Phi_1$  и  $\Phi_2$ , освещдающего катод, представлен на рис.1.8.

К общим закономерностям фотоэлектрического эффекта, вытекающим из опыта, следует отнести:

- нелинейное увеличение силы тока  $I$  с ростом напряжения  $U$  до достижения им предельного значения  $I_h$ , которое называется током насыщения;
- величина тока насыщения оказывается пропорциональной световому потоку (Закон Столетова);
- неравенство нулю тока при отсутствии разности потенциалов между катодом и анодом;
- наличие задерживающей разности потенциалов  $U_3$ , когда на анод надо подать отрицательный потенциал, чтобы фототок стал равным нулю;
- при частотах света меньше определенной частоты («красная граница фотоэффекта») фотоэффект не наблюдается.

Закономерности фотоэффекта не могут быть объяснены с точки зрения классической физики.

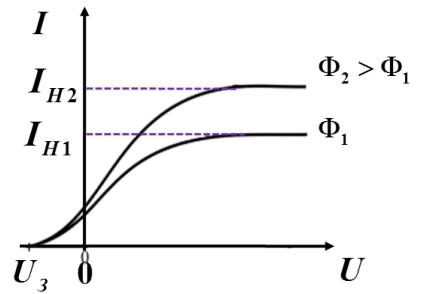


Рис. 1.8.

## 1.5. Гипотеза и формула Эйнштейна

Объяснение фотоэффекта принадлежит Альберту Эйнштейну (1905 г.), который взяв за основу гипотезу Планка, развел её, предположив, что **свет не только излучается, но распространяется и поглощается отдельными порциями, квантами энергии**. То есть, согласно гипотезе Эйнштейна, свет представляет собой поток особых световых частиц. Переносчик «кванта» энергии света был назван «фотоном». Энергия фотона пропорциональна частоте соответствующей световой волны:

$$\varepsilon = h\nu = \hbar\omega = hc/\lambda. \quad (1.15)$$

Если фотон, поглощенный электроном, сообщает ему энергию, достаточную для его перехода из металла в вакуум, то электрон преодолевает потенциальный барьер, высота которого равна работе выхода электрона из металла. Остаток энергии составляет кинетическую энергию свободного электрона. Таким образом, энергия фотона должна быть, по

крайней мере, больше либо равна работе выхода электрона из металла, чтобы фотоэффект имел место. В общем случае:

$$h\nu = A_{\text{вых}} + \frac{mv_{\text{max}}^2}{2}. \quad (1.16)$$

Выражение (1.16) называется **формулой Эйнштейна**. Оно относится к электрону, находящемуся непосредственно на поверхности металла, и поэтому получившему максимальную кинетическую энергию.

Попадая в ускоряющее поле, когда на аноде «плюс», электрон достигает анода. Рост потенциала анода сопровождается увеличением фототока (рис.1.8) до предельного значения, тока насыщения, когда все электроны, вылетевшие из катода при данном световом потоке, достигнут анода. Для изменения величины тока насыщения необходимо изменить интенсивность монохроматического света, так как число фотоэлектронов, очевидно, должно быть пропорционально числу фотонов, падающих на катод. Таково объяснение закона Столетова.

При потенциале на аноде равном нулю фототок отличен от нуля благодаря электронам, долетевшим до анода за счет их кинетической энергии.

Для прекращения фототока необходимо подать на анод «минус» и создать, таким образом, задерживающую разность потенциалов. При этом даже электроны, имеющие максимальную скорость, не долетят до анода, и фототок станет равным нулю. Следовательно,

$$\frac{mv_{\text{max}}^2}{2} = e|U_3|, \quad (1.17)$$

где  $e$  – элементарный заряд, равный заряду электрона по абсолютной величине. Подстановка (1.17) в формулу Эйнштейна (1.16) приводит к прямо пропорциональной зависимости задерживающей разности потенциалов от частоты света:

$$e|U_3| = h\nu - A_{\text{вых}}. \quad (1.18)$$

Отсюда следует:

$$|U_3| = \frac{h}{e}\nu - \frac{A_{\text{вых}}}{e}. \quad (1.19)$$

Коэффициент пропорциональности  $h/e$  – постоянная величина, независящая от материала катода. Правая и левая части формулы (1.18) положительны. Следовательно, фотоэффект наблюдается при частотах больших некоторой минимальной частоты, которая получила название «красной» границы фотоэффекта  $\nu_0$ :

$$\nu \geq \nu_0 = \frac{A_{\text{вых}}}{h}. \quad (1.20)$$

## 1.6. Коротковолновая граница тормозного рентгеновского излучения

Как известно, ускоренное движение заряженных частиц сопровожда-

ется излучением электромагнитной энергии [6]. В частности, при соударении быстрых электронов с телом, состоящим из тяжелых металлов, возникает тормозное рентгеновское излучение [2]. Это явление можно наблюдать в рентгеновской трубке, основные элементы которой показаны на рис. 1.9: катод 1, фокусирующая система 2 (вакуумная трубка с встроенным фокусирующими электродами), анод 3 (антикатод). Катод служит источником электронов, испускаемых при термоэлектронной эмиссии вследствие его нагрева. Фокусирующая система предназначена для формирования пучка электронов 4, ускоряющихся в электрическом поле высокого напряжения  $U$  между катодом и анодом.

При столкновении электронов с анодом происходит их резкое торможение, они испытывают большое отрицательное ускорение  $a$ , вследствие этого и появляется тормозное рентгеновское излучение 5, мощность которого  $P \propto a^2$  [2].

Согласно классической теории излучения волн спектр излучаемых частот должен при этом простираться от нуля до бесконечности.

Эксперименты, однако, показывают, что тормозное рентгеновское излучение

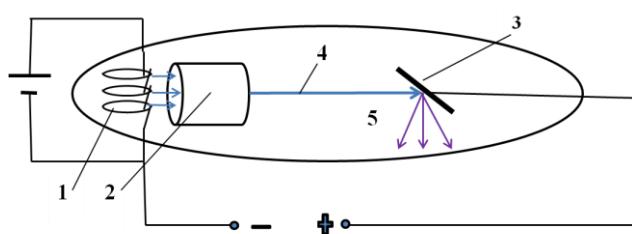


Рис. 1.9.

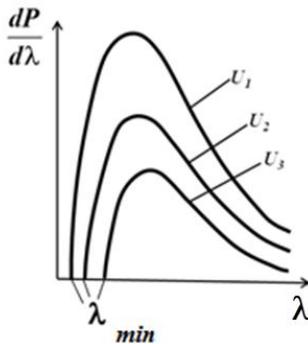


Рис. 1.10.

ние на малых длинах волн резко обрывается: наблюдается коротковолновая граница рентгеновского излучения. На рис. 1.10 приведены графики зависимости мощности рентгеновского излучения в единичном диапазоне длин волн  $dP/d\lambda$  при различных ускоряющих напряжениях  $U_1 > U_2 > U_3$ .

Наличие коротковолновой границы легко объясняется в рамках квантовой оптики. Действительно, в рентгеновской трубке электроны получают перед столкновением с анодом энергию, равную  $eU$ , где  $e$  - модуль заряда электрона. При столкновении с анодом тех электронов, которые всю свою энергию тратят на излучение, образуются фотоны с энергией

$$h\omega = \frac{hc}{\lambda} = eU. \quad (1.21)$$

Отсюда находим коротковолновую границу тормозного рентгеновского излучения

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{eU}. \quad (1.22)$$

Рассчитанное по формуле (1.22) значение коротковолновой границы хорошо согласуется с экспериментальными значениями. Остальные электроны только часть энергии тратят на излучение, оставшаяся у них энергия идет на нагрев анода, поэтому длина волны фотонов, образующихся при торможении этих электронов,  $\lambda > \lambda_{min}$ .

В отличие от фотоэффекта, где энергия падающих на фотокатод фотонов передается электронам, при тормозном рентгеновском излучении происходит обратный эффект – энергия быстрых электронов передается фотонам.

### 1.7. Опыт Боте

Установка в опыте Боте (рис. 1.11) состояла из первичного источника рентгеновского излучения  $S$ , который облучал металлическую фольгу  $\Phi$ , в результате чего она сама становилась источником рентгеновского излучения, которое регистрировалось счетчиками  $C1$  и  $C2$ . При попадании отдельных фотонов в счетчики электрический сигнал от них передавался на самописцы  $M1$  и  $M2$  с регистрацией электрических импульсов на общей движущейся ленте самописцев.

Если бы вторичное излучение от фольги распространялось в виде волны, то счетчики срабатывали бы одновременно, и метки на ленте  $L$  были бы расположены симметрично с левой и с правой стороны. Однако, оказалось, что расположение меток с одной и другой стороны ленты носило случайный характер.

Таким образом, опыт Боте послужил непосредственным доказательством того, что электромагнитное излучение не только испускается и поглощается, но и распространяется отдельными порциями энергии.

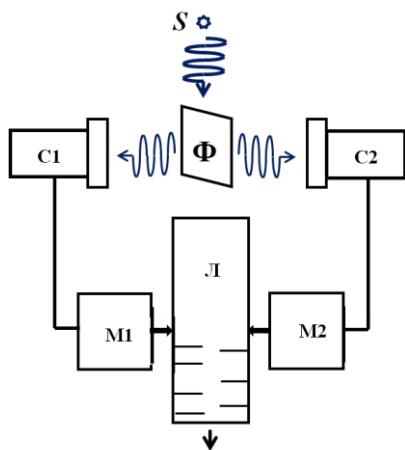


Рис. 1.11.

### 1.8. Импульс фотона. Давление света.

В первой половине XX столетия в физике по предложению Эйнштейна была введена концепция фотонов или "световых квантов". Такой объект как фотон во многих отношениях уникален и заслуживает отдельного рассмотрения.

Фотон нельзя разделить на части. Частичное поглощение или частичное отражение фотона не наблюдается.

Как известно из релятивистской механики, формулы для релятивистской энергии и импульса в выбранной системе отсчета имеют вид [2]:

$$\varepsilon = mc^2 / \sqrt{1 - v^2/c^2}, \quad (1.23)$$

$$p = mv / \sqrt{1 - v^2/c^2}. \quad (1.24)$$

где  $m$  – масса частицы в системе отсчета, где ее скорость равна нулю. Являясь переносчиком световой энергии, фотон движется в вакууме со скоростью света  $v = c = 3 \cdot 10^8$  м/с. Так как согласно формуле (1.15) энергия фотона конечна, а знаменатель в (1.23) при  $v = c$  обращается в ноль, то фотону следует приписать массу покоя  $m = 0$ . Если из формулы для энергии (1.23) выразить скорость в виде  $v = c \sqrt{\varepsilon^2 - m^2 c^4} / \varepsilon$ , то видно, что при  $m = 0$ , скорость частицы будет неизбежно равна скорости света в любой системе отсчета:  $v = c$ . Это следует понимать так, что не существует такой системы отсчета, в которой фотон покоился бы. В любой системе отсчета он движется со скоростью света в вакууме.

Тот факт, что скорость света при переходе из вакуума в другую среду становится меньше, объясняется тем, что фотоны поглощаются атомами среды, причем полностью, а затем вновь излучаются атомами. На эти процессы уходит время и скорость света в среде становится меньше скорости света в вакууме.

Если формулу для релятивистского импульса (1.24) выразить через энергию (1.23)

$$p = \varepsilon v / c^2, \quad (1.25)$$

то при скорости равной скорости фотона  $v = c$ , получим выражение для импульса фотона:

$$p = \varepsilon / c. \quad (1.26)$$

Учитывая, что энергия кванта, согласно гипотезе Планка (1.11), равна  $\varepsilon = h\nu$ , получим, что импульс фотона равен:

$$p = h\nu/c = h/\lambda. \quad (1.27)$$

При нормальном падении фотонов на некоторую площадку давление света  $P$  – величина, равная силе  $F_{\perp}$ , действующей перпендикулярно поверхности, к её площади  $S$ . Сила связана с суммарным изменением импульса  $\Delta p$ , передаваемым фотонами, падающими на поверхность площадки за время  $\Delta t$  [7]:

$$P = \frac{F_{\perp}}{S} = \frac{\Delta p}{S \cdot \Delta t}. \quad (1.28)$$

По закону изменения импульса поглощенный фотон передаст площадке импульс, равный  $h\nu/c$ . Зеркально отраженный фотон передаст площадке импульс, равный  $2h\nu/c$ .

Таким образом, при нормальном падении  $N$  фотонов за время  $\Delta t$  площадка получит импульс, равный сумме:

$$\Delta p = N(1-\rho) \frac{h\nu}{c} + 2N\rho \frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu}{c} N(1+\rho), \quad (1.29)$$

где  $\rho$  - коэффициент отражения (доля отраженных фотонов);  $(1-\rho)$  - доля поглощенных фотонов. Подставляя (1.29) в (1.28), получим для давления света:

$$P = \frac{h\nu N}{S \cdot \Delta t \cdot c} (1+\rho) = \frac{W}{S \cdot \Delta t \cdot c} (1+\rho) = \frac{I}{c} (1+\rho). \quad (1.30)$$

В выражении (1.30) учтено, что произведение  $h\nu \cdot N = W$  представляет собой энергию фотонов, падающих на площадку площадью  $S$  за время  $\Delta t$ . Отношение  $W/(S \cdot \Delta t) = I$  представляет собой плотность потока энергии, или интенсивность падающего на площадку света.

Явление давления света было блестяще подтверждено экспериментально в известных опытах Лебедева [8].

В природе давление света можно видеть при наблюдении комет. Существование «хвостов» комет, направленных всегда в радиальном направлении от Солнца, объясняется взаимодействием вещества поверхности комет с «солнечным ветром».

## 2. АТОМНАЯ ФИЗИКА

### 2.1. Закономерности в спектрах излучения атомов.

Логично предположить, что природа света должна быть связана с механизмом его излучения атомами, из которых состоит источник света.

На рис. 2.1 изображена схема спектроскопа, состоящего из источника излучения (на рис. 2.1 изображена газоразрядная лампа), системы щелей, формирующих световой поток, падающий на призму, при помощи которой происходит спектральное разложение света. На экране можно наблюдать окрашенные изображения щели в виде совокупности линий. Поэтому спектры излучения атомов, состоящие из отдельных линий, называются линейчатыми.

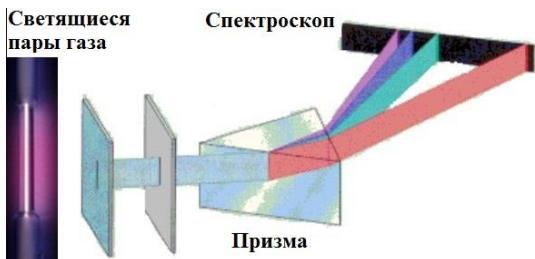


Рис.2.1. Наблюдение линейчатого спектра



Рис.2.2. Линейчатые спектры испускания атомов натрия, водорода и паров германия

Линейчатые спектры характерны для атомов вещества в газообразном атомарном состоянии при низком давлении, когда взаимодействием атомов друг с другом можно пренебречь. Так получают спектры изолированных атомов. Для атомов каждого вещества характерен свой спектр испускания (рис.2.2).

В 1885 г. Бальмер обнаружил, что частоты испускания в видимой части спектра атома водорода пропорциональны разности обратных квадратов целых чисел:

$$\omega \sim \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (2.1)$$

где  $m$  и  $n$  – целые числа. Для видимой части спектра  $m = 2$ , а  $n > 2$ . Формула (2.1) представляет совокупность частот, получивших название серии Бальмера.

Последующие исследования привели к открытию других частот излучения, лежащих в невидимой части, но которые могут быть представлены также в виде разности обратных квадратов целых чисел:

$$\omega = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > m. \quad (2.2)$$

Формула (2.2) получила название обобщенной формулы Бальмера. Значения целых чисел  $m$  относятся к совокупности частот, которым соответствуют линии одной серии, названной по имени её первооткрывателя:  $m = 1$  – серия Лаймана,  $m = 2$  – серия Бальмера,  $m = 3$  – серия Пашена,  $m = 4$  – серия Брэкета,  $m = 5$  – серия Пфунда. Коэффициент пропорциональности, обозначенный  $R$  в обобщенной формуле Бальмера (2.2), определен опытным путем и называется постоянной Ридберга:

$$R = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ рад/с.} \quad (2.3)$$

Целое число  $n$  принимает значения:  $n = m+1, m+2, m+3, \dots$

Объяснение закономерностей в атомных спектрах, лежащее вне представлений классической физики, должно быть объективным критерием правильности модели строения атома, основного предмета исследования атомной физики.

## 2.2. Опыты Резерфорда. Планетарная модель атома.

Ко времени фундаментальных исследований Резерфорда в 1911 году было известно, что атом в целом нейтрален: в его состав входят отрицательно заряженные электроны, а, следовательно, существует и равный по величине положительный заряд. Целью опытов Резерфорда было изучение распределения положительного и отрицательного зарядов в атоме методом исследования рассеяния альфа частиц атомами металлической фольги.

На рис. 2.3 представлена схема опыта Резерфорда. Узкий пучок  $\alpha$ -частиц, представляющих собой дважды ионизованные атомы гелия, несущихся с огромной скоростью порядка  $2 \cdot 10^7$  м/с, направлялся на мишень  $\Phi$  из тонкой золотой фольги. Рассеянные  $\alpha$ -частицы вызывали на экране  $\mathcal{E}$ , окружавшем мишень и покрытом сернистым цинком, сцинтиляции, вспышки света, наблюдавшиеся в микроскоп  $M$ . Весь прибор помещался в вакуумную оболочку.

Масса  $\alpha$ -частицы равна  $6,64 \cdot 10^{-27}$  кг, в 7300 раз больше массы электрона и нельзя было ожидать сколь-нибудь заметного влияния электронов на рассеяние  $\alpha$ -частиц.

В результате опыта оказалось, что большая часть частиц не испытывала рассеяния. Незначительное число  $\alpha$ -частиц рассеивалось на малые углы ( $1\text{--}3^\circ$ ). Однако некоторое количество  $\alpha$ -частиц отклонялось на очень большие углы (до  $180^\circ$ ).

Анализируя результаты опыта, Резерфорд пришел к выводу, что столь значительное отклонение  $\alpha$ -частиц вызывается чрезвычайно сильным электрическим полем, которое создается зарядом частицы с большой массой и сосредоточенным в очень малом объеме (рис.2.4). Остальное внутриатомное пространство практически ничем не заполнено.

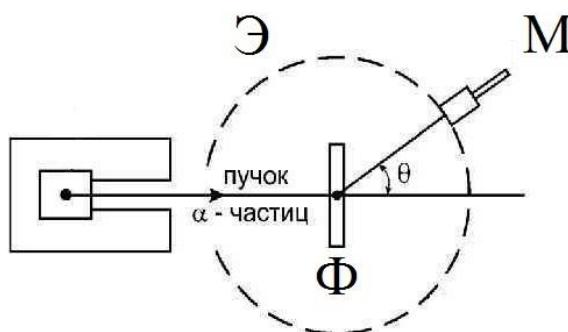


Рис. 2.3. Схема опыта Резерфорда

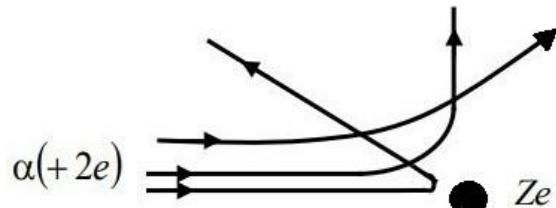


Рис. 2.4. Рассеяние  $\alpha$ -частиц на тяжелом ядре

Резерфорд разработал количественную теорию рассеяния  $\alpha$ -частиц и получил формулу для дифференциального поперечного сечения рассеяния

$d\sigma$  (отношение числа частиц, рассеянных атомом в единицу времени в телесный угол, к плотности потока падающих частиц) [2]:

$$d\sigma = \frac{1}{4} \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 m v^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4(\theta/2)}, \quad (2.4)$$

где  $d\Omega = 2\pi \sin(\theta) d\theta$  – телесный угол;  $m$  и  $v$  – масса и скорость  $\alpha$ -частицы с зарядом  $+eZ_1$ , налетающей на частицы мишени с зарядом  $+eZ_2$ .

Из анализа результатов опытов Резерфорда было сделано предположение о структуре строения атома: в центре каждого атома расположено тяжелое (99,98 % массы всего атома) положительно заряженное ядро малых размеров ( $R_a \sim 10^{-13} \div 10^{-12}$  см), а вокруг ядра на больших расстояниях ( $10^{-8}$  см) расположены электроны. Это был главный и фундаментальный результат опыта и теории Резерфорда. По сути атом – «пуст». Положительный заряд атома сосредоточен в его ядре, линейные размеры которого составляют лишь 1/10000 от линейных размеров всего атома ( $5 \cdot 10^{-9}$  см).

Опыты Резерфорда подтвердили существовавшую теоретическую модель строения атома – ядерную или планетарную модель, согласно которой в центре атома находится тяжелое положительно заряженное ядро, вокруг которого движутся по замкнутым круговым траекториям, подобно планетам вокруг Солнца, отрицательно заряженные электроны. Модель атома как планетарной системы приходила в головы многим физикам [8] и была сформулирована в 1901 г. Жаном Батистом Перреном на лекции в парижском университете Сорбонны. Он предположил что под действием электромагнитных сил возможно образование динамически устойчивой системы, периоды движения по круговым орбитам в которой соответствуют частотам спектра атома.

Однако, планетарная модель атома была подвергнута принципиальной критике, связанной с её недостатками.

1. «Неустойчивость» модели атома: из классической электродинамики известно, что любая заряженная частица, движущаяся с ускорением, должна неизбежно излучать электромагнитные волны, терять свою энергию и упасть на ядро. Тем не менее, ничего подобного не происходит – атомы устойчивы;

2. Нет объяснения дискретности спектров испускания. С классической точки зрения электрон может находиться на всевозможных орбитах, обладая непрерывным спектром энергий.

### 2.3. Постулаты Бора. Модель атома водорода.

Неустойчивость планетарной модели Резерфорда и противоречия с представлениями классической физики привела Нильса Бора к

видоизменению модели так, чтобы она согласовывалась с опытом. Для этого Н. Бор сформулировал постулаты:

**1-ый постулат.** Атом может находиться в определенных **стационарных состояниях**, которым соответствуют определенные значения энергии. При этом атом не излучает.

**2-ой постулат.** Переход атома из одного стационарного состояния в другое сопровождается поглощением или излучением кванта энергии, равной разности энергий электрона в атоме:

$$h\nu = E_n - E_m. \quad (2.5)$$

**3-ий постулат.** Стационарным состояниям с определенной энергией соответствуют только те орбиты, для которых момент импульса электрона  $M = rm\nu$  имеет значения, кратные постоянной Планка:

$$M = r \cdot m \cdot \nu = n \cdot \hbar = n \frac{\hbar}{2\pi}, \quad (2.6)$$

где  $n$  – целое число, равное 1,2,3....

Рассмотрим систему, состоящую только из одного электрона с массой  $m$ , с элементарным зарядом  $-e$ , движущимся по круговой орбите радиуса  $r$  с постоянной скоростью  $\nu$  в электрическом поле ядра с зарядом  $+Ze$  (атомное число  $Z = 1$  для атома водорода,  $Z > 1$  для водородоподобного иона). Сила Кулона – центростремительная сила и по второму закону Ньютона [7]:

$$ma = \frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}. \quad (2.7)$$

Выражения (2.6) и (2.7) составляют систему 2-х уравнений для определения радиуса круговой орбиты и скорости электрона на ней:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \frac{n^2}{Z}, \quad (2.8)$$

$$\nu_n = \frac{\hbar}{m} \frac{n}{r_n} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \frac{Z}{n}, \quad (2.9)$$

где  $n = 1,2,3....$

Полная энергия электрона в атоме  $E$  равна сумме кинетической энергии  $E_{\text{кин}}$  и потенциальной энергии  $E_{\text{пот}}$ :

$$E = E_{\text{кин}} + E_{\text{пот}} = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (2.10)$$

Потенциальная энергия берется со знаком минус как энергия притяжения разноименных зарядов [9].  $E_{\text{пот}} = 0$ , когда заряды находятся на бесконечном расстоянии друг от друга и не взаимодействуют.

Подставив выражения (2.8) и (2.9) в (2.10), получим для полной энергии электрона в атоме:

$$E = E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2}. \quad (2.11)$$

Таким образом, как следует из постулатов Бора и из формул (2.8), (2.9) и (2.11), скорости, радиусы орбит и энергия электрона принимают дискретные значения.

На рис. 2.5 представлена числовая ось значений энергии в электрон-вольтах (эВ), которые может принимать электрон в атоме. 1эВ – внесистемная единица, равная энергии, приобретаемой электроном при прохождении им разности потенциалов в 1 В (1 эВ =  $1,6 \cdot 10^{-19}$  Дж). От возможных значений энергии на рис. 2.5 проведены горизонтальные линии, получившие название **энергетических уровней** стационарных состояний электрона в атоме водорода.

Как следует из 2-го постулата Бора, при переходе атома из стационарного состояния с большей энергией  $E_n$  в стационарное состояние с меньшей энергией  $E_m$  происходит излучение кванта света с энергией  $h\nu$ :

$$h\nu = \hbar\omega = E_n - E_m. \quad (2.12)$$

На рис. 2.5 переходы, описываемые формулой (2.12), обозначены вертикальными стрелками и образуют совокупность серии переходов на энергетический уровень с определенным значением  $m$ . Эти переходы описываются обобщенной формулой Бальмера (2.2), которую легко получить подстановкой формулы (2.11) в (2.12):

$$\omega = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{\pi me^4 Z^2}{4\epsilon_0^2 h^3} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (2.13)$$

Расчет множителя перед скобкой дает число, равное, с хорошей степенью точности, постоянной Ридберга, определенной экспериментально (см. параграф 2.1).

$$R = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^3} = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ рад/с}. \quad (2.14)$$

В состоянии, когда электрон находится на 1-ой орбите  $n = 1$ , энергия атома – наименьшая и соответствует нормальному или **основному состоянию** атома. Состояния с  $n \geq 2$  называются **возбужденными**. Если электрону сообщается энергия  $\Delta E > 13.6$  эВ, то происходит ионизация атома. Энергия  $E > 0$  соответствует свободному электрону на большом расстоянии от ядра. Так выглядит первая квантовая теория атома водорода и водородоподобного иона, предложенная Н. Бором в 1913 г. на основе планетарной модели атома Резерфорда.

Однако, не смотря на хорошее согласие с экспериментом, у теории есть недостатки принципиального характера, связанные с её ограниченностью. Во-первых, не удалось построить теорию даже простейшего после водорода атома гелия. Во-вторых, теория оказалась не последовательной, используя одновременно как представления классической механики, так и понятия квантовой оптики.

Тот факт, что модель приводит к хорошим результатам в случае атома водорода, по существу случайный. Теория Бора явилась очень важным переходным этапом от классической механики к последовательной теории – квантовой механике.

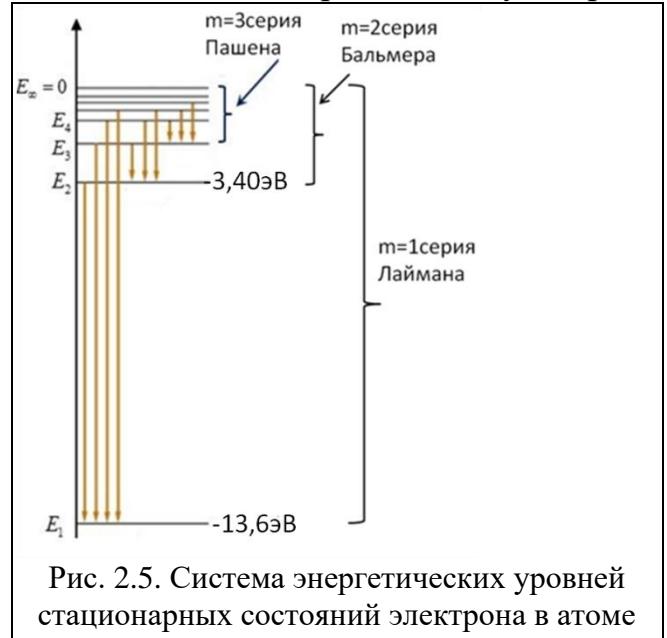


Рис. 2.5. Система энергетических уровней стационарных состояний электрона в атоме водорода

## 2.4. Опыт Франка-Герца.

Существование стационарных состояний электрона в атоме, лежащих в основе постулатов Бора, было экспериментально доказано в опытах Франка и Герца в 1913 г.

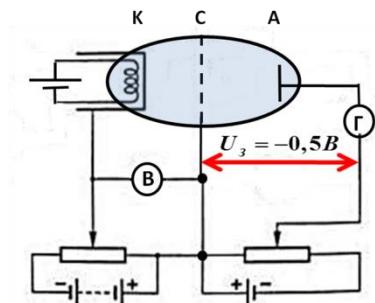


Рис. 2.6. Схема установки опыта Франка-Герца

величине задерживающая разность потенциалов (порядка 0,5 В).

Если бы в трубке был вакуум, то вольтамперная характеристика имела бы вид «закона трех вторых»  $I \sim U^{3/2}$  (рис. 2.7), наблюдающийся при наличии объёмного пространственного заряда.

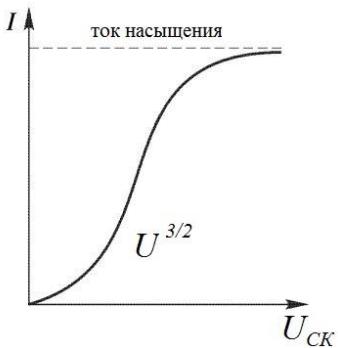


Рис. 2.7.  
ВАХ вакуумного диода

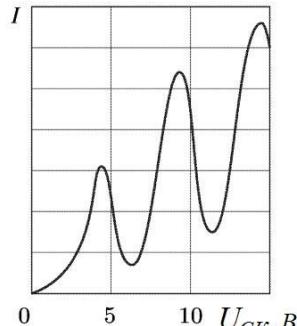


Рис. 2.8.  
ВАХ в опыте Франка  
и Герца

При наличии ртутных паров на вольтамперной характеристике (рис.2.8) проявлялось чередование минимумов и максимумов тока. При этом расстояние между максимумами было кратно 4,9 В. Объяснение такой зависимости следующее: начальный рост кривой объясняется тем, что

электроны испытывают только упругие столкновения с атомами ртути, т.е. им не хватает кинетической энергии на возбуждение атомов ртути. При энергии электронов  $E = 4.9$  эВ появляется вероятность неупругого соударения и переводом атома ртути в возбужденное состояние. Начинаются неупругие взаимодействия. Такие электроны не в состоянии преодолеть задерживающий потенциал 0,5 В и не достигают анода, ток падает. Второй максимум на вольтамперной характеристике связан с началом 2-х возможных неупругих столкновений, когда некоторые электроны успевают вторично набирать энергию в 4.9 эВ достаточную для возбуждения атома ртути.

Таким образом, опыт Франка и Герца показали, что атомы имеют дискретную энергетическую структуру, то есть не могут принять любую энергию, а только ту, которая соответствует определенным энергетическим состояниям.

### 3. КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ

#### 3.1. Корпускулярно-волновой дуализм света.

В разделе «квантовая оптика» (тепловое излучение, фотоэффект, опыт Боте, коротковолновая граница рентгеновского излучения и т.п.) было убедительно показано, что в отдельных случаях свет ведет себя как поток частиц (корпускул). В разделе «волновая оптика» [1] с той же степенью убедительности, доказывалось, что свет имеет волновую природу (интерференция, дифракция, поляризация). Корпускулярные свойства фотонов наиболее отчетливо выражены в области коротких волн, а волновые – в области длинных волн. Некоторые аспекты поведения света, например, световое давление, связь между излучательной способностью и объемной плотностью излучения, закон Стефана - Больцмана и т.д., могут

быть одинаково хорошо получены в совершенно идентичной форме как с использованием предположения, что свет – это волна, так и в предположении, что это поток частиц. Сами свойства частиц – квантов (или фотонов, как называют кванты света), являются, по меньшей мере, странными. Так, энергия кванта равна  $\hbar\omega$ , то есть для измерения этой, по идеи чисто корпускулярной величины, надо сначала произвести дифракционные или интерференционные опыты, чтобы узнать чисто волновую характеристику – частоту  $\omega$ . Именно поэтому фотон называют не частицей, а «квазичастицей».

Обобщение этих фактов привело к концепции корпускулярно-волнового дуализма, т.е. к вынужденному признанию наличия у фотона как корпускулярных, так и волновых свойств одновременно.

Первое время после принятия этой концепции (в начале 20-го века)казалось, что с человеческой (то есть с нашей) точки зрения примирить волновые и корпускулярные представления невозможно, в том смысле, что в окружающем нас макромире нельзя представить себе объект, одновременно обладающий и теми и другими свойствами. В самом деле, частица (корпускула) где-то находится (т.е. имеет в пространстве определенные координаты  $x, y, z$ ), а волна (например, на море) рассредоточена по некоторой области пространства, имеющей протяженность  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ . Строго говоря, гармоническая волна  $\xi = A \cos(\omega t - kx)$  вообще локализована в бесконечной области пространства, поскольку последняя формула не предполагает каких-либо ограничений.

### 3.2. Гипотеза де Бройля. Опыты по дифракции электронов.

Анализируя результаты исследований природы света, а также необходимость необычных предположений для объяснения спектров испускания атомов, французский физик Луи де Бройль в 1924 году сделал удивительное предположение, что **корпускулярно-волновой дуализм универсален**. То есть любая частица (заряженная, незаряженная, массивная, безмассовая) при определенных условиях будет проявлять, подобно свету, волновые свойства, а любая волна – свойства частицы.

Аналогично формуле для импульса (1.27)  $p = h\nu/c = h/\lambda$ , в которой отражаются волновые и корпускулярные свойства фотона, де Бройль предложил сопоставлять частицам длину волны, определяемую формулой:

$$\lambda_B = h/p, \quad (3.1)$$

и получившей название **длины волны де Бройля**.

Для проверки гипотезы де Бройля американские физики Дэвиссон и Джермер поставили серию опытов с пучком электронов, подобных опытам

по дифракции света [2]. Источником служила электронная пушка, в которой электроны ускорялись в электрическом поле под действием напряжения  $U$ , приобретая кинетическую энергию:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = eU. \quad (3.2)$$

С учётом (3.1) получаем, что длина волны де Бройля для электрона связана с величиной ускоряющего напряжения в опыте Дэвиссона и Джермера соотношением:

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2emU}}, \quad (3.3)$$

где  $m$  – масса электрона,  $e$  – элементарный заряд. Подставляя численные значения констант в (3.3), получаем для электрона:

$$\lambda_B = \frac{1,23}{\sqrt{U}} \cdot 10^{-9} \text{ м}. \quad (3.4)$$

При  $U = 1000 \text{ В}$   $\lambda_B \approx 3,9 \cdot 10^{-11} \text{ м}$ , т.е. имеет тот же порядок, что и

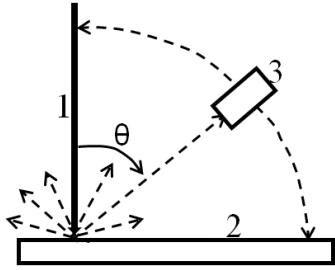


Рис. 3.1

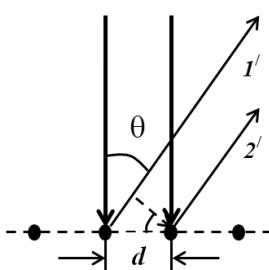


Рис. 3.2

длина волны рентгеновских лучей. Следовательно, волновые свойства электронов, как и рентгеновских лучей должны проявляться при дифракции на кристаллической решётке твердых тел, так как постоянная решётки имеет размеры порядка длины волны

де Бройля для электрона.

Схема опыта представлена на рис.3.1. Пучок электронов 1, ускоренных напряжением 54 В, падал нормально на поверхность кристалла никеля 2. Рассеянные атомами кристалла электроны попадали в детектор 3, регистрировавший интенсивность рассеянного пучка. Положение детектора по отношению к падающему пучку определялось углом  $\theta$ . Роль отражательной решётки играл первый слой атомов поверхности кристалла (точки на рис. 3.2). Детектор регистрировал электроны, рассеянные атомами под одинаковым углом  $\theta$ , которые можно рассматривать как аналог отраженных лучей в дифракционной решётке. Как видно из рис. 3.2, разность хода между лучами 1' и 2' равна  $\Delta = d \sin \theta$ , где  $d$  - период кристаллической решётки. Детектор регистрировал максимум интенсивности при выполнении условия  $d \sin \theta = \lambda_B$ , где  $\lambda_B$  - длина волны де Бройля электронов. При падении светового пучка на отражательную решётку с периодом  $d$  это условие, но для световой волны, тоже соответствует первому максимуму отраженного света.

Таким образом, опыты Дэвиссона и Джермера доказали справедливость гипотезы Де Бройля о волновых свойствах микрочастиц, что нашло подтверждение в других опытах.

Если рентгеновские лучи проходят сквозь тонкую фольгу, то на фотопластинке, расположенной за фольгой образуются дифракционные кольца. Томсон и Тартаковский провели аналогичные опыты, пропуская электронный пучок через фольгу. На фотопластинке за фольгой были получены аналогичные дифракционные кольца (рис.3.3). Причем положение дифракционных максимумов, рассчитанное по формулам волновой оптики, где в качестве длины волны бралась длина волны де Бройля, соответствовало эксперименту.

Проявляют ли волновые свойства кроме электронов другие частицы? Были проделаны опыты по дифракции пучков нейтронов, атомов и молекул. Они подтвердили наличие волновых свойств и у этих частиц и применимость к ним формулы де Бройля (3.1).

До сих пор говорилось о волновых свойствах пучков частиц. Возникает вопрос: имеют ли отношение волновые свойства к отдельной частице? Решению этой задачи были посвящены опыты Фабриканта, Бибермана и Сушкина с пучками электронов слабой интенсивности. Настолько слабой, что можно было считать, что через кристалл они проходят поодиночке. При этом на фотопластинке, расположенной за кристаллом, получались метки от отдельных электронов. В начале опыта эти метки казались разбросанными хаотично по пластинке (рис. 3.4). С течением времени, однако, оказывалось, что они группируются в виде колец. В конечном счете получалась та же дифракционная картина, что и для пучка электронов (рис. 3.3).

Результат этих опытов свидетельствует о волновых свойствах, присущих отдельным микрочастицам. При этом распределение интенсивности в дифракционной картине, образующейся в опытах с пучками частиц, при прохождении отдельной частицы через кристаллическую структуру, представляет собой распределение вероятности попадания частицы в то или иное место пространства. Следует отметить очень важное замечание: речь идет не об электромагнитной волне, а о волне вероятности локализации частицы в той или иной точке пространства. Движение любой частицы сопровождает волна вероятности. Смысл волны вероятности: частица попадает в те точки пространства, где вероятность ее появления больше.

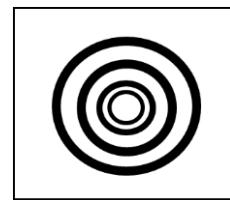


Рис. 3.3

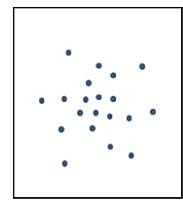


Рис. 3.4

### 3.3. Особенности поведения частиц микромира

Для объектов микромира (электроны, протоны, нейтроны, атомы, молекулы) исторически сложилось название «частица». Однако, как отмечалось в предыдущем параграфе при определенных условиях они проявляют свойства, присущие волнам, что кардинально отличает их от обычных частиц макромира.

Рассмотрим мысленный опыт (рис. 3.5), в котором эти необычные свойства микрочастиц выражены особенно отчетливо [10]. Поток

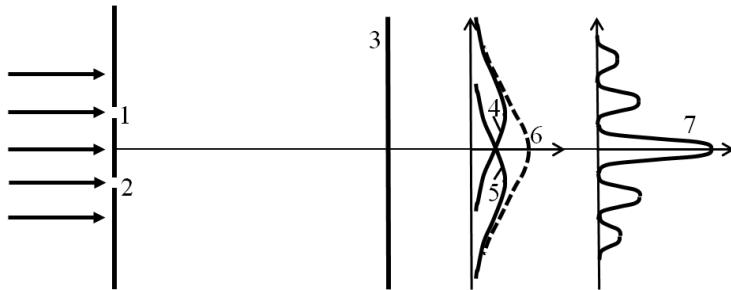


Рис. 3.5

микрочастиц, например, электронов, имеющих одинаковый импульс, падая на экран с двумя щелями 1 и 2, регистрируются на другом экране 3. Если открыта только щель 1, то распределение частиц на

экране 3, с точки зрения классической механики, представлялось бы кривой 4. Если же открыта только щель 2, то распределение имело бы вид кривой 5. Когда открыты обе щели, то обычные частицы дали бы распределение интенсивности, равное сумме кривых 4 и 5 (пунктирная кривая 6 на рис. 3.5).

В действительности, как следует из опытов по дифракции электронов, должно получаться распределение, представленное кривой 7 на рис. 3.5 с чередующимися максимумами и минимумами, аналогично тому, которое наблюдается в опыте Юнга при интерференции света на двух щелях [1].

В случае со светом представляем дело так: свет, прошедший через щель 1 и свет, прошедший через щель 2, интерферируют в точках экрана 3, результат интерференции определяется разностью фаз волн, идущих от щелей. Но может ли электрон, проходя через щели, расщепиться подобно световому пучку на две части, которые потом интерферируют на экране? Опыт опровергает такое предположение. В любом эксперименте электрон обнаруживается как единое целое. Например, в рассматриваемом случае можно уменьшить интенсивность падающего на щели пучка настолько, чтобы на экран 3 электроны попадали поочередно. В этом случае на экране получаются метки в виде точек от этих электронов. При достаточно длительном интервале времени эти метки сливаются в интерференционную картину, показанную кривой 7. Для обычных частиц наличие или отсутствие щели 2 никак не влияет на поведение (в частности на траекторию) частиц, прошедших через щель 1. Другое дело, когда речь идет о микрочастицах. Как следует из этого опыта, на поведение каждого электрона влияют обе щели. Получается, что в прохождении каждого электрона участвуют обе щели как и в аналогичном опыте со световой волной. Но это говорит о том, что нельзя себе представлять, что электрон

движется по некоторой траектории, проходящей через определенную щель. Понятие траектории для микрочастиц теряет смысл. Невозможно рассчитать в какую точку экрана попадет электрон, задав его начальные координаты, скорость, геометрию установки как это можно сделать для частицы в классической механике. Однако, зная длину волны де Броиля электронов и геометрию установки, можно рассчитать положение максимумов и минимумов на экране с помощью волновой теории.

Таким образом, для микрочастиц неприменимы, по крайней мере в полном объеме, те понятия и представления, которыми мы привыкли описывать обычные частицы. Наглядные модели, которые помогают в описании поведения объектов в классической физике, здесь не работают.

### 3.4. Соотношения неопределенностей

В классической механике состояние частицы определяется её координатами, скоростью, энергией. Если значения этих величин определяются в эксперименте, то их точность зависит от условий эксперимента, измерительных приборов, точности справочных данных и т.п. В принципе считается, что точность задания величины можно неограниченно увеличивать.

В отличие от классических частиц объекты микромира обладают корпускулярно-волновой двойственностью, и это накладывает ограничения на способ задания некоторых характеризующих их величин. Например, микрочастице можно приписать такую характеристику как длина волны  $\lambda_B$ . Но волна – образование, существующее не в отдельной пространственной точке, как это имеет место для классической частицы (материальной точки). Для описания волны и определения ее характеристик нужно рассматривать область пространства. Наличие волновой природы у микрочастиц приводит к таким особенностям описания их поведения, которые совершенно не характерны для классической механики.

В качестве примера рассмотрим опыт по прохождению микрочастицы через щель шириной  $a$  в плоском экране Э1 (рис. 3.6). Пусть частица движется вдоль оси, перпендикулярной экрану. Направим ось  $x$  вдоль экрана Э1 перпендикулярно щели. В момент прохождения щели положение микрочастицы определено с точностью  $\Delta x = a$ , т.е.  $\Delta x$  – неопределенность координаты частицы в этот момент. Ее поведение после щели определяется дифракцией: она может оказаться в окрестности какого-то из дифракционных максимумов на экране Э2 (кривая 1 на рис.3.6). Как показывает опыт, все максимумы достаточно слабы кроме центрального.

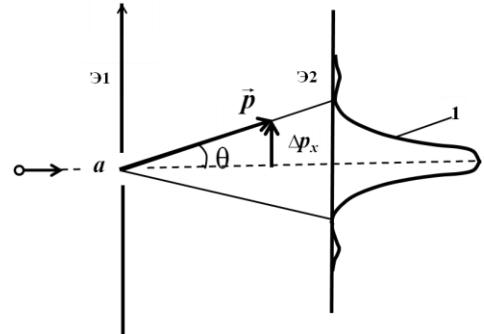


Рис. 3.6

Поэтому в первом приближении можно учитывать только вероятность попадания частицы в окрестность центрального максимума, ограниченного верхним и нижним первыми дифракционными минимумами. Положение этих минимумов на экране Э2, как следует из эксперимента, определяется углом  $\theta$ , удовлетворяющим условию

$$a \sin \theta = \lambda_B. \quad (3.5)$$

Угол  $\theta$  определяет разброс возможных значений проекции импульса на ось  $x$ , т.е. неопределенность проекции импульса  $\Delta p_x$  в момент прохождения частицей щели (рис. 3.6). Учтем, что

$$\lambda_B = \frac{h}{p}, \quad \sin \theta = \frac{\Delta p_x}{p}. \quad (3.6)$$

Подставив (3.6) в (3.5) и учитя, что  $a = \Delta x$ , получим

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h. \quad (3.7)$$

Знак неравенства обусловлен тем, что частица могла попасть и в область дифракционных максимумов большего порядка. Соотношение (3.7) носит приближенный, но принципиальный характер.

В других опытах неопределенности могут трактоваться иначе, поэтому и величина правой части неравенства может оказаться другой, хотя порядок ее будет тем же. Обычно в правой части ставят величину  $\hbar = h/(2\pi)$ .

В трехмерном случае, как показывают эксперименты, всегда выполняются одновременно соотношения для всех трех неопределенностей координат и соответствующих им неопределенностей проекций импульса частицы, которые называют соотношениями неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar. \quad (3.8)$$

Соотношения (3.8) носят всеобщий характер. Они показывают, что нельзя поставить такой эксперимент, в котором одновременно точно определить координаты и импульс частицы. Если уточнять положение частицы (сужать ширину щели  $a$  как в опыте на рис. 3.6), то неизбежно возрастет неопределенность импульса (в рассмотренном опыте возрастет ширина центрального максимума, т.к. возрастет угол  $\theta$ , поскольку  $\sin \theta = \lambda_B/a$ , а значит возрастет  $\Delta p_x$ ). И наоборот, уточнение значений проекции импульса возможно только за счет увеличения неопределенности координаты. Никакое усовершенствование метода измерений или измерительных приборов не позволяет обойти неравенства (3.8). Соотношения неопределенностей Гейзенберга накладывают естественный предел точности измерений координат и импульса, обусловленный свойствами частиц микромира.

Рассмотрим вопрос о скорости частицы. Учитывая, что неопределенность импульса связана с неопределенностью скорости

формулой  $\Delta p_x = m \cdot \Delta v_x$  (масса частицы не имеет неопределенности), получаем из (3.8):

$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{m \cdot \Delta x}. \quad (3.9)$$

Следовательно, невозможно описать состояние частицы одновременно точными значениями координаты и скорости. А это значит, что для микрочастиц неприменимо понятие траектории. Траектория определена только тогда, когда в каждой ее точке заданы координаты и скорость частицы.

Дело обстоит таким образом, что микрочастица в принципе не может иметь одновременно точных значений импульса (а значит и скорости) и координат. Эти понятия взяты из классической механики, где они имеют наглядный характер, и перенесены в микромир. Но оказывается, поведение частиц микромира не может быть описано в полной мере теми же понятиями, образами, законами, которые привычны для человека в окружающем его макромире.

Из соотношений Гейзенберга (3.8) вытекает, что теряет смысл деление полной энергии на кинетическую и потенциальную. Действительно, кинетическая энергия  $W_k = mv^2/2$ , а потенциальная определяется координатами частицы. Так как скорость и координаты микрочастицы не могут одновременно иметь точных значений, то и ее кинетическая и потенциальная энергии не могут иметь одновременно точных значений.

Из (3.8) вытекает, что находящаяся в ограниченном объеме частица не может находиться в состоянии покоя. Действительно, если  $\Delta v \rightarrow 0$ , то  $\Delta x \rightarrow \infty$ . И наоборот, если  $\Delta x \rightarrow 0$ , то  $\Delta v \rightarrow \infty$ , т.е. разброс возможных значений скорости максимален.

Характерным примером проявления неравенства (3.9) может служить рассмотрение поведения электрона в атоме. В этом случае размер атома можно принять за неопределенность координаты:  $\Delta x \approx 10^{-10}$  м. Тогда из (3.9) следует, что неопределенность скорости достигает значения

$$\Delta v \geq \frac{10^{-34}}{9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-10}} \approx 10^6 \frac{\text{м}}{\text{с}}.$$

Но как можно получить из (2.9), таков же порядок величины и самой скорости. Следовательно, ни о какой траектории электрона в атоме говорить не имеет смысла.

Рассмотрим, как обстоит дело при переходе к макромиру. Как видно из (3.9), чем больше масса частицы, тем меньше неопределенность скорости. Пусть имеется пылинка массой  $m = 10^{-6}$  мг и размерами  $\Delta x = 0,01$  мм. Неопределенность ее скорости согласно (3.9) равна

$$\Delta v \geq \frac{10^{-34}}{10^{-12} \cdot 10^{-5}} \square 10^{-17} \frac{m}{s} .$$

Такую неопределенность никакие приборы уловить не смогут, так как их погрешности на много порядков превысят полученную величину. Если речь идет о микрочастице, движущейся в макрообласти, то ее движение можно рассматривать в рамках классической механики, если ограничения, обусловленные соотношениями (3.8), лежат за пределами нужной точности для расчета координат и скорости частицы. Такая ситуация имеет место, например, при рассмотрении движения электронов в электронно-лучевых трубках и других электровакуумных приборах. Там успешно пользуются законами механики, в частности, понятием траектории.

При движении электрона в камере Вильсона можно проследить его траекторию. Это происходит потому что капли воды, которые оседают на ионах (центрах ионизации), отмечают трек. Появляется цепочка маленьких капелек размером  $\Delta x \sim 10^{-4}$  см. Для электрона с энергией  $E = 100$  эВ, длина волны де Броиля будет равна  $\lambda_B = 10^{-8}$  см и  $\Delta x \gg \lambda_B$ . Таким образом, электрон проявляет корпускулярные свойства. При такой степени точности определения траектории электрон можно считать классическим объектом.

Отметим, что соотношения (3.8) не накладывают ограничений на точность одновременного измерения координаты и проекции импульса на другую координатную ось (например,  $x$  и  $p_y$ ).

Приведем теперь математическое условие корпускулярно-волнового дуализма: если  $\Delta x$  – это точность, с которой мы знаем положение микрочастицы в пространстве (чем  $\Delta x$  меньше, тем с большей точностью известно положение), а  $\lambda_B = h/p$  – длина волны де Броиля, то в зависимости от физических условий микрочастица проявляет дуальные свойства, ведя себя либо как волна, либо как частица:

1. В условиях  $\Delta x \sim \lambda_B$  микрочастица проявляет волновые свойства; понятие траектории для описания механического движения не применимо и взаимодействие микрочастицы с классическим прибором не контролируемо, т.е. случайно;

2. В условиях  $\Delta x \gg \lambda_B$  микрочастица проявляет корпускулярные свойства и получается более или менее плавная траектория (траектория означает, что мы с грубой точностью измеряем положение частицы; но чем точнее измерение, тем сильнее оказываемое им воздействие на микрочастицу, тем более скачкообразным и беспорядочным будет результат).

Соотношение, аналогичное (3.8), существует и для энергии и времени:

$$\Delta W \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (3.10)$$

Здесь  $\Delta W$  – неопределенность энергии частицы в квантовом состоянии,  $\Delta t$  – время нахождении ее в этом состоянии или длительность измерения энергии этого состояния. Если частица находится в стационарном

состоянии (например, электрон в основном невозбужденном состоянии в атоме водорода), то энергия этого состояния имеет вполне определенное значение. Если состояние нестационарное, то энергия частицы определена в нем только с точностью  $\Delta W$ , вытекающей из соотношения (3.10). В атоме водорода длительность пребывания электрона в возбужденном состоянии порядка  $\Delta t \approx 10^{-8}$  с. Отсюда из (3.10) получаем неопределенность энергии этого уровня  $\Delta W \geq 10^{-26}$  Дж. Фотон (возьмем  $\lambda = 6 \cdot 10^{-7}$  м), испускаемый при переходе с этого уровня на нижний имеет неопределенность по частоте

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{\Delta W}{W} \square \frac{10^{-26}}{3,3 \cdot 10^{-19}} \square 3 \cdot 10^{-8}.$$

Это приводит к конечной ширине спектральных линий.

Как следует из рассмотренных в последних параграфах опытов, поведение микрочастиц носит вероятностный характер: частица может с большой вероятностью попасть в окрестность первого дифракционного максимума, а может – с меньшей вероятностью – в окрестность какого-то другого и с еще меньшей вероятностью – в окрестность минимума (опыт на рис.3.5 в параграфе 3.3, опыт на рис.3.6 в данном параграфе). При этом эта вероятность определяется интенсивностью интерференционной картины в данном месте пространства. Для адекватного описания такого поведения микрочастиц вместо классической механики, ее понятий и законов требовались другие понятия и законы. Они были созданы и изучаются в разделе «Квантовая механика».

## 4. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

### 4.1. Волновая функция и её свойства

В предыдущих разделах рассматривались явления, в которых движущиеся частицы проявляли свойства характерные для волн. Такие частицы, в поведении которых существенно сказывается корпускулярно-волновой дуализм, будем называть микрочастицами.

Состояние частицы в классической механике задаётся значениями координаты и импульса. Параметры этого состояния изменяются с течением времени согласно уравнению второго закона Ньютона при заданных начальных условиях. Для микрочастиц подобное определение состояния теряет смысл. Попытка использовать термины координата, импульс, траектория для описания микрочастицы приводит к соотношению неопределенностей. В квантовой механике состояние микрочастицы задается волновой функцией или пси-функцией  $\Psi(x, y, z, t)$ , принимающей комплексные значения и зависящий от пространственных координат и времени. Знание пси-функции позволяет найти вероятность  $dP$  того, что

микрочастица в момент времени  $t$  окажется в объеме  $dV$  в окрестности точки с координатами  $(x, y, z)$ :

$$dP = |\Psi|^2 dV. \quad (4.1)$$

Другими словами, квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности нахождения микрочастицы в окрестности  $(x, y, z)$  в момент времени  $t$ :

$$\rho = \frac{dP}{dV} = |\Psi|^2 = \Psi \Psi^*, \quad (4.2)$$

где  $\Psi^*$  – функция, комплексно сопряженная с  $\Psi$ .

Волновая функция обладает следующими свойствами.

1. Поскольку вероятность обнаружения частицы в объеме  $V$ , где она достоверно находится, равна 1, на волновую функцию накладывается условие нормировки:

$$\int_V |\Psi|^2 dV = 1. \quad (4.3)$$

2. Принимает конечные значения, т.е. ограниченная.

3. Однозначная.

4. Непрерывная.

5. Принцип суперпозиции: линейная комбинация волновых функций, описывающих состояния номер 1 и 2 ( $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ ), дают новую волновую функцию, описывающую новое состояние  $\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$ ,  $c_1$ ,  $c_2$  – постоянные коэффициенты.

Знание волновой функции для данного состояния микрочастицы позволяет рассчитать среднее значение любой физической величины  $Y$  в этом состоянии:

$$\langle Y \rangle = \int_V Y |\Psi|^2 dV = \int_V Y \Psi \Psi^* dV. \quad (4.4)$$

Например, среднее значение координаты объекта, находящегося на оси  $OX$  в интервале  $a < x < b$ :  $\langle x \rangle = \int_a^b x \Psi \Psi^* dV$ .

## 4.2. Уравнение Шредингера

Уравнение, в соответствии с которым изменяется состояние микрочастицы, т.е. ее волновая функция, было написано Шрёдингером. Это уравнение является основным уравнением квантовой механики и играет в

ней такую же роль, как второй закон Ньютона в классической механике. Уравнение Шрёдингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi+U\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \quad (4.5)$$

Здесь  $\Psi(x, y, z, t)$  – искомая функция,  $m$  – масса частицы,  $i$  – мнимая единица,  $i=\sqrt{-1}$ ,  $\hbar=\frac{h}{2\pi}$ ,  $\Delta$  – оператор Лапласа, действие которого на функцию сводится к вычислению суммы трех вторых производных по  $x, y, z$

$$\Delta\Psi=\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}, \quad (4.6)$$

$U=U(x, y, z, t)$  – потенциальная энергия частицы в силовом поле. Обычно эта функция задана. Уравнение (4.5) представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных второго порядка по пространственным координатам и первого порядка по времени. Общее решение этого уравнения будет содержать произвольные постоянные. Для нахождения волновой функции, описывающей поведение микрочастицы, находящейся в некоторой области пространства, необходимо дополнить уравнение Шрёдингера начальными и граничными условиями. Начальное условие задает волновую функцию в начальный момент. Граничные условия определяют волновую функцию и ее первую производную по координатам на границе области нахождения микрочастицы. Уравнение Шредингера в виде (4.5) называется нестационарным. В случае, если потенциальная энергия не зависит от времени, решение можно искать в виде произведения функций, одна из которых зависит только от координат, а вторая только от времени:

$$\Psi(x, y, z, t)=\psi(x, y, z)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \quad (4.7)$$

Параметр  $E$  имеет смысл полной энергии микрочастицы. Функция  $\psi(x, y, z)$  называется координатной частью полной волновой функции. Поскольку  $|\Psi|^2=|\psi|^2$ , для вычисления плотности вероятности достаточно найти лишь  $\psi(x, y, z)$ . Плотность вероятности в состоянии, описываемом функцией (4.7), не изменяется с течением времени. Поэтому такие состояния называются стационарными. Уравнение для координатной части волновой функции получается после подстановки (4.7) в (4.5) и имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U\psi = E\psi. \quad (4.8)$$

Это уравнение называется стационарным уравнением Шрёдингера. При заданной функциональной зависимости потенциальной энергии  $U(x, y, z)$ , это уравнение можно рассматривать как дифференциальное уравнение для  $\psi(x, y, z)$  с параметром  $E$ . Совокупность значений энергии  $E$ , при которых (4.8) имеет решения, удовлетворяющие как свойствам волновой функции, сформулированным в предыдущем разделе, так и граничным условиям, называется спектром собственных значений. Если энергия принимает непрерывные значения внутри какого-то интервала числовой оси, то такой спектр называется непрерывным или сплошным. Если спектр состоит из изолированных значений энергии, он называется дискретным энергетическим спектром. Спектр может быть также смешанным, содержащим и непрерывную и дискретную части.

### 4.3. Решение уравнения Шрёдингера для свободной частицы

Получим решение стационарного уравнения Шрёдингера (4.8) для частицы, движущейся вдоль оси  $OX$  при условии, что на неё не действуют силы ( $F=0$ ). Поскольку  $F = -\text{grad}U$ , то  $U(x)$  можно выбрать равной нулю. Тогда полная энергия частицы  $E$  будет совпадать с её кинетической энергией:  $E = \frac{p^2}{2m}$ , где  $p = m\omega$  – импульс частицы. Уравнение для координатной части волновой функции приобретает вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0. \quad (4.9)$$

Общее решение этого уравнения содержит две произвольные постоянные  $C_1$  и  $C_2$ :

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}, \text{ где } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar}. \quad (4.10)$$

Полная волновая функция согласно (4.7) имеет вид

$$\Psi(x, t) = C_1 e^{i(kx - \omega t)} + C_2 e^{-i(kx + \omega t)}, \quad (4.11)$$

где введено обозначение  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ , имеющее смысл циклической частоты колебаний. Функция (4.11) описывает две плоские волны, распространяющиеся вдоль оси  $OX$  в противоположные стороны. Если

ограничить условие задачи только движением частицы в положительном направлении оси  $OX$ , то  $C_2 = 0$  и

$$\Psi(x, t) = C_1 e^{i(kx - \omega t)}. \quad (4.12)$$

Вещественная часть этой функции:

$$\operatorname{Re}(\Psi(x, t)) = C_1 \cos(kx - \omega t). \quad (4.13)$$

представляет собой плоскую бегущую волну, распространяющуюся в положительном направлении оси  $OX$  со скоростью  $v = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}$ . Длина волны

$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$  совпадает с длиной волны де Бройля, соответствующей данной движущейся частице, т.к.  $\sqrt{2mE}$  равно её импульсу. Плотность вероятности обнаружить частицу в точке с координатой  $x$ :

$$\rho(x) = \Psi(x) \cdot \Psi^*(x) = C_1^2. \quad (4.14)$$

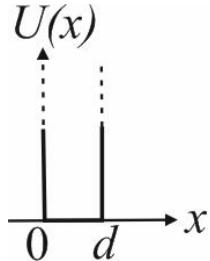
Однако из условия нормировки (4.3) следует, что амплитуда волны  $C_1$  стремится к нулю, т.к. интегрирование производится по всей числовой оси от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Это означает, что плотность вероятности вероятность найти частицу в любом ограниченном интервале оси  $OX$  является бесконечно малой. Этот факт согласуется с соотношением неопределенности. Поскольку импульс частицы задан, его неопределенность равна нулю, а неопределенность координаты оказывается бесконечно большой, и плотность вероятности  $\rho(x)$  – бесконечно малой.

#### 4.4. Микрочастица в потенциальной яме с непроницаемыми стенками

Решим уравнение Шрёдингера для частицы способной двигаться прямолинейно лишь внутри ограниченной области  $0 < x < d$ . Внутри области на частицу не действуют силы, и она движется свободно. На границах области, в точках  $x=0$  и  $x=d$ , на неё действуют бесконечно большие силы, препятствующие выходу за пределы. Говорят, что такая частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме или яме с непроницаемыми стенками. Потенциальная энергия такой частицы имеет вид (рис.4):

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x > 0, x < d \\ 0 & \text{при } 0 \leq x \leq d \end{cases} \quad (4.15)$$

Классическая частица, движущаяся внутри отрезка  $[0, d]$  со скоростью  $v$ , обладает кинетической энергией  $E = \frac{mv^2}{2}$ . Обнаружить частицу можно в любой точке отрезка с одинаковой вероятностью.



Рассмотрим поведение квантовой частицы. Так как её потенциальная энергия внутри области  $[0, d]$  равна нулю, уравнение Шрёдингера и его решение имеют такой же вид как и для свободной частицы (4.9), (4.10):

Рис. 4.1

$$\Psi(x, t) = C_1 e^{i(kx - \omega t)} + C_2 e^{-i(kx + \omega t)}. \quad (4.16)$$

Запрет на нахождение частицы в областях  $x < 0$  и  $x > d$  означает, что в этих областях  $\Psi(x, t) = 0$ . Непрерывность волновой функции приводит к граничным условиям:  $\Psi(0, t) = 0$ ,  $\Psi(d, t) = 0$ . Из первого следует  $C_2 = -C_1$ , а из второго  $C_1 e^{ikd} + C_2 e^{-ikd} = 0$ , откуда  $e^{-ikd} = e^{ikd}$  и  $e^{2ikd} = 1$ . Следовательно,  $2k_n d = 2\pi n$  и

$$k_n = \frac{\pi n}{d}. \quad (4.17)$$

Это означает, что граничным условиям для волновой функции удовлетворяют лишь определённые значения волнового числа  $k_n$ . Соответствующие этим значением волновые функции имеют вид

$$\Psi_n(x, t) = C_1 e^{-i\omega t} \left( e^{ik_n x} - e^{-ik_n x} \right), \quad (4.18)$$

или, после перехода к тригонометрической записи,

$$\Psi_n(x, t) = A e^{-i\omega t} \sin(k_n x). \quad (4.19)$$

Коэффициент  $A$  определяется из условия нормировки (4.3), которое в нашем случае принимает вид

$$A^2 \int_0^d \sin^2(k_n x) dx = 1, \quad (4.20)$$

откуда

$$A = \sqrt{\frac{2}{d}}. \quad (4.21)$$

Окончательно, для решения уравнения Шрёдингера имеем:

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{d}} e^{-i\omega t} \sin\left(\frac{\pi n}{d} x\right). \quad (4.22)$$

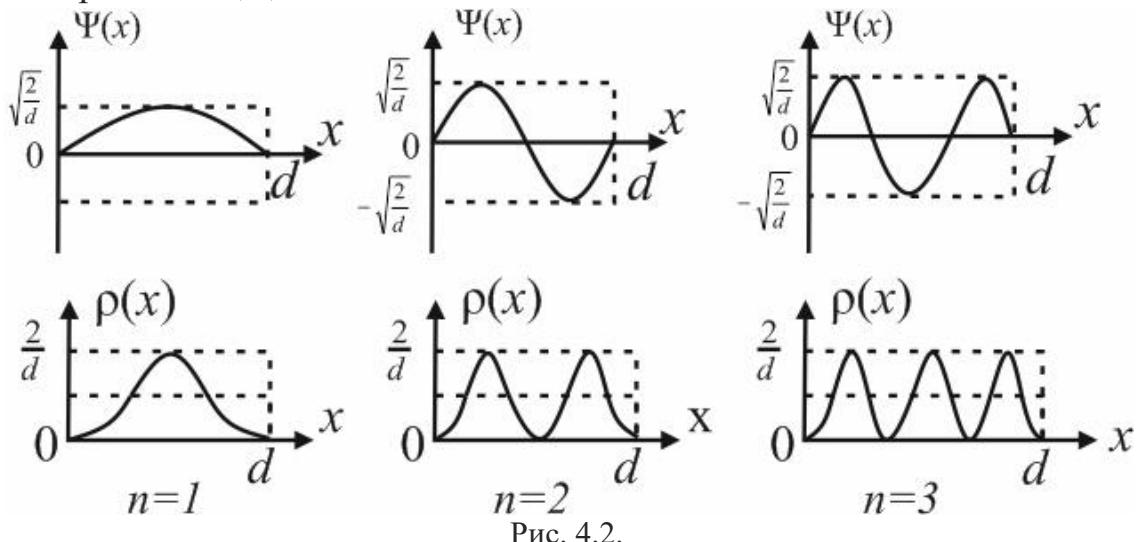
Анализ полученного решения удобно провести, рассмотрев вещественную часть волновой функции

$$\operatorname{Re}(\Psi(x, t)) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{\pi n}{d} x\right) \cos(\omega t). \quad (4.23)$$

Эта функция описывает стоячую волну, называемую волной вероятности. Стоячая волна образуется в результате наложения волн, отраженных от левой и правой границ потенциальной ямы и движущихся во встречных направлениях. Плотность вероятности обнаружить частицу в момент времени  $t$  в точке  $x$  равна

$$\rho_n(x) = |\Psi_n(x, t)|^2 = \frac{2}{d} \sin^2\left(\frac{\pi n}{d} x\right). \quad (4.24)$$

Графики амплитуды волны вероятности  $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{\pi n}{d} x\right)$  и функции  $\rho_n(x)$  изображены на рис. 4.2 для энергетических уровней с номерами  $n=1, 2, 3$ .



Для классической частицы распределение плотности вероятности не зависит от ее энергии и является равномерным:  $\rho(x) = \frac{1}{d}$ .

Плотность вероятности обнаружить квантовую частицу в разных точках ямы колеблется и зависит от волнового числа

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (4.25)$$

т.е. от энергии частицы  $E_n$ . В узлах стоячей волны  $\rho_n(x) = 0$ . На ширине ямы укладывается целое число полуволн де Броия:

$$d = \frac{\pi n}{k_n} = \frac{\lambda}{2} n. \quad (4.26)$$

Выразив  $E_n$  из (4.25), и учитывая условие (4.17), для возможных значений энергии частицы в потенциальной яме получаем

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} n^2, \quad n=1,2,\dots \quad (4.27)$$

Совокупность значений энергии (4.27) составляет энергетический спектр частицы. Для квантовой частицы в потенциальной яме этот спектр является дискретным. Говорят, энергия частицы квантуется. Минимальная энергия:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2}. \quad (4.28)$$

Для электрона ( $m=9,1 \cdot 10^{-31}$  кг) при  $d=0,1$  нм, что примерно равно диаметру первой боровской орбиты,  $E_1 = 37$  эВ.

Зависимость  $E_n$  от номера энергетического уровня квадратична и разность  $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$  растет с ростом  $n$ :

$$\Delta E_n = E_1(2n+1). \quad (4.29)$$

Однако относительное энергетическое расстояние между уровнями уменьшается:

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \rightarrow 0 \text{ при } n \rightarrow \infty. \quad (4.30)$$

Это означает, что с ростом энергии частицы роль проявляемых ею волновых свойств ослабевает и её поведение приближается к классическому.

Одновременно колебания  $\rho_n(x)$  с ростом  $n$  становится всё более частыми и распределение вероятности приближается к равномерному. То, что минимальное значение энергии частицы в потенциальной яме не равно нулю, согласуется с принципом неопределенности. Неопределенность координаты частицы, имеющая порядок ширины ямы, приводит к неопределенности импульса. Следовательно, импульс частицы и связанная с ним энергия частицы отличны от нуля.

## 4.5. Потенциальный барьер бесконечной ширины

Рассмотрим решение уравнения Шредингера для частицы, движущейся в направлении оси  $OX$  и взаимодействующей с потенциальным барьером, имеющим вид ступеньки (рис. 4.3). Потенциальная энергия  $U(x)$  имеет вид:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0 \\ U_0 & \text{при } x \geq 0 \end{cases} \quad (4.31)$$

Частица свободно движется при  $x < 0$  и при  $x > 0$ . Лишь в точке  $x = 0$  на неё воздействует бесконечно большая сила, направленная против оси  $OX$ :

$$F_x = -\frac{dU}{dx} \Big|_{x \rightarrow 0} \rightarrow -\infty.$$

В условиях классической механики возможны два сценария:

1. Если скорость частицы  $v_0$  такова, что кинетическая энергия  $E = \frac{mv_0^2}{2}$  превысит высоту потенциального барьера ( $E > U_0$ ), то она перемещается в область  $x > 0$  и движется там, уменьшив скорость до  $v = \sqrt{\frac{2(E - U_0)}{m}}$ . (4.32)

2. Если  $E < U_0$ , то частица остается в области  $x < 0$ , отразившись от барьера и изменив направление скорости на противоположное (рис. 4.3).

В условиях квантовой механики следует решать уравнения Шредингера в областях  $x < 0$  и  $x > 0$ . Поскольку в каждой из областей частица движется свободно, уравнения имеют такой же вид как в (4.5):

$$\text{При } x < 0: \quad \psi_1'' + k_1^2 \psi_1 = 0, \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (4.33)$$

$$\text{При } x > 0: \quad \psi_2'' + k_2^2 \psi_2 = 0 \quad . \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} \quad (4.34)$$

Общее решение этих уравнений:

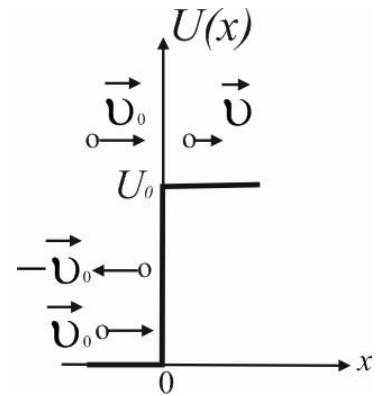


Рис. 4.3

При  $x < 0$ :

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}. \quad (4.35)$$

При  $x > 0$ :

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}. \quad (4.36)$$

Коэффициенты  $A_1$  и  $B_1$  имеют смысл амплитуд волн, распространяющихся в области  $x < 0$ , а  $A_2$  и  $B_2$  – аналогичные величины в области  $x > 0$ . Т. к. физической причины появления волны, движущейся против оси  $OX$  в области  $x > 0$ , нет,  $B_2 = 0$ . Значения коэффициентов  $A_1$  и  $B_1$  определяются из условий непрерывности волновой функции и её производной в точке  $x = 0$ :  $\psi_1(0) = \psi_2(0)$  и  $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$ .

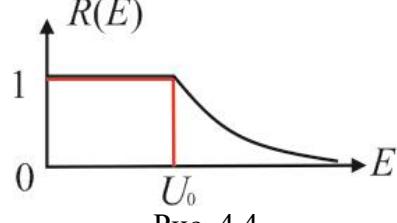
Из этих уравнений после подстановки (4.35), (4.36) следует, что:

$$A_2 = A_1 \frac{2k_1}{k_1 + k_2}; \quad B_1 = A_1 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}. \quad (4.37)$$

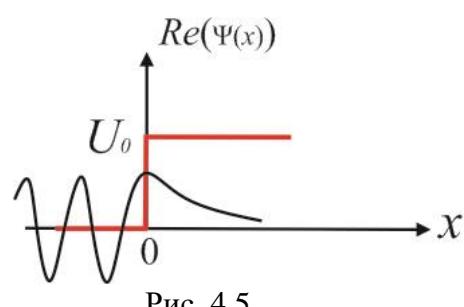
Для описания взаимодействия частицы с потенциальным барьером удобно ввести коэффициент отражения  $R$ , имеющий смысл вероятности отражения частицы от барьера. Коэффициент отражения равен отношению квадратов амплитуд отраженной и падающей волны:

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2. \quad (4.38)$$

Коэффициент отражения является функцией от энергии падающей частицы.



В случае  $E > U_0$  волновое число  $k_2$  вещественное и функция  $R(E)$  является убывающей, но не равной нулю (рис. 4.4). Это отличает поведение квантовой частицы от классической.



Если  $E < U_0$ , то  $k_2 = i|k_2|$  и  $R = \left| \frac{k_1 - i|k_2|}{k_1 + i|k_2|} \right|^2 = 1$ ,

т.е. частица отражается от барьера. Хотя для классической частицы характерно аналогичное поведение (при  $E < U_0$  она отражается), имеет место важное отличие.

Волновая функция  $\psi_2(x) = A_1 \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{-i|k_2|x}$

не равна нулю в областях  $x > 0$  (рис. 4.5), т.е. существует вероятность обнаружить частицу в «подбарьерной» области.

Эта вероятность пропорциональна  $|\psi_2(x)|^2 \propto e^{-2|k_2|x}$  и резко убывает с ростом  $x$ . С позиций классической физики нахождения частицы при  $x > 0$  невозможно. Это означало бы отрицательное значение ее кинетической энергии ( $E - U < 0$ ). Для квантовой частицы разделение полной энергии на кинетическую и потенциальную недопустимо, т. к. противоречит принципу неопределенности. Поэтому запрет на появление частицы в «подбарьерной» области исчезает.

#### 4.6. Потенциальный барьер конечной ширины. Туннельный эффект

Теперь рассмотрим поведение частицы, движущейся с энергией  $E$  в направлении прямоугольного потенциального барьера, имеющего ограниченную ширину  $d$  (рис. 4.6). Потенциальная энергия частицы имеет вид:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 \leq x \leq d \\ 0, & x > d \end{cases} \quad (4.39)$$

Частица,

подчиняющаяся законам классической механики в этом случае, ведёт себя следующим образом:

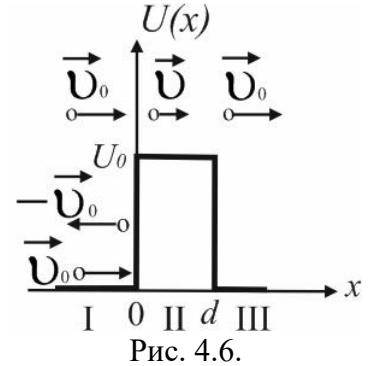


Рис. 4.6.

В области  $x < 0$  — область I — она движется в направлении оси  $OX$ , имея скорость  $v_0 = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ . Если  $E > U_0$ , она проходит в область II, уменьшая скорость до  $v = \sqrt{\frac{2(E-U_0)}{m}}$ , а затем, в области III, скорость принимает первоначальное значение  $v_0$ . Если  $E < U_0$ , частица в точке  $x=0$  отражается от барьера и движется в области I против оси  $OX$ . Величина её скорости не изменяется (рис. 4.6).

Для квантовой частицы необходимо записать уравнения Шрёдингера в каждой из трёх областей:

$$\text{При } x < 0 \quad \psi_1'' + k_1^2 \psi_1 = 0, \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (4.40)$$

$$\text{При } 0 \leq x \leq d \quad \psi_2'' + k_2^2 \psi_2(x) = 0, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}. \quad (4.41)$$

$$\text{При } x > d \quad \psi_3'' + k_1^2 \psi_3(x) = 0. \quad (4.42)$$

Волновые функции, являющиеся решением этих уравнений, имеют вид аналогичный случаю бесконечно широкого барьера (4.35), (4.36):

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad (4.43)$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad (4.44)$$

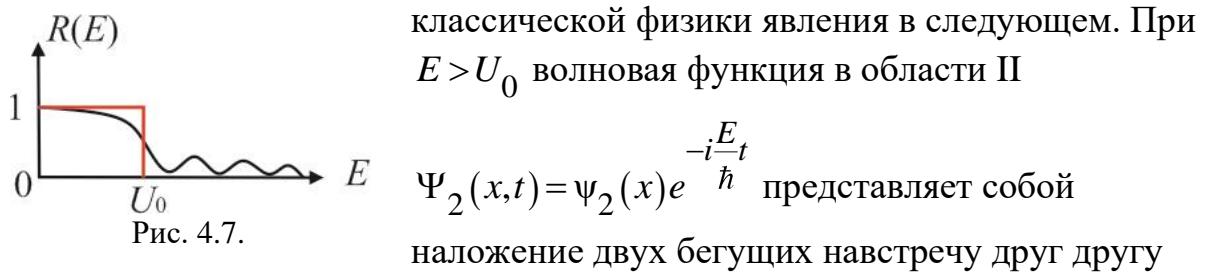
$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x}. \quad (4.45)$$

Коэффициенты  $A_i$  и  $B_i$ , имеющие смысл амплитуд волн, движущихся вправо ( $A_i$ ) и влево ( $B_i$ ) в областях I, II и III, определяются как и в случае барьера бесконечной ширины из условий непрерывности  $\psi(x)$  и  $\psi'(x)$  в точках  $x=0$  и  $x=d$ . Коэффициент  $B_3=0$ , поскольку отражённая волна в области III отсутствует. Амплитуды  $A_i$ ,  $B_i$  зависят от волновых чисел  $k_1$  и  $k_2$  и, следовательно, от энергий  $E$  и  $U_0$ . Коэффициент отражения частицы от барьера, равный отношению квадратов модулей амплитуд  $B_1$  и

$A_1$ :  $R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2$  зависит от того, насколько энергия частицы  $E$  отличается от высоты потенциального барьера  $U_0$ . Наряду с величиной  $R$  удобно ввести коэффициент прохождения (прозрачность) барьера  $D=1-R$ . Рассмотрим два возможных случая.

1.  $E > U_0$ . Тогда волновое число  $k_2$  — вещественно и функция является периодической. С увеличением разности  $E-U_0$  коэффициент отражения падает, но в отличие от бесконечно широкого барьера не монотонно (рис. 4.7).

При определённых значениях  $E$  коэффициент отражения обращается в нуль ( $R=0$ ), а прозрачность  $D=1$ . Это означает, что частица, «проходя над барьером», не чувствует его. Причина такого необъяснимого с позиций



$\lambda_B = \frac{h}{m\omega} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$ . Если  $E$  такова, что на ширине барьера укладывается

целое число длин полуволн де Броиля, то есть  $d = n \frac{\lambda_B}{2}$ ,  $n = 1, 2, \dots$ , то в

результате наложения образуется стоячая волна. При этом значения  $\Psi_2(x, t)$  на краях барьера совпадают и его присутствие не влияет на прозрачность.

2.  $E < U_0$ . Волновое число  $k_2$  является чисто мнимым и  $\Psi_2(x)$  принимает экспоненциальный вид (рис. 4.8)

Плотность вероятности обнаружения частицы  $\rho(x) = |\Psi(x)|^2$  также экспоненциально убывает при  $0 < x < d$  и становится постоянной при  $x > d$  (рис. 4.9).

То, что  $|\Psi(x)|^2 \neq 0$  при  $x > d$ , означает возможность попадания частицы в область III из области I даже в случае, если её энергия  $E$  меньше высоты барьера  $U_0$ . Это явление называется туннельным эффектом. Вероятность частицы пройти «сквозь» барьер характеризуется прозрачностью барьера  $D$ . Для барьера прямоугольной формы

$$D \approx \exp\left(-\frac{d}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right). \quad (4.46)$$

Для электрона ( $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг) при  $U_0 - E \approx 1$  эВ и  $d = 0,1$  нм (порядка размера атома)  $D \approx 0,36$ , то есть около трети электронов проходят сквозь барьер. Увеличение толщины барьера до 5 нм приводит к резкому уменьшению прозрачности  $D \approx 10^{-23}$ .

Для барьера произвольной формы  $U(x)$  (рис. 4.10) прозрачность приближенно определяется выражением

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx\right). \quad (4.47)$$

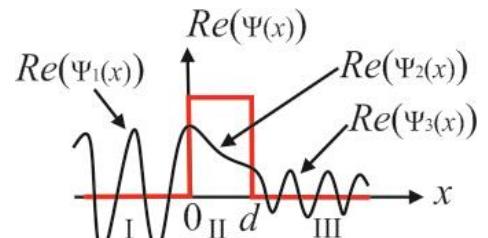


Рис. 4.8.

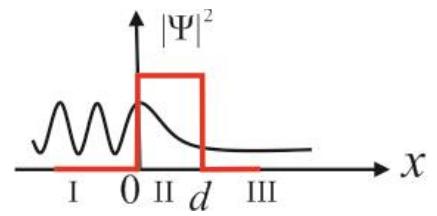


Рис. 4.9.

44

Рис.4.10.

Туннельный эффект проявляется в автоэлектронной (холодной) эмиссии. Электроны внутри металла находятся в потенциальной яме. Если вблизи поверхности металла создать электрическое поле, то в приповерхностной области образуется потенциальный барьер конечной ширины. При увеличении напряжённости электрического поля ширина барьера уменьшается и возрастает вероятность выхода электронов за пределы металла.

#### 4.7. Водородоподобный атом

Простейший атом – атом водорода – согласно классической физике, представляет собой положительно заряженное ядро с зарядом  $e$  и электрон с зарядом  $-e$ , движущийся по круговой орбите вокруг ядра, и удерживающийся на орбите силой кулоновского притяжения. Обобщением этой модели является водородоподобный атом, содержащий также один электрон, а заряд ядра  $Ze$ . При  $Z=1$  такой атом – атом водорода, при  $Z=2$  – однократно ионизованный ион гелия.

Силе взаимодействия между ядром и электроном

$$F = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (4.48)$$

соответствует потенциальная энергия  $U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ ,  $r$  – расстояние от

начала координат, где находится ядро, до точки нахождения электрона. Стационарное уравнение Шредингера (4.9) для такой системы приобретает вид

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0. \quad (4.49)$$

Решение этого уравнения удобно проводить в сферической системе координат. В этой системе положение электрона задаётся расстоянием  $r$ , полярным углом  $\theta$  и азимутальным углом  $\phi$  (рис. 4.11).

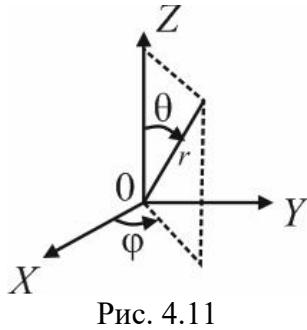


Рис. 4.11

Оператор Лапласа записанный в сферической системе координат содержит производные по  $r, \theta, \phi$ . Поскольку функция  $U(r)$  не содержит углов, его решение представляется в виде произведения двух функций. Первая функция зависит только от  $r$  и называется радиальной частью волновой функции. Вторая часть зависит только от  $\theta$  и  $\phi$ :

$$\psi = \psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,\ell}(r) \cdot Y_{\ell,m}(\theta, \phi). \quad (4.50)$$

Подстановка в (4.48) приводит к двум независимым дифференциальным уравнениям: одно для радиальной части волновой функции  $R$ , второе – для угловой  $Y$ . Индексы в формуле (4.50) называются квантовыми числами:  $n$  – главное квантовое число,  $\ell$  – азимутальное квантовое число,  $m$  – магнитное квантовое число. Из требования непрерывности функции (4.50) следует, что  $\ell$  и  $m$  должны принимать лишь целочисленные значения. Наличие этих индексов означает, что имеются разные наборы волновых функций, удовлетворяющих уравнению (4.49).

Каждое квантовое число связано с физической величиной, характеризующей состояние электрона. Орбитальное квантовое число определяет величину момента импульса электрона:

$$L = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots . \quad (4.51)$$

Магнитное квантовое число задаёт проекцию его момента импульса на выделенное направление – ось  $Z$  – в пространстве:

$$L_z = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell. \quad (4.52)$$

Формула (4.51) означает, что величина вектора момента импульса квантуется, в то время как конкретное направление этого вектора остается неопределенным. Квантованной, т.е. принимающей дискретные значения, является также проекция вектора момента импульса на выделенную пространственную ось (рис. 4.12). Говорят, происходит пространственное квантование.

Решение дифференциального уравнения для радиальной части волновой функции  $R_{n,\ell}(r)$  приводит к следующим результатам:

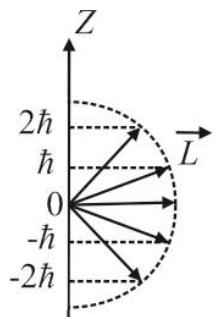


Рис. 4.12

- При любом значении энергии электрона  $E > 0$  это решение существует. Оно описывает рассеяние свободного электрона на положительном ядре. Спектр энергий электрона непрерывный.
- При  $E < 0$  решение существует лишь при значениях

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n=1,2,\dots. \quad (4.53)$$

Для атома водорода, при  $Z=1$ , энергия основного состояния  $E_1 = -13,6 \text{ эВ}$ . Отрицательная энергия электрона в атоме соответствует его связанным состояниям, то есть таким, при которых он движется в поле ядра, не удаляясь от него на бесконечно большое расстояние. Дискретный спектр энергий (4.53) совпадает с соответствующими значениями в модели Бора (2.11). Энергетические уровни, задаваемые формулой (4.53) совместно с графиком потенциальной энергии электрона, изображены на рис. 4.13.

Электрон, находящийся на фиксированном энергетическом уровне с номером  $n$  и обладающий энергией  $E_n$ , может находиться в разных состояниях, различающихся значением орбитального квантового числа  $\ell$ . Величина  $\ell$  принимает значения  $0,1,2,\dots,n-1$ . Каждому состоянию соответствует своя волновая функция с радиальной частью  $R_{n,\ell}(r)$ .

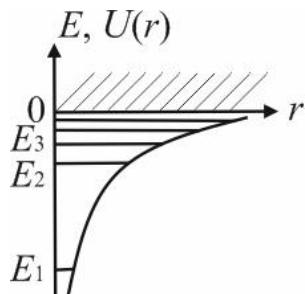


Рис. 4.13

Различные квантовые состояния, находясь в которых частица имеет одинаковую энергию, называются вырожденными. Количество таких различных состояний называется кратностью вырождения. Вычислим кратность вырождения  $n$ -го уровня водородоподобного атома. Каждому из значений азимутального квантового числа  $\ell$  соответствуют  $2\ell+1$  значение магнитного числа  $m$ . Поэтому полное

число  $N$  различных состояний для фиксированного  $n$  равно

$$N = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = 1+3+5+\dots+(2n-1) = n^2. \quad (4.54)$$

В следующем разделе будет показано, что состояние электрона характеризуется ещё одним квантовым числом, принимающим два возможных значения. Это квантовое число не связано с тем, что электрон входит в состав атома и взаимодействует с ядром. Оно является его собственной характеристикой. Поэтому кратность вырождения энергетического уровня номер  $n$

$$N = 2n^2. \quad (4.55)$$

Энергетический спектр (4.53), полученный из решения уравнения Шрёдингера, совпадает со спектром, вычисленным с использованием постулатов Бора (2.11). Однако описание состояния электрона при этих

двах подходах существенно различно. Согласно постулатам Бора, в стационарном состоянии электрон движется по круговой орбите определенного радиуса. В квантовой механике электрон не имеет определённой координаты и может находиться с разной вероятностью в разных точках в окрестности ядра.

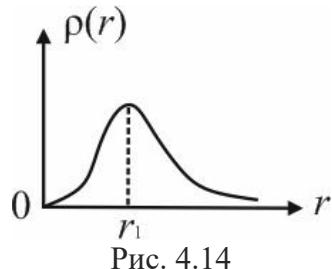


Рис. 4.14

Для наглядности вводят представление об электронном облаке. Плотность облака равна плотности вероятности  $\rho(r)$  обнаружить электрон на расстоянии  $r$  от ядра:

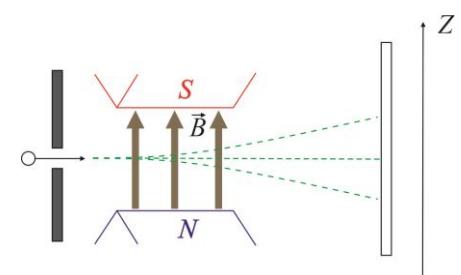
$$\rho(r) = \frac{dP}{dr} = R_{\ell,n}^2(r) r^2$$

(4.56)

График для  $\rho(r)$  при  $n=1, \ell=0$  изображён на рис. 4.14. Максимальное значение плотности вероятности достигается при  $r_1 = 0,53 \cdot 10^{-10}$  м. Это значение совпадает с первым боровским радиусом. Таким образом, радиусам орбит, получаемым из постулатов Бора, в квантовой механике соответствуют значения, в которых нахождение электрона наиболее вероятно. При  $\ell > 0$  изменяется форма электронного облака. Оно перестает быть сферически симметричным и его форма становится зависящей от угла  $\theta$ .

#### 4.8. Опыт Штерна-Герлаха. Спин электрона. Квантовые числа.

Помимо квантования энергии микрочастицы и величины ее момента импульса существует другой вид квантования – пространственное квантование. Пространственное квантование заключается в дискретности проекции механического и магнитного моментов микрочастицы на выделенное направление. Этот вид квантования был обнаружен в опытах Штерна-Герлаха в 1922 году [2].



Узкий пучок атомов серебра пропускался через сильно неоднородное вдоль оси  $Z$  магнитное поле. Поле создавалось магнитом с заостренным наконечником. После прохождения области пространства вблизи магнита атомный пучок попадал на стеклянную пластинку – экран – и оставлял на ней зеркальный след. На атом, обладающий магнитным моментом  $\vec{P}$  в неоднородном магнитном поле  $\vec{B}$  действует сила, пропорциональная градиенту  $\vec{B}$ . Проекция этой силы на ось  $Z$ :

$$F_z = P_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (4.57)$$

Эта сила приводит к отклонению пучка атомов от прямолинейного распространения. Магнитный момент атома связан с его моментом импульса  $\vec{L}$  гиromагнитным соотношением

$$\vec{P} = -\frac{e}{2m} \vec{L} \quad (4.58)$$

В зависимости от того, какие значения могут принимать векторы  $\vec{L}$  и  $\vec{P}$ , можно ожидать разные результаты опыта.

Если вектор  $\vec{L}$ , а следовательно и  $\vec{P}$ , равен нулю, атомный пучок не отклонится и на экране образуется узкая полоска (рис.4.16а). Такой же результат получится в случае отсутствия неоднородного магнитного поля. Если вследствие хаотического теплового движения векторы  $\vec{L}$  для разных атомов имеют произвольные направления, действующая на атомы сила изменяется непрерывно и образуется непрерывная, симметричная относительно  $Z=0$  полоска (рис.4.16б). Если проекции  $L_z$  и  $P_z$  принимают дискретные значения, что свидетельствует о пространственном квантовании, то на экране должны образоваться несколько отдельных узких полосок. Поскольку  $L_z = m\hbar$ , где магнитное квантовое число  $m$  принимает значения всех целых чисел в диапазоне от  $-\ell$  до  $\ell$ , то количество полосок равно  $2\ell+1$ .

Например, 3 при  $\ell=1$  (рис.4.16в).

В опытах Штерна-Герлаха число полосок оказалось равным  $2\ell+2$ , то есть на одну больше, чем предполагает квантование  $L_z$ . Для атомов серебра  $\ell=0$  и таких полосок две (рис.4.16г).

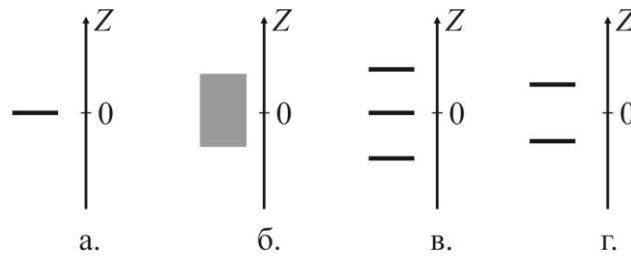


Рис. 4.15

Рис. 4.16

Результаты опытов Штерна-

Герлаха позволили сделать следующие выводы:

1. Магнитные и механические моменты атомов ориентируются во внешнем магнитном поле не под любыми углами, а только под некоторыми, так что их проекции на направление магнитного поля (ось  $Z$ ) изменяется на одну и ту же величину;

2. У электрона существует вектор собственного момента импульса  $\vec{S}$ . Вектор  $\vec{S}$  называют спином электрона. Спин – существенно квантовая величина, не имеющая аналога в классической механике. Он является такой же характеристикой частицы, как и ее масса или заряд. В отличие от величины орбитального момента импульса, модуль спина частицы  $S = |\vec{S}|$  неизменен:

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)}, \quad (4.59)$$

где  $s$  – спиновое квантовое число. Для электрона, протона и нейтрона  $s = \frac{1}{2}$ , для фотона  $s = 1$ . Модуль спина электрона равен  $\frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$ .

Аналогично гиromагнитному соотношению (4.58), связывающему орбитальные механический и магнитный моменты, существует гиromагнитное соотношение для спиновых (собственных) механического ( $\vec{S}$ ) и магнитного моментов ( $\vec{P}_s$ ):

$$\vec{P}_s = -\frac{e}{m} \vec{S}. \quad (4.60)$$

3. Проекция спина на выделенное направление – ось  $Z$  – принимает всего два значения:

$$S_z = m_s \hbar, \quad (4.61)$$

где  $m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$  – магнитное спиновое квантовое число.

Таким образом, состояние электрона в атоме определяется набором четырех квантовых чисел:  $(n, \ell, m, m_s)$ . Главное квантовое число  $n = 1, 2, \dots$  задает значения энергии электрона  $E_n$ . Орбитальное квантовое число  $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$  устанавливает значение момента импульса электрона (4.51). Магнитное квантовое число  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$  определяет величину проекции момента импульса (4.51). Магнитное спиновое квантовое число  $m_s = \pm \frac{1}{2}$  фиксирует проекцию спина  $\vec{S}$  на ось  $Z$ .

Поведение частиц, обладающих значением спинового квантового числа равным  $\frac{1}{2}$ , подчиняется принципу Паули. Согласно этому принципу в одном квантовом состоянии не может находиться более одной частицы.

Это означает, что электроны должны различаться хотя бы одним значением из четырех квантовых чисел. Энергия электронов многоэлектронного атома зависит не только от  $n$ , но и от  $\ell$  (при заданном  $n$  возрастает с увеличением  $\ell$ ) и не зависит от  $m$  и  $m_s$ . Электронную оболочку образуют  $2(2\ell+1)$  электронов при заданных  $n$  и  $\ell$  и имеющих одинаковую энергию. Электроны с фиксированным значением  $n$  образуют электронный слой. Количество таких электронов согласно (4.55):

$$2 \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = 2n^2. \quad (4.62)$$

Таким образом, в самом ближнем к ядру слое находятся 2 электрона ( $n=1, \ell=0$ ). Во втором слое ( $n=2$ ) – 8 электронов. Из них два в оболочке  $n=2, \ell=0$  и шесть в оболочке  $n=2, \ell=1$ . В третьем слое – 18 электронов, в четвертом – 32 и т.д. После заполнения электронами предыдущей оболочки начинается заполнение следующей по нарастанию энергии.

На рис. 4.17 показана схема энергетических уровней электронных оболочек

Принцип постепенного заполнения электронных оболочек атома лежит в основе построения периодической системы химических элементов – таблицы Д.И. Менделеева. Химические свойства атома зависят от числа электронов на внешней оболочке, т.е. тех, которые слабее остальных связаны с ядром. Поскольку число таких электронов изменяется периодически, то периодически изменяются и химические свойства атомов.

Для характеристики состояния атома нужно указать состояние каждого его электрона. Состояния с орбитальными квантовыми числами  $\ell=0,1,2,3$  обозначаются соответственно  $s, p, d, f$ . Главное квантовое число указывается спереди в виде цифры. Если несколько электронов находятся в состоянии с одинаковыми  $n$  и  $\ell$  (обладают одинаковой энергией), то их количество указывается в виде показателя степени. Например, состояния валентных электронов первых пяти химических элементов периодической системы записываются так: водород –  $1s^1$  ( $1S^1$ ), гелий –  $1s^2$  ( $1S^2$ ), литий –  $1s^2 2s^1$  ( $1S^2 2S^1$ ), бериллий –  $1s^2 2s^2$  ( $1S^2 2S^2$ ), бор –  $1s^2 2s^2 2p^1$  ( $1S^2 2S^2 2P^1$ ).

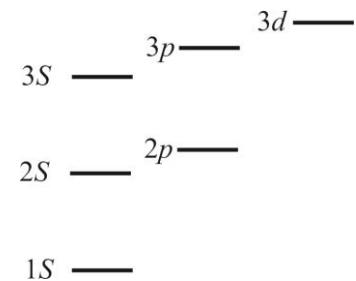


Рис. 4.17

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Андреев А. Д. Физика. Волновая оптика: учебное пособие / А. Д. Андреев, С. Н. Колгатин, Л. М. Черных. - СПб. : СПбГУТ, 2017. - 56 с.*
2. *Савельев И. В. Курс общей физики. Кн. 5. Квантовая оптика. Атомная физика / И. В. Савельев. - М.: Наука, 1998. – 368 с.*
3. *Данин Д. С. «Вероятностный мир» / Д. С. Данин. - М.: Знание, 1981. - 205 с.*
4. *Савельев И. В. Курс общей физики. Кн. 1. Механика / И. В. Савельев. - М.: Наука, 1998. - 336 с.*
5. *Столетов А.Г. Собр. соч., т. 1. Столетов А.Г. - М.Л., 1939.*
6. *Андреев А. Д. Физика. Волны: учебное пособие / А. Д. Андреев, С. Н. Колгатин, Л. М. Черных. - СПб. : СПбГУТ, 2015. - 40 с.*
7. *Андреев А. Д. Физика. Классическая механика: учебное пособие / А. Д. Андреев, С. Н. Колгатин, Л. М. Черных. - СПб. : СПбГУТ, 2019. – 40 с.*
8. *Кудрявцев П. С. Курс истории физики / П. С. Кудрявцев. - М.: Просвещение, 1982. – 350 с.*
9. *Андреев А. Д. Физика. Электростатика: конспект лекций / А. Д. Андреев, Л. М. Черных. - СПб. : СПбГУТ, 2004. – 36 с.*
10. *Фейнман Р. Фейнмановские лекции по физике / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – М. : МИР, 1966. – 315 с.*

**Андреев Александр Давидович**

**Павлов Федор Федорович**

**Федюшин Владимир Борисович**

**Черных Леонид Михайлович**

**ФИЗИКА**

**КВАНТОВАЯ ФИЗИКА**

**Учебное пособие**

Редактор И. И. Щенсняк

Компьютерная верстка Н. А. Ефремовой

План издания 2020 г., п.

Подписано к печати

Объем 3,25 печ. л. Тираж 30 экз. Заказ

Редакционно-издательский отдел СПбГУТ

193232 СПб., пр. Большевиков, 22

Отпечатано в СПбГУТ