

*SEVENTH EDITION*

# ATOMIC PHYSICS

by  
MAX BORN

From the original translation of  
JOHN DOUGALL  
M.A., D.Sc., F.R.S.E.

revised by the author in collaboration with  
R. J. BLIN-STOYLE  
M. A., D. Phil.

BLACKIE AND SON LIMITED

LONDON — GLASGOW

1963

М. БОРН

# АТОМНАЯ ФИЗИКА

*Перевод с английского*

О. И. ЗАВЬЯЛОВА и В. П. ПАВЛОВА

*Под редакцией*

Б. В. МЕДВЕДЕВА

*Предисловие*

академика Н. Н. БОГОЛЮБОВА

ИЗДАТЕЛЬСТВО „МИР“ МОСКВА

1965

Автор этой книги Макс Борн, выдающийся ученый, один из создателей современной физики, хорошо знаком нашему читателю по целому ряду его книг, изданных в нашей стране (в частности, совсем недавно вышли его книги «Физика в жизни моего поколения», ИЛ, 1963; «Эйштейновская теория относительности», изд-во «Мир», 1964).

Книга М. Борна «Атомная физика» занимает особое место в физической литературе, являясь одним из самых простых и доступных изложений физики атомов и молекул. Для чтения ее от читателя не требуется большой специальной подготовки. Сложные физические выводы, а также некоторые математические сведения вынесены автором в ряд приложений, помещенных в конце книги. Это позволяет читать книгу «на двух уровнях». Тот, кто интересуется физической картиной явлений, может ограничиться основным текстом. В то же время в целом книга представляет собой научно строгое и достаточно полное руководство для более подготовленного читателя. Наконец, для специалиста физика книга Макса Борна будет интересна тем, что она передает героическую атмосферу того времени, когда создавалась квантовая физика, — времени, число непосредственных свидетелей которого уже невелико.

Поэтому круг читателей, к которым Макс Борн адресует свою книгу, весьма широк. Ее охотно приобретут и физики-специалисты. Она будет полезным пособием для студентов и преподавателей различных вузов, в которых изучается физика; ею будут пользоваться химики, биологи, инженеры. Книгу будут читать и неспециалисты, серьезно интересующиеся или увлекающиеся физикой.

## ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОМУ ПЕРЕВОДУ

Монография Макса Борна «Атомная физика» смело может быть названа классической. Эта монография является всесторонним и последовательным изложением основных проблем и достижений атомной физики. Весьма привлекательной отличительной особенностью книги М. Борна является ее простота и доступность, совмещенная с полнотой и строгостью изложения. Целое поколение физиков — и теоретиков, и экспериментаторов — знакомилось именно по ней с тем переворотом в наших представлениях о строении вещества, который принесла с собой квантовая механика.

В книге рассматривается обширный круг вопросов: теория атомных спектров, физика ядра, структура атомов и молекул, квантовая статистика, электронная теория металлов, некоторые аспекты физики элементарных частиц и т. д. При этом необходимые для понимания теории сведения о квантовой механике и ее математическом аппарате излагаются попутно — или в самом тексте, или — большей частью — в вынесенных в конец книги многочисленных приложениях. Таким образом, по широте охвата темы «Атомная физика» М. Борна представляет собой прекрасное введение в проблемы современной атомной физики, доступное читателю с минимальными математическими познаниями. Существенно отметить, что эта книга не требует от читателя и большой специальной подготовки.

Книга была написана тридцать лет назад — в 1933 году — и с тех пор непрерывно переиздается, причем автор подвергает ее каждый раз такой переработке, что она никогда не выглядит устаревшей. Поэтому советский читатель, знакомый лишь с выполненным в 1937 году переводом первого издания монографии, встретится теперь как бы с совсем другой книгой, и можно надеяться, что настоящий новый перевод, сделанный О. И. Завьяловым и В. П. Павловым с седьмого английского издания, найдет многочисленных читателей.

Акад. *Н. Н. Боголюбов*



## ПРЕДИСЛОВИЕ

Немецкое издание этой книги появилось в 1933 году под названием «Современная физика». Его основой послужил курс лекций, который я прочитал в Технической школе Берлин — Шарлоттенбург по просьбе Общества инженеров и который был записан д-ром Ф. Заутером. Я был не вполне свободен в выборе материала: имея в виду уровень знаний и профессиональные интересы своих членов, Общество высказало некоторые предложения.

Годом-двумя позже возникла идея английского издания. Но к этому времени название книги оказалось неадекватным, поскольку за истекшее время точка роста в физике переместилась. Интересы сконцентрировались на физике ядра, которой в лекциях было уделено совсем немного места. Однако изменение названия книги обусловлено вовсе не этим, а фактом, что в каталоге издательства уже имелась книга под названием «Современная физика».

Как физик-теоретик я, естественно, выдвинул на передний план теоретическую интерпретацию явлений. Однако сам текст содержит лишь сравнительно элементарное изложение теории. Краткие, но законченные доказательства использованных формул собраны в ряде приложений.

Два года назад, в лекциях, я с некоторой гордостью подчеркивал успехи теории. Теперь же следует привлечь внимание скорее к огромному прогрессу эксперимента. Но я не смог устоять перед соблазном упомянуть о нескольких собственных идеях, которые, я надеюсь, внесут вклад в новый подъем теории.

*Макс Борн*

Кембридж, 1935 г



## ПРЕДИСЛОВИЕ К СЕДЬМОМУ ИЗДАНИЮ

Основным изменением в этом издании было значительное увеличение главы, касающейся структуры атомного ядра. Так, гораздо более детально чем ранее, описаны оболочечная и коллективная модели, с позиций которых мы сейчас смотрим на большинство свойств ядра. Это добавление сделало необходимым переделку и расширение некоторых параграфов, трактующих основы волновой механики. В частности, было введено понятие четности и попутно упомянуто о нарушении сохранения четности в  $\beta$ - и  $\mu$ -распаде. Помимо этих добавлений, остальная часть книги подверглась лишь незначительной переработке, которая свелась в основном к небольшому пересмотру и поправкам. Мы выражаем свою благодарность нашим коллегам за указание мест, где такие исправления были необходимы.

Январь, 1961 г.

*Макс Борн,  
Р. Дж. Блин-Стойл*

## О Г Л А В Л Е Н И Е

Предисловие к русскому переводу . . . . .	5
Предисловие . . . . .	7
Предисловие к седьмому изданию . . . . .	8
<b>Г л а в а I. Кинетическая теория газов . . . . .</b>	<b>9</b>
§ 1. Атомистическая теория в химии . . . . .	9
§ 2. Основные предположения кинетической теории газов . . . . .	11
§ 3. Вычисление давления газа . . . . .	13
§ 4. Температура газа . . . . .	15
§ 5. Теплоемкость . . . . .	17
§ 6. Закон распределения по энергиям и скоростям . . . . .	18
§ 7. Длина свободного пробега . . . . .	27
§ 8. Определение числа Авогадро . . . . .	29
<b>Г л а в а II. Элементарные частицы . . . . .</b>	<b>34</b>
§ 1. Прохождение электрического тока сквозь разреженные газы . . . . .	34
§ 2. Каталовые и анодные (положительно заряженные) лучи . . . . .	38
§ 3. Рентгеновские лучи . . . . .	40
§ 4. Радиоактивные излучения . . . . .	41
§ 5. Гипотеза Проута. Изотопия. Протон . . . . .	50
§ 6. Нейтрон . . . . .	57
§ 7. Космические лучи. Позитроны . . . . .	59
§ 8. Мезоны и ядерные силы . . . . .	63
<b>Г л а в а III. Атом и его ядро . . . . .</b>	<b>70</b>
§ 1. Теория электрона Лоренца . . . . .	70
§ 2. Теорема инертности энергии. Единая теория поля . . . . .	72
§ 3. Изучение строения атома на экспериментах по рассеянию . . . . .	78
§ 4. Дефект массы и энергия связи ядер. Нейтрино . . . . .	82
§ 5. Тяжелый водород и тяжелая вода . . . . .	87
§ 6. Искусственное расщепление ядер и искусственная радиоактивность . . . . .	89
<b>Г л а в а IV. Волны — частицы . . . . .</b>	<b>98</b>
§ 1. Волновая теория света. Интерференция и дифракция . . . . .	98
§ 2. Кванты света . . . . .	102
§ 3. Квантовая теория атома . . . . .	105

§ 4. Эффект Комптона . . . . .	108
§ 5. Волновая природа материи. Теория де-Бройля . . . . .	110
§ 6. Экспериментальное доказательство существования воли материи . . . . .	113
§ 7. Противоречие между волновой и корпускулярной теориями. Устранение этого противоречия . . . . .	116
<b>Глава V. Структура атома и спектральные линии . . . . .</b>	<b>127</b>
§ 1. Атом Бора; стационарные орбиты для простого периодического движения . . . . .	127
§ 2. Квантовые условия для простого и кратиопериодического дви- жения . . . . .	137
§ 3. Матричная механика . . . . .	155
§ 4. Волновая механика . . . . .	158
§ 5. Механический момент (момент импульса) в волновой механике . . . . .	169
§ 6. Четность . . . . .	171
§ 7. Статистическая интерпретация волновой механики . . . . .	172
<b>Глава VI. Спин электрона и принцип Паули . . . . .</b>	<b>179</b>
§ 1. Дублеты щелочных металлов и спин электрона . . . . .	179
§ 2. Аномальный эффект Зеемана . . . . .	183
§ 3. Атом водорода и рентгеновские термы . . . . .	192
§ 4. Атом гелия . . . . .	198
§ 5. Принцип запрета Паули . . . . .	209
§ 6. Периодическая система. Заполненные оболочки . . . . .	211
§ 7. Магнетизм . . . . .	214
§ 8. Волновая теория спина электрона . . . . .	217
§ 9. Плотность электронного облака . . . . .	227
<b>Глава VII. Ядерная физика . . . . .</b>	<b>235</b>
§ 1. Размеры ядра и $\alpha$ -распад . . . . .	235
§ 2. Момент количества движения и магнитный момент . . . . .	239
§ 3. Дейтрон и ядерные силы . . . . .	246
§ 4. Структура ядра . . . . .	251
§ 5. Оболочечная модель ядра . . . . .	252
§ 6. Коллективная модель ядра . . . . .	260
§ 7. $\beta$ -распад и $K$ -захват . . . . .	262
§ 8. Дискретный $\beta$ -спектр и ядерные возбуждения . . . . .	271
§ 9. Капельная модель ядра и деление ядер . . . . .	274
<b>Глава VIII. Квантовая статистика . . . . .</b>	<b>283</b>
§ 1. Тепловое излучение и закон Планка . . . . .	283
§ 2. Теплоемкость твердых тел и многоатомных газов . . . . .	293
§ 3. Квантование черного излучения . . . . .	302
§ 4. Статистика Бозе—Эйнштейна для световых квантов . . . . .	308
§ 5. Эйнштейнова теория вырождения газа . . . . .	312
§ 6. Статистика Ферми—Дирака . . . . .	315
§ 7. Электронная теория металлов. Распределение по энергии . . . . .	317

§ 8. Термоэффект и фотоэффект в металлах . . . . .	320
§ 9. Магнетизм электронного газа . . . . .	324
§ 10. Электропроводность и теплопроводность. Термоэлектричество . . . . .	325
<b>Глава IX. Строение молекул . . . . .</b>	<b>329</b>
§ 1. Свойства молекул как отражение распределения заряда в электронном облаке . . . . .	329
§ 2. Экспериментальное определение молекулярных постоянных . . . . .	331
§ 3. Полосатые спектры и эффект Рамана . . . . .	340
§ 4. Химическая связь. Классификация типов связей . . . . .	351
§ 5. Теория гетерополярной ионной связи . . . . .	353
§ 6. Теория ковалентной связи . . . . .	357
§ 7. Теории сил Ван-дер-Ваальса и других видов связи . . . . .	360
§ 8. Заключение . . . . .	362

## ПРИЛОЖЕНИЯ

1. Вычисление некоторых интегралов, встречающихся в кинетической теории газов . . . . .	364
2. Теплопроводность, вязкость и диффузия . . . . .	366
3. Уравнение состояния Ван-дер-Ваальса . . . . .	370
4. Среднее квадратичное отклонение . . . . .	373
5. Теория относительности . . . . .	375
6. Теория электрона . . . . .	379
7. Теорема инертности энергии . . . . .	382
8. Вычисление коэффициента рассеяния света на свободных частицах . . . . .	382
9. Формула Резерфорда для рассеяния $\alpha$ -частиц . . . . .	384
10. Комpton-эффект . . . . .	387
11. Фазовая и групповая скорость . . . . .	389
12. Элементарный вывод соотношения неопределенностей Гейзенберга . . . . .	391
13. Теория Гамильтона и переменные действия . . . . .	392
14. Квантование эллиптических орбит в теории Бора . . . . .	395
15. Осциллятор в матричной механике . . . . .	400
16. Осциллятор в волновой механике . . . . .	404
17. Колебания круглой мембраны . . . . .	406
18. Решение уравнения Шредингера для задачи Кеплера . . . . .	407
19. Полный механический момент . . . . .	412
20. Вывод формулы Резерфорда в волновой механике . . . . .	414
21. Вывод правил отбора в задаче Кеплера . . . . .	418
22. Аномальный эффект Зеемана для $D$ -линий натрия . . . . .	422
23. Подсчет числа уровней в случае двух $p$ -электронов . . . . .	424
24. Атомный формфактор . . . . .	428
25. Формализм квантовой механики . . . . .	435
26. Общее доказательство соотношения неопределенностей . . . . .	442
27. Вероятности перехода . . . . .	444
28. Квантовая теория излучения . . . . .	447

---

29. Электростатическая энергия ядер . . . . .	452
30. Теория $\alpha$ -распада . . . . .	453
31. Основное состояние дейтрона . . . . .	455
32. Мезонная теория . . . . .	458
33. Закон Стефана—Больцмана и закон смещения Вина . . . . .	458
34. Поглощение осциллятором . . . . .	462
35. Температура и энтрония в квантовой статистике . . . . .	466
36. Термоэлектронная эмиссия . . . . .	467
37. Температурная зависимость для парамагнетизма . . . . .	479
38. Теория ковалентной связи . . . . .	473
39. Теория сил Ван-дер-Ваальса . . . . .	476

# КИНЕТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ГАЗОВ

## § 1. Атомистическая теория в химии

В современной физике понятия энергии и материи самым тесным образом связаны с атомной теорией, поэтому естественно начать с краткого рассказа о том, откуда возникли атомистические представления.

Впервые они зародились, как известно, в химии — идея атома почти неизбежно вытекает из всякой попытки объяснить простые количественные закономерности, которые сразу бросаются в глаза при изучении весового баланса в химических реакциях. Прежде всего установлено, что общий вес участвующих в реакции веществ остается неизменным. Затем оказывается, что вещества соединяются лишь в одних и тех же простых весовых отношениях, так что некоторое количество одного реактива может прореагировать только с определенным количеством другого; при этом весовое отношение прореагировавших веществ не зависит от внешних условий — например от того, в какой пропорции они были смешаны первоначально. На языке химиков эти правила выражаются *законом постоянных и кратных отношений* (Проут, 1799 г.; Дальтон, 1808 г.). Например,

1 г водорода, соединяясь с 8 г кислорода, дает 9 г воды;  
1 г водорода, соединяясь с 35,5 г хлора, дает 36,5 г хлористого водорода.

Хорошей иллюстрацией закона кратных отношений служат соединения азота с кислородом:

7 г азота, соединяясь с	
1 · 4 г кислорода, дают	11 г закиси азота,
2 · 4 г	"            15 г окиси азота,
3 · 4 г	"            19 г азотистого ангидрида,
4 · 4 г	"            23 г двуокиси азота,
5 · 4 г	"            27 г азотного ангидрида.

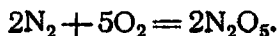
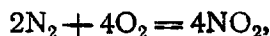
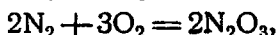
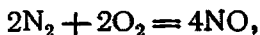
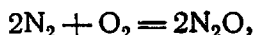
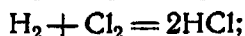
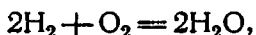


В случае газов простые закономерности выполняются не только для весов реагирующих веществ, но также и для их объемов. Так (при постоянном давлении),

2 объема водорода, соединяясь с 1 объемом кислорода, образуют 2 объема водяного пара;

1 объем водорода, соединяясь с 1 объемом хлора, образует 2 объема хлористого водорода.

Числа, равные отношениям объемов, как раз и фигурируют в соответствующих химических формулах. В приведенных нами примерах это выглядит так:



Эти факты можно объяснить (как и сделал Авогадро) следующим образом: любой газ состоит из огромного числа частичек — атомов или молекул. При одних и тех же температуре и давлении равные объемы всех газов содержат равное число молекул.

Примеры, приведенные выше, иллюстрируют важность этого принципа для понимания законов химических реакций. Тот факт, что два объема водорода, соединяясь с одним объемом кислорода, образуют два объема водяного пара (Авогадро, 1811 г.), эквивалентен утверждению, что две молекулы водорода, соединяясь с двумя молекулами кислорода, образуют две молекулы воды. Аналогично, образование девяти весовых частей воды при соединении одной весовой части водорода с восемью частями кислорода означает, что молекула кислорода должна быть в восемь раз, а молекула воды — в девять раз тяжелее, чем две молекулы водорода.

Таким путем мы приходим к понятиям *молекулярного* и *атомного веса*. Это соответственно вес одной молекулы и вес одного атома вещества. Он измеряется не в граммах, а определяется относительно некоторого стандартного (воображаемого) газа, атомный вес которого полагается равным единице. Единицу решили выбрать не так, чтобы атомный вес водорода H был равен 1, а положив атомный вес кислорода O равным 16;

этот выбор оказался чрезвычайно удачным (поскольку выяснилось, что у водорода есть тяжелый изотоп, гл. III, § 5). Мы будем обозначать определенный таким образом молекулярный вес символом  $\mu$ .

Количество вещества, вес которого составляет  $\mu$  грамм, называется *граммолекулой*, или *молем* (даже в том случае, когда вещество не может существовать химически). Так, моль атомарного кислорода весит 16 г, а моль молекулярного кислорода — 32 г. Из самого определения следует, что «1 моль» вещества всегда содержит одно и то же число молекул. Это число играет важную роль в кинетической теории газов. Его можно найти, зная количество молекул в кубическом сантиметре, впервые измеренное Лошмидтом в 1865 г. В настоящее время принято называть число молекул в 1 см<sup>3</sup> *числом Лошмидта* и число молекул в моле — *числом Авогадро*. Число Авогадро мы обозначим через  $N_0$ ; оно равно (см. стр. 33)

$$N_0 = 6,025 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}.$$

Из закона Авогадро следует, что при заданных температуре  $T$  и давлении  $p$  моль любого газа занимает один и тот же объем. При  $p = 760$  мм рт. ст. и  $T = 0^\circ \text{C}$  этот объем равен 22,4 л.

Приведем еще ряд обозначений, которыми мы будем пользоваться в дальнейшем. Если  $m$  — вес молекулы в граммах, то  $\mu = N_0 m$ . В частности, для атомарного водорода ( $\mu$  почти в точности равно 1)  $N_0 m_{\text{H}} = 1$ . Если, далее,  $n$  — число молекул в единичном объеме,  $N$  — число молекул в объеме  $V$ , а  $\nu$  — число молей в объеме  $V$ , то выполняется соотношение

$$\nu N_0 = nV = N.$$

Наконец,

$$\rho = nm$$

означает плотность газа, а

$$v_s = \frac{1}{\rho}$$

— его удельный объем.

## § 2. Основные предположения кинетической теории газов

После этих предварительных замечаний об атомистической теории в химии перейдем теперь к *кинетической теории газов* (Герпат, 1821 г.; Ватертсон, 1843 г.; Крониг, 1856 г.). Разумеется, совершенно безнадежно пытаться описать состояние газа, задавая положение и скорость каждой молекулы, так как в любом сколько-нибудь заметном объеме газа содержится огромное

количеством молекул. Как и всегда, когда мы имеем дело с макроскопической материей, приходится обратиться к *статистике*. Но статистика, которую нам предстоит здесь использовать, несколько иная, чем та, к которой мы привыкли в повседневной жизни. Там статистический метод сводится к тому, чтобы, зарегистрировав большое число происшедших событий, извлечь определенные выводы из накопленных численных данных. Так, например, статистика смертности может ответить на вопрос, насколько более вероятно, что человек умрет в шестьдесят лет, чем в двадцать. С этой целью в течение длительного времени подсчитывают количество случаев смерти в том и в другом возрасте и полагают, что полученные таким образом числа пропорциональны искомым вероятностям.

Совсем иначе следует поступить, применяя статистический метод к теории газов, ибо, например, совершенно невозможно указать, сколько и какие именно молекулы находятся в данном объеме. Поэтому нужно идти обходным путем, выбрав правдоподобные гипотезы и строя теорию на их основе. Как во всякой научной теории, окончательным критерием правильности исходных положений будет согласие их логических следствий с опытом.

Пусть, например, мы хотим знать вероятность обнаружения молекулы в определенной точке внутри сосуда с газом. Если внешние силы отсутствуют, то нет никакой причины, по которой молекула находилась бы предпочтительно в одной части сосуда, а не в какой-либо другой. Точно так же бесосновательно было бы считать предпочтительным какое-либо направление скорости частицы. Поэтому мы принимаем следующую гипотезу, которую обычно называют *принципом молекулярного беспорядка*: для газа в замкнутом сосуде при отсутствии внешних сил *все направления скорости и все положения молекул равновероятны*.

В кинетической теории газов мы будем иметь дело лишь с усредненными величинами — средними по времени, средними по объему, средними по всем направлениям и т. д. Точные значения величин полностью ускользают от наблюдения. Пусть  $n_a$  — число молекул в единичном объеме, обладающих свойством  $a$ , например определенной величиной скорости или определенной ее составляющей по оси  $x$ ; тогда под средним значением  $a$  мы понимаем величину  $\bar{a}$ , где

$$\bar{a} = \frac{\sum n_a a}{\sum n_a} \quad \text{или} \quad n\bar{a} = \sum n_a a.$$

Здесь  $n$  есть  $\sum n_a$  — число молекул в кубическом сантиметре. Пусть, к примеру, скорость каждой молекулы дается вектором

$v$  с компонентами  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ , так что ее величина  $v = \sqrt{(\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2)}$ , и мы хотим найти среднее значение  $\bar{\xi}$  (для молекул со скоростью  $v$ ). Тогда принцип молекулярного беспорядка, примененный к направлениям движения, гласит, что число молекул с составляющей скорости  $+\xi$  будет точно совпадать с числом молекул, имеющих составляющую  $-\xi$ . Среднее значение  $\xi$  должно поэтому равняться нулю. Отличное от нуля значение означало бы, что газ как целое движется с этой скоростью в направлении оси  $x$ .

С другой стороны,  $\bar{\xi}^2$  не равно нулю. Из соображений симметрии мы заключаем, что

$$\bar{\xi}^2 = \bar{\eta}^2 = \bar{\zeta}^2.$$

Усредняя равенство  $v^2 = \xi^2 + \eta^2 + \zeta^2$  по всем направлениям при фиксированном абсолютном значении  $v$ , получаем

$$v^2 = \bar{\xi}^2 + \bar{\eta}^2 + \bar{\zeta}^2 = 3\bar{\xi}^2$$

или

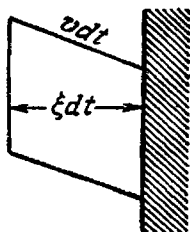
$$\bar{\xi}^2 = \bar{\eta}^2 = \bar{\zeta}^2 = \frac{v^2}{3}.$$

### § 3. Вычисление давления газа

Вооружившись этими представлениями, мы уже можем вычислить *давление газа*  $p$ , т. е. силу, действующую на единичную площадь (Д. Бернулли, 1738 г.; Крониг, 1856 г.; Клаузиус,

Фиг. 1. Число столкновений со стенкой для молекул, имеющих скорость  $v$  за малый промежуток времени  $dt$ .

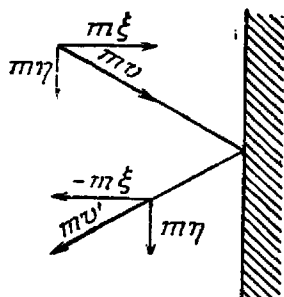
Оно равно количеству молекул, находящихся в данный момент времени внутри наклонного цилиндра, высота которого есть  $\xi dt$ , а основание совпадает с выделенным элементом стенки.



1857 г.). Согласно кинетической теории газов, эта сила равна изменению импульса молекул, ударяющихся об единичную поверхность стенки сосуда за секунду. Направим ось  $x$  по перпендикуляру к стенке. Пусть  $n_v$  — число молекул со скоростью  $v$  в одном кубическом сантиметре. Тогда за бесконечно малое время  $dt$  на квадратный сантиметр поверхности могут упасть те молекулы, которые к моменту времени, предшествующему  $dt$ , оказались внутри наклонного цилиндра с образующей  $v dt$ , опирающегося на выделенный элемент поверхности как на основание (фиг. 1). Поскольку высота цилиндра есть  $\xi dt$ , объем

его также равен  $\xi dt$ , а число рассматриваемых молекул в нем  $n_v \xi dt$ . За единицу времени элемент поверхности испытывает  $n_v \xi$  соударений с молекулами, обладающими скоростью  $v$ .

Если уподобить молекулы бильiardным шарам, то легко понять, что перпендикулярная стенке составляющая их импульса меняется при ударе на  $2m\xi$ , а параллельная его составляющая остается неизменной (фиг. 2). Поэтому вклад рассматриваемых молекул в общее давление  $p$  будет равен



Фиг. 2. Диаграмма импульсов для упругого столкновения молекулы со стенкой сосуда.

Энергия, абсолютная величина импульса и его параллельная стенке составляющая не меняются при столкновении. Однако перпендикулярная стенке составляющая импульса меняет знак. Поэтому стенке передается импульс  $2m\xi$ .

$2m\xi^2 n_v$ . Просуммируем сначала такие вклады при фиксированном значении  $v$  по всем направлениям падения, т. е. по полусфере. В данном случае эта сумма окажется равной половине суммы по всей сфере, так что

$$2m\Sigma\xi^2 n_v = 2m \cdot \frac{1}{2} \bar{\xi^2} n_v = \frac{m}{3} v^2 n_v,$$

где  $n_v$  — число молекул с абсолютным значением скорости  $v$  в одном кубическом сантиметре. Если еще просуммировать это выражение по всем значениям скорости, то получим для полного давления

$$p = \frac{m}{3} \Sigma n_v v^2 = \frac{m}{3} n \bar{v^2}.$$

Пусть  $V$  — объем, занимаемый газом, а  $N$  — число молекул в этом объеме. Тогда, умножая предыдущее уравнение на  $V$  и вспоминая, что  $nV = vN_0 = N$ , найдем

$$Vp = N \frac{m}{3} \bar{v^2} = \frac{2}{3} vU,$$

где мы положили

$$U = N_0 \frac{m}{2} \bar{v^2}.$$

Очевидно, что  $U$  — это средняя кинетическая энергия одного моля газа, которая в случае одноатомных газов совпадает с

полной энергией всех молекул в моле. Для многоатомных газов формулы усложняются в связи с учетом вращения молекул как целого и колебаний атомов внутри молекулы. Можно показать, однако, что вышеприведенная формула для давления останется в силе и в этом случае. Величина  $U$ , как и раньше, будет кинетической энергией поступательного движения молекул; однако ее уже нельзя будет отождествить с полной энергией.

#### § 4. Температура газа

На основе кинетической теории газов, не зная даже закона распределения молекул по скоростям (т. е. вида зависимости числа  $n_v$  от  $v$ ), мы нашли, что произведение объема на давление есть функция только от средней кинетической энергии газа. Но существует также эмпирический закон *Бойля — Мариотта*: при постоянной температуре произведение объема на давление для идеального газа есть постоянная величина.

Отсюда следует сделать вывод, что  $U$  — средняя кинетическая энергия одного моля газа — зависит только от его температуры. Первоначально понятие температуры является посторонним для кинетической теории, поскольку фактически каждая отдельная молекула характеризуется только своей скоростью. Но совершенно естественно определить абсолютную температуру газа  $T$  через среднюю кинетическую энергию. Обычно это делается в соответствии с уравнением

$$\frac{m}{2} \bar{v}_x^2 = \frac{k}{2} T,$$

где слева стоит средняя кинетическая энергия поступательного движения молекулы вдоль оси  $x$ , а  $k$  называется *постоянной Больцмана*. Для всей кинетической энергии движения центра инерции молекулы мы имеем поэтому

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2} kT,$$

а в расчете на один моль

$$U = N_0 \frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2} RT.$$

Здесь мы положили  $N_0 k = R$ .

Оправданием такого определения температуры служит тот факт, что, подставляя последнее выражение в полученную ранее формулу для газового давления, мы приходим формально к соотношению, объединяющему закон *Бойля — Мариотта*

с законами Гей-Люссака и Шарля:

$$pV = \nu RT.$$

Константу  $R$  называют *универсальной газовой постоянной*; ее можно без труда найти, измерив одновременно значения  $p$ ,  $V$  и  $T$ . Она равна

$$R = 8,313 \cdot 10^7 \text{ эрг} \cdot \text{град}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1} = 1,986 \text{ кал} \cdot \text{град}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}.$$

Мы не можем здесь подробно обсуждать определение температуры с термодинамической и аксиоматической точек зрения (полное рассмотрение для случая обобщенной статистики, основанной на квантовой теории, приводится в приложении 35). Ограничимся лишь кратким замечанием о единицах измерения температуры.

Мы используем понятие «идеального газа». Это газ, для которого при постоянной температуре произведение объема на давление точно постоянно; при малых давлениях это имеет место для любого газа. Отклонения от идеального поведения наблюдаются тогда, когда плотность газа настолько велика, что среднее расстояние между соседними молекулами сравнимо с их диаметрами.

Если идеальный газ использовать в качестве термометрического вещества, то шкала Цельсия определяется следующим образом: пусть  $(pV)_T$  есть значение  $pV$ , когда газ приведен в соприкосновение с тающим льдом, а  $(pV)_K$  — с кипящей водой<sup>1)</sup>. Тогда при произвольном значении  $pV$  температура в стоградусной шкале определяется равенством

$$t = 100 \frac{pV - (pV)_T}{(pV)_K - (pV)_T}.$$

Сразу видно, что при таком определении температура тающего льда будет равна  $0^\circ\text{C}$ , а температура кипящей воды  $100^\circ\text{C}$ . Переход от температуры в шкале Цельсия к абсолютной температуре (Кельвин, 1854 г.), которую мы уже обозначили выше символом  $T$ , осуществляется следующим путем. Как показал эксперимент, при повышении температуры на  $1^\circ\text{C}$  объем идеального газа увеличивается на  $1/273$  часть его объема при  $0^\circ\text{C}$ , если давление остается неизменным. Так, например,

$$\frac{(pV)_K}{(pV)_T} = \frac{T_K}{T_T} = 1 + \frac{100}{273} = \frac{373}{273}.$$

Если сохранить единицу шкалы Цельсия и для абсолютной шкалы температур, то  $T_K$  и  $T_T$  должны отличаться друг от

<sup>1)</sup> Здесь  $t$  — точка таяния,  $k$  — точка кипения.

друга на  $100^\circ\text{C}$ . Отсюда следует, что тающий лед ( $t=0^\circ\text{C}$ ) имеет абсолютную температуру  $T_{\text{т}}=273^\circ$ , а кипящая вода ( $t=100^\circ\text{C}$ ) — температуру  $T_{\text{к}}=373^\circ$ . Поэтому нуль абсолютной шкалы температуры лежит при  $-273^\circ\text{C}$ .

Отметим, что абсолютную температурную шкалу часто называют *шкалой Кельвина* и для отличия от обычной стоградусной шкалы Цельсия обозначают буквой К.

### § 5. Теплоемкость

*Теплоемкость* вещества (отнесенная к 1 молю) — это энергия, которую необходимо сообщить граммолекуле вещества, чтобы повысить его температуру на  $1^\circ$ . Из этого определения сразу следует, что для одноатомного газа теплоемкость при постоянном объеме равна

$$c_v = \frac{dU}{dT} = \frac{3}{2} R.$$

Если газу сообщать тепловую энергию, но постоянным поддерживать не объем, а давление, то газ будет расширяться и, следовательно, совершать работу против внешнего давления (которое, разумеется, в случае равновесия равно и направлено противоположно давлению газа). Работа, производимая газом, при этом составляет

$$p \Delta V = R \Delta T,$$

т. е. равна  $R$  для  $\Delta T=1^\circ$ . Таким образом,  $R$  — это та часть теплоемкости, которая соответствует работе, затраченной на расширение. Прибавив к ней теплоемкость при постоянном объеме  $\frac{3}{2} R$ , найдем полную теплоемкость при постоянном давлении

$$c_p = \frac{5}{2} R.$$

Отношение  $c_p/c_v$  принято обозначать символом  $\gamma$ . Итак, для одноатомного газа имеем (Клаузиус, 1857 г.)

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} = \frac{5}{3} = 1,667,$$

что хорошо согласуется с опытом, особенно для инертных газов.

Многоатомные молекулы обладают, кроме трех поступательных, еще и вращательными и колебательными степенями свободы, к которым также переходит некоторая доля энергии, сообщаемой газу. Существует общая теорема, называемая *теоремой равнораспределения* (Клаузиус, 1857 г.; Максвелл, 1860 г.), которая утверждает, что теплоемкость равна произ-



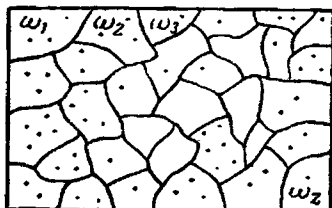
ведению числа степеней свободы на  $k/2$  (если расчет относить к одной молекуле) или на  $R/2$  (если рассматривать 1 моль вещества). Например, если считать двухатомную молекулу жесткой гантелью, то она будет обладать в конечном счете двумя вращательными степенями свободы; вращением молекулы вокруг линии, соединяющей два атома, при определении числа степеней свободы пренебрегают. Для идеализированных точечных атомов это, очевидно, правомерно; учет же пространственной протяженности атомов приводит к принципиальной трудности, которая устраняется только квантовой теорией (см. гл. VIII, § 2). Итак, в нашем случае имеем  $c_v = 5/2 R$ ,  $c_p = 7/2 R$  и, следовательно,  $\gamma = c_p/c_v = 7/5 = 1,4$ . Эти значения были действительно подтверждены наблюдениями, например на молекулярном кислороде.

### § 6. Закон распределения по энергиям и скоростям

В качестве следующего шага в построении кинетической теории газов мы рассмотрим закон распределения по энергиям и скоростям, в частности вид зависимости введенного выше числа  $n_v$  от скорости. До сих пор мы для достижения своих целей нуждались лишь в небольшом числе простых идей, но теперь нам придется всерьез обратиться к помощи статистических методов теории вероятностей.

Чтобы начать с простого примера, рассмотрим, не заботясь о скорости, вопрос о том, сколько вообще молекул можно в среднем обнаружить в определенном элементе объема  $\omega$ . Точный подсчет этого числа в тот или иной момент времени, даже если не говорить о том, что он принципиально невозможен, был бы бесполезен, так как это число непрерывно изменяется вследствие движения молекул. Поэтому речь может идти только о среднем его значении. Мы найдем это среднее значение следующим образом. Представим, что весь объем содержащего газ сосуда разделен на отдельные ячейки объемом  $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_z$  (для наглядности его можно изобразить на плоскости, фиг. 3), и наугад «бросим» молекулы, считая их как бы маленькими шариками, в эту систему ячеек. Мы обнаружим, что  $n_1$  шариков попали в первую ячейку,  $n_2$  — во вторую и т. д. При повторном испытании числа шариков в различных ячейках окажутся, вернее всего, другими. Повторяя этот опыт очень большое число раз, мы установим, что любое данное распределение, характеризующееся числами  $n_1, n_2, \dots, n_z$ , встречается не единожды, а многократно. В случае, если имеются настоящие шарики и настоящий сосуд с настоящими ячейками, частоту повторения заданного распределения можно найти, про-

ведя большую серию испытаний. Для молекул газа такой опыт практически невыполним; вместо этого следует обратиться к математическому рассуждению частично арифметического характера (касательно чисел  $n_1, n_2, \dots, n_z$ ), частично геометрического (касательно размеров ячеек  $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_z$ ). Таким путем мы найдем математическую вероятность данного распределения. Среди всех возможных различных распределений найдется одно, вероятность которого окажется больше, чем вероятность других, — максимально вероятное распределение. Вследствие очень большого числа молекул в кубическом сантиметре этот максимум будет чрезвычайно острым, так что вероятность любого распределения, заметно отличающегося от



Фиг. 3. Разделение на ячейки с целью определения наиболее вероятного распределения молекул газа.

наиболее вероятного, будет пренебрежимо мала. Поэтому естественно ожидать, что наиболее вероятное распределение характеризует состояние газа в среднем.

Здесь, однако, нужно остановиться на одном принципиальном вопросе. Возникает следующая трудность. Если бы в определенный момент были точно известны положение и скорость каждой молекулы газа, то дальнейшее их движение было бы полностью предопределено, так как в таком случае поведение газа строго детерминировано законами механики и с самого начала как будто бы не подвержено действию никаких вероятностных закономерностей. Предположив, что в момент времени  $t=0$  положения и скорости молекул распределены соответственно какому-либо статистическому закону, мы еще не получаем достаточных оснований считать, что в любой последующий момент  $t$  состояние газа будет определяться только игрой вероятностей независимо от выбранного начального состояния. Вполне можно было бы представить себе, что при как-то выбранном начальном состоянии все молекулы, следуя законам механики, соберутся в момент  $t$  в определенном углу ящика. Чтобы статистический подход вообще был возможен, должна с необходимостью отсутствовать взаимосвязь между состояниями в различные моменты времени. Именно, мы должны предположить, что обусловленные законами механики соударения

между молекулами благодаря своему огромному числу полностью стирают «память» о начальном состоянии уже за (макроскопически) короткий промежуток времени. Далее следует отдавать себе отчет в том, что измерение длится какой-то период времени; то, что мы получаем в результате измерения, представляет собой отнюдь не микросостояние в момент  $t$ , но некоторое среднее по значительному промежутку времени. Считают, что найденные таким образом средние по времени не зависят от выбора промежутка времени и совпадают со средними, полученными на основании вероятностных соображений, из определенного выше наиболее вероятного состояния.

Хотя эта так называемая квазиэргодическая гипотеза весьма правдоподобна, ее строгое доказательство наталкивается на огромные трудности. Математики фон Нейман и Биркгоф доказали (1932 г.) теорему, практически эквивалентную квазиэргодической. Правда, согласно новейшим представлениям теоретической физики, проблема строгого доказательства эргодической гипотезы потеряла свое значение, поскольку, как будет выяснено ниже, теперь вообще не имеет смысла говорить о точном положении отдельных молекул<sup>1)</sup>. Повторяем, гипотеза утверждает, что, даже когда начальное состояние произвольно, столкновения молекул друг с другом и со стенкой приводят с течением времени к стационарному состоянию и что это состояние совпадает с определенным выше наиболее вероятным состоянием. Предполагается, что стенки ящика «шероховаты», так что они не отражают идеально.

Вернемся теперь к вопросу о наиболее вероятном распределении молекул по отдельным ячейкам ящика. Всякое конкретное распределение определяется заданием чисел заполнения во всех различных ячейках  $n_1, n_2, \dots, n_z$ ; сумма этих чисел, конечно, должна равняться числу молекул газа в ящике

$$n_1 + n_2 + \dots + n_z = n.$$

Обозначим отношение объема  $\omega_k$  ячейки ко всему объему ящика  $\omega$  через  $g_k$ :

$$g_k = \frac{\omega_k}{\omega},$$

тогда

$$g_1 + g_2 + \dots + g_z = 1.$$

<sup>1)</sup> Это утверждение слишком решительно. Хотя для квантовомеханической системы и нельзя точно задать начальное состояние заданием координат и импульсов всех частиц, можно тем не менее точно задать его волновую функцию. Работы фон Неймана по эргодической теореме в квантовой механике подробно изложены в его книге «Математические основы квантовой механики» (М., 1964 г.), — Прим. ред.

Как часто будет осуществляться одно конкретное распределение? Сразу ясно, что то же самое распределение получится, если поменять местами отдельные молекулы; число таких перестановок равно  $n!$ . Однако сюда войдут и те случаи, когда меняются местами молекулы внутри одной ячейки. Поскольку такие перестановки не приводят к новым способам реализации рассматриваемого распределения, мы должны разделить  $n!$  на число  $n_1!$  перестановок в первой ячейке, число  $n_2!$  перестановок во второй и т. д. Таким образом, мы получаем, что всякое распределение можно реализовать

$$\frac{n!}{n_1! n_2! \dots n_z!}$$

различными способами. Чтобы получить его вероятность, необходимо еще умножить это число на априорную вероятность распределения, равную  $g_1^{n_1} g_2^{n_2} \dots g_z^{n_z}$ , так как априорная вероятность того, что частица попадет в первую ячейку, равна  $g_1$ , а для  $n_1$  частиц — соответственно  $g_1^{n_1}$  и т. д. Таким образом, вероятность распределения, заданного числами  $n_1, n_2, \dots$ , оказывается равной

$$W = \frac{n!}{n_1! n_2! \dots n_z!} g_1^{n_1} g_2^{n_2} \dots g_z^{n_z}.$$

Дабы убедиться, что в наших выкладках действительно учтены все возможные способы реализации распределения, нужно найти сумму вероятностей всех возможных распределений; эта сумма, конечно, должна равняться единице, так как одно из распределений осуществляется наверняка. Поэтому образуем сумму по всем распределениям  $n_1, n_2, \dots$ , для которых  $n_1 + n_2 + \dots = n$ . Сумма легко вычисляется по известной формуле для степени полинома, и мы получаем

$$\sum_{n_1, n_2, \dots} \frac{n!}{n_1! n_2! \dots n_z!} g_1^{n_1} g_2^{n_2} \dots g_z^{n_z} = (g_1 + g_2 + \dots + g_z)^n = 1.$$

Преобразуем полученное выше выражение для вероятности избранного распределения, воспользовавшись формулой Стирлинга, которая для больших  $n$  дает

$$\ln n! = n (\ln n - 1).$$

Тогда, логарифмируя выражение для  $W$ , получаем

$$\ln W = \text{const} + n_1 \ln \frac{g_1}{n_1} + n_2 \ln \frac{g_2}{n_2} + \dots$$

Чтобы найти наиболее вероятное распределение, необходимо вычислить максимум величины  $\ln W$  по переменным  $n_1, n_2, \dots$

при дополнительном условии  $n_1 + n_2 + \dots + n_z = n$ . Так как  $n_1, n_2, \dots$  очень велики, с ними можно обращаться как с непрерывными величинами. Используя метод неопределенных множителей Лагранжа, получим уравнения

$$\frac{\partial \ln W}{\partial n_1} = \ln \frac{g_1}{n_1} - 1 = \lambda, \quad \frac{\partial \ln W}{\partial n_2} = \ln \frac{g_2}{n_2} - 1 = \lambda, \dots,$$

определяющие искомый максимум; здесь  $\lambda$  — постоянная, которая находится из условия  $n_1 + n_2 + \dots = n$ . Отсюда следует, что

$$\frac{g_1}{n_1} = \frac{g_2}{n_2} = \dots = e^{\lambda+1} = \text{const},$$

$$n_1 = n g_1 = n \frac{\omega_1}{\omega}, \quad n_2 = n g_2 = n \frac{\omega_2}{\omega}, \dots$$

Значит, числа молекул  $n_1, n_2, \dots$  в отдельных ячейках пропорциональны размерам ячеек, и, следовательно, мы получили во всем ящике *однородное распределение молекул*, причем размеры ячеек вообще не играют никакой роли.

В то время как в случае распределения плотности молекул с самого начала было ясно, что мы получим именно такой ответ, тот же самый метод, примененный к распределению молекул по скоростям, приводит к существенно новому результату. Вычисления в этом случае полностью аналогичны проведенным выше. Мы образуем «пространство скоростей», сопоставив векторам скорости отдельных молекул отрезки прямых, проведенных из некоторой точки как из начала; скорость молекулы будет определяться длиной и направлением отрезка. Будем изучать распределение концов этих отрезков. Как и прежде, проведем разбиение на ячейки и определим число векторов, оканчивающихся в некоторой ячейке. Однако здесь имеется одно существенное отличие от предыдущего случая: появляются *два дополнительных условия*, именно, кроме условия

$$n_1 + n_2 + \dots + n_z = n$$

для полного числа частиц, имеется еще условие

$$n_1 \varepsilon_1 + n_2 \varepsilon_2 + \dots + n_z \varepsilon_z = E$$

для полной энергии газа  $E$ , где  $\varepsilon_l$  обозначает энергию молекулы, вектор скорости которой оканчивается в ячейке  $l$ . Учтя эти два дополнительных условия, получим для максимума вероятности уравнение ( $\lambda$  и  $\beta$  — два лагранжевых множителя)

$$\frac{\partial \ln W}{\partial n_l} = \ln \frac{g_l}{n_l} - 1 = \lambda + \beta \varepsilon_l \quad (l = 1, 2, \dots, z),$$

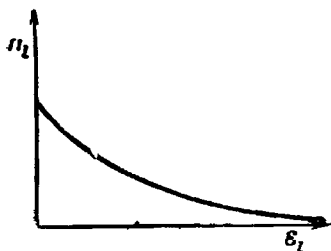
которое приводит к закону распределения Больцмана (1896 г.):

$$n_l = g_l e^{-1-\lambda-\beta \epsilon_l} = g_l A e^{-\beta \epsilon_l}.$$

Здесь  $A$  и  $\beta$  — постоянные, определяемые из двух дополнительных условий. Итак, выражение для числа  $n_l$ , соответствующего ячейке  $l$ , существенным образом зависит как от размеров ячейки  $g_l$ , так и от энергии, связанной с этой ячейкой, причем эта последняя зависимость такова, что среди ячеек одинакового размера менее заполнена та ячейка, чья энергия больше; уменьшение величины  $n_l$  при возрастании энергии происходит по экспоненте (фиг. 4).

Фиг. 4. Распределение Больцмана.

Если размеры ячеек одинаковы, то ячейка с большей энергией менее заполнена, чем ячейка, энергия которой ниже.



Применим теперь *распределение Больцмана* к частному случаю *одноатомного газа*. Здесь энергия дается выражением

$$\epsilon = \frac{m}{2} v^2 = \frac{m}{2} (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2).$$

Положение атома в пространстве скоростей однозначно определяется тремя компонентами скорости  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ . По смыслу самого определения наши ячейки  $g$  конечны. Но с макроскопической точки зрения их можно считать бесконечно малыми; обозначим их объем через  $d\xi d\eta d\zeta$ . Тогда при образовании средних значений можно будет заменить суммы интегралами

$$\sum g_l \dots \rightarrow \int \int \int d\xi d\eta d\zeta \dots,$$

где пределами каждого интеграла будут  $-\infty$  и  $+\infty$ . В дальнейшем мы будем интересоваться только средними значениями величин  $v$ ,  $v^2$ , ... ( $\bar{\xi}$ ,  $\bar{\eta}$  и  $\bar{\zeta}$  исчезают, что ясно из соображений симметрии, а  $\bar{\xi}^2$ ,  $\bar{\eta}^2$ ,  $\bar{\zeta}^2 = 1/3 \bar{v}^2$ ), поэтому подынтегральные выражения в каждом вычисляемом интеграле будут зависеть только от  $v$ , что побуждает нас ввести сферические координаты в пространстве скоростей, приняв  $v$  за радиус. Интегрирование по углам проводится сразу и дает множитель  $4\pi$  — поверхность

единичной сферы. Поэтому

$$\int \int \int d\xi d\eta d\zeta \dots = 4\pi \int_0^{\infty} v^2 dv \dots$$

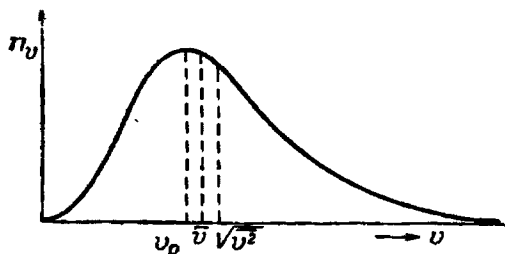
Полное число молекул  $n$  получают из распределения Больцмана, вычисляя интеграл

$$n = 4\pi A \int_0^{\infty} v^2 e^{-\beta/2 m v^2} dv,$$

а полную энергию — вычисляя интеграл

$$E = 4\pi A \int_0^{\infty} \frac{m}{2} v^4 e^{-\beta/2 m v^2} dv.$$

Эти два уравнения однозначно определяют две постоянные  $A$



Фиг. 5. Максвеллово распределение по скоростям.

Указаны наиболее вероятная скорость ( $v_p$ ), средняя скорость ( $\bar{v}$ ) и средняя квадратичная скорость  $\sqrt{\bar{v}^2}$ .

и  $\beta$ , которые до сих пор оставались неизвестными. Интегралы легко берутся (см. приложение 1) и приводят к соотношениям

$$n = A \sqrt{\left(\frac{\pi}{\lambda}\right)^3} \quad \left(\lambda = \frac{\beta m}{2}\right),$$

$$E = \frac{3}{4} m A \sqrt{\frac{\pi^3}{\lambda^3}} = \frac{3}{4} \frac{m n}{\lambda} = \frac{3}{2} \frac{n}{\beta}.$$

Но мы уже видели (§ 4 этой главы), что в среднем кинетическая энергия молекулы (соответственно наличию у нее трех поступательных степеней свободы) составляет  $3/2 kT$ ; поскольку отсюда следует, что кинетическая энергия всего газа равна  $3/2 nkT$ , то мы получаем

$$\beta = \frac{1}{kT}.$$

Итак, постоянные в законе Больцмана выражаются через число молекул газа и их абсолютную температуру.

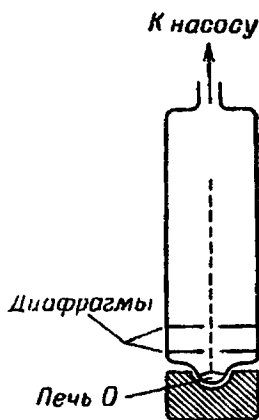
Найдем теперь число молекул, имеющих скорости в интервале от  $v$  до  $v+dv$ . Это число  $n_v dv$ , очевидно, дается подынтегральным выражением в записанном выше интеграле для  $n$ :

$$n_v = 4\pi A e^{-\lambda v^2} v^2 = 4\pi n \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-mv^2/2kT} v^2.$$

Это соотношение известно как *максвеллово распределение молекул по скоростям* (Максвелл, 1860 г.); график зависимости  $n_v$  от  $v$  приведен на фиг. 5.

Чтобы получить представление о порядке величин скоростей, с которыми движутся молекулы газа, можно, пользуясь законом распределения, вычислить наиболее вероятную скорость

Фиг. 6. Схема получения молекулярного пучка. Печь  $O$ , в которой находится газ, подогревается сваружки.



$v_p$ , среднюю скорость  $v$  или другую подобную среднюю величину (см. приложение 1). Например, для наиболее вероятной скорости мы получим

$$v_p = \sqrt{\frac{2RT}{\mu}},$$

так что, скажем, для молекулярного водорода ( $\mu=2$ ) при  $0^\circ\text{C}$  ( $T=273^\circ\text{K}$ )

$$v_p = 15,06 \cdot 10^4 \text{ см/сек.}$$

Экспериментальную проверку распределения Максвелла можно осуществить следующим образом. Пусть газ при определенной температуре  $T$  помещен в печь  $O$ , в стенке которой имеется отверстие, позволяющее молекулам газа вылетать в трубку, откачанную до высокого вакуума (фиг. 6). Вылетающая из отверстия молекула движется в вакууме прямолинейно с той скоростью, которую она имела в момент вылета. С помощью



системы диафрагм из потока молекул, распространяющихся во всех направлениях, можно вырезать *молекулярный луч* (Дюнуайе, 1911 г.). Распределение скоростей в луче (или *пучке*) может быть непосредственно измерено. Для этого существуют различные методы, наиболее важные из которых мы сейчас опишем. Надо только, если мы хотим получить из этого распределения распределение по скоростям в газе, заключенном в замкнутый сосуд, иметь в виду, что в пучке доля быстрых молекул больше, чем в газе. В самом деле, луч образован всеми молекулами, вылетающими из отверстия за единицу времени, и число их (§ 3 этой главы) пропорционально  $n_v dv$ , в то время как в газе число молекул, скорости которых лежат в тех же пределах, составляет  $n_v dv$ . Таким образом, два распределения отличаются друг от друга множителем  $v$ .

Прямой метод измерения скорости в пучке (Штерн, 1920 г.) основан на следующей идее. Пучок, состоящий, к примеру, из атомов серебра, легко обнаружить, поместив на его пути стеклянную пластинку, на которой будет осаждаться серебро. Если теперь прибор вращать вокруг оси, перпендикулярной пучку, то молекулы будут осаждаться не в одной и той же точке, как в случае неподвижной пластинки, а на большем или меньшем расстоянии от этой точки в зависимости от своей скорости, так как за время пролета от печки до пластинки вся трубка, а вместе с ней и пластинки повернутся на некоторый угол. Распределение скоростей в пучке можно непосредственно определить, измерив плотность осадка в зависимости от расстояния до первоначального пятна.

Более современный способ основывается на том же принципе, который применил Физо (1849 г.) для измерения скорости света, — именно на использовании системы вращающихся зубчатых колес. Мы не будем вдаваться в подробности этого метода. Измерения, проведенные в основном Штерном и его учениками, показали, что распределение по скоростям для молекул в замкнутом сосуде действительно удовлетворяет закону Максвелла.

В другом методе используется эффект Доплера (1842 г.): когда молекула, в состоянии покоя излучающая свет некоторой частоты  $\nu_0$ , движется в направлении к наблюдателю с относительной скоростью  $v_r$ , частота света, принимаемого наблюдателем, оказывается смещенной в сторону высоких частот, именно равной  $\nu_0(1 + v_r/c)$ ; при движении молекулы в противоположном направлении соответствующий коэффициент равен  $(1 - v_r/c)$ . Непосредственное подтверждение этого эффекта дал Штарк (1905 г.) при помощи *каналовых лучей* (гл. II, § 2), т. е. пучка быстрых положительных ионов водорода. В спектре

излучения светящегося газа присутствует не только основная частота  $\nu_0$ , но и все другие частоты, получающиеся из  $\nu_0$  вследствие эффекта Допплера, вызванного движением молекул. При этом интенсивность излучения на определенной частоте пропорциональна числу молекул, имеющих одно и то же значение компоненты скорости в направлении к наблюдателю. Поэтому каждая спектральная линия имеет конечную ширину, а распределение интенсивности в пределах одной линии непосредственно иллюстрирует максвеллово распределение.

### § 7. Длина свободного пробега

Мы говорили выше о молекулярном луче. Он состоит из молекул, которые прошли через систему диафрагм и пролетают узким пучком в откачанной трубке. При этом необходимым условием является *высокий вакуум*. Если, однако, в трубке все же остались частицы газа (из тех же или каких-либо других молекул), то часть молекул пучка — большая или меньшая в зависимости от давления — будет сталкиваться с молекулами газа и в результате рассеиваться. Соответственно молекулярный пучок по мере увеличения пройденного пути будет ослабевать, причем ясно, что по экспоненциальному закону, так как число актов рассеяния пропорционально числу молекул в пучке. Поэтому если обозначить через  $n(s)$  число молекул пучка, которые, пройдя путь  $s$  от отверстия в печи, пересекают за единицу времени плоскость, перпендикулярную к направлению пучка, то мы получим зависимость вида

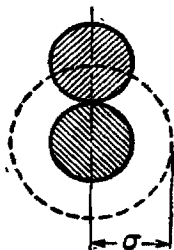
$$n(s) = n(0) e^{-s/l}.$$

Здесь  $l$  — величина, имеющая размерность длины (ее определение будет дано ниже). Простое рассуждение показывает, что эта величина равна длине пути, который в среднем проходит молекула пучка, прежде чем столкнуться с молекулой окружающего газа. В самом деле, положив  $1/l = \beta$ , получим для этого среднего пути

$$\begin{aligned} \bar{s} &= \frac{\int_0^{\infty} sn(s) ds}{\int_0^{\infty} n(s) ds} = \frac{\int_0^{\infty} se^{-\beta s} ds}{\int_0^{\infty} e^{-\beta s} ds} = \\ &= -\frac{d}{d\beta} \left( \ln \int_0^{\infty} e^{-\beta s} ds \right) = -\frac{d}{d\beta} \left( \ln \frac{1}{\beta} \right) = \frac{d}{d\beta} (\ln \beta) = \frac{1}{\beta} = l. \end{aligned}$$

Поэтому мы назовем  $l$  *средней длиной свободного пробега* для пучка молекул в газе (Клаузиус, 1858 г.). Борн и Борман (1921 г.) показали, как можно найти эту величину, основываясь на том, что она, по определению, фигурирует в экспоненциальном законе. Они предложили измерять уменьшение интенсивности пучка атомов серебра по мере прохождения пучка сквозь покоящийся газ (воздух). Более важен, однако, случай, когда и пучок, и газ состоят из одинаковых молекул. Тогда средняя длина свободного пробега является характеристикой самого газа.

В вопросе о величинах, от которых зависит средняя длина свободного пробега, можно разобраться теоретически. Ясно, что она определяется числом соударений, испытываемых данной молекулой при движении в газе. Остальные молекулы газа



Фиг. 7. Эффективное газокинетическое сечение рассеяния.

При столкновении центры масс двух одинаковых молекул не могут сблизиться больше чем на расстояние  $\sigma$  ( $\sigma$  равно диаметру молекулы).

можно считать неподвижными — результат от этого практически не изменится. Допустим, что каждая молекула представляет собой шарик диаметра  $\sigma$ , и выясним, сколько соударений испытывает такой шарик, двигаясь в газе, состоящем из таких же, но неподвижных шариков. Так как соударение происходит каждый раз, когда центр движущейся молекулы приближается к центру неподвижной на расстояние меньше  $\sigma$ , то число соударений можно найти, рассматривая движение точки через систему покоящихся шаров, для которых  $\sigma$  — радиус, а не диаметр (фиг. 7). Таким образом, мы пришли к той же задаче, какую решает стреляющий из ружья в лесу человек, пожелав узнать, сколько деревьев заденет его пуля. Ясно, что это число пропорционально толщине каждого отдельного дерева и количеству деревьев на единице площади. Ясно также, что величина, обратная числу задетых деревьев, определяет среднюю дальность полета пули. Так же и в случае газа — число соударений должно быть пропорционально количеству  $n$  молекул газа в единице объема и их (газокинетическому) эффективному сечению  $\pi\sigma^2$ . Поскольку средняя длина свободного пробега обратно пропорциональна этому числу соударений, то она прямо про-

порциональна величине

$$\frac{1}{\pi l \sigma^2} = \frac{V}{\pi N_0 \sigma^2},$$

где  $V$  — объем одного моля газа.

Поэтому измерение средней длины свободного пробега  $l$  позволяет судить о величине произведения  $N_0 \sigma^2$ . Прямой метод определения  $l$  (для пучка чужеродных молекул) уже был описан выше. Из косвенных методов необходимо прежде всего отметить метод, предложенный Максвеллом (1860 г.) и основанный на явлении теплопроводности в газе (см. приложение 2, стр. 366). Если бы молекулы газа не сталкивались друг с другом, то повышение температуры в какой-либо части объема газа (т. е. увеличение кинетической энергии частиц) распространялось бы в газе с той огромной скоростью, с которой движутся его молекулы, скажем порядка тысячи метров в секунду. Но, как показывает эксперимент, газы — сравнительно плохие проводники тепла. Причина состоит в том, что молекула может пролететь в газе лишь сравнительно небольшое расстояние — порядка длины свободного пробега. Затем она столкнется с другой молекулой и при этом не только изменит направление движения, но и передаст другой молекуле часть своей энергии. Другие методы определения  $l$  основаны на изучении *вязкости* и *диффузии* (см. приложение 2). Последний метод очень удобен для демонстрации в аудитории. Если, например, дать желтовато-зеленому хлору диффундировать в воздухе, то благодаря отчетливой окраске можно непосредственно наблюдать, насколько медленно происходит этот процесс.

Суммируя результаты этих экспериментов, приведем порядки величин длины свободного пробега при некоторых значениях давления: при 760 мм рт. ст. (1 атм)  $l \sim 10^{-6}$  см; при  $10^{-4}$  мм рт. ст. (что соответствует обычному давлению в рентгеновских установках)  $l \sim 10$  см.

## § 8. Определение числа Авогадро

Уже отмечалось, что если известна длина свободного пробега, то известна и величина произведения  $N_0 \sigma^2$ , т. е. произведения квадрата диаметра молекулы на число Авогадро. Для определения  $\sigma$  и  $N_0$  в отдельности необходимо знать второе соотношение между ними. Такое соотношение, по крайней мере для порядков величин, дает нам величина *молярного объема* твердого тела. Разумно предположить, что в твердом состоянии молекулы тела упакованы наиболее плотно, так что объем, занимаемый одним молекул, с точностью до множителя порядка

единицы равен произведению молекул в одном моле на объем, занимаемый одной молекулой, т. е.  $N_0\sigma^3$ . Зная  $N_0\sigma^2$  и  $N_0\sigma^3$ , уже можно определить  $N_0$  и  $\sigma$ :

$$N_0 \sim 10^{23} \text{ моль}^{-1}, \quad \sigma \sim 10^{-8} \text{ см.}$$

Больше того, влияние «собственного объема» молекул сказывается не только в наиболее конденсированной фазе (твердое тело), но даже и в газообразном состоянии — в отклонениях от уравнения состояния идеального газа

$$pV = RT.$$

Так, если объем  $V$  некоторой массы газа уменьшается настолько, что собственный объем молекул уже сравним с  $V$ , то свободный, не занятый самими молекулами объем оказывается заметно меньше  $V$ , и мы получим уравнение состояния

$$p(V - b) = RT.$$

Точное вычисление показывает, что  $b$  равно учетверенному собственному объему молекул (для сферических частиц диаметра  $\sigma$

$$b = 4N_0 \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\sigma}{2}\right)^3 = \frac{2\pi}{3} N_0\sigma^3,$$

см. приложение 3). Однако в плотных газах имеются и другие отклонения от уравнения состояния идеального газа, порождаемые сцеплением молекул и приводящие к тому, что давление при данных  $T$  и  $V$  оказывается меньше вычисленного по формуле  $pV = RT$ . Для учета этих факторов было предложено много различных уравнений состояния — наиболее известно из них уравнение Ван-дер-Ваальса (1881 г.):

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT.$$

Для нас здесь особенно важно то, что, определив константу  $b$ , мы снова получим произведение  $N_0\sigma^3$ . Мы еще вернемся к вопросу о величине  $a$ , характеризующей сцепление молекул (гл. IX, § 6; приложение 39).

Конечно, приведенный выше способ расчета числа Авогадро довольно груб. Более точный метод связан с рассмотрением флуктуаций. Если взять 1 см<sup>3</sup> газа, то в нем будет находиться ровно столько молекул, сколько в любом другом кубическом сантиметре газа, — например, при комнатной температуре около  $10^{19}$ ; для таких больших чисел разница в несколько сотен молекул, конечно, не играет роли. Другое дело, если мы перейдем к меньшим объемам — в кубе со стороной 0,1 мк (1 мк = 1 микрон =  $10^{-3}$  мм) находится в среднем только  $10^4$  молекул; ясно,

что отклонение от этой величины на несколько сотен молекул будет иметь относительно большое значение. Переходя к еще меньшим областям, мы в конце концов достигнем объемов, содержащих одну-две молекулы или совсем ни одной. Следовательно, чем меньше число рассматриваемых частиц, тем большую роль будут играть флуктуации (приложение 4).

Пример таких флуктуаций дает *броуновское движение* (Броун, 1828 г.), наблюдаемое на микроскопических частицах (например, коллоидные растворы или дым в воздухе). Макроскопически броуновское движение обнаруживает себя в колебаниях зеркала, подвешенного на тонкой проволоке, а также при *осаждении взвесей*, когда коллоидные частицы под действием силы тяжести стремятся опуститься на дно сосуда, но столкновения с частицами растворителя принуждают их подниматься, что приводит к распределению плотности взвеси, имеющему тот же характер, что и распределение плотности воздуха в атмосфере, описываемое барометрической формулой (Перрен, 1908 г.). Третьим примером может служить *рассеяние света в атмосфере* (Рэлей, 1871 г.), определяющее цвет неба. Действительно, если бы плотность воздуха была всюду одинакова, то в нем, как и в идеальном кристалле, свет не рассеивался бы: волны, рассеянные отдельными молекулами, взаимно погасались бы при интерференции, и небо выглядело бы черным. Рассеяние возможно только тогда, когда в распределении есть неоднородности, т. е. флуктуации плотности; более того, эти флуктуации должны быть к тому же настолько резкими, чтобы ощущаться на расстояниях порядка длины волны. Так как флуктуации в малых объемах сказываются сильнее, короткие (голубые) волны рассеиваются сильнее, чем длинные (красные) волны; поэтому небо выглядит голубым (Смолуховский, 1908 г.).

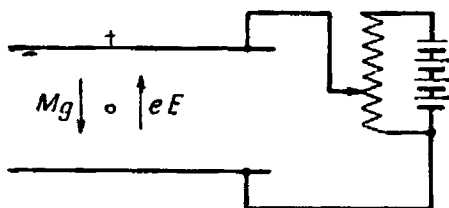
Значительно более точный метод определения числа  $N_0$  связан связи  $N_0$  с *элементарным электрическим зарядом  $e$*  и *постоянной Фарадея  $F$* . Эта связь следует из основного закона электролиза, открытого Фарадеем (1833 г.): при электролитическом выделении 1 моля любого вещества переносится количество электричества, равное 96 520 кулон, т. е.

$$eN_0 = F = 96\,520 \text{ кулон.}$$

Очевидно, что если переносимый каждым ионом заряд кратен элементарному заряду  $e$ , то все перенесенное количество электричества равно произведению  $e$  на число атомов. Поэтому, зная  $e$ , можно найти  $N_0$  или  $m_{\text{H}} = 1/N_0$ .

Метод определения  $e$  предложили Эренгафт (1909 г.) и Милликен (1910 г.), а Милликен развил этот метод, достигнув очень высокой точности. Если электричество действительно состоит

из элементарных квантов, то полный заряд тела должен быть кратен элементарному заряду  $e$ . Конечно, из-за малости  $e$  трудно проверить это на опытах с макроскопическими заряженными телами. Такие опыты подают весьма слабые надежды на успех до тех пор, пока весь заряд не будет состоять лишь из небольшого числа элементарных. Как раз эта возможность и реализуется в капельном методе Миллиkena (фиг. 8). Заряд капли масла можно определить с достаточной точностью, поместив ее в поле между пластинами конденсатора, силовые линии которого направлены вертикально вверх. Тогда на каплю будут действовать две противоположно направленные силы: электростатическая сила, направленная вверх, и сила тяжести,



Фиг. 8. Конденсатор в методе определения элементарного заряда  $e$  по Милликену. Вес  $Mg$  компенсируется электрическим полем  $E$ .

направленная вниз. Равновесие капли достигается в случае, когда приложенная к конденсатору разность потенциалов выбрана так, что

$$eE = Mg,$$

где  $e$  и  $M$  — заряд и масса капли соответственно,  $E$  — напряженность электрического поля, а  $g$  — ускорение силы тяжести. Труднее всего найти массу  $M$ . Ее можно вычислить через плотность и радиус капли, предположив, что плотность масла имеет свое обычное значение. Для определения радиуса выключают электрическое поле, так что капля начинает падать. Если измерить скорость падения, которая постоянна из-за сопротивления окружающей среды, то, подставив эту скорость в формулу Стокса, мы найдем радиус капли. Эксперименты, осуществленные Милликеном и другими, не только подтвердили со всей несомненностью, что заряды капель кратны элементарному заряду  $e$ , но и позволили довольно точно определить значение  $e$ . Упомянем также другие методы определения  $N_0$ , использующие радиоактивные излучения. Можно, например, подсчитать число частиц либо по сцинтилляциям на покрытом сульфидом цинка экране, либо с помощью счетчика Гейгера. Зная массу радио-

активного образца и постоянную распада, можно затем вычислить  $N_0$ .

В дальнейшем был разработан новый точный метод определения  $N_0$  с помощью дифракции рентгеновских лучей (гл. 2, § 3). Оказалось, что существует возможность измерять длину волны на регулярной кристаллической решетке (гл. 4, § 1). Дифракционная картина, полученная на кристалле, позволяет определить постоянную решетки  $a$ , а  $N_0$  тогда находится из известного молярного объема  $N_0 a^3$  (Зигбан, Комптон, 1925 г.). В настоящее время наиболее надежными, по данным Козна, Дюмонда, Лейтона и Реллета (1955 г.), считаются следующие величины  $N_0$  и  $e$ :

$$N_0 = (6,02486 + 0,00016) \cdot 10^{23} \text{ молекул/моль,}$$

$$e = (4,80286 + 0,00009) \cdot 10^{-10} \text{ эл.-ст. ед.}$$

В заключение отметим еще, что постоянную Больцмана, которая по определению равна газовой постоянной  $R$ , деленной на число Авогадро, можно найти и непосредственно, измеряя спектральное распределение интенсивности черного излучения. В функцию, выражающую зависимость интенсивности от частоты и температуры, входят только две универсальные постоянные  $k$  и  $h$ . Первая из них есть постоянная Больцмана, а вторая, называемая постоянной Планка, — это фундаментальная постоянная квантовой теории (гл. 8, § 1).



## ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЧАСТИЦЫ

### § 1. Прохождение электрического тока сквозь разреженные газы

Развитие химии и кинетической теории газов привело — как мы узнали из предыдущей главы — к утверждению той идеи, что вещество состоит из молекул и атомов. Химику эти частицы представляются последними составными частями, из которых построены твердые, жидкие и газообразные тела. Только с ними он имеет дело в любой реакции, осуществляемой чисто химическими методами.

Посмотрим, как ставит вопрос о мельчайших составных частях вещества физик. В его распоряжении имеется большое число других явлений, изучая которые он может получить сведения о строении вещества. Среди этих явлений особую роль играют процессы, сопровождающие прохождение электрического тока через разреженные газы.

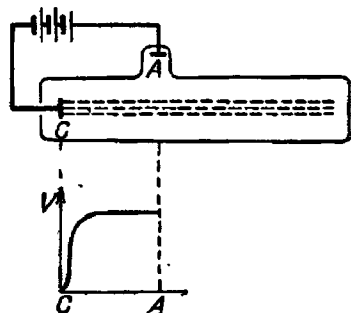
При нормальных условиях газ в общем плохой проводник электричества. Однако поместим газ в трубку с двумя электродами, к которым приложено достаточно высокое напряжение. Тогда при давлениях порядка нескольких *мм рт. ст.* возникает перенос электричества через газ, что обнаруживает себя в виде тока в проводах, подведенных к электродам; одновременно в газе появляется яркое свечение. С теоретической точки зрения последнее явление довольно сложно. Между тем оно нашло разностороннее применение в практике, особенно в так называемых гейслеровских трубках, широко используемых для световой рекламы.

При дальнейшем понижении давления газа в трубке (ниже *0,1 мм рт. ст.*) свечение почти полностью исчезает. Однако при еще более низких давлениях (ниже  $10^{-3}$  *мм рт. ст.*) появляются лучи, исходящие из катода и вызывающие флуоресценцию на противоположной стенке стеклянной трубки. При определенных условиях эти лучи можно видеть непосредственно. Они тянутся голубоватой нитью от катода к катоду через всю трубку. Их называют *катодными лучами* (фиг. 9).

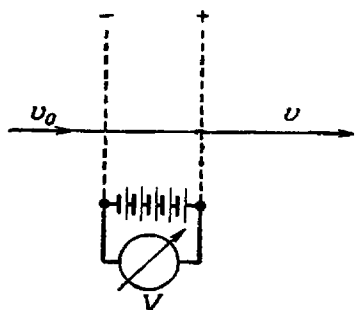
Свойства катодных лучей можно установить следующим образом (Плюккер, 1858 г.; Хитторф, 1869 г.; Дж. Дж. Томсон, 1894 г.). Если на их пути поместить какое-либо тело, то оно будет отбрасывать тень на флуоресцирующем участке стекла. Взаимное расположение катода, тела и его тени показывает,

Фиг. 9. Возникновение катодных лучей.

Лучи, исходящие из катода *C*, можно наблюдать в виде голубоватой нити, если давление газа в трубке не слишком мало. *A* — анод. Прямолинейное распространение лучей от катода вызвано тем, что потенциал между *C* и *A* растет от *C* к *A* неравномерно из-за присутствия в трубке небольших остатков газа (пространственного заряда). Практически потенциал достигает максимума в непосредственной близости от катода. (График потенциала изображен в нижней части чертежа.) Слабое перемещение положительных ионов замыкает ток.



что лучи, создающие теневое изображение, *распространяются прямолинейно*. Кроме того, оказывается, что это излучение всегда сопровождается переносом электрического заряда вдоль трубки. Более того, можно вызвать отклонение их траектории от прямолинейной с помощью внешнего электрического или



Фиг. 10. Ускорение электронов электрическим полем.

Увеличение кинетической энергии равно падению потенциала, умноженному на заряд  $-e$  электрона.

магнитного поля, причем из характера этого отклонения следует вывод, что лучи состоят из быстро летящих *отрицательно заряженных частиц*. Частицы эти названы *электронами*.

Можно определить также скорость и удельный заряд (т. е. отношение заряда к массе  $e/m$ ) этих частиц. Если на пути лучей перпендикулярно их направлению поместить две проволочные сетки (фиг. 10) и приложить к ним разность потенциалов  $V$ , то возникающее между сетками *продольное электрическое поле* будет либо ускорять, либо замедлять электроны. Изменение скорости электронов, обусловленное этим полем, опреде-

ляется из закона сохранения энергии. Пусть  $v_0$  — скорость электрона до прохождения через поле, а  $y$  — скорость после этого. В случае, когда направление поля противоположно направлению скорости электронов (так что поле ускоряет отрицательно заряженные электроны), имеем

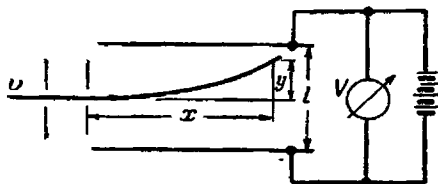
$$\frac{m}{2} v_0^2 = \frac{m}{2} v^2 + eV.$$

Если начальная скорость мала, то можно положить  $v_0 \sim 0$ ; тогда

$$\frac{m}{2} v^2 = -eV.$$

Отсюда по известному  $V$  находится величина  $(m/e)v^2$ .

Ту же величину можно найти по отклонению в поперечном электрическом поле (фиг. 11). Если параллельно направлению



Фиг. 11. Отклонение электронов в поперечном электрическом поле (между пластинами конденсатора).

Траектория представляет собой параболу (траекторию снаряда).

лучей расположить две пластины конденсатора, раздвинутые на расстояние  $l$ , и приложить к пластинам разность потенциалов  $V$ , то на электроны будет действовать постоянная отклоняющая сила  $eV/l$ , перпендикулярная первоначальному направлению их движения. При этом электроны полетят по параболе, определяемой уравнениями

$$x = v_0 t, \quad y = \frac{g}{2} t^2,$$

где  $v_0$  — начальная скорость электронов, а

$$g = \frac{e}{m} \frac{V}{l}$$

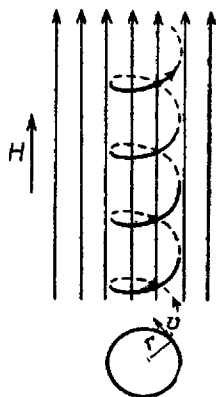
— их ускорение в поле. Исключая время  $t$ , найдем

$$y = \frac{e}{2m} \frac{V}{l} \frac{x^2}{v_0^2}, \quad \text{или} \quad \frac{m}{e} v_0^2 = \frac{V}{l} \frac{x^2}{2y}.$$

Измерив отклонение луча  $y$  на пути  $x$ , мы вновь получаем возможность определить величину  $(m/e)v_0^2$ .

На заряд  $e$ , движущийся в магнитном поле  $H$ , действует, как известно, сила, перпендикулярная и к направлению поля, и к направлению скорости. Величина этой так называемой силы

Лоренца равна  $e(v/c)H$ , умноженному на синус угла между направлениями скорости и поля ( $c=300\,000$  км/сек есть скорость света). Электрон при этом движется по спирали, ось которой параллельна полю (фиг. 12). В частном случае, когда параллельная полю составляющая скорости исчезает, спираль вырождается в окружность, плоскость которой перпендикулярна



Фиг. 12. Движение электрона в постоянном магнитном поле  $H$ .

Вообще говоря, траектория представляет собой спираль, ось которой параллельна полю; в частном случае, когда электрон движется под прямым углом к  $H$ , его траектория — окружность.

полю. Легко вычислить радиус этой окружности. Сила Лоренца  $e(v/c)H$ , направленная к центру окружности, очевидно, должна быть равна центробежной силе  $mv^2/r$ , так что

$$e \frac{v}{c} H = \frac{mv^2}{r}, \text{ или } \frac{m}{e} v = \frac{Hr}{c}.$$

Следовательно, измерение радиуса  $r$  и напряженности магнитного поля  $H$  позволяет вычислить величину  $(m/e)v$ .

Итак, мы пришли к следующему результату: измерение отклонения в электрическом поле дает величину  $(m/e)v^2$ , а измерение отклонения в магнитном поле — величину  $(m/e)v$ . Отсюда можно найти  $e/m$  и  $v$ . Практические измерения обнаружили, что с увеличением разности потенциалов в трубке скорость электронов может достигать почти скорости света.

Точные же опыты по измерению  $e/m$  показали, что величина этого удельного заряда не строго постоянна, но в некоторой мере зависит от скорости электронов (Кауфман, 1897 г.). Этот эффект объясняет теория относительности (приложение 5). Согласно Эйнштейну (1905 г.), величина заряда  $e$  неизменна, масса же электрона меняется, причем ее величина зависит от скорости электрона относительно наблюдателя. Величина массы электрона равна  $m_0$  — его «массе покоя», если он покоится относительно наблюдателя; при движении со скоростью  $v$  отно-

сительно наблюдателя электрон ведет себя (например, в силовом поле) так, как если бы он обладал массой

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

Это утверждение теории можно проверить в опытах по отклонению катодных лучей; такие опыты полностью подтверждают его (гл. III, § 1).

Результат, полученный в таких опытах для предельного значения  $e/m_0$ , т. е. для удельного заряда, приведенного к нулевой скорости, гласит:

$$\frac{e}{m_0} = 1840F,$$

где  $F$  — число Фарадея (оно определяет количество электричества, переносимое при электролитическом выделении одного моля вещества). Постоянная Фарадея связана с массой  $m_H$  атома водорода (см. гл. I, § 8):

$$F = \frac{e}{m_H}.$$

Отсюда для массы покоя электрона следует соотношение

$$m_0 = \frac{m_H}{1840} = 9,1 \cdot 10^{-28} \text{ г.}$$

## § 2. Каналовые и анодные (положительно заряженные) лучи

Мы познакомились с отрицательно заряженными частицами на примере катодных лучей. Возможно ли тем же путем, каким были получены катодные лучи, создать лучи, заряженные положительно? Ответ на этот вопрос дал Гольдштейн (1886 г.), которому удалось получить такие лучи следующим способом. Если сохранить в разрядной трубке небольшое количество газа, то электроны на своем пути от катода к аноду будут сталкиваться с молекулами остаточного газа и ионизировать их. Образовавшиеся ионы, будучи положительно заряженными, увлекаются к катоду приложенным к разрядной трубке напряжением. Эти ионы наталкиваются на катод и застревают в нем, если в катоде не высверлить, как это сделал Гольдштейн, каналы, позволяющие ионам свободно пролетать сквозь катод (фиг. 13). Полученные таким образом лучи названы *каналовыми лучами*. Описанная интерпретация свечения в разрядной трубке подтверждена наблюдениями Штарка, изучавшего эф-

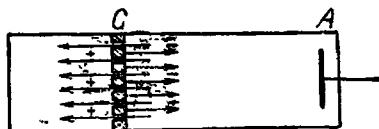
фekt Дoпплера на испускаемом каналoвыми лучами свете (гл. I, § 6).

При определенных условиях анод также испускает положительно заряженные лучи. В этом случае они состоят из ионов, вырванных из атомной решетки анода; такие лучи названы *анодными лучами*.

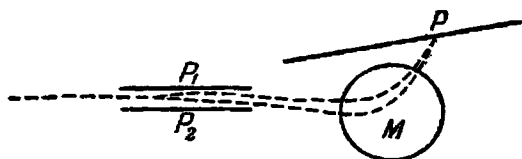
Свойства этих «положительных лучей» можно изучить методами, аналогичными тем, которые использовались при изучении катодных лучей. Значения удельного заряда положительно

Фиг. 13. Возникновение каналoвых лучей.

Образовавшиеся перед катодом положительные ионы увлекаются к катоду и проходят сквозь каналы, просверленные в нем.



заряженных частиц, найденные в опытах по отклонению, имеют порядок числа Фарадея  $F$ . Таким образом, здесь мы имеем дело с однократно или многократно заряженными атомами или молекулами (ионами); для масс ионов получаются те же отношения, какие нашли химики своими методами.



Фиг. 14. Схема масс-спектрографа Астона.

Положительный луч отклоняется сначала вниз в электрическом поле (между пластинами конденсатора  $P_1$  и  $P_2$ ), а затем вверх в магнитном поле (изображена катушка электромагнита  $M$ ). Подходящим образом подобрав размеры и взаимное расположение частей прибора, можно гарантировать (как показали Астон и Фаулер), что положительные частицы с одинаковым отношением  $e/m$ , но произвольными скоростями фокусируются в одной и той же точке  $P$  фотопластинки. На фотопластинке получается спектр масс; примеры изображены на фото 2.

Для точного определения удельного заряда Дж. Дж. Томсон построил прибор, в котором ионы отклоняются электрическим и параллельным ему магнитным полем. Если перпендикулярно первоначальному направлению лучей поместить фотопластинку, то изображение на ней будет иметь вид семейства парабол (фото 1). Как показывает простое вычисление (§ 1 этой главы), точки, соответствующие частицам с одним и тем же значением  $e/m$ , ложатся на одну и ту же параболу, причем отдельные точки параболы соответствуют различным скоростям частиц так, что следы частиц с меньшими скоростями (поэтому легче отклоняемых) расположены дальше от ее вершины. Так

как каждому значению  $e/m$  отвечает своя парабола, то по положению отдельных парабол легко определить удельные заряды ионов, содержащихся в луче, а тем самым и их массы (поскольку нам известны уже их заряды, кратные, конечно, элементарному заряду).

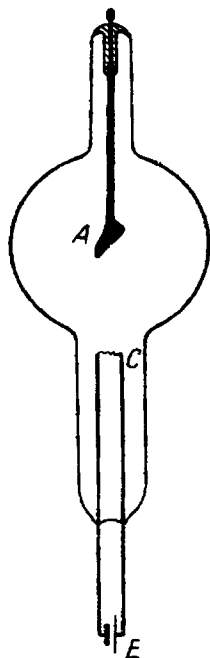
«Масс-спектрограф» Астона (его устройство показано на фиг. 14, а получаемые спектры масс — на фото 2) позволяет определять непосредственно массы. Очевидно, преимущество этого метода перед химическими заключается в том, что здесь измеряется масса отдельного иона, в то время как химик всегда измеряет лишь среднюю массу очень большого числа частиц. Ниже мы вернемся к этому вопросу (§ 5 этой главы).

### § 3. Рентгеновские лучи

В 1895 году Рентген открыл лучи нового типа, обладающие невиданной проникающей способностью. Многие до сих пор помнят, какую сенсацию вызвала первая опубликованная фотография скелета живого существа. Надежды, возникшие тогда у медиков, во многом оправдались. Но и в физике это открытие проложило новые пути. С него ведет свое начало физика излучений, столь знаменательная для нашего времени.

Рентгеновские лучи возникают при падении катодных лучей на стеклянную стенку трубки или на специально подобранный антикатод (фиг. 15). Проникающая способность рентгеновских лучей, называемая также жесткостью, возрастает при повышении приложенного к трубке напряжения. Но различные вещества обнаруживают различную степень «прозрачности». Чем выше атомный вес, тем сильнее поглощение, поэтому и возможно получать рентгенограммы костей, в которых содержание атомов металлов значительно выше, чем в прилежащих тканях. Умы физиков долго и безуспешно занимал вопрос, какова природа рентгеновских лучей — корпускулярная или, как и у света, волновая. Опыты по интерференции и дифракции (Уолтер и Поль, 1908 г.), сущность которых мы объясним позднее (гл. IV, § 1), дали лишь один несомненный вывод, именно: если лучи считать волнами, то длина этих волн должна быть значительно меньше, чем волн видимого или ультрафиолетового света. Применяв в качестве разрешающей системы кристалл, фон Лауэ и его сотрудники Фридрих и Книппинг (1912 г.) пришли к окончательному ответу (гл. IV, § 1): рентгеновские лучи представляют собой свет с очень малой длиной волны. Это открытие дало нам один из самых мощных методов исследования структуры вещества (молекул и кристаллов, гл. IV, § 1). В этом

методе наблюдающееся рассеяние рентгеновских лучей интерпретируется как результат интерференции вторичных волн. Замечательно, однако, что другие опыты с теми же самыми рентгеновскими лучами привели к выводам, прямо противополож-



Фиг. 15. Схема рентгеновской трубки.

C — катод, A — анод (антикатод), E — батарея для накала катода.

ным волновой точке зрения. Это заставляет нас приписать свету и корпускулярные свойства (гл. IV, § 5).

#### § 4. Радиоактивные излучения

До сих пор мы занимались только искусственно вызванными излучениями. Но мы знаем, что существуют и испускаемые радиоактивными веществами естественные излучения, которые сопровождаются спонтанными превращениями атомов этих веществ в другие атомы (Беккерель, 1896 г.; Пьер и Мария Кюри, 1898 г.; Резерфорд и Содди, 1902 г.). Мы различаем три типа радиоактивных излучений.

1. **Альфа-лучи.** Опыты по отклонению частиц в поле показали, что в случае  $\alpha$ -лучей мы имеем дело с положительно заряженными частицами, которые гораздо труднее отклонить, чем



катодные лучи. Следовательно, эти частицы должны иметь значительно большую массу, чем электроны. Их удельный заряд соответствовал бы дважды ионизированному атому гелия,  $He^{2+}$ -частице. Указанием на то, что это в самом деле частицы  $He^{2+}$  (атомный вес 4), а не, скажем, однократно заряженные частицы с атомным весом 2, которые обладали бы, конечно, тем же значением удельного заряда, служит выделение гелия радиоактивными веществами (Резерфорд, Рамзей и Содди, 1903 г.). Самым убедительным образом это показали на опыте Резерфорд и Ройдс (1909 г.), которым удалось собрать  $\alpha$ -частицы в откачанный сосуд. Если затем заставить светиться собранный газ, то спектрограф с несомненностью обнаруживает линии гелия.

**2. Бета-лучи.** Опыты по отклонению этих частиц однозначно доказывают, что  $\beta$ -лучи состоят из электронов и отличаются от катодных лучей только тем, что скорости электронов в них выше. В то время как скорости частиц в катодных лучах удается довести лишь до нескольких сотых скорости света, скорости  $\beta$ -частиц меньше скорости света всего на несколько тысячных долей.

Более тщательные исследования обнаружили два вида  $\beta$ -лучей, испускаемых данным радиоактивным элементом. Лучи одного вида обладают непрерывным «спектром скоростей», т. е. содержат электроны со всеми значениями скорости из довольно широкого интервала.

Спектр скоростей другого вида лучей дискретен, т. е. они состоят из отдельных групп электронов с определенным значением скорости в каждой группе.

В § 4 гл. VII мы выясним, что существование второго вида лучей можно считать менее важным, вторичным эффектом. Эти электроны вылетают вовсе не из ядра, которое собственно и характеризует атом (гл. III, § 3), а из окружающей ядро внешней электронной системы. Собственно же ядерные  $\beta$ -лучи, обладающие непрерывным спектром, поставили перед теоретической физикой на первый взгляд неразрешимую проблему. Именно, если ядро атома действительно испускает частицы всех возможных энергий, то оно не может превращаться в единую систему с определенной энергией. Но все эксперименты указывают на то, что остающееся в качестве продукта распада после вылета электрона новое ядро стабильно и, следовательно, обладает определенной энергией. Тогда что же происходит с избытком энергии? Позднее (гл. III, § 4) мы узнаем, что избыточную энергию уносит самая загадочная из частиц — нейтрино

( $\nu^0$ ), которая не имеет ни заряда, ни, вероятно, массы и которую чрезвычайно трудно обнаружить.

3. Гамма-лучи. Установлено, что  $\gamma$ -лучи не отклоняются ни в электрическом, ни в магнитном поле. Здесь мы сталкиваемся со светом очень малой длины волны (ультрарентгеновым излучением).

Основной закон радиоактивных превращений (фон Швейдлер, 1905 г.) утверждает, что число атомов, распадающихся в единицу времени, ( $-dN/dt$ ) пропорционально числу нераспавшихся атомов в данный момент:

$$-dN = \lambda N dt.$$

Множитель  $\lambda$  называется *постоянной радиоактивного распада*; она имеет одну и ту же величину для всех атомов одного сорта. Проинтегрировав равенство, мы получим

$$N = N_0 e^{-\lambda t},$$

где  $N_0$  есть число нераспавшихся атомов в момент  $t=0$ . Можно выразить  $\lambda$  через *период полураспада*  $T$  (он равен времени, за которое распадается половина общего числа атомов). Из равенства  $N_0 e^{-\lambda T} = 1/2 N_0$  мы имеем

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0,6931}{\lambda}.$$

Для радия, например,  $T=1590$  лет, но имеются радиоактивные элементы и с чрезвычайно большими периодами полураспада, — например для тория  $T=1,8 \cdot 10^{10}$  лет — и с чрезвычайно малыми — скажем, для тория  $B'$   $T=10^{-9}$  сек.

Смысл закона радиоактивных превращений состоит в том, что каждый атом обладает одной и той же вероятностью «взорваться». Ясно, что сам закон имеет чисто статистический характер. Последнее обстоятельство имеет два различных подтверждения. Во-первых, обнаружено, что обычными физическими средствами (скажем, действием высоких температур) абсолютно невозможно ускорить или замедлить процесс распада, да и вообще каким-либо образом повлиять на него. Во-вторых, оказалось возможным определить не только среднее число частиц, излучаемых за секунду, но и флуктуации около среднего, причем выяснилось, что флуктуации подчиняются обычным статистическим законам (приложение 4). Радиоактивный распад — это пример процесса, в объяснении которого бессильны идеи классической физики, но с которым успешно справляется современная квантовая теория.

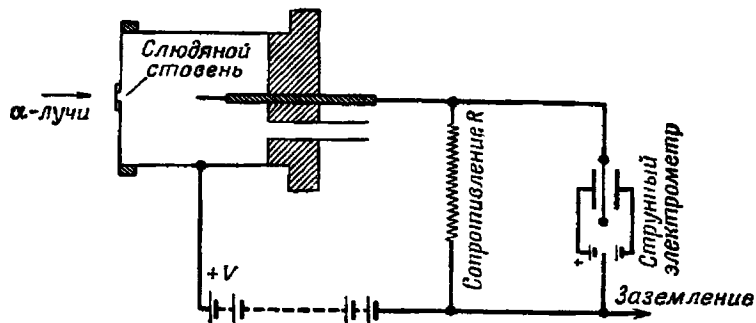
Упомянем теперь еще о нескольких опытах, которые однозначно свидетельствуют о корпускулярной природе  $\alpha$ - и  $\beta$ -лучей.

Мы придаем особое значение тому, что, по-видимому, просто невозможно объяснить эти опыты иначе, как считая эти лучи действительно потоками дискретных частиц. Однако в следующей главе мы обсудим ряд других опытов с теми же самыми лучами, которые, по-видимому, столь же неопровержимо свидетельствуют о том, что эти лучи представляют собой волновой процесс.

Начнем со *сцинтилляционных явлений* (Крукс, 1903 г.), о которых уже упоминалось в конце предыдущей главы в связи с методами определения числа Авогадро. Если вблизи радиоактивного препарата поместить флуоресцирующий экран, то на экране то здесь, то там наблюдаются вспышки света. Имея часы со «светящимся» циферблатом и увеличительное стекло, читатель может и сам увидеть такие вспышки. Светящаяся поверхность состоит из слоя радиоактивного материала, покрытого цинковой обманкой. Когда на нее падает излучение, появляется светящееся пятно. Это явление заставляет нас предположить, что  $\alpha$ -излучение, подобно дроби, состоит из отдельных частиц и что флуоресцирующий экран светится только там, куда попала частица. Явление сцинтилляции теперь широко используется для обнаружения и измерения ядерных излучений. На первых порах наблюдателю приходилось просто считать число световых вспышек за определенный промежуток времени. В последнее время световые импульсы преобразуют в электронные ливни с помощью так называемого фотоумножителя. Этот прибор состоит из фотокатода, испускающего электроны, когда на него попадает свет (гл. II, § 3), и электронного умножителя. Вылетевшие из фотокатода электроны ускоряются под действием высокого напряжения и попадают на анод, выбивая из него вторичные электроны, которые в свою очередь устремляются к следующему аноду. Такой процесс продолжается до тех пор, пока электронный ливень не достигнет анода-коллектора. Способ регистрации возникающего таким образом электронного импульса будет описан ниже.

Другой метод регистрации отдельных частиц дает нам второе явное доказательство корпускулярной природы  $\alpha$ - и  $\beta$ -лучей. Частицы регистрируются счетчиком Гейгера (Гейгер, 1913 г.; Гейгер и Мюллер, 1928 г.), основные детали которого — металлическая пластинка и закрепленное против нее металлическое острие (фиг. 16). Эти электроды помещены в наполненный воздухом сосуд. Между пластинкой и острием создается такая максимально допустимая разность потенциалов, что, несмотря на эффект острия, разряд все еще не происходит. Пролетающая в промежутке между электродами  $\alpha$ -частица, сталкиваясь с молекулами воздуха, вызывает их ионизацию. Обра-

зовавшиеся таким образом ионы еще больше ускоряются в сильном поле около острия, вызывая в свою очередь образование других ионов. Этот лавинный процесс размножения первоначальных ионных пар создает заметный импульс тока, вызывая на сопротивлении  $R$  падение напряжения, которое можно обнаружить с помощью электрометра. После такого разряда пластинка и острие снова заряжаются и процесс начинается заново. Каждая пролетающая частица вызывает, таким образом, мгновенный разряд, который можно зарегистрировать с



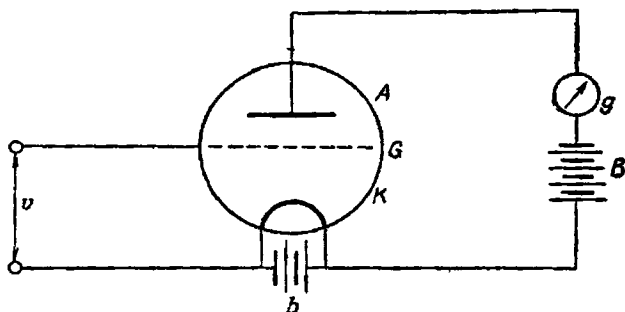
Фиг. 16. Схема счетчика Гейгера для регистрации  $\alpha$ - и  $\beta$ -частиц.

Величина приложенного потенциала ограничена тем условием, что самопроизвольный разряд между острием и стенкой прибора едва-едва не происходит. Попадая в пространство между острием и стенкой, ионизирующая частица вызывает разряд; сопротивление  $R$  ограничивает ток и таким образом гасит разряд. Число разрядов подсчитывается, например, с помощью регистрирующего приспособления (усилитель и телефон), индуктивно связанного со счетчиком по току, или, как на чертеже, с помощью струнного электрометра.

помощью соответствующего устройства. Первоначально для этой цели применялись обычные приборы типа чувствительных струнных электрометров. После изобретения электронных усилителей стало возможным регистрировать разряд, прослушивая его через телефонные наушники или посредством механического счетчика. Техника подсчета электрических импульсов достигла высокого совершенства благодаря широкому применению электронных схем на *электронных лампах*.

Простейший вариант такой лампы (Флеминг, 1904 г.) представляет собой откачанную до высокого вакуума разрядную трубку, вроде изображенной на фиг. 9 (стр. 35). В нее впаяна тонкая проволока, которая при нагревании электрическим током испускает электроны. В дальнейшем мы обсудим явление термоэмиссии с теоретической точки зрения (гл. VIII, § 8). Здесь же достаточно упомянуть, что возникающий в такой трубке электронный ток значителен и зависит в основном от температуры проволоки и лишь в очень малой степени — от

приложенного напряжения. Обычно ток в таком *диоде* (лампе с двумя электродами) течет только в одном направлении. Поэтому можно использовать диод как электронную лампу или как выпрямитель, срезающий один полупериод переменного тока. Значительно шире возможности *триода* (лампы с тремя электродами), изобретенного де Форестом (1907 г.) и значительно усовершенствованного Лэнгмюром (1915 г.). Третий электрод этой лампы, называемый *сеткой*, делается из зигзагообразной проволоки или проволочной решетки и располагается между катодом и анодом (последний обычно имеет форму полого цилиндра, осью которого служит раскаленный катод).



Фиг. 17. Схема триода.

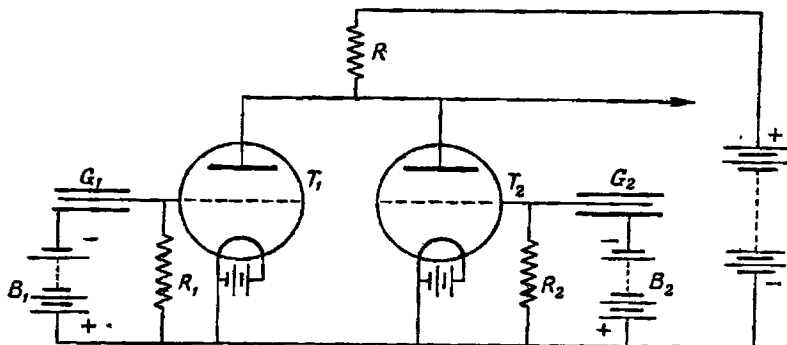
*A* — анод, *K* — катод, подогреваемый батареей *b*, а *G* — сетка. Входной потенциал *v* модулирует (усиливает или ослабляет в соответствии со своим знаком) анодный ток, создаваемый батареей *B* и регистрируемый гальванометром *g*.

Разность потенциалов между катодом и сеткой в зависимости от своего знака либо ускоряет, либо замедляет электроны, испущенные катодом, и таким образом управляет числом электронов, пролетающих сквозь ячейки сетки и достигающих анода. Включив триод в подходящим образом сконструированную схему, можно добиться значительного усиления (фиг. 17), а используя последовательно несколько электронных ламп, — многократно увеличить его. Широко известны применения таких устройств для генерации и приема радиоволн и для других технических надобностей. Однако нас интересуют не эти приложения, а регистрация слабых импульсов.

В проблеме же регистрации импульсов очень важным шагом вперед явилось изобретение *схемы совпадений* (Боте и Кольхёрстер; Росси, 1929 г.), позволившей изучать корреляцию различных фаз атомного явления. В простейшем случае работа двух счетчиков согласована так, что регистрируются только одновременные импульсы в них обоих (фиг. 18). Следовательно

но, устанавливается не только факт существования частицы, но и факт ее появления в двух или более местах (счетчиках) и таким образом грубо определяется ее путь.

Самое впечатляющее доказательство корпускулярной природы радиоактивного излучения дает камера Вильсона (1912 г.). Этот прибор (фиг. 19) позволяет увидеть отдельные частицы непосредственно. Возьмем чистый водяной пар, не содержащий ядер конденсации — частиц пыли и т. п., и резким

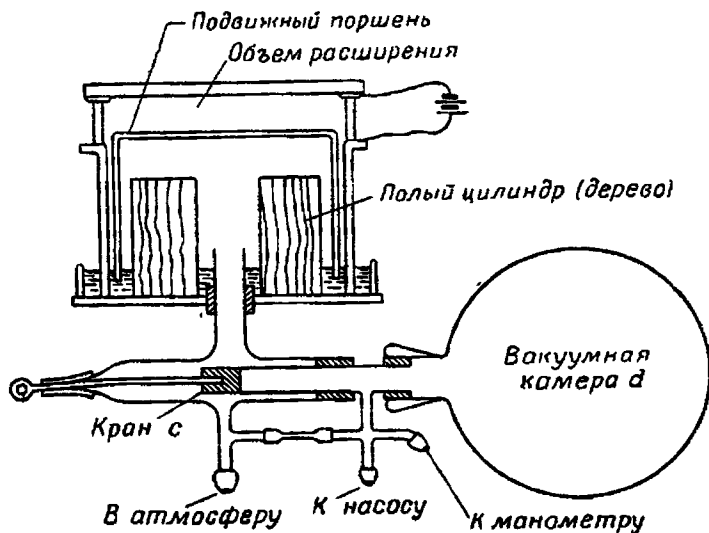


Фиг. 18. Схема совпадений Росси.

Два триода  $T_1$  и  $T_2$  имеют общее анодное сопротивление  $R$  и батарей напряжения  $B$  (около 200 в). Сетки триодов  $T_1$  и  $T_2$  соединены с электродами счетчиков  $G_1$  и  $G_2$ . Батареи  $B_1$  и  $B_2$  через сопротивления  $R_1$  и  $R_2$  поддерживают на счетчиках потенциал около 1000 в. Отрицательный импульс напряжения, создаваемый разрядом в счетчике  $G_1$ , запирает ток через триод  $T_1$ . Если от счетчика  $G_2$  импульса не поступает и  $T_2$  остается открытым, то изменение полного тока через  $R$  будет небольшим, поскольку малое сопротивление триода  $T_2$  включено параллельно большому сопротивлению  $G_1$ . Однако если обе лампы одновременно запираются совпадающими разрядами в счетчиках  $G_1$  и  $G_2$ , то изменение тока через  $R$  будет значительным.

расширением охладим его настолько, чтобы давление оказалось выше давления насыщенных паров при упавшей температуре. Несмотря на это, в отсутствие ядер конденсации такой пар все же не сможет сгуститься в капли: мы получили пересыщенный пар. Пронесаясь через такой пар,  $\alpha$ -частица будет ионизировать молекулы, с которыми сталкивается; образующиеся ионы действуют как ядра конденсации, на которых соседние молекулы пересыщенного пара сгущаются в капли. Таким образом, путь  $\alpha$ -частицы становится зримым в форме цепочки мельчайших водяных капель. Хитроумное устройство позволяет экспериментатору одним действием расширить пар до пересыщения, направить радиоактивный луч в камеру, осветить ее вспышкой света и сделать моментальный фотоснимок. Фотопластинка запечатлевает ряд прямолинейных или ломаных «треков». Треки  $\alpha$ -частиц отличаются от треков  $\beta$ -частиц благодаря большему иони-

зирующему действию первых (и, значит, более интенсивной конденсации): они толще, прямее и менее изломаны, чем треки электронов. Усовершенствование этого метода позволило при известных обстоятельствах распознавать треки не только частиц, испускаемых естественными радиоактивными веществами, но и частиц, возникающих при искусственном расщеплении ядер или вылетающих из ускорителя, например циклотрона.



Фиг. 19. Схема камеры Вильсона.

Открывая кран с и тем самым соединяя объем под поршнем с вакуумной камерой d, можно вызвать внезапное опускание подвижного поршня.

Такая техника позволяет идентифицировать, например, протоны (гл. III, § 6) и даже открывать новые частицы, например мезоны (гл. II, § 8). Узким местом таких исследований была малая частота событий: требовались сотни и тысячи фотографий, чтобы обнаружить один случай явления. Огромным шагом вперед стала синхронизированная со счетчиком камера Вильсона (Блэкетт и Оккиалини, 1937 г.). Установка в этом случае состоит из камеры и двух счетчиков, одного над камерой, другого под нею. Система синхронизирована так, что прибор срабатывает и фотографирование производится только при условии «совпадения», т. е. когда частица действительно пролетает через камеру. Позднее получила распространение диффузионная камера непрерывного действия (Леметр и Валларта, 1936 г.; Нидлс и Нильсон, 1950). Пар в ней непрерывно диффундирует

В направлении сверху вниз через участок, на котором поддерживается вертикальный градиент температуры. Благодаря этому создается зона, в которой пар все время пересыщен, и которая, следовательно, все время находится в готовом к действию состоянии. По-видимому, самым революционным типом камеры за последние годы является *пузырьковая камера*, изобретенная Глейзером (1952 г.). Основной недостаток камер Вильсона состоит в том, что плотность рабочего вещества в них по необходимости мала. Для преодоления этой трудности Глейзер предложил использовать нестабильность перегретой жидкости относительно образования пузырьков пара. Он рассуждал так. При движении ионизирующей частицы в перегретой жидкости в ней появятся ядра «конденсации», которые вызовут образование пузырьков точно так же, как образуются капельки в обычной камере Вильсона. Но зато рабочее вещество наполненной жидкостью пузырьковой камеры будет иметь значительно более высокую плотность.

В настоящее время созданы различные пузырьковые камеры на жидком водороде, оказавшиеся в высшей степени полезными при исследованиях процессов с участием протонов и других частиц.

Другой большой успех был достигнут двумя женщинами-физиками из Вены Блау и Вамбахер (1937 г.), которые открыли фотографический метод регистрации треков частиц. Зерна фотографической эмульсии чувствительны не только к свету, но и к быстрым частицам; если пластинку, подвергнутую действию пучка частиц, проявить и отфиксировать, то под микроскопом можно увидеть треки в виде цепочки темных пятен. Качество изображения сильно зависит от размера зерен эмульсии; созданы эмульсии с очень маленькими и плотными зернами (Ильф-Форд, Кодак).

Треки в эмульсии в несколько тысяч раз короче треков в воздухе вследствие высокой тормозной способности твердого материала; длина треков имеет порядок нескольких микрон. Преимущество этого метода заключается в чрезвычайной простоте, непрерывности действия и большом числе событий, регистрируемых на одной пластинке. С другой стороны, иммерсионные объективы позволяют получать высококачественные изображения и микрофотографии треков. Поскольку глубина резкости таких объективов очень мала, резкие изображения получаются только от небольшого числа треков, так что необходимо делать несколько фотографий при разной фокусировке.

Новый важный метод регистрации и счета очень быстрых электронов опирается на открытие Черенкова (1934 г.), теоретически объясненное Таммом и Франком. Существо дела легче



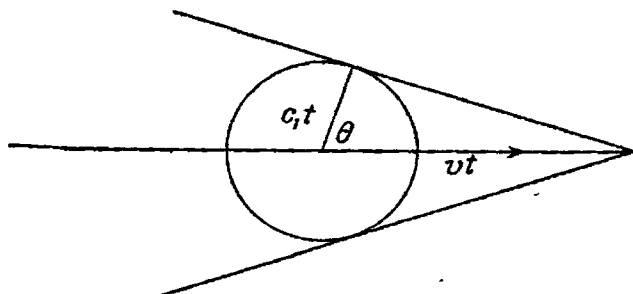
всего понять с помощью акустической аналогии. Пушечный снаряд, двигаясь быстрее звука, порождает конусообразную волну сжатия с вершиной на головке снаряда (фиг. 20). Пусть  $c_1$  — скорость звука,  $v$  — скорость снаряда и  $v > c_1$ . Тогда, как видно из фиг. 20, угол раскрытия конуса  $\theta$  определяется уравнением

$$\cos \theta = \frac{c_1}{v} < 1.$$

Теперь перейдем к случаю световой волны. Скорость света в вакууме равна  $c$ , но его групповая скорость в среде с показателем преломления  $n > 1$  меньше, именно:

$$c_1 = \frac{c}{n} < c.$$

Если электрон движется со скоростью  $v > c_1$ , то по тем же причинам, что и в акустике, около него образуется коническая



Фиг. 20. Коническая головная волна.

волна. В этом и состоит явление, экспериментально обнаруженное Черенковым. Использовать его для регистрации электронов можно, поставив на пути конической волны металлическую пластинку, в которой энергия фотонов преобразуется в электрический ток. Этот ток затем усиливается (фотоумножителем, см. стр. 44). Таким образом получается высокочувствительное устройство для регистрации электронов.

### § 5. Гипотеза Прюта. Изотопия. Протон

Теперь, убедившись в корпускулярном характере испускаемых радиоактивными веществами  $\alpha$ - и  $\beta$ -лучей, мы можем вновь обратиться к поставленной с самого начала проблеме строения атомов и молекул из элементарных составляющих. Еще на заре прошлого века Прют выдвинул гипотезу о том,

что в конечном счете все атомы *сложены из атомов водорода*. Эта гипотеза, однако, была предана забвению, когда химики научились более точно определять атомные веса элементов. Если бы она была верна, вес каждого атома был бы целым кратным атомного веса водорода. Но оказалось, что для большого ряда атомов такая целочисленность не имеет места — яркий пример тому хлор, атомный вес которого в водородных единицах равен 35,5.

Явления, открытые в связи с изучением радиоактивности, привели к предположению, что химические элементы, даже будучи абсолютно чистыми химически, на самом деле представляют собой смесь атомов различных сортов, хотя и одинаковой структуры, но с различной массой. Такие атомы, полностью эквивалентные химически, но с различной массой, называются *изотопами*. Для того чтобы легче понимать дальнейшее, полезно кратко напомнить читателю *периодическую систему элементов* (табл. 1), разработанную Ньюлэндсом (1863 г.), Менделеевым (1870 г.) и Л. Мейером (1870 г.). Химическое поведение данного элемента в большей степени определяется местом, занимаемым им в периодической таблице. Например, щелочные металлы с их сходным химическим поведением расположены в одном вертикальном столбце; точно так же щелочноземельные металлы, тяжелые металлы и, наконец, галогены и инертные (или благородные) газы составляют отдельные столбцы таблицы. Размещение элементов в периодической системе производилось вначале по их атомным весам; теперь, как мы увидим ниже (гл. III, § 3), элементы размещают соответственно их «атомным номерам».

В конце периодической системы располагаются радиоактивные элементы; они также могут быть расставлены в согласии с их химическими свойствами. Метод их выделения в чистом виде и определения химических свойств, примененный впервые супругами Кюри, заключается в следующем: содержащее радиоактивный элемент вещество переводят в раствор и действием различных осаждающих реактивов пытаются выделить радиоактивный элемент в осадок. Затем проверяют активность осадка и оставшегося раствора. При этом по мощности излучения можно судить, перешел ли радиоактивный элемент в осадок, остался он в растворе, или присутствует и там, и там. В последнем случае и раствор, и осадок подвергаются снова тем же процедурам, пока, наконец, один из продуктов не будет свободен от радиации, а другой не обнаружит экспоненциального распада с характерным полупериодом (§ 4 этой главы). Таким образом супруги Кюри (1898 г.) выделили из урановой смоляной руды радий; с самого начала радий в руде сопутствовал

## Краткая периодическая система элементов

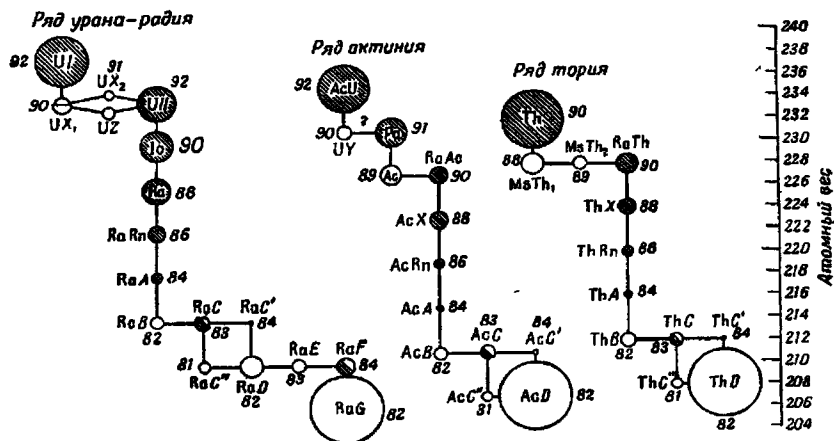
Период	Группа I		Группа II		Группа III		Группа IV		Группа V		Группа VI		Группа VII		Группа VIII		
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	
I														1 H		2 He	
II	3 Li 6,940	4 Be 9,02	5 B 10,82	6 C 12,010	7 N 14,008	8 O 16,0000	9 F 19,00	10 Ne 20,183									
III	11 Na 22,997	12 Mg 24,32	13 Al 26,97	14 Si 28,06	15 P 30,98	16 S 32,066	17 Cl 35,457	18 Ar 39,944									
IV	19 K 39,096	20 Ca 40,08	21 Sc 45,10	22 Ti 47,90	23 V 50,95	24 Cr 52,01	25 Mn 54,93	26 Fe 55,85	27 Co 58,94	28 Ni 58,69							
	29 Cu 63,54	30 Zn 65,38	31 Ga 69,72	32 Ge 72,60	33 As 74,91	34 Se 78,96	35 Br 79,916	36 Kr 83,7									
V	37 Rb 85,48	38 Sr 87,63	39 Y 88,92	40 Zr 91,22	41 Nb 92,91	42 Mo 95,95	43 Tc 99	44 Ru 101,7	45 Rh 102,91	46 Pd 106,7							
	47 Ag 107,880	48 Cd 112,41	49 In 114,76	50 Sn 118,70	51 Sb 121,76	52 Te 127,61	53 I 126,92	54 Xe 131,3									
VI	55 Cs 132,91	56 Ba 137,36	57-71 Редкие земли	72 Hf 178,6	73 Ta 180,88	74 W 183,92	75 Re 186,31	76 Os 190,2	77 Ir 193,1	78 Pt 195,23							
	79 Au 197,2	80 Hg 200,61	81 Tl 204,39	82 Pb 207,21	83 Bi 209,00	84 Po 210	85 At 211	86 Rn 222									
VII	87 Fr 223	88 Ra 226,05	89 Ac 227	90 Th 232,12	91 Pa 231	92 U 238,07	93 Np 237	94 Pu 242	95 Am 241	96 Cm 246	97 Bk 246	98 Cf 249	99 Es 254	100 Fm 256	101 Md 256	102 No 259	103 Lr 260

## Редкие земли

VI	57 La 138,92	58 Ce 140,13	59 Pr 140,92	60 Nd 144,27	61 Pm 147	62 Sm 150,43	63 Eu 152,0	64 Gd 157,25	65 Tb 158,93	66 Dy 162,50	67 Ho 164,93	68 Er 167,26	69 Tm 168,93	70 Yb 173,05	71 Lu 174,967
----	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	--------------	-----------------	----------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	------------------

Числа против символов дают атомные номера, а числа под символами — атомные веса. Двойной стрелкой помечены места, в которых атомные веса и атомные номера не согласуются. Новые элементы обозначены приватными для них символами. Четыре из них заполняют пропуски в прежней периодической системе: это 43 Tc — технеций, 61 Pm — прометий, 65 At — астаин, 87 Fr — франций. Девять других — это трансурановые элементы: 93 Np — нептуний, 94 Pu — плутоний, 95 Am — америций, 96 Cm — курций, 97 Bk — берклий, 98 Cf — калифорний, 99 Es — эйнштейний, 100 Fm — фермий, 101 Mv — менделевий.

барий, который до последней стадии не удалось отделить. Это указывает, что радий принадлежит к группе щелочноземельных металлов, а в периодической системе должен быть помещен в столбце под кальцием и барием. С другой стороны, радон Rn



Фиг. 21. Радиоактивные ряды.

Превращения по вертикалям соответствуют  $\alpha$ -излучению, а по горизонталям —  $\beta$ -излучению; в первом случае атомный вес понижается на 4, а атомный номер — на 2; во втором — атомный вес остается приблизительно тем же, но атомный номер увеличивается на 1. Заштрихованные кружки соответствуют  $\alpha$ -активности, а незаштрихованные —  $\beta$ -активности. Размеры кружков иллюстрируют величины периодов полураспада.

(или «эманация радия») по своему поведению подобен благородному газу и поэтому занимает место под гелием, неоном и т. д. Короткоживущий продукт дальнейшего распада RaA ( $T=3$  мин) оказался химически эквивалентным теллуру, следующий RaB ( $T=27$  мин) походит на свинец и т. д.

Из этих и им подобных результатов был выведен важный закон радиоактивного смещения: получающийся после испускания  $\alpha$ -частицы (потери заряда  $+2e$ ) атом-остаток сдвигается влево на две клетки периодической системы, т. е. в направлении меньших валентностей по водороду. Например, радий, отдав  $\alpha$ -частицу, превращается в радон (эманацию радия). Напротив, испускание  $\beta$ -частицы смещает атом на одну клетку вправо (Рассел, Содди, Фаянс, 1913 г.). Если, согласно этому правилу, построить три радиоактивных ряда (фиг. 21), то многие клетки таблицы Менделеева оказываются занятыми несколькими элементами. Возьмем наиболее яркий пример: согласно закону смещения, в клетку, занятую обычным свинцом, попадают конечные продукты трех радиоактивных рядов, а именно RaG,

$\text{AcD}$  и  $\text{ThD}$ , причем все три, несомненно, обладают теми же свойствами, что и свинец. Кроме них, в ту же клетку попадают  $\text{RaD}$ ,  $\text{AcB}$ ,  $\text{ThB}$  и  $\text{RaB}$ . Вопреки сходному химическому поведению всех этих элементов их массы различны, так как после  $\alpha$ -излучения масса атома уменьшается на массу атома гелия, равную 4, в то время как  $\beta$ -распад оставляет массу атома практически неизменной (ведь масса электрона ничтожно мала). Поэтому три элемента в упомянутом выше ряду радия,  $\text{RaB}$ ,  $\text{RaD}$  и  $\text{RaG}$ , должны обладать массами, последовательно уменьшающимися на 4.

Добавим также следующее: может случиться (например, при каждом  $\beta$ -распаде) так, что два химически различных элемента обладают одинаковым атомным весом. Такие элементы называют *изобарами*.

После открытия изотопов у радиоактивных веществ Дж. Дж. Томсон (1913 г.) сумел на опытах по отклонению канальных лучей обнаружить изотопы и у обычных элементов, например у неона. Обычный хлор, атомный вес которого химики нашли равным 35,5, состоит из атомов двух сортов с атомными весами 35 и 37. Эти исследования были доведены до высокого совершенства на уже упоминавшемся (§ 2 этой главы) масс-спектрографе Астона (1919 г.). Его метод определения атомных весов и по сей день остается наиболее точным (Астон, Демпстер, 1918 г.; Бэйнбридж, 1930 г.; Маттаух, 1937 г.; Нир, 1951 г.).

С помощью магнитного разделения канальных лучей оказалось даже возможным получить заметные количества разделенных изотопов лития с атомными весами 6 и 7 (Олифант, Шир и Краутэр, 1934 г.). Сейчас такой метод широко используется для разделения двух изотопов урана с атомными весами 235 и 238 (гл. VII, § 6).

Частичное разделение изотопов можно осуществить с помощью любого физического процесса, скорость которого прямо или косвенно зависит от массы частиц. Такими процессами могут быть, например, обычная диффузия или термодиффузия (приложение 2), диффузия под действием центробежной силы, а или иная химическая реакция, фракционная перегонка, испарение, миграция ионов и электролиз (гл. III, § 5), фотохимические реакции. В качестве примера можно упомянуть частичное разделение изотопов неона, осуществленное Герцом (1933 г.). Разработав технологию специального кругового процесса, он заставил смесь изотопов несколько раз продиффундировать через систему глиняных цилиндров. Так как легкие компоненты смеси диффундируют быстрее тяжелых, то в качестве конечного продукта мы получим две смеси, одна из

Таблица изотопов

Изотопы расположены в порядке распространенности (во всех случаях, когда она известна). Радиоактивные изотопы помечены звездочками. Радиоактивные изотопы, полученные искусственным путем, в таблицу не включены.

Элемент	z	Изотопы	Элемент	z	Изотопы
H	1	1, 2, 3	Rb	37	85, 87*
He	2	4, 3	Sr	38	88, 86, 87, 84
Li	3	7, 6	Y	39	89
Be	4	9	Zr	40	90, 92, 94, 91, 96
B	5	11, 10	Nb	41	93
C	6	12, 13	Mo	42	98, 96, 95, 92, 97, 94, 100
N	7	14, 15	Tc	43	99
O	8	16, 18, 17	Ru	44	102, 104, 101, 99, 100, 96, 98
F	9	19	Rh	45	103
Ne	10	20, 22, 21	Pd	46	106, 108, 105, 110, 104, 102
Na	11	23	Ag	47	109, 107
Mg	12	24, 25, 26	Cd	48	114, 112, 111, 110, 113, 116, 106, 108
Al	13	27	In	49	115, 113
Si	14	28, 29, 30	Sn	50	120, 118, 116, 119, 117, 124, 122, 112 114, 115
P	15	31	Sb	51	121, 123
S	16	32, 34, 33, 36	Te	52	130, 128, 126, 125, 124, 122, 123, 120
Cl	17	35, 37	I	53	127
Ar	18	40, 36, 38	Xe	54	132, 129, 131, 134, 136, 130, 128, 124, 126
K	19	39, 41, 40*	Cs	55	133
Ca	20	40, 44, 42, 48, 43, 46	Ba	56	138, 137, 136, 135, 134, 130, 132
Sc	21	45	La	57	139
Ti	22	48, 46, 47, 49, 50	Ce	58	140, 142, 138, 136
V	23	51	Pr	59	141
Cr	24	52, 53, 50, 54	Nd	60	142, 144, 146, 143, 145, 148, 150
Mn	25	55	Pm	61	147
Fe	26	56, 54, 57, 58			
Co	27	59, 57			
Ni	28	58, 60, 62, 61, 64			
Cu	29	63, 65			
Zn	30	64, 66, 68, 67, 70			
Ga	31	69, 71			
Ge	32	74, 72, 70, 73, 76			
As	33	75			
Se	34	80, 78, 76, 82, 77, 74			
Br	35	79, 81			
Kr	36	84, 86, 82, 83, 80, 78			

Таблица 2. Продолжение

Элемент	z	Изотопы	Элемент	z	Изотопы
Sm	62	152, 154, 147, 149, 148, 150, 144	Au	79	197,
Eu	63	153, 151	Hg	80	202, 200, 199, 201, 198, 204, 196
Gd	64	158, 160, 156, 157, 155, 154, 152	Tl	81	205, 203, 207*, 208*, 210*
Tb	65	159	Pb	82	208, 206, 207, 204, 210*, 211*, 212*, 214*
Dy	66	164, 162, 163, 161, 160, 158	Bi	83	209, 210*, 211*, 212*, 214*
Ho	67	165	Po	84	210*, 211*, 212*, 214*, 215*, 216*, 218*
Er	68	166, 168, 167, 170, 164, 162	At	85	211
Tm	69	169	Rn	86	222*, 219*, 220*
Yb	70	174, 172, 173, 171, 176, 170, 168	Fr	87	223*
Lu	71	175, 176	Ra	88	226*, 223*, 224*, 228*
Hf	72	180, 178, 177, 179, 176, 174	Ac	89	227*, 228*
Ta	73	181	Th	90	232*, 227*, 228*, 229*, 230*, 231*, 233*, 234*
W	74	184, 186, 182, 183, 180	Pa	91	231*, 234*
Re	75	187, 185	U	92	238*, 235*, 234*
Os	76	192, 190, 189, 188, 187, 186, 184	Np	93	—
Ir	77	193, 191	Pu	94	—
Pt	78	195, 194, 196, 198, 192	Am	95	—
			Cm	96	—

которых богаче легкой компонентой, а другая — тяжелой. Этот метод был с успехом применен также для выделения тяжелого изотопа водорода (гл. III, § 5) и для разделения изотопов урана (гл. VII, § 9).

Клаузиус и Диккель (1938 г.) успешно применили метод термодиффузии к неону и хлору (в соединении HCl). С помощью химической реакции между газом HCN и раствором NaCN в зоде Хатчинсон, Стьюарт и Юри (1940 г.) сумели значительно обогатить углерод изотопом  $^{13}\text{C}$ .

Результат детального изучения изотопии можно сформулировать в следующем виде. Каждый химический элемент либо обладает целым атомным весом, либо состоит из смеси различ-

ных сортов атомов, чьи веса также целые (см. табл. 2). Из практических соображений атомные веса уже давно относят не к весу водорода, принимаемому за 1, а к весу кислорода, принимаемому за 16. Выяснилось, что в таком случае целочисленность весов изотопов становится более явной, чем при выборе в качестве единицы веса Н. Правда, при  $O=16$  атомный вес водорода выражается величиной 1,0081, заметно отличающейся от 1, но зато веса всех остальных чистых изотопов очень близки к целым числам.

Чтобы понять, откуда происходит этот факт, мы должны, забегая вперед, сказать, что массы атомов почти полностью сконцентрированы в *атомных ядрах*. Каждый атом состоит из ядра, окруженного облаком электронов (гл. III, § 3). Ядро представляет собой основную часть атома. Результаты исследований Астона должны относиться к ядрам: каждое ядро состоит из целого числа водородных ядер или *протонов*, а масса ядра равна (с точностью до ничтожных отклонений) целому кратному масс протона.

Отклонения эти, несмотря на свою ничтожность имеющие огромное значение, будут обсуждаться ниже (гл. III, § 4).

Здесь мы еще раз суммируем идеи, державшиеся в физике около двух десятилетий.

Имеются два простейших «атома» — атома электричества — отрицательный электрон и положительный протон. Их заряды равны по величине и противоположны по знаку, но массы их сильно различаются (в отношении 1:1840, см. гл. II, § 1). Из них в два этапа строится все вещество: сначала из протонов с некоторым участием цементирующих электронов образуются очень маленькие и компактные ядра, затем ядра окружаются сравнительно рыхлым электронным облаком.

Но в свете целого ряда новых открытий эта простая и универсальная картина оказалась неверной; перейдем к рассказу о том, как это произошло.

## § 6. Нейтрон

В соответствии с только что изложенными идеями ядро гелия, имеющее массу 4 и заряд 2, состоит из четырех протонов и двух электронов. Точно так же в более сложных ядрах некоторое количество электронов частично компенсирует общий заряд протонов. Возникает вопрос: почему в ядре всегда преобладают положительные заряды? Не могут ли существовать ядра с равным количеством протонов и электронов, например — как простейший вариант — нейтрон, состоящий из одного протона и одного электрона.



Идеи подобного рода занимали многих исследователей, размышлявших о природе ядер и радиоактивного распада. Но в действительности нейтроны были открыты чисто экспериментально, при изучении искусственных превращений атомов. Именно так Боте и Беккер (1930 г.) обнаружили, что если бомбардировать  $\alpha$ -лучами ядра легких элементов типа лития и бериллия, то испускаются  $\gamma$ -лучи. Затем Ирен Кюри, дочь супругов Кюри, открывших радий, и ее муж Жолио обнаружили (1932 г.), что излучение бериллия, подвергнувшегося бомбардировке  $\alpha$ -частицами, может при прохождении через водородсодержащие вещества типа парафина освобождать протоны, чего никак не могли бы сделать  $\gamma$ -лучи. Отсюда следовало, что излучение бериллия должно быть каким-то новым видом излучения. Тогда же Чэдвик с помощью ионизационной камеры показал, что новое излучение состоит из тяжелых нейтральных частиц. Физер (1932 г.) подтвердил это, используя камеру Вильсона. Треки испускаемых бериллием частиц оставались невидимыми — следовательно, они не ионизировали молекул воздуха, — но треки ядер, испытавших столкновения с такими частицами, конечно, были видны. Сопоставляя величину ионизации в водороде и азоте, Чэдвик определил массу нейтрона, оказавшуюся приблизительно равной массе протона.

С точки зрения проникающей способности нейтроны ведут себя совершенно иначе, чем любой другой вид излучения, будь то световые волны или заряженные частицы. В явлении поглощения заряженных частиц основную роль играет процесс передачи энергии от частиц к внешним электронам атомов, а так как число этих электронов приблизительно пропорционально массам атомов, то и поглощательная способность различных веществ приблизительно пропорциональна их массам. Однако нейтроны вообще не замечают внешних электронов — они могут остановиться только в результате столкновения с ядром. Поскольку размеры ядер различных веществ почти одинаковы (гл. VII, § 1), то играет роль только число ядер на единицу объема. Но в одном грамме водорода столько же ядер, сколько в 16 г кислорода, поэтому поглощающая способность на грамм у водорода в 16 раз больше, чем у кислорода<sup>1)</sup>. Кроме того, фотографии в камере Вильсона показали, что при взаимодействии нейтронов с ядрами в одних случаях нейтрон просто

<sup>1)</sup> Здесь, конечно, имеется в виду не обязательно настоящее поглощение, при котором нейтрон перестает существовать, но и (главным образом) рассеяние, когда нейтрон лишь выбивается из пучка и продолжает лететь сквозь вещество уже с измененным направлением (и, может быть, величиной) скорости. — *Прим. ред.*

сталкивается с ядром (предполагается, что его диаметр приблизительно равен диаметру ядра), а в других случаях ядро захватывает нейтрон, вследствие чего оно взрывается и испускает другие частицы (гл. III, § 6). Здесь мы подходим к вопросу, какое место занимают нейтроны в структуре ядра, однако этим мы займемся позже (гл. III, § 4), а сейчас заметим только, что, конечно, все ядра с любым (положительным) зарядом можно считать состоящими только из протонов и нейтронов; электроны же вообще нет нужды вспоминать, говоря о структуре ядер.

Эта идея оказалась очень плодотворной (гл. III, § 4—6). Тот факт, что ядра могут излучать электроны ( $\beta$ -распад), потребовал теперь нового объяснения, которое мы изложим несколько позже.

## § 7. Космические лучи. Позитроны

Предположение, что положительные и отрицательные элементарные электрические заряды сильно различаются по массе, означало бы неоправданную асимметрию природы. Все выдвигавшиеся до сих пор теории симметричны по отношению к знаку заряда. Поэтому еще задолго до нашего времени было бы вполне резонно высказать мысль, что соответственно обеим известным нам частицам, и тяжелой положительной, и легкой отрицательной, в природе существуют частицы с противоположными знаками заряда: положительный электрон и отрицательный протон. Однако обосновать это предположение удалось только при релятивистской формулировке квантовой механики, предложенной Дираком в 1928 г. (гл. VI, § 8).

А в действительности открытие положительных электронов, или «позитронов», совершилось экспериментально и вне связи с этими идеями при наблюдениях так называемых космических лучей. Эти лучи сами по себе представляют большой интерес, поэтому мы немного расскажем об их открытии и исследовании.

Как уже отмечалось (§ 1 этой главы), газы при нормальных условиях плохо проводят электрический ток. Но их проводимость можно увеличить, не только приложив нужную разность потенциалов при пониженном давлении (этот способ мы уже рассмотрели), но также действуя на газ любым видом корпускулярного излучения или (высокочастотными) электромагнитными волнами. Эти лучи отрывают электроны от атомов или молекул, а электрическое поле приводит и электроны, и остатки атомов — ионы — в движение. Для обнаружения излучений и исследования их свойств применяются ионизационные каме-

ры — небольшие сосуды, наполненные газом и снабженные электродами. Для измерения интенсивности излучения по ионному току нужно удостовериться, что в отсутствие радиации ток равен нулю. Однако было обнаружено, что он никогда полностью не исчезает. Остаточную ионизацию пытались объяснить слабым радиоактивным излучением Земли. Но оказалось, что ее неспособны подавить даже толстые свинцовые экраны; слабая ионизация всегда остается (Резерфорд, Макленнан, 1903 г.). Излучение, вызывающее эту ионизацию, должно было бы обладать гораздо большей проникающей способностью, чем любые известные нам  $\gamma$ -лучи. Гоккель (1909 г.) обнаружил, что оно не исчезает при подъеме измерительной аппаратуры над поверхностью Земли, как следовало бы ожидать, если бы источники его были на Земле. Затем Хесс (1912 г.), используя воздушные шары, провел измерения на высотах свыше 5 км и нашел, что интенсивность излучения даже возрастает с высотой. Он обнаружил также, что интенсивность одинакова ночью и днем (и, следовательно, источником лучей не может быть Солнце). Таким образом выяснилось, что лучи приходят из межзвездного пространства; они были названы *космическими лучами*. Эксперименты проводились на все больших и больших высотах Кольхёрстером (1914 г.), а затем Миллиkenом, Тицардом и Регенером. Автоматические шары-зонды Регенера (1935 г.) поднимались до высоты 30 км. Космические лучи были обнаружены и на дне глубоких озер — на глубинах более 500 м (Милликен, Регенер, 1928 г.).

Более точные исследования проводились с помощью камеры Вильсона в сильных магнитных полях (впервые их осуществил Скобельцын в 1929 г.). Треки частиц имеют вид окружностей малой кривизны; определив радиусы окружностей, можно вычислить скорости и энергии частиц. Оказалось, что лучи состоят из чрезвычайно быстрых частиц; среди них нередки электроны, для разгона которых нужна была бы разность потенциалов порядка 100—1000 мв.

Конечно, на земной поверхности мы наблюдаем отнюдь не первичное космическое излучение, а смесь различных вторичных частиц, в том числе и электроны, выбитые из молекул воздуха в результате различных процессов, которые мы опишем ниже. Некоторую определенность в вопрос о природе первичных частиц вносит тот факт, что их интенсивность зависит от географической широты (Клей, 1927 г.): интенсивность меньше на экваторе, чем на полюсах. Отсюда следует, что мы имеем дело с заряженными частицами, испытывающими отклонение в магнитном поле Земли. В самом деле, рой заряженных частиц, попадая в поле магнита, собирается преимущественно у

полюсов — этот факт хорошо известен и именно его использовал Штёрмер (около 1903 г.) для объяснения полярных сияний. Сверх того, можно определить знак заряда прилетающих частиц, так как положительные и отрицательные частицы по-разному отклоняются магнитным полем Земли. Положительные частицы отклоняются к западу, отрицательные — к востоку. Эта асимметрия распределения по долготе позволяет показать, что по крайней мере в первичных космических лучах большинство частиц заряжено *положительно*. Сейчас вполне точно установлено, что большинство этих частиц — протоны. Однако присутствуют также ядра гелия, компоненты группы CNO и некоторые тяжелые ядра, такие, как железо. Имеется целый ряд различных гипотез о происхождении космических лучей, хотя более или менее единодушно мнение, что их энергия обязана либо хаотическому рассеянию в больших намагниченных облаках (Ферми, 1954 г.), либо эффектам типа синхротронного ускорения (гл. III, § 6), например, в Крабовидной туманности. В первом случае частицы получают энергию за счет намагниченных облаков; процесс в известной мере сходен с замедлением нейтронов в низкотемпературном замедлителе (только наоборот: нейтроны не теряют энергию, а приобретают ее). Достоинство этого механизма, предложенного Ферми, заключается в том, что он естественным образом объясняет наблюдаемое распределение энергии первичных космических частиц. Однако едва ли подлежит сомнению, что Крабовидная туманность тоже является источником космических лучей, хотя с этой точки зрения, к сожалению, не удастся достаточно просто объяснить наблюдаемый энергетический спектр.

Двигаясь через атмосферу, первичные протоны вызывают образование вторичных частиц, среди них множество электронов; ниже мы объясним механизм этого процесса.

Андерсон первый заметил, что часто на фотографиях появляются два вида треков, имеющих противоположные знаки кривизны, хотя и те и другие выглядят как следы электронов (фото 3). Эти треки можно истолковать либо как принадлежащие положительным электронам, либо как принадлежащие частицам, движущимся навстречу друг другу. Вторая возможность исключается следующим образом. В камеру поместили свинцовую пластинку и исследовали треки прошедших через нее частиц. В этом случае скорость давшей трек частицы обязательно должна уменьшиться, так что кривизна пути частицы за пластинкой становится больше, чем перед ней; это и позволяет определить направление движения частиц (фото 4). Так было доказано существование позитрона.

С теоретической точки зрения открытие позитрона — событие огромного значения. Оно подтверждает уже упоминавшуюся теорию Дирака, согласно которой ни электрон, ни позитрон сами по себе не являются неизменными и неразрушимыми, но могут аннигилировать, столкнувшись друг с другом, а освобождающаяся энергия излучается в виде световых волн. Наоборот, световые волны достаточно большой энергии могут при определенных условиях родить «пару»: электрон + позитрон. Имеются экспериментальные доказательства существования обоих процессов. Факт преобладания отрицательных электронов в нашем реальном мире не противоречит теории.

В 1933 г. Блекетт и Оккиалини обнаружили, что часто из стенок камеры вылетает целый ливень частиц, причем треки одних имеют положительную, а других отрицательную кривизну. Эти потоки состоят, таким образом, из положительных и отрицательных электронов. В настоящее время их возникновение вполне объяснено. Они рождаются в каскадных процессах (Карлсон и Оппенгеймер, Баба и Гайтлер, 1937 г.).

Пусть очень быстрый электрон проходит сквозь атом или молекулу; он отклонится в электрическом поле атомного ядра. При любом изменении скорости или искривлении пути быстрый электрон излучает свет, причем чем электрон быстрее, тем меньше длина волны излучения. Самые быстрые из получаемых обычными способами в лабораториях электронов излучают свет с рентгеновской длиной волны. В случае космических электронов длины волн могут быть даже короче, чем у  $\gamma$ -лучей. И теоретические, и экспериментальные исследования показали, что эти сверхжесткие  $\gamma$ -лучи генерируются с такой интенсивностью, что электроны, проходя через вещество, очень быстро останавливаются, отдавая всю свою энергию этим лучам. Однако сверхжесткие  $\gamma$ -лучи не остаются пассивными. Проходя через вещество, они превращаются в «электронные пары», о чем мы упоминали выше. Составляющие такие пары положительные и отрицательные электроны имеют, конечно, меньшую энергию, чем первоначальный электрон, но если энергия последнего достаточно велика, то и энергия положительного и отрицательного вторичных электронов может оказаться достаточной, чтобы вновь излучить сверхжесткие  $\gamma$ -лучи. Таким образом, процесс повторяется снова, образуются все новые и новые пары, пока весь запас энергии не будет исчерпан, и энергия каждого отдельного электрона не окажется слишком малой для дальнейшего размножения. Мощности таких ливней могут колебаться от двух до нескольких тысяч частиц в зависимости от энергии первичного электрона.

Образование ливней происходит очень быстро. Если, например, космический электрон проникает в свинцовую пластинку, достаточно 1—3 см свинца, чтобы ливень достиг максимальных размеров, и вскоре после этого все частицы ливня замедляются настолько, что уже не могут выйти из пластинки, если ее толщина составляет, скажем, 5 см. Поэтому ни электроны, ни вторичные частицы не могут пройти сквозь свинцовые пластинки толщиной более нескольких сантиметров.

Однако при исследовании космических лучей были обнаружены частицы с гораздо большей проникающей способностью, преодолевающие в свинце пути до 1 м и даже больше (Боте и Кольхёрстер, 1928 г.). Природа этих проникающих частиц долгое время оставалась для физиков загадкой. Ясно, что в рамках данного выше объяснения природы ливней (а эксперименты не оставляют сомнений в его правильности) проникающие частицы не могут быть электронами. Эта дилемма привела к открытию частиц нового типа, названных *мезонами*.

### § 8. Мезоны и ядерные силы<sup>1)</sup>

Нетрудно видеть, какими свойствами должна обладать частица, чтобы она отдавала меньше энергии сверхжестким  $\gamma$ -квантам, чем электроны, и, таким образом, имела большую проникающую способность. Очевидно, что отклонение, которое испытывает частица, проходя через атом, зависит от ее массы. Тяжелая частица будет отклоняться меньше и, следовательно, терять меньше энергии, чем легкая. Отсюда возникает идея, что частицы, образующие жесткую компоненту космических лучей, тяжелее электронов. Можно было бы предположить, что это протоны. Но тогда *все* частицы должны быть положительными, а в действительности это не так. Только после 1938 г. (Вильямс и Пикап, Нишина и др.) появилась возможность экспериментально оценить массу этих частиц. (Для этого требовалось измерить кривизну траектории в магнитном поле, определив тем самым величину отношения  $mv/e$ , и одновременно измерить ионизацию для последующего определения скорости.)

<sup>1)</sup> В связи с чрезвычайно быстрым накоплением новых экспериментальных данных и эволюцией теоретических взглядов в области систематики элементарных частиц за последние два-три года содержание этого параграфа и — в еще большей мере — соответствующего приложения 32 (которое поэтому не включено в настоящее издание) в значительной мере устарело. Читателю, интересующемуся современным положением вещей, можно рекомендовать для первого чтения издаваемые издательством «Наука» сборники «Над чем думают физики», а также перевод статьи Чу, Гел-Манна и Розенфельда «Сильно взаимодействующие частицы» в журнале «Успехи физических наук» за 1964 год. — *Прим. ред.*

Результат оказался таков: масса проникающих частиц равна приблизительно 200 электронным массам, или 0,1 массы протона. Поэтому они были названы *мезонами* (греческое слово «мезон» означает «средний»).

Возможно, мезоны не были бы открыты так скоро, если бы тремя годами раньше их существование не было предсказано теоретически. Их предсказал японский физик Юкава (1935 г.); здесь мы лишь слегка коснемся его теории, отложив подробную формулировку до следующих глав (гл. VII, § 3). Однако, забегая несколько вперед, обсудим некоторые факты.

Мы уже упоминали (гл. II, § 6) и вскоре опишем более подробно (гл. III, § 4), что атомные ядра состоят из двух сортов частиц — протонов и нейтронов. Ядра упакованы очень плотно, ибо их радиусы, измеренные различными методами (гл. III, § 3), колеблются только от 2 до  $9 \cdot 10^{-13}$  см.

Что, спросим мы себя, удерживает протоны и нейтроны на таком маленьком расстоянии друг от друга? Какая-то притягивающая сила должна действовать между ними. Это не могут быть силы электрического происхождения, так как лишенный заряда нейтрон не взаимодействует с электрическим полем. Отсюда Юкава сделал вывод, что должно существовать поле нового типа, сходное с электромагнитным, но имеющее другую природу, которое и создает притяжение между протонами и нейтронами. Предваряя современную классификацию, будем называть это поле *мезонным полем*. Как и в обычном случае заряженных частиц, предположим, что и протоны, и нейтроны несут «мезонный заряд», создающий мезонное поле; обозначим его через  $f$ . Тогда протон и нейтрон будут притягивать друг друга, подобно двум электрическим зарядам, и между ними будет действовать некоторый потенциал, подобный кулоновскому потенциалу  $-e^2/r$ , действующему между двумя электрическими зарядами противоположного знака. Однако имеются два существенных отличия мезонного поля от электрического. Как было показано выше, радиус действия ядерных сил очень мал (от 2 до  $3 \cdot 10^{-13}$  см). Поэтому Юкава предположил, что потенциал между двумя ядерными частицами равен не  $-f^2/r$ , а

$$-f^2 \frac{e^{-\eta r}}{r},$$

где  $\eta$  — новая универсальная постоянная, имеющая размерность обратной длины и величину порядка  $(0,3-0,5) \cdot 10^{13}$  см<sup>-1</sup>.

Как электрические заряды при неравномерных движениях излучают электромагнитные волны, так и мезонные заряды при некоторых условиях могут излучать мезонные волны. Но закон

распространения этих волн должен быть другим, так как в него необходимо включить зависимость от константы  $\eta$ . Действительно, если  $\nu$  — частота, и  $\tau = 1/\lambda$  — волновое число простой гармонической волны, то для электромагнитной волны  $\nu\lambda = c$ , или  $\nu/c = \tau$ . Простейшее же волновое уравнение, совместимое с законом Юкавы для статического поля, как можно показать, приводит к соотношению

$$\left(\frac{\nu}{c}\right)^2 = \tau^2 + \left(\frac{\eta}{2\pi}\right)^2.$$

Теперь, предваряя результаты квантовой теории, учтем, что любое простейшее физическое явление имеет двойственный характер — его можно описывать и при помощи волн, и при помощи частиц. Частицы переносят определенный квант энергии  $E$  и импульс  $p$ , а связь с частотой  $\nu$  и волновым числом  $\tau$  соответствующей волны дается формулами

$$E = h\nu, \quad p = h\tau,$$

где  $h$  — постоянная Планка (гл. IV, § 2, 5). Из закона Юкавы для частоты получим зависимость энергии частицы от ее импульса:

$$\left(\frac{E}{c}\right)^2 = p^2 + \left(\frac{h\eta}{2\pi}\right)^2.$$

Завершающим шагом рассуждения Юкавы была интерпретация этой формулы на основе теории относительности (приложение 5), согласно которой энергия и импульс частицы связаны с ее массой покоя  $m_0$  выражением

$$\left(\frac{E}{c}\right)^2 = p^2 + m_0^2 c^2.$$

Сопоставляя эту формулу с предыдущей, Юкава сделал вывод, что должны существовать частицы, масса покоя которых связана с постоянной внутриядерных сил  $\eta$  соотношением

$$m_0 = \frac{h\eta}{2\pi c}.$$

Подставляя сюда значение  $\eta$ , данное выше [т. е.  $(0,3-0,5) \times 10^{13} \text{ см}^{-1}$ ], получаем величину  $m_0$  в пределах от 130 до 200 электронных масс (гл. II, § 1).

Опираясь на эти соображения, Юкава предсказал существование частиц с массой, промежуточной между массами электрона и протона. Эта гипотеза была проверена в 1939 г. независимо Недермейером и Андерсоном и Блекеттом и Вильсоном с помощью камеры Вильсона.



Мезоны следует считать элементарными частицами, т. е. такими, что их нельзя составить из других частиц. Однако они отличаются от электронов и ядерных частиц (протонов и нейтронов) тем, что не принимают участия в построении обычного вещества. Почему? Ответ был дан уже в первой статье Юкавы: мезоны нестабильны. Когда рядом нет других частиц, мезон распадается на электрон и нейтрино  $\nu^0$  (нейтрино  $\nu^0$  — гипотетическая частица, встречающаяся в процессах  $\beta$ -распада, см. гл. III, § 4). Космические лучи дают убедительное, хотя и не совсем прямое, доказательство распада свободных мезонов. Вильямсу (1940 г.) удалось непосредственно сфотографировать несколько распадов мезона в камере Вильсона. На фотографиях можно видеть, что траектория мезона в газе внезапно обрывается. От конечной точки траектории начинается след электрона, движущегося в несколько ином направлении (нейтрино, будучи нейтральным, конечно, невидимо). Можно также определить среднее время жизни мезона. Это время весьма мало — эксперименты дают приблизительно  $2 \cdot 10^{-6}$  сек, а из теории Юкавы следует величина, примерно в 20 раз меньшая.

Ввиду малого времени жизни мезоны не приемлемы в качестве первичных частиц космического излучения. Они должны образовываться где-либо в земной атмосфере. Тогда, двигаясь достаточно быстро, они могут успеть, еще не распавшись, достичь уровня моря. В § 7 мы видели, что первичные частицы, приходящие из межзвездного пространства, вероятно, представляют собой протоны. Теперь мы уже в состоянии понять, как происходит процесс образования мезонов первичными протонами. Может случиться, что при входе в атмосферу быстрый первичный протон столкнется с ядром кислорода или азота, которое, как известно, тоже состоит из протонов и нейтронов. Каждая из этих частиц, а также и первичный протон окружены мезонным полем. При чрезвычайно сильном ударе протона о ядро должны излучаться мезонные волны, подобно тому, как при сильном столкновении электрона с другой заряженной частицей излучаются электромагнитные волны (именно таким путем начинаются ливни).

Мезоны, соответствующие этим волнам, раньше или позже распадутся, образовав электроны. Фактически большинство мезонов распадается уже в верхних слоях атмосферы, и лишь быстрейшие из них достигают уровня моря. Поэтому-то в космических лучах так много электронов: они продукты распада мезонов. В дальнейшем их число еще увеличивается вследствие каскадного размножения (см. выше).

Таково происхождение электронов в космических лучах. Итак, идеи Юкавы помогли объяснить и систематизировать большое количество наблюдений. Но дальнейшие исследования показали, что действительность гораздо сложнее, чем казалось вначале.

Рассмотрев некоторые несоответствия между теорией и экспериментом (примером может служить отмеченное выше различие в измеренном и вычисленном времени жизни), Маршак и Бете (1947 г.) выдвинули предположение, что существует два различных типа мезонов. Первое доказательство этого факта было дано Бристольской группой, руководимой Пауэллом (Лэттес, Мюрхид, Оккиалини и Пауэлл, 1947 г.), и подтверждено в следующем году вместе с этой группой также Калифорнийской группой, работающей в Беркли. Эти эксперименты стали возможны благодаря значительному усовершенствованию фотографического метода наблюдения треков. Оказалось, что первичные мезоны в космических лучах, названные  $\pi$ -мезонами, обладают массой около  $264m_e$ , если они нейтральны, или  $273m_e$ , если несут положительный или отрицательный заряд. Заряженные  $\pi$ -мезоны ( $\pi^\pm$ -частицы) распадаются на  $\mu$ -мезоны того же знака с массой  $207m_e$  и нейтрино, причем время жизни первичных частиц в этих процессах около  $2,5 \cdot 10^{-8}$  сек (фото 5). Но вероятность самопроизвольного распада отрицательных  $\pi$ -мезонов мала, обычно они притягиваются положительными ядрами окружающих атомов и захватываются ими, вызывая сильные ядерные взрывы. Вторичные  $\mu$ -мезоны в свою очередь распадаются на электрон или позитрон (в зависимости от заряда) и два нейтрино; их время жизни равно  $2,22 \cdot 10^{-6}$  сек. С другой стороны, нейтральные  $\pi$ -мезоны ( $\pi^0$ -частицы) распадаются на два  $\gamma$ -кванта ( $\gamma^0$ ; гл. IV, § 2). Тот факт, что причиной ядерных взрывов оказываются обычно (отрицательные)  $\pi$ -мезоны, показывает, что именно эти, более тяжелые мезоны связаны с ядерными силами в согласии с теорией Юкавы. Однако хотя теория Юкавы, сравнительно простая, представляется качественно верной, она не объясняет деталей взаимодействия между ядерными частицами.

Проведенные в Беркли эксперименты подтвердили результаты Бристольской школы. Гарднер и Латтес сообщили в 1948 г., что  $\pi^-$ - и  $\mu$ -мезоны можно получить, бомбардируя мишени из различных веществ  $\alpha$ -частицами с энергией более  $300$  Мэв, полученными на Калифорнийском циклотроне (гл. III, § 6). Измерения масс  $\pi^-$ - и  $\mu$ -мезонов проводили многие исследователи; наилучшие к 1960 г. значения следующие:

$$m_{\pi^\pm} = 273,3m_e, \quad m_{\pi^0} = 264,3m_e, \quad m_{\mu^\pm} = 206,9m_e.$$

Кроме  $\pi$ - и  $\mu$ -мезонов (условно называемых  $L$ -мезонами), сейчас изучена другая группа,  $K$ -мезоны, с массами около  $1000m_e$ . Эта группа состоит из заряженных  $\tau$ -мезонов и нейтральных  $\theta$ -мезонов, причем все они распадаются на заряженные и нейтральные  $\pi$ -мезоны, как видно из табл. 3. Далее обнаружена группа частиц, названных гиперонами, с массами, превышающими массы нуклонов. Они распадаются за время порядка  $10^{-10}$ — $10^{-11}$  сек на нейтроны или протоны и  $\pi$ -мезоны (см. табл. 3). Добавим, что предполагается существование  $\Sigma^0$ ,  $\Xi^0$

Таблица 3

Таблица элементарных частиц<sup>1)</sup>

Частица, символ, заряд	Масса, $m_e$	Продукты распада	Среднее время жизни, сек	
$\gamma^0$	0	Стабильна	$\infty$	
$\nu^0$	$< 0,005$	Стабильна	$\infty$	
$e^-$	1	Стабильна	$\infty$	
$e^+$	$1 \pm 0,000071$	$e^+ + e^- \rightarrow n \gamma$ $n = 1, 2, 3 \dots$	$^8S$ позитроний $1,5 \cdot 10^{-7}$	
$L$ -мезоны	$\mu^\pm$	206,7	$e^\pm + \nu^0 + \nu^0$	$2,22 \cdot 10^{-6}$
	$\pi^+$	273,3	$\mu^+ + \nu^0$	$2,53 \cdot 10^{-8}$
	$\pi^-$	272,8	$\mu^- + \nu^0$	$2,55 \cdot 10^{-8}$
	$\pi^0$	264,3	$\gamma^0 + \gamma^0$	$(1-5) \cdot 10^{-15}$
$K$ -мезоны	$\tau^+$	966,1	$\pi^+ + \pi^+ + \pi^-$	$1,27 \cdot 10^{-8}$
	$\tau^-$	966,1	$\pi^- + \pi^+ + \pi^-$	$1,27 \cdot 10^{-8}$
	$\theta^0$	965	$\pi^+ + \pi^-$	$1,3 \cdot 10^{-10}$
Нуклоны	$p^+$	1836,12	Стабильна	$\infty$
	$p^-$	(1836,12)	—	—
	$n^0$	1838,65	$p^+ + e^- + \nu^0$	$1,11 \cdot 10^3$
	$\bar{n}^0$	(1838,65)	—	—
Гипероны	$\Lambda^0$	2181,5	$p^+ + \pi^-$	$3,7 \cdot 10^{-10}$
	$\Sigma^+$	2326,9	$p^+ + \pi^0$	$\sim 3,4 \cdot 10^{-11}$
	$\Sigma^-$	(2326,9)	$n^0 + \pi^+$	$\geq 3,4 \cdot 10^{-10}$
	$\Xi$	2586	$n^0 + \pi^-$ $\Lambda^0 + \pi^-$	$\sim 1 \cdot 10^{-10}$

<sup>1)</sup> А. М. Шапиро, Rev. Mod. Phys., 28, 164 (1956).

и соответствующих античастиц для всех гиперонов, но обнаружены были только некоторые из этих частиц.

Представляется вполне вероятным, что будущая теория материи должна будет делать различие между стабильными частицами — протоном и электроном, — образующими атомы, и между большим числом более или менее нестабильных, эфемерных, «второстепенных» частиц, таких, как фотон,  $\pi$ - и  $\mu$ -мезоны, и, возможно, многими другими частицами, массы которых образуют целый спектр.



## АТОМ И ЕГО ЯДРО

### § 1. Теория электрона Лоренца

Изучая строение материи, физика всегда пользовалась методом, основанным на следующем принципе: законы, справедливые для «макрокопических» тел, т. е. для тел, имеющих привычные глазу размеры, сначала для пробы переносятся на элементарные частицы в неизменном виде; если при этом обнаруживается какое-то противоречие, то предпринимается видоизменение этих законов. Таким образом, научный прогресс существенно зависит от теснейшего сотрудничества теории и эксперимента.

Так, в предыдущих главах мы постоянно пользовались законами взаимодействия заряженных частиц между собой и с внешними полями или световыми волнами. Но самый важный результат — что масса атома почти полностью сосредоточена в очень маленьком ядре, в то время как объем атома, его физические и химические свойства определяются сравнительно рыхлым электронным окружением ядра — мы приняли без доказательства. Теперь мы должны дать это доказательство. Однако сначала необходимо несколько основательнее разобраться в законах электромагнитного поля.

Эти законы, как известно, формулируются на языке уравнений Максвелла (1855 г.) (приложение 6). В своем первоначальном виде эти уравнения описывают пространственное и временное изменение напряженностей электрического поля  $E$  и магнитного поля  $H$  в веществе и поэтому содержат характерные для этого вещества постоянные (в простейшем случае это диэлектрическая постоянная и магнитная проницаемость).

Атомистическая теория электричества, имеющая дело только с полями в вакууме, упрощает уравнения поля: путем выбора подходящей системы единиц из уравнений устраняются входящие в них постоянные (по крайней мере, за исключением скорости света  $c = 3 \cdot 10^{10}$  см/сек, которую целесообразно сохранить ввиду удобства обычных кинематических единиц — сантиметра и секунды). В таком виде уравнения поля составляют базу

электронной теории Лоренца (1897 г.), которая стояла во главе физики на рубеже века. В то время ученые уже были знакомы со свободными электронами и знали, что электроны входят в состав атомов; о положительных элементарных зарядах ничего не было известно.

Электрон представляли себе в виде очень маленького заряженного тела, создающего поле в пустом пространстве и, наоборот, испытывающего на себе действие сил со стороны поля. Считалось, что эти силы определяют движение электрона в соответствии с законом Ньютона: произведение массы на ускорение равно силе. Поэтому необходимо было приписать электрому, помимо заряда  $e$ , еще и массу  $m$ , а мы уже видели, что отношение  $e/m$  можно найти из экспериментов по отклонению частиц в полях. На основе этих предположений можно рассчитать движение электронов в различных полях. Было обнаружено, что при этом имеет значение также и размер электрона (его радиус, если считать, что он имеет шарообразную форму) — и вот по какой причине. Если электрон движется с ускорением, поле распределенного в нем заряда изменяется; возмущение распространяется внутри электрона со скоростью света и приводит к появлению дополнительных сил. При малых ускорениях такие силы в первом приближении пропорциональны ускорению и  $e^2/a$ , где  $e$  — заряд, а  $a$  — радиус электрона (коэффициент пропорциональности зависит от распределения заряда). Другими словами, все это равносильно эффективному возрастанию массы на величину, пропорциональную  $e^2/a$  (Дж. Дж. Томсон, 1882 г.; Хевисайд, Сирл, 1885 г.). Этот факт навел некоторых физиков на мысль, что электрон вообще не имеет «обычной» массы, обладая лишь «электромагнитной» массой. Малость общей массы электрона, казалось, подтверждает это. Было обнаружено далее, что электромагнитная масса зависит от скорости. Первые наблюдения этого эффекта Кауфманом (1906 г.) были восприняты как блестящее подтверждение теории. В 1904 г. Хазенёрль вывел закон движения полого ящика с отражающими стенками, содержащего электромагнитное излучение, и нашел, что излучению следует приписать массу  $E/c^2$ , где  $E$  — полная электромагнитная энергия. Это было первым указанием на общий закон, который мы обсудим в следующем параграфе.

Вычисления электромагнитной массы основывались на предположении (Абрагам, 1903 г.), что электрон представляет собой жесткую конструкцию, сохраняющую форму в процессе движения, а это предполагает наличие бесконечно больших внутренних сил неэлектрического происхождения. Если отказаться от этого предположения, то получаются не только дру-

гие численные множители, но и другая зависимость от скорости. Кроме того, предположение об абсолютной жесткости несовместимо с теорией относительности (в смысле лоренцева сокращения, см. приложение 5). Если же вместо абсолютной жесткости постулировать неизменность формы электрона в системе отсчета, движущейся вместе с ним, то получатся формулы с точностью до численного множителя, согласующиеся с изложенным на стр. 38 (электрон Лоренца, 1909 г.). Однако численный множитель остается в большой мере произвольным, так как он зависит от распределения зарядов, о котором ничего не известно. Еще хуже то, что даже в такой релятивистской по форме теории необходимо вводить очень большие внутренние силы сцепления, удерживающие на месте одинаково заряженные и потому отталкивающие друг друга части электрона, а это приводит к противоречию с фундаментальной теоремой из механики излучающих систем, о которой сейчас пойдет речь.

## § 2. Теорема инертности энергии. Единая теория поля

С полной общностью теорема инертности энергии была впервые установлена Эйнштейном в 1905 г. Она утверждает, что всякая энергия  $E$  обладает массой  $m$  в соответствии с уравнением

$$E = mc^2.$$

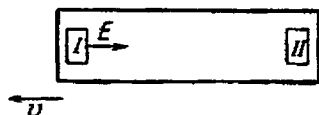
Это соотношение мы будем постоянно использовать в дальнейшем. Оно далеко от того, чтобы быть только некоторой теоретической тонкостью; связанные с ним явления, по существу, имеют характер эффектов большого масштаба. Представим себе закрытый ящик, на противоположных стенках которого укреплены два совершенно одинаковых прибора, устроенных так, что они могут испускать кратковременный световой сигнал в определенном направлении или же полностью поглощать приходящий световой сигнал (фиг. 22). Пусть теперь прибор I в определенный момент испускает световой сигнал в направлении прибора II. Во время процесса излучения прибор I, а вместе с ним весь ящик испытывает отдачу. Отдача обусловлена световым давлением. Световое давление экспериментально наблюдал в 1901 г. Лебедев, результаты которого хорошо согласуются с теорией; позднее этот эффект исследовали Никольс и Халл (1903 г.) и др., а еще позднее и очень тщательно — Герлах с сотрудниками (1923 г.). Под влиянием отдачи все время, пока свет идет от I к II, ящик будет перемещаться в противоположном направлении. Он придет в состояние покоя только в момент, когда свет достигнет прибора II и его давление пол-

ностью затормозит движение ящика. Теперь поменяем местами оба прибора — это не внесет никаких изменений, если вначале массы приборов были одинаковы. Пусть после этого прибор II испускает по направлению к прибору I ту же порцию света, что раньше испустил прибор I; вследствие этого весь ящик снова перемещается влево на то же расстояние, что и раньше. Затем мы снова поменяем оба прибора местами; таким путем было бы возможно перемещать ящик на любое расстояние без каких-либо изменений внутри и вокруг него, что очевидным образом противоречит закону движения центра инерции.

Это противоречие, однако, тотчас исчезает, если принять тезис Эйнштейна об эквивалентности энергии и массы. Испускающая

Ф и г. 22. Иллюстрация к эйнштейновскому мысленному эксперименту, доказывающему соотношение  $E = mc^2$ .

Передатчик I излучает в направлении приемника II определенную порцию энергии  $E$ , вследствие чего весь ящик испытывает отдачу.



световой сигнал на первом этапе рассматриваемого мысленного эксперимента, прибор I отдает определенное количество энергии  $E$ , вследствие чего его энергия, а тем самым и его масса становятся меньше. Соответственно энергия прибора II после поглощения светового сигнала становится больше. Следовательно, то же самое происходит и с его массой: она станет теперь больше, чем масса прибора I. Поменять местами приборы, не смещая центра инерции, можно, только сдвинув весь ящик на определенное расстояние вправо.

Попробовав установить соотношение между массой и энергией, такое, чтобы перемещение ящика под действием светового давления было в точности скомпенсировано перестановкой приборов, мы приходим после короткого вычисления (приложение 7) к формуле Эйнштейна, приведенной выше. Наиболее важна роль закона Эйнштейна в изучении распадов ядер; ниже мы увидим (§ 6 этой главы), что такие явления дают этому закону экспериментальное доказательство.

Вернемся теперь к проблеме электромагнитной массы (см. выше). По теореме Эйнштейна простейший способ нахождения этой массы в случае малых скоростей состоял бы в подсчете внутренней электрической энергии заряда, заключенного в электроне; эта энергия действительно пропорциональна  $e^2/a$ ,



но численный множитель во всех случаях отличается от получаемого при вычислении силы реакции собственного поля электрона. Отличие, как мы уже видели, объясняется силами сцепления, которые должны давать вклад в энергию (хоть это и трудно согласовать с предполагаемой жесткостью электрона).

Из-за этих неудовлетворительных выводов привлекательная идея электромагнитной массы была мало-помалу оставлена. Кроме того, выяснилось, что теория относительности чисто формальным образом дает закон зависимости масс всех тел от скорости — закон, блестяще согласующийся с экспериментом (Бухерер, 1909 г.; Нейман, Шефер, 1914 г.; Гиге, Ратновский, Лаванчи, 1921 г.). А после создания квантовой теории физики вообще стали относиться скептически к конкретным моделям элементарных частиц. Они предпочитают рассматривать электрон в любых внешних условиях как заряженную точечную массу, не интересуясь больше его внутренней структурой. При этом остается, однако, то неприятное затруднение, что собственная энергия электрона, пропорциональная  $e^2/a$ , становится бесконечной, если положить  $a$  равным нулю. Один из способов преодоления этой трудности состоит в том, что мы отбрасываем в уравнениях электродинамики бесконечные члены, не меняя уравнения ни в чем другом. Дирак в 1938 и 1942 годах сделал это, изменив выражение для силы, действующей на точечный заряд, а Прайс в 1938 году — изменив определение энергии и импульса электромагнитного поля. Однако все это похоже скорее на уход от проблемы, чем на ее решение.

Действительно, радиус электрона  $a$  имеет непосредственный физический смысл: под  $a$  мы понимаем длину, определяемую соотношением Эйнштейна  $\alpha e^2/a = mc^2$ , где  $\alpha$  — численный множитель порядка единицы. Следовательно,

$$a = \alpha \frac{e^2}{mc^2} = \alpha \cdot 2,82 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

Простейший эффект, в котором играет роль эта величина, — *рассеяние света* (или другого электромагнитного излучения) атомами. Согласно электромагнитной теории Максвелла, свет (так же, как рентгеновские лучи) представляет собой периодически меняющееся переменное электромагнитное поле. Световая волна, встретив заряженную частицу, которая может свободно двигаться, заставляет ее колебаться, причем тем сильнее, чем легче частица. Если частица связана с другими частицами, то амплитуда ее вынужденных колебаний будет тем больше, чем ближе частота падающей волны к собственной частоте частицы. Поэтому, с одной стороны, электроны ввиду малости их массы будут колебаться под воздействием света гораздо

сильнее, чем протоны, не говоря уже о более тяжелых частицах. С другой стороны, видимый свет приведет в колебательное движение главным образом только частицы, находящиеся у поверхности атома и потому сравнительно слабо связанные, в то время как для возбуждения связанных электронов в глубине атома необходимы уже рентгеновские лучи.

Как известно, колеблющаяся заряженная частица действует как антенна: она сама излучает сферические электромагнитные волны. Энергия, полученная (свободным или слабо связанным) электроном в единицу времени от падающего луча и преобразованная в рассеянное излучение, равна (приложение 8)

$$I = \frac{8\pi}{3} \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 I_0,$$

где  $I_0$  — интенсивность первичного излучения. Но  $I_0$  определяется как энергия, приходящая на  $1 \text{ см}^2$ , а  $I$  означает всю рассеянную энергию, поэтому отношение  $I/I_0$  должно иметь размерность площади. Мы можем приравнять его «эффективному сечению» электрона  $\pi a^2$ , откуда

$$\frac{I}{I_0} = \frac{8\pi}{3} \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 = \pi a^2,$$

так что

$$a = \sqrt{\frac{8}{3}} \frac{e^2}{mc^2}.$$

Эта величина будет «радиусом» электрона, если положить  $a = \sqrt{8/3}$ .

Замечательно в этом методе то, что он не использует никаких гипотез о применимости законов электростатики *внутри* электрона и оперирует с точечным электроном.

Квантовомеханическое рассмотрение рассеяния света свободными электронами, учитывающее релятивистские эффекты (Клейн — Нишина, 1929 г.), также приводит к эффективным сечениям, выражающимся через этот радиус  $a$ .

В точности такие же результаты получаются для рассеяния электронов на ядрах (или других электронах), с чем мы познакомимся глубже в следующем параграфе. Здесь мы только поставим вопрос: на какое расстояние могут сблизиться два электрона, если их скорости на большом расстоянии друг от друга равны  $v$ ? Ясно, что наиболее благоприятен случай, когда они движутся навстречу друг другу вдоль одной прямой. В этом случае в момент наибольшего сближения скорость и, следовательно, кинетическая энергия пары электронов равны нулю. Полная энергия их равна поэтому сумме энергии покоя  $2m_0c^2$  и потенциальной энергии  $e^2/r$ . По закону сохранения эта

энергия должна совпадать с первоначальной, которая в соответствии с формулами теории относительности равна

$$2mc^2 = \frac{2m_0c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}};$$

таким образом, мы имеем

$$2m_0c^2 + \frac{e^2}{r} = \frac{2m_0c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

откуда

$$r = \frac{e^2}{2m_0c^2} / \left( \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right).$$

Мы видим, что и здесь эффективный радиус пропорционален  $e^2/mc^2$ .

Могло бы показаться, что радиус электрона — всего лишь искусственная величина, образованная из  $e$ ,  $m$  и  $c$ ; однако дальнейшие исследования обнаруживают, что все наши теории, по-видимому, становятся неприменимыми на расстояниях порядка этой величины<sup>1)</sup>. В свете этого факта ясно, что мы должны придавать радиусу электрона реальный смысл. Положение вещей требует такой модификации электродинамики, чтобы существование радиуса электрона было понятно независимо от введения массы  $m$ , определенной в механике. Попыток такого рода было вполне достаточно, в частности, особого упоминания заслуживают работы Ми (1912 г.). Автор настоящей книги в 1933 г. наметил путь, по которому можно прийти к нужному результату, нигде не выходя за рамки классических методов.

Исходная идея такой *единой теории поля и материи* состоит в том, что существует естественная единица измерения для напряженностей поля  $E$  и  $H$ , абсолютная напряженность  $b$ , которая в то же время представляет собой нечто вроде верхнего предела для всех полей (подобно тому, как скорость света для скоростей). Формально новые уравнения поля совпадают с уравнениями Максвелла для изотропной среды с диэлектрической постоянной  $\epsilon$  и магнитной проницаемостью  $\mu$ ; только  $\epsilon$  и  $\mu$  теперь не постоянны, а зависят от самого поля, например (приложение 6),

$$\mu = \frac{1}{\epsilon} = \sqrt{1 + \frac{1}{b^2} (H^2 - E^2)}.$$

<sup>1)</sup> Новейшее развитие теории и эксперимента показало, что описание явлений не только на расстояниях порядка «радиуса» электрона, но и на значительно меньших расстояниях не требует пока радикального пересмотра наших основных представлений. — *Прим. ред.*

Произведение  $\mu$  и  $v$ , как и в уравнениях Максвелла для вакуума, равно единице. Оказывается, что точечные заряды (положительные или отрицательные) существуют (как особенности поля), но что соответствующая энергия поля вовсе не бесконечна. Из  $e$  и  $b$  мы можем образовать «радиус электрона»  $a$  по формуле

$$a = \sqrt{\frac{e}{b}}.$$

Тогда энергия определится как

$$E = 1,2361 \frac{e^2}{a}.$$

причем численный множитель не допускает никакого произвола. Такой заряд движется во внешних полях, которые не меняются существенно на расстояниях порядка  $a$ , в точности как лоренцев электрон с чисто электромагнитной массой, и теорема Эйнштейна  $E=mc^2$  выполняется строго (Борн и Инфельд, 1934 г.). Однако для высокочастотных полей (длина волны порядка  $a$ ) наблюдаются отклонения от обычных законов движения электрона. Новые уравнения поля явно нелинейны, и это было камнем преткновения для всех попыток согласовать их с принципами квантовой теории. Эта несогласованность имеет, однако, и другую, более глубокую причину. Квантовая теория содержит характерную для нее величину — постоянную Планка  $h$  (ее размерность — «энергия  $\times$  время»). Поэтому  $hc$  имеет ту же размерность, что и  $e^2$ , именно «энергия  $\times$  длина». Следовательно, отношение  $hc/e^2$  безразмерно; численная величина его порядка 860, т. е. вовсе не мала ( $2\pi$ , деленное на эту величину, фигурирует в квантовой теории водородного атома как зоммерфельдова постоянная тонкой структуры, см. гл. VI, § 3). Это означает, что классическая теория строения электрона явно неадекватна, так как она не учитывает членов с множителем  $hc/e^2$ , которые весьма велики.

Другой аргумент против особой теории для электрона — открытие многих других типов частиц, которые обладают массами, некоторые несут заряд, а некоторые нейтральны (нейтрон, мезон). Кажется маловероятным, что они существуют независимо друг от друга. Будущая теория элементарных частиц должна рассматривать их все одновременно, а их массы (и прочие характеристики) должны следовать из некоторого общего принципа.

Совершенно иной подход к теории строения электрона был предложен Эйнштейном (1928 г.) и развит им и многими другими известными авторами, в том числе Шредингером (1943 г.).

Этот подход основан на идее, что не позволяющая электрону распасться сила сцепления имеет гравитационную природу; конечная цель подхода — создание единой теории электромагнитного и гравитационного полей. При выполнении этой программы была проявлена огромная изобретательность и математическое искусство, но без каких-либо удовлетворительных результатов. Одна из причин неудачи кроется, очевидно, в различии масштабов сил, соответствующих двум видам полей. Например, для двух одинаковых частиц с массами  $m$  и зарядами  $e$  отношение электрического потенциала  $e^2/r$  к гравитационному  $km^2/r$  (где  $k=6,67 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2 \cdot \text{г}^{-1} \cdot \text{сек}^{-2}$  — гравитационная константа) равно  $e^2/km^2$ , что для электрона дает гигантскую величину  $4 \cdot 10^{42}$ . Эддингтон (начиная с 1928 г.) предпринимал отважные, но не достаточно убедительные попытки истолковать это безразмерное число как свойство Вселенной. Главное возражение против всех теорий такого рода состоит в том, что нам известно много различных элементарных частиц, каждой из которых соответствует специальный тип поля. Поэтому кажется бесполезным ограничиваться только электромагнитным и гравитационным полями, несмотря на их важность с точки зрения практики.

### § 3. Изучение строения атома на экспериментах по рассеянию

Самый важный метод изучения строения атома заключается в том, чтобы, направив на атом электромагнитную волну или пучок каких-либо частиц, исследовать получающийся эффект. Результат состоит в ослаблении (поглощении) волны, движущейся в первоначальном направлении и соответственно в появлении дифракционных или рассеянных лучей. Мы уже рассматривали рассеяние света на свободных или слабо связанных электронах (§ 2 этой главы). Таким процессом можно воспользоваться для подсчета числа слабо связанных электронов в атоме. Если это число равно  $n$ , а  $N$  — количество атомов в единичном объеме, то относительная убыль энергии первоначального излучения на каждом сантиметре его пути, т. е. показатель поглощения, равна (Дж. Дж. Томсон, 1906 г.)

$$\frac{nNI}{I_0} = \frac{8\pi}{3} \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 nN.$$

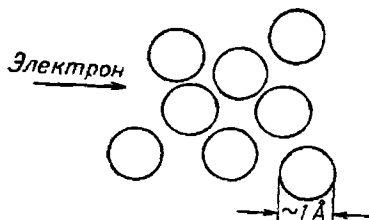
Поскольку  $N$  известно из кинетической теории, можно найти  $n$ , измеряя поглощение рентгеновских лучей. Для достаточно жестких лучей позволительно считать все электроны, по крайней мере в наиболее легких атомах, практически свободными, так

что  $n$  будет обозначать полное число электронов, а стало быть, и заряд ядра в единицах элементарного заряда.

Измерения показали, что для всех легчайших атомов, доступных изучению,  $n$  приблизительно равно половине атомного веса. Необходимо сразу же отметить, что в настоящее время более изощренные эксперименты со световыми и рентгеновскими лучами позволяют получить гораздо более подробные сведения о строении атома. Так, в первую голову нужно упомянуть о дисперсии рассеянной световой волны, которая дает информацию о силах, действующих на электрон в атоме. Далее, интерференционные кольца, которые обнаруживаются при тщательном изучении рассеянных рентгеновских лучей (гл. IV, § 1), служат для определения диаметра электронного облака атома и расстояния между центрами атомов в молекулах (Дебай, 1929 г.).

Фиг. 23. Прохождение электронов через вещество.

Согласно идеям кинетической теории газов, молекулы обладают размерами  $\sim 1 \text{ \AA}$ . Если бы они были непроницаемыми для электронов, то электроны не могли бы проходить сквозь тонкие пленки.

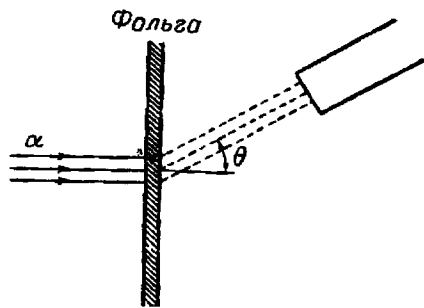


Теперь мы переходим к попыткам изучать строение атома на опытах по рассеянию электронных пучков. Впервые такую попытку предпринял Ленард со своими сотрудниками, используя катодные лучи. В гл. I мы говорили, что диаметр атома составляет по порядку величины  $10^{-8} \text{ см}$ . Если бы атомы представляли собой массивные шарики, как схематически изображено на фиг. 23, то в результате столкновений с такими шариками частицы, из которых состоит катодное излучение, неизбежно очень скоро остановились бы. Систематические исследования, проведенные Ленардом, дали, однако, прямо противоположный результат (1903 г.). Оказалось, что на самом деле быстрые электроны почти совершенно не тормозятся атомом. Однако «силовая» теория атома, предложенная Ленардом и основанная на этих результатах, потерпела неудачу.

Титул отца атомной теории завоевал Резерфорд, который вел исследования, опираясь на более действенные технические средства, и пошел значительно дальше. Резерфорду мы обязаны нашими конкретными количественными представлениями о строении атома. Для своих экспериментов по рассеянию Резерфорд (1911 г.) выбрал не сравнительно легкие электроны, а значительно более массивные  $\alpha$ -частицы (фиг. 24). В силу этого

$\alpha$ -частицы не отклоняются сколько-нибудь заметным образом при столкновениях с электронами атома и поэтому реагируют только на столкновения с более тяжелыми частицами. Разницу между электроном и  $\alpha$ -частицей в смысле их проникающих способностей можно сравнить с разницей между легкой ружейной пулей и тяжелым снарядом.

Прежде всего эксперименты Резерфорда определенно показали (1913 г.), что, помимо маленького массивного ядра, остальное внутриатомное пространство практически ничем не заполнено — результат, уже полученный ранее Ленардом. Поскольку  $\alpha$ -частицы заметно отклоняются лишь ядром, мы можем вывести закон рассеяния из распределения  $\alpha$ -частиц, отклоненных тонкой пленкой изучаемого образца. Таким путем был получен



Фиг. 24. Устройство для наблюдения рассеяния  $\alpha$ -частиц.

Для подсчета числа  $\alpha$ -частиц, отклонившихся от первоначального направления на определенный угол  $\theta$ , используется счетчик Гейгера.

совершенно недвусмысленный вывод — эффективная рассеивающая сила представляет собой кулоновскую силу  $2Ze^2/r^2$ , где  $2e$ , как мы знаем, есть заряд  $\alpha$ -частицы, а  $Ze$  — заряд ядра. Траектории  $\alpha$ -частиц имеют вид гипербол, в фокусе которых расположено ядро (фиг. 25).

Если падающий пучок содержит по одной  $\alpha$ -частице на каждый квадратный сантиметр его поперечного сечения, то, согласно Резерфорду (приложение 9), число частиц в единичном телесном угле, отклоненных на угол  $\varphi$ , дается формулой

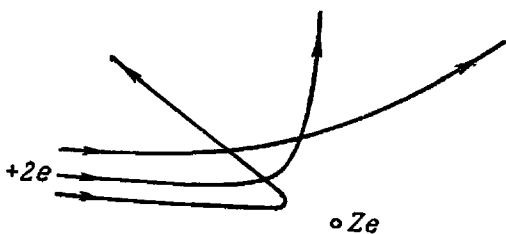
$$\omega(\varphi) = Z^2 \left(\frac{m}{M}\right)^2 \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{1}{\left(\frac{v}{c}\right)^4 \sin^4 \frac{\varphi}{2}},$$

где  $m$  — масса электрона,  $M = 4m_{\text{H}}$  — масса  $\alpha$ -частицы. Сюда снова входит в качестве множителя эффективное сечение рассеяния на электроны, но теперь электронный радиус домножается на малое число (характеризующее размер ядра):

$$\frac{m}{M} = \frac{m}{4m_{\text{H}}} = \frac{1}{4 \cdot 1840} = 1,36 \cdot 10^{-4}.$$

Эксперимент показал, что число  $Z$ , определяющее заряд ядра, равно номеру, который нужно приписать соответствующему элементу в периодической системе Менделеева. Если атом нейтрален, то число, дающее заряд ядра, должно соответствовать числу электронов в окружающем ядро электронном облаке, найденному из опытов по рассеянию рентгеновских лучей. Химические свойства атома зависят от его внешних электронов, так что эти свойства определяются не массой атома, а его атомным номером (или зарядом его ядра). Изотопы имеют один и тот же атомный номер.

Для почти центральных столкновений, т. е. для рассеяния на большие углы, наблюдается отклонение распределения рассеянных частиц от формулы, полученной на основе закона Кулона. Отсюда мы должны сделать вывод, что закон Кулона



Фиг. 25. Рассеяние  $\alpha$ -частиц на ядрах с зарядовым числом  $Z$ .

Траектории  $\alpha$ -частиц представляют собой гиперболы.

перестает быть справедливым на расстояниях около  $10^{-13}$  см. Ядро также обладает конечными размерами; стоит отметить, что «ядерный радиус» имеет тот же порядок величины, что и радиус электрона.

Согласно Резерфорду, атом и его ядро можно представить себе следующим образом. В центре атома находится ядро. Предполагалось, что ядро состоит из протонов и электронов, но это привело к многочисленным трудностям, связанным, например, с невозможностью объяснить, как могут электроны помещаться в ядре, размеры которого имеют тот же порядок величины, что и размеры одного электрона (радиус последнего есть  $10^{-13}$  см, гл. II, § 8). После открытия нейтрона была построена более удовлетворительная модель, в которой ядро считается составленным из  $p$  протонов и  $n$  нейтронов. В этом случае число, определяющее заряд ядра (атомный номер), есть  $Z=p$ , а массовое число атома равно  $A=p+n$ . К этой модели мы перейдем в следующем параграфе.

Как уже упоминалось, в нейтральном атоме вокруг ядра движутся  $Z$  электронов, которые заполняют сферу радиуса



$\sim 10^{-8}$  см. Чтобы представить себе масштабы и степень заполненности внутриатомного пространства, приведем следующий пример. Вообразим, что капля воды увеличена до размеров земного шара и что все атомы в капле также увеличены в той же пропорции. Тогда диаметр атома увеличится до нескольких метров. Диаметр ядра, однако, достигнет лишь 0,01 мм.

Из этих масштабных отношений следует, что в огромном большинстве физических и химических процессов ядра проявляют себя просто как точечные положительно заряженные массы и существенной оказывается только система внешних электронов. Это обстоятельство стимулировало изучение электронного облака атома. Достигнутые успехи настолько значительны, что сейчас мы обладаем теорией, которая, по-видимому, находится в полном согласии с опытом. Развитие ядерной физики относится к более позднему времени. В последнее время она столь стремительно продвинулась вперед, что подробный рассказ об этом потребовал бы отдельной книги. Здесь мы коснемся только некоторых главных фактов из этой обширной области. Следующий параграф посвящен описанию экспериментальных результатов и непосредственных следствий из них, которые существенны для наших теоретических представлений. Более подробный отчет о теории ядра, включая теорию уже упоминавшихся ядерных сил (гл. II, § 8), мы дадим позднее (гл. VII, § 3), когда будет сформулирована новая механика, необходимая для описания атомных систем.

#### § 4. Дефект массы и энергия связи ядер. Нейтрино

Как уже отмечалось, масса ядра не равна в точности сумме масс протонов. Это легко понять. Чтобы удалить протон, нейтрон или  $\alpha$ -частицу из сложного ядра, необходимо затратить энергию (кроме случая радиоактивных веществ, которые могут распадаться самопроизвольно, без предварительной затраты энергии). Убыль энергии при объединении элементарных частиц в ядро эквивалентна, по Эйнштейну (гл. III, § 2), уменьшению массы, так что вес образовавшегося ядра меньше суммарного веса составляющих его частиц. Приведем пример. Наибольшая потеря массы получается при образовании атома гелия из четырех атомов водорода. Общая масса последних составляет  $4 \cdot 1,008$ , а масса их связанного состояния (гелия) равна 4,004; таким образом, освободившаяся при объединении энергия равна по формуле Эйнштейна

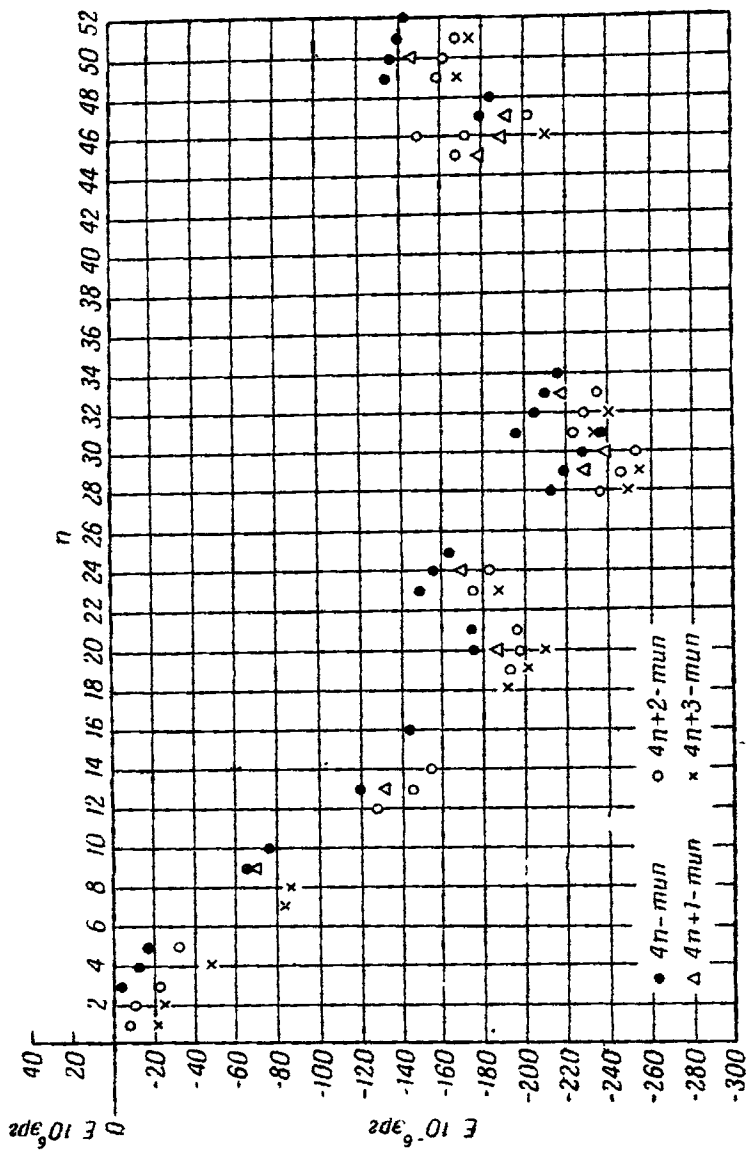
$$E = (4 \cdot 1,008 - 4,004) c^2 = 0,028c^2 = 0,25 \cdot 10^{20} \text{ эрг} \cdot \text{моль}^{-1}.$$

Для расщепления атома гелия на четыре атома водорода необходимо затратить по крайней мере такую же энергию. Чтобы лучше представить себе порядок этой величины, переведем эрги в калории; для  $E$  мы получим грандиозное число  $6,4 \cdot 10^8$  ккал/моль. Можно отметить для сравнения, что количество тепла, выделяющееся при сгорании одного моля топлива, составляет по порядку величины несколько сотен килокалорий. В ядерной физике дефекты масс или энергии связи обычно выражают либо просто в атомных весовых единицах (например, для гелия  $E=0,028$ ), либо, поскольку получающиеся численные значения малы, в электронных массах  $m$  (или в электронных энергиях  $mc^2$ ), так что для He

$$E = 0,028 \cdot 1840mc^2 = 52mc^2.$$

Мы будем часто пользоваться единицами  $mc^2$ . Эта единица соответствует кинетической энергии электрона, прошедшего разность потенциалов 510 000 в; мы будем говорить, что она равна  $5,1 \cdot 10^5$  эв (электрон-вольт) или 0,51 Мэв (мегаэлектрон-вольт). Измерения дефектов массы, проведенные с большой точностью Астоном и др. (начиная с 1920 г.), дают, таким образом, сведения о «теплотах образования» ядер, т. е. об энергетических соотношениях в ядерной системе. Было обнаружено, что эти соотношения подчиняются некоторым вполне определенным правилам. Оказывается удобным разбить все ядра на четыре группы в соответствии с тем, делится ли массовое число на четыре, или деление дает остаток 1, 2 или 3; мы вернемся к этому немного ниже. На фиг. 26 приведены энергии связи (и, следовательно, дефекты масс); видно, что при увеличении атомного номера энергия связи (дефект масс) сначала быстро растет, а затем начинает медленно спадать при приближении к радиоактивным элементам.

Для объяснения этих фактов существенны предположения о составных частях ядер. Мы уже видели, что электроны не могут поместиться внутри ядер, если считать радиус электрона физической реальностью. Поскольку изложенное нами рассуждение могло показаться недостаточно убедительным, приобретает важность тот факт, что невозможность продолжительного существования электрона внутри ядра более достоверно следует из измерений ядерных моментов количества движения — так называемого ядерного спина. Мы еще вернемся к этому вопросу (гл. IX, § 3), здесь же нужно отметить только следующее. В квантовой теории момент частицы всегда равен целому числу некоторых элементарных единиц; при этом момент системы частиц должен быть связан простыми целочисленными соотношениями с моментами отдельно взятых частей. Эти соотношения,



Фиг. 26. Энергии связи (дефекты масс) в ядрах в зависимости от  $n$  — такого наибольшего целого числа, что  $4l$  не превосходит величины атомного веса.

хотя они выполняются без всяких исключений для электронных оболочек атомов, не имели бы место для ядер, содержащих электроны, что хорошо выяснено на примере ядра азота  $N^{14}$ ; если строить ядра из протонов и электронов, то моменты ведут себя, как если бы в ядре были одни только протоны (Гайтлер, Герцберг, 1929 г.).

Сейчас в нашем распоряжении имеются другие частицы, прежде всего нейтроны, и, естественно, возникает мысль попытаться использовать их для объяснения структуры ядер. Все вышеперечисленные трудности исчезают, если принять, что ядра составлены из протонов и нейтронов (Иваненко, Гейзенберг, 1932 г.). Прежде всего уже простые предположения о силах взаимодействия позволяют в этом случае понять тот фундаментальный факт, что атомный вес  $A$  легких атомов вдвое больше атомного номера  $Z$ , тогда как для тяжелых атомов он возрастает несколько быстрее, чем  $2Z$ . Ведь между двумя протонами действует сила кулоновского отталкивания их положительных зарядов, поэтому, чтобы образование ядер было вообще возможным, между нейтроном и протоном должны существовать очень значительные короткодействующие силы притяжения. Существуют еще и другие силы — силы между двумя нейтронами и силы между двумя протонами; последние изучались в опытах по рассеянию протонов на протонах (фото 6); оказалось, что они того же порядка, что и нейтрон-протонные силы. Разумно предположить то же самое для взаимодействия нейтрон — нейтрон. Тогда нейтрон и протон можно считать одной и той же частицей, называемой *нуклоном*, который может находиться в двух состояниях соответственно двум значениям заряда 0 и 1. Заряд, однако, влияет на короткодействующие силы таким образом, что протон-нейтронные силы несколько больше, чем силы между одноименными частицами; сверх того, заряд порождает электростатическое (кулоновское) отталкивание между протонами. Теперь можно понять поведение дроби  $A/2Z$ .

Число  $p$  протонов и число  $n$  нейтронов так согласованы друг с другом, что при образовании ядра освобождается наибольшая энергия. Это означает, если пренебречь кулоновским отталкиванием протонов, то образуется максимально возможное количество нейтрон-протонных пар. При заданном атомном весе, или, точнее, массовом числе  $A = p + n$ , самым устойчивым состоянием для малых чисел  $A$  будет состояние, в котором  $p = n$ . Так как  $p$  равно атомному номеру  $Z$ , то  $A = 2Z$ . Однако, чем больше протонов окажется в ядре, тем большее значение приобретает кулоновское отталкивание. Ясно, что это препятствует росту числа протонов. Таким образом, разность  $n - p$  становится больше нуля и растет с увеличением  $p = Z$ . Отсюда следует, что

$A = n + p > 2p$  или  $A > 2Z$  и что  $A - 2Z$  растет при увеличении  $Z$ ; так и обстоит дело в действительности. Вероятно, что протон-нейтронные пары в ядре по возможности стремятся объединиться в  $\alpha$ -частицы, так как известно, во-первых, что  $\alpha$ -частица относительно прочна (дефект массы велик, см. выше), во-вторых, что именно  $\alpha$ -частицы излучаются нестабильными (радиоактивными) ядрами и, наконец, что дефекты масс тех ядер, атомный вес которых кратен четырем, образуют правильные серии.

Более того, устойчивость  $\alpha$ -частицы приобретает разумное объяснение при рассмотрении сил, возникающих при обмене зарядами и спинами между элементарными частицами и имеющих тенденцию к насыщению (образованию систем с нулевым моментом в соответствии с принципом Паули, см. VI, § 5). Так можно объяснить радиоактивный  $\alpha$ -распад.

Что касается  $\beta$ -распада, т. е. излучения электрона, то новая концепция привлекательна тем, что сводит его к элементарному процессу, именно к распаду нейтрона на протон и электрон. Наблюдается также испускание позитронов из ядер с малым временем жизни (полученных искусственным путем, см. гл. III, § 6); этот процесс должен быть распадом протона на нейтрон и позитрон. Для обычного  $\beta$ -излучения, как мы видели (гл. II, § 4), характерен непрерывный спектр скоростей; то же самое справедливо для  $\beta^+$ -излучения. Мы уже говорили о возникающих при этом фундаментальных трудностях; они состоят в нарушении энергетического принципа для таких процессов (как, впрочем, и закона сохранения момента или спина).

Для спасения этих законов не остается ничего другого, как предположить, что существует еще третья частица, участвующая в процессе, но ускользающая в силу своих свойств от прямого наблюдения (Паули, Ферми, 1934 г.). Она должна быть очень легкой и не иметь заряда; поэтому ее называют «нейтрино». Существуют косвенные доказательства существования такой частицы, совершенно аналогичные доказательству существования нейтрона (гл. II, § 6). Наблюдая следы атомных ядер, испытавших столкновения, и применяя к ним закон сохранения импульса, мы сделали вывод о существовании нейтрона. В случае нейтрино подобные столкновения слишком редки; вместо них, однако, можно рассмотреть отдачу при распаде. Для естественных радиоактивных веществ, атомы которых очень тяжелы, лед отдачи атомного остатка при  $\beta$ -распаде безусловно слишком мал; но теперь мы умеем создавать легкие радиоактивные томы искусственным путем (§ 6 этой главы), и эффект отдачи для них, конечно, можно обнаружить. Если направления треков электрона и атомного остатка оказываются не точно противоположными друг другу, то для объяснения этого явления пред-

почтительнее ввести третью, невидимую частицу, чем отказаться от закона сохранения импульса (Бете, Пайерлс, 1934 г.).

Первые эксперименты (Лейпунский, 1936 г.; Крейн и Хэлперн, 1938—1939 гг.) дали лишь слабые указания на существование нейтрино. К убедительным результатам привел новый метод (Аллен, 1942 г.). Исследовался радиоактивный изотоп бериллия, полученный бомбардировкой обычного лития дейтронами, в результате реакции  ${}_3\text{Li}^6 + {}_1\text{D}^2 = {}_4\text{Be}^7$  (см. табл. 4 на стр. 92). Здесь, как и в дальнейшем, нижний индекс означает атомный номер  $Z$ , а верхний — округленный атомный вес, или массовое число  $A$ . Так как  ${}_4\text{Be}^7$  содержит на один протон больше, чем  ${}_3\text{Li}^7$ , он менее устойчив (в соответствии с соображениями, высказанными нами выше). Но разница еще слишком мала, чтобы  ${}_4\text{Be}^7$  выбросил позитрон ( $\beta^+$ -распад). Происходит другая странная вещь: ядро  ${}_4\text{Be}^7$  захватывает один из ближайших электронов оболочки ( $K$ -захват), превращаясь, таким образом, с полупериодом примерно в 43 дня в  ${}_3\text{Li}^7$  (гл. VII, § 7). В этом случае энергия отдачи образовавшегося атома зависит лишь от испущенного нейтрино. Судя по разности масс  ${}_4\text{Be}^7$  и  ${}_3\text{Li}^7$  (соответствующей 370 000 эв), энергия отдачи должна быть около 58 эв. Экспериментальные результаты, полученные Алленом, удовлетворительно согласуются с этой величиной.

Недавно были выполнены (Рейнес и Коуэн, 1956 г.) новые эксперименты; многие физики считают их более прямым доказательством существования нейтрино. Атомный котел (гл. VII, § 7) излучает мощный поток нейтрино, и для их обнаружения можно использовать обратный  $\beta$ -процесс. В этом процессе протон захватывает нейтрино, распадаясь затем на нейтрон и позитрон. Одновременное наблюдение нейтрона и позитрона убедительно свидетельствует о том, что нейтрино существует как элементарная частица.

## § 5. Тяжелый водород и тяжелая вода

Для большинства элементов факт существования изотопов не так уж важен в повседневной практике физиков и химиков, ибо разница масс изотопов относительно невелика и их свойства почти одинаковы. По-иному обстоит дело с недавно открытым изотопом водорода, масса ядра которого равна примерно удвоенной массе протона; он получил название *дейтрона* («второго»). Тут физические и химические свойства изотопов оказываются существенно различными, так что мы имеем право говорить о действительно новом элементе, названном *дейтерием* и получившем символ  $D$ .

Значительность открытия дейтерия становится особенно понятной, если учесть, что наиболее важное химическое соединение водорода — вода, которая издавна служит физике своего рода стандартом, — теперь оказывается смесью нескольких сортов молекул ( $H_2O$ ,  $HDO$ ,  $D_2O$ ), молекулярные веса которых отличаются друг от друга на 5 и 10% соответственно. В этом смысле очень удачно получилось, что по причинам другого, чисто практического характера мы давно отказались от определения килограмма как массы  $1000 \text{ см}^3$  воды при ее максимальной плотности, определив вместо этого единичную массу как массу некоторого платино-иридиевого образца.

Стоит рассказать, однако, почти романтическую историю открытия дейтерия, напоминающую открытие аргона в атмосфере (Релей, Рамзей, 1894 г.); в обоих случаях ключом к открытию стало доверие к совсем крошечным расхождениям в различных измерениях одной и той же величины.

Напомним вначале, что спектрографическими методами были открыты два изотопа кислорода с массами 17 и 18. Так как частоты колебаний обратно пропорциональны квадратному корню из масс колеблющихся частиц, изотопы были обнаружены по появлению смещенных линий в молекулярных спектрах. Однако интенсивность линий была очень мала, а количество изотопов так ничтожно, что все это не могло повлиять на практические измерения. С теоретической же точки зрения доказательство существования изотопов и измерение их относительных количеств привело к важным следствиям. По этим данным и химическим молекулярным весам мы можем вычислить действительную массу атома водорода  $H$ , приняв массу основного изотопа кислорода за 16. С другой стороны, та же масса водорода была измерена Астоном на масс-спектрографе. Бёрдж и Мензел (1931г.) обнаружили разницу в  $1/5000$  и заключили, что водород также должен содержать малое количество (около  $1/4000$ ) тяжелого изотопа с массой  $2^1$ ). Вскоре после этого Юри, Брикведд и Мёрфи (1931 г.) предприняли спектроскопические исследования водорода. Мы покажем (гл. V, § 1), что положение спектроскопических атомных линий также зависит от массы ядер. И в самом деле, на должном расстоянии от основной водородной линии были обнаружены слабые линии-спутники. Для обогащения водорода тяжелым изотопом  $D$  применялись различные методы, причем наиболее успешным из них оказался обычный электролиз (Юри и Вашберн, Льюис и Макдональд, 1932 г.). Оказалось, что легкий

<sup>1)</sup> Позднейшие измерения Астона показали, однако, что эти столь правдоподобные выводы были основаны на неточных измерениях.

водород  $H_2$  выделяется на катоде в 5—6 раз быстрее, чем тяжелый  $D_2$ . Если первоначальная концентрация определяется соотношением 1:5000, то электролиз шести литров обыкновенной воды может дать нам около 1 см<sup>3</sup> чистой тяжелой воды. Между прочим, сейчас этот метод позволяет получать тяжелую воду в количествах, достаточных для изучения ее свойств. Другой метод разделения изотопов, на который обратил внимание еще Герц (гл. II, § 5), основан на разнице в коэффициентах диффузии газов. Этим методом было получено около 1 см<sup>3</sup> дейтерия такой чистоты, что спектральных линий обычного водорода (так называемых бальмеровских линий, см. гл. V, § 1) вообще не было видно. Точная масса D-атома в кислородных единицах равна 2,0147 (Астон, 1936 г.), тогда как масса H-атома составляет 1,0081. С точки зрения Гейзенберга (гл. III, § 21) мы должны рассматривать ядро дейтерия как комбинацию протон + нейтрон. Это было доказано непосредственно:  $\gamma$ -лучи расщепляют дейтрон на протон и нейтрон (Чэдвик и Гольдхабер, 1934 г., гл. III, § 6). Свойства тяжелой воды  $D_2O$  заметно отличаются от свойств обычной воды  $H_2O$ . Так, точка замерзания  $D_2O$  приблизительно на 3,8°, а точка кипения на 1,4° выше, чем у обычной воды; плотность  $D_2O$  примерно на 11% превосходит плотность  $H_2O$ . Аналогичные результаты получаются для других веществ, в которых H полностью или частично заменен на D. Скорости химических реакций с участием этих веществ значительно изменяются. Так возникла новая область химии, важная также и для биологии.

Для физиков важность тяжелого водорода определяется тем фактом, что появляется возможность получать пучки D-атомов так же легко, как и H-атомов. Это открывает новые возможности бомбардировки других ядер, что уже дало ценную информацию об их структуре. Об этом мы будем говорить в следующем параграфе.

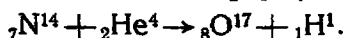
## **§ 6. Искусственное расщепление ядер и искусственная радиоактивность**

Как известно, опыт показывает, что на радиоактивные распады ядер нельзя воздействовать обычными физическими средствами — они происходят самопроизвольно в соответствии со статистическими законами. Если бы мы располагали только такими процессами, то нам никогда не удалось бы получить прямую информацию о строении большинства нерадиоактивных ядер и пришлось бы довольствоваться лишь гипотезами.

Поэтому огромное значение приобретает открытие Резерфорда (1919 г.), установившего, что ядро можно расщепить,



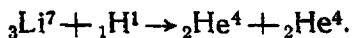
подвергнув его воздействию  $\alpha$ -лучей. Впервые это было проделано с ядром азота. В камере Вильсона можно время от времени наблюдать ядерные столкновения, при которых внезапно исчезает трек налетающей  $\alpha$ -частицы, а там, где он кончается, появляется трек испытавшего удар ядра и более протяженный трек вторичной частицы (фото 7, 8, 9). Тот же результат был впоследствии получен на ядрах многих других элементов — бора, фтора, неона, натрия и пр. (Резерфорд, Чэдвик, Кириш и Паттерсон, 1920—1925 гг.). Опыты по отклонению в полях показали, что образующиеся легкие частицы представляют собой протоны. Очевидно,  $\alpha$ -частица поглощается ядром; при этом атом  ${}^7\text{N}^{14}$  превращается в упоминавшийся выше изотоп кислорода с массой 17 в согласии с формулой



Здесь уже видны истоки своего рода ядерной химии, законы которой можно сформулировать, как и в только что приведенном примере, совершенно аналогично химическим формулам. (Можно также включить в эти формулы энергию связи, которая будет служить аналогом теплоты образования и будет компенсировать разницу в кинетических энергиях частиц.) Само явление вопреки тому, что предполагалось сначала и часто еще утверждается теперь, состоит не в разрушении ядра, а в его превращении в другое ядро, что нередко почти решает проблему искусственного получения ядер. Сравнительно недавно для облучения ядер было использовано большое число других быстрых частиц; были изучены вызываемые этими частицами ядерные превращения.

Весьма впечатляющие результаты получены методом фотоэмульсий (гл. II, § 4); на фото 10 приведен пример взрывоподобного распада, который наблюдался группой Пауэлла в Бристоле.

В 1932 году Кокрофт и Уолтон обнаружили, что искусственно полученные пучки протонов с энергией 12 000 эв, что приблизительно равно  $mc^2/4$  и совсем немного в сравнении с энергией естественных  $\alpha$ -лучей (около  $16 mc^2$ ), способны расщеплять ядра атомов лития согласно формуле



При этом наблюдение в камере Вильсона обнаружило, что два ядра гелия, т. е.  $\alpha$ -частицы, одновременно вылетают из облучаемой литиевой пленки в противоположных направлениях (Киришнер, Ди и Уолтон, 1934 г., фото 11). Аналогичные превращения удалось наблюдать в большой группе других ядер. При этом весьма примечательно, что измерить массу ядра с по-

мощью масс-спектрографа и определить кинетические энергии частиц до и после распада можно с такой точностью, которая позволяет получить прямое экспериментальное подтверждение закона Эйнштейна  $E=mc^2$  (Бейнбридж, 1933 г.).

Может сложиться впечатление, что ядерные превращения происходят только в том случае, когда налетающий протон приближается к ядру на очень малое расстояние; однако дело обстоит не так. Минимальное расстояние между протоном и ядром нетрудно вычислить, приравнявая потенциальную энергию  $e^2Z/r$  на этом расстоянии к кинетической энергии протона  $eV$ , где  $V$  — ускоряющий потенциал. Так,

$$V = \frac{eZ}{r}, \quad r = \frac{eZ}{V}.$$

Следовательно, при энергии  $eV$ , равной  $10^5$  эв, т. е.  $1,59 \cdot 10^{-7}$  эрг (так что  $V = \frac{1}{3} \cdot 10^3$  CGSE), получаем для  $Z=1$

$$r = 4,80 \cdot 10^{-10} \cdot 1 \cdot 3 \cdot 10^{-3} = 14 \cdot 10^{-13} \text{ см}$$

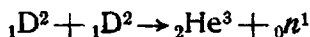
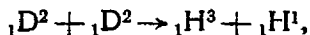
— величину того же порядка, что и радиус ядра (гл. III, § 3 и гл. VII, § 1). Но эффект искусственного распада лития наблюдается даже при энергиях несколько ниже 30 000 эв, когда протон заведомо находится вне ядра (Траубенберг и Дёпель, 1933 г.). Объяснение этого факта будет дано позднее (гл. VII, § 1).

Тяжелый изотоп водорода D тоже использовался для бомбардировки ядер и оказался чрезвычайно эффективным (Льюис, Левингстон, Лоуренс, 1933 г.). Так, например, можно (согласно Кокрофту и Уолтону, 1934 г.) вызвать превращение легкого изотопа лития в тяжелый:



Полученные таким образом протоны обладают очень большой энергией. Нет нужды перечислять здесь все осуществленные к настоящему времени ядерные превращения. Некоторые из них вместе с процессами, которые нам понадобятся уже сейчас, перечислены в табл. 4.

Важным открытием явилось обнаружение новых изотопов водорода и гелия, именно  ${}_1\text{H}^3$  (названного «тритином», или тритием) и  ${}_2\text{He}^3$ . Эти изотопы были впервые получены в Кавендишской национальной лаборатории при экспериментах по расщеплению ядер в соответствии с реакциями (Олифант, Хартек, Резерфорд, 1934 г.)



## Искусственное превращение ядер

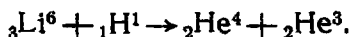
Радиоактивные ядра, излучающие электроны (позитроны), помечены значками «минус» («плюс»)

Бомбардирующая частица	$\gamma$	${}_0n^1$	${}_1H^1$	${}_1D^2$	${}_2He^4$
Ядро					
${}_1D^2$	${}_1H^1 + {}_0n^1$			${}_1H^3 + {}_1H^1$ ${}_2He^3 + {}_0n^1$	
${}_3Li^6$		${}_2He^4 + {}_1H^3$	${}_2He^4 + {}_2He^3$	${}_3Li^7 + {}_1H^1$ ${}_2He^4 + {}_2He^4$ ${}_4Be^7 + {}_0n^1$	
${}_4Li^7$		${}_3Li^5 + \gamma(?)$	${}_2He^4 + {}_2He^4$ ${}_4Be^7 + {}_0n^1$	${}_2He^4 + {}_0n^1$ ${}_2Li^5 + {}_1H^1$	${}_5B^{10} + {}_0n^1$
${}_4Be^9$	${}_4Be^8 + {}_0n^1$	${}_2He^6 + {}_2He^4$	${}_4Be^8 + {}_1D^2$	${}_5B^{10} + {}_0n^1$	${}_6C^{12} + {}_0n^1$
${}_5B^{10}$		${}_3Li^7 + {}_2He^4$ ${}_2He^4 + {}_1H^3$		${}_6C^{11} + {}_0n^1$ ${}_3He^4$ ${}_5B^{11} + {}_1H^1$	${}_7N^{13} + {}_0n^1$ ${}_6C^{13} + {}_1H^1$
${}_5B^{11}$			${}_3He^4$	${}_6C^{12} + {}_0n^1$ ${}_5B^{12} + {}_1H^1$ ${}_3He^4 + {}_0n^1$	
${}_6C^{12}$		${}_3He^4 + {}_0n^1$ ${}_4Be^9 + {}_2He^4$	${}_7N^{13} + \gamma$	${}_7N^{13} + {}_0n^1$	
${}_6C^{13}$				${}_7N^{14} + {}_0n^1$ ${}_5B^{11} + {}_2He^4$	
${}_7N^{14}$		${}_5B^{11} + {}_2He^4$ ${}_6C^{14} + {}_1H^1$ ${}_3Li^7 + {}_2He^4$		${}_7N^{15} + {}_1H^1$ ${}_6C^{12} + {}_2He^4$	${}_8O^{17} + {}_1H^1$ ${}_9F^{17} + {}_0n^1$
${}_8O^{16}$		${}_6C^{13} + {}_2He^4$			

Таблица 4. Продолжение

Бомбардирующие частицы	$\gamma$	${}_0n^1$	${}_1H^1$	${}_1D^2$	${}_2He^4$
Ядро					
${}_9F^{19}$		${}_7\bar{N}^{16} + {}_2He^4$	${}_8O^{16} + {}_2He^4$	${}_9\bar{F}^{20} + {}_1H^1$	${}_{10}Ne^{22} + {}_1H^1$ + ${}_{11}Na^{22} + {}_0n^1$
${}_{10}Ne^{20}$					${}_{11}Na^{23} + {}_1H^1$
${}_{11}Na^{23}$		${}_{11}\bar{Na}^{24} + \gamma$		${}_{11}\bar{Na}^{24} + {}_1H^1$	${}_{12}Mg^{26} + {}_1H^1$ + ${}_{13}Al^{26} + {}_0n^1$
${}_{12}Mg^{24}$		${}_{11}\bar{Na}^{24} + {}_1H^1$			${}_{13}Al^{27} + {}_1H^1$ ${}_{14}Si^{27} + {}_0n^1$
${}_{18}Al^{27}$		${}_{11}\bar{Na}^{24} + {}_2He^4$ ${}_{12}\bar{Mg}^{27} + {}_1H^1$		${}_{13}\bar{Al}^{28} + {}_1H^1$	${}_{14}Si^{30} + {}_1H^1$ ${}_{15}P^{30} + {}_0n^1$

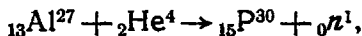
и (Олифант, Кинси и Резерфорд, 1933 г.)



Вскоре после этого  ${}_1H^3$  зафиксировали непосредственно на масс-спектрографе как небольшую примесь к  ${}_1H^1$  и  ${}_1D^2$  (Блэки, Лозьер, Смит, 1934 г.). Современные методы, о которых мы расскажем ниже, позволили получать новые изотопы  ${}_2H^3$  и  ${}_2He^3$  в количестве, хотя и незначительном, но достаточном для изучения их физических свойств.

В дальнейшем в качестве бомбардирующих частиц применили нейтроны (Физер, Харкинс, 1932 г.). Сразу можно предположить, что эффективность нейтронов должна быть весьма значительна, так как они не заряжены и потому не тормозятся электрическим полем мишени. Это предположение подтвердилось и привело к открытию нового класса ядерных превращений, о которых сейчас и пойдет речь. Отметим, что эти процессы — их можно назвать процессами искусственного получения радиоактивных веществ — были открыты в 1934 году с помощью  $\alpha$ -лучей, а не нейтронов. Честь открытия принадлежит Ирен Кюри и ее мужу Фредерику Жолио. Выяснилось, например, что алюминий, на который воздействуют  $\alpha$ -лучи, выбивая из него нейтроны, продолжает излучать и после прекращения этого

воздействия, причем вторичное излучение состоит из положительных электронов. Ясно, что первоначальным продуктом реакции, согласно уравнению



должен оказаться радиоактивный изотоп фосфора, который затем превращается в изотоп кремния, испуская позитрон:

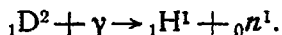


Период полураспада «радиофосфора», как было обнаружено, равен 3 мин. Это достаточно, чтобы проверить правильность интерпретации старым химическим методом — методом осаждения (гл. II, § 5). Протон и его изотоп D также оказались удобными для получения радиоактивных ядер.

Однако к самым содержательным и многочисленным результатам привели опыты с нейтронами, используя которые Ферми и его сотрудники в 1934 году получили новые радиоактивные ядра из большинства известных атомов. Несмотря на довольно короткое время жизни этих ядер (несколько минут), удалось определить химическую природу продуктов реакции; при этом было установлено, что атомный номер ядра, захватившего нейтрон, изменяется на 2, 1 или 0, что соответствует излучению  $\alpha$ -частицы, протона или светового кванта.

Проходя через вещества, которые содержат много атомов водорода, например воду или парафин, нейтроны замедляются в результате столкновений с протонами, отдавая этим частицам, имеющим такую же массу, половину своей энергии при каждом столкновении. Таким способом удается получить нейтроны, находящиеся почти в тепловом равновесии с окружающей средой. Ядерные превращения, вызванные этими медленными нейтронами, особенно интенсивны и обладают большим числом интересных особенностей, таких, например, как избирательное поглощение дейтронов некоторыми элементами. Изучение процессов с участием медленных нейтронов представляет собой один из самых мощных методов, выявляющих закономерности строения ядра (см. гл. VII, § 9).

В 1934 году Чэдвик и Голдхабер, используя  $\gamma$ -излучение как средство воздействия на ядра, обнаружили ядерные превращения нового типа. Было обнаружено, что тяжелый изотоп водорода D расщепляется по схеме



Это позволило определить энергию связи D-ядра ( $D=p+n$ ) и вычислить массу нейтрона. К настоящему времени лучшие данные таковы: 2,237 Мэв или 4,38  $mc^2$  для энергии связи и 1,00899

для массы нейтрона (Эллиот и Бэлл, 1948 г.). В последнее время технические средства, позволяющие получать пучки быстрых частиц, значительно усовершенствованы. Простой принцип электрофорной машины, способной создавать высокий электрический потенциал за счет механического перемещения заряженного тела, был в гигантских масштабах использован Ван-дер-Граафом (1931 г.), который применил в качестве переносчика заряда длинную замкнутую ленту. Полученный высокий потенциал подается на вакуумную трубу, где за один цикл происходит ускорение заряженных частиц (линейные ускорители).

Задача ускорения электронов — релятивистская задача, поскольку, например, электрон с энергией  $1,0 \text{ Мэв}$  обладает скоростью  $0,94 c$  (см. гл. I, § 1 и приложение 5). Интересной категорией высокоэнергетических линейных ускорителей являются ускорители, использующие так устроенные круговые волноводы, что электромагнитная волна распространяется в них с постоянно возрастающей скоростью, приближающейся в конце концов к скорости света. При инжекции электронов скорость волны совпадает со скоростью последних, затем электроны ускоряются электрической составляющей электромагнитной волны, которая как бы «несет» их на себе. Ускоритель такого типа, сооружаемый в Стэнфорде, будет сообщать электронам энергию в  $1 \text{ Бэв}$  ( $1000 \text{ Мэв}$ ).

В других типах ускорителей разгоняющий потенциал невелик, зато возможно многократное ускорение частиц на периодической орбите с помощью повторяющихся электромагнитных импульсов. Самые удачные машины такого типа — *циклотрон*, ускоряющий ионы (Лоуренс и Эдлефсон, 1930 г.), и *бетатрон*, ускоряющий электроны (Керст и Сербер, 1941 г.). И в той и в другой машине заряженные частицы удерживаются на круговой орбите сильным магнитным полем (гл. II, § 1), но собственно ускорение проводится различными способами. В циклотроне две половины круговой орбиты поддерживаются под различными электрическими потенциалами (с помощью металлических коробок, имеющих форму полукруга). Частицы, пересекая диаметр, отделяющий одну половину орбиты от другой (т. е. переходя из одной коробки в другую), испытывают на себе действие сильного поля. Последнее создается высокочастотным генератором и подобрано так, что каждое пересечение упомянутого диаметра сопровождается разгоняющим импульсом. В бетатроне вообще не используется электрическое поле; ускорение осуществляется магнитным полем, которое, изменяясь, создает электродвижущую силу индукции, воздействующую на электроны, движущиеся по круговой орбите. Тщательная наладка позволяет настолько стабилизировать движение электронов,

что, несмотря на случайные столкновения с атомами, они проходят орбиту много сотен тысяч раз. Энергия, достижимая на обычном циклотроне, ограничена релятивистским изменением массы, которому подвержена разгоняемая частица при увеличении энергии (гл. I, § 1). Это можно видеть следующим образом. Для непрерывного ускорения частицы необходимо, чтобы момент ее перехода из одной полукруговой коробки в другую был согласован с высокочастотными колебаниями поля. Если частица с массой  $m$  и зарядом  $e$  движется по кругу радиуса  $R$  в плоскости, перпендикулярной магнитному полю  $H$ , то должно выполняться равенство

$$Hev = \frac{mv^2}{R}.$$

Здесь  $v$  — скорость частицы. Пользуясь тем, что  $v = \omega R$ , где  $\omega$  — круговая частота, запишем

$$\omega = \frac{He}{m}.$$

Поэтому если  $m$  постоянна, то  $\omega$  принимает одно и то же значение для всех  $R$ . Однако если  $m$  изменяется в силу релятивистского увеличения массы, то для поддержания синхронизации между движением частицы и высокочастотными колебаниями поля необходимо менять либо  $\omega$ , либо  $H$ .

В синхроциклотроне (Векслер, 1944 г.; Макмиллан, 1945 г.) эта трудность преодолена с помощью периодического изменения частоты генератора. При этом ускорение частиц происходит порциями, взрывоподобно. Так, например, на 184-дюймовом синхроциклотроне Калифорнийского университета можно получать 120 порций протонов с энергией 350 Мэв каждую секунду. С другой стороны, в синхротроне согласование достигается путем изменения магнитного поля при фиксированной частоте генератора. В электронном синхротроне, рассчитанном на энергию около 2 Мэв, при которой  $v \sim c$ , угловая скорость частиц составляет  $\omega \sim c/R$ , так что радиус орбиты почти постоянен, если постоянна  $\omega$ . Это означает, что если в синхротрон вводить достаточно быстрые электроны, то отпадет необходимость в том, чтобы магнитное поле заполняло все пространство ускорителя. Это позволяет ограничиться кольцеобразным магнитом и, следовательно, значительно снизить стоимость сооружения. Для протонного синхротрона условия приблизительного постоянства радиуса орбиты не выполняются вплоть до энергий порядка 3 Бэв. Тем не менее орбиту с постоянным радиусом все же можно получить, если одновременно с увеличением поля изменять и частоту колебаний, так чтобы соотношение  $v = \omega R$  выполня-

лось для одного и того же радиуса  $R$ . В Брукгейвенской национальной лаборатории построен протонный синхротрон (космотрон), дающий протоны с энергией 3 *Бэв*. Еще большая машина (беватрон) Калифорнийского университета с диаметром орбиты 160 футов разгоняет протоны до энергии 7 *Бэв*. В различных лабораториях планируются и уже сооружаются также и еще более мощные ускорители, рассчитанные на энергии вплоть до 30 *Бэв*. С помощью машин описанных выше конструкций удалось получить большое число различных частиц, которые наблюдаются в естественных космических лучах (гл. II, § 8).

Позднее (гл. VII, § 9) в связи с кратким обзором теории ядра мы расскажем также о ядерной реакции совершенно иного типа. Она называется *делением* и состоит в том, что ядро распадается на части примерно одинаковых размеров.

На этом мы закончим этот небольшой обзор наших знаний о ядре и обратимся к изучению строения системы внешних электронов атома. Таким образом, мы приступаем к рассмотрению областей, линейные размеры которых в несколько тысяч раз больше размеров ядер. Благодаря совместным усилиям теоретиков и экспериментаторов фундаментальные законы, характерные для этих масштабов, достаточно хорошо выяснены во всех своих существенных чертах. Но осмыслить эти законы удалось лишь ценой отказа от классических воззрений — воззрений, к которым человеческий ум столь приучен повседневным опытом, сложившимся из наблюдения макроскопических явлений, что понадобился глубокий и болезненный пересмотр основных представлений классической физики.



# IV

## ВОЛНЫ — ЧАСТИЦЫ

### § 1. Волновая теория света. Интерференция и дифракция

Все те представления о строении вещества, к которым мы пришли в предыдущих главах, держатся на возможности доказать существование быстро движущихся частиц прямым опытом, на возможности даже непосредственно «увидеть» эти частицы, регистрируя их треки, как это делается, скажем, в камере Вильсона. Из таких экспериментов однозначно и недвусмысленно следует, что вещество состоит из мельчайших частиц — корпускул. Теперь же мы должны рассмотреть другие эксперименты, которые столь же убедительно свидетельствуют в пользу того, что молекулярный или электронный пучок представляет собой не что иное, как распространяющуюся *волну*. Но прежде чем перейти к делу, напомним вкратце, что известно о волновом движении вообще. При этом в качестве конкретного примера мы разберем явление оптической дифракции.

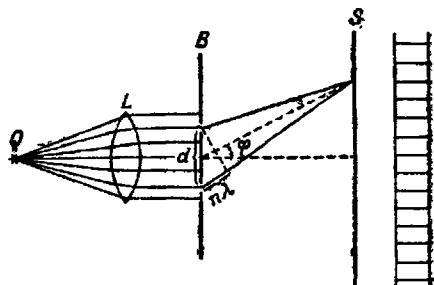
В восемнадцатом столетии физики почти единодушно придерживались ньютоновской корпускулярной теории (примерно 1680 г.), согласно которой свет состоит из комбинаций очень маленьких частиц, вылетающих из источника света. Волновая же теория Гюйгенса (1690 г.) насчитывала лишь нескольких сторонников (в их числе был и великий математик Леонард Эйлер). Однако положение вещей в корне изменилось к началу девятнадцатого века, когда благодаря открытию Юнга выяснилось, что при определенных условиях два световых луча могут взаимно ослаблять друг друга — явление, совершенно необъяснимое с точки зрения корпускулярной теории. Дальнейшие исследования Юнга и Френеля неопровержимо подтвердили волновую концепцию Гюйгенса, ибо явление интерференции нельзя объяснить иначе как с помощью волновой теории.

Опишем кратко *интерференционный опыт* Юнга (фиг. 27). Источник монохроматического света  $Q$  освещает параллельным (благодаря линзе  $L$ ) пучком две щели в диафрагме  $B$ . При этом на экране  $S$  за диафрагмой возникает эквидистантная система светлых и темных полос (ореолов). Объяснить это явление

ние можно следующим образом. Из двух щелей диафрагмы исходят две сферические волны, которые «когерентны», т. е. способны к взаимной интерференции. Эти волны накладываются одна на другую и усиливают друг друга в том случае, если их гребни совпадают. Если же гребни одной волны попадают на впадины другой, то волны «сглаживают» одна другую и, следовательно, происходит взаимоуничтожение волн. Стало быть, можно прямо указать те места экрана, где освещенность будет наибольшей — они соответствуют таким точкам, разность расстояний которых от отверстий диафрагмы составляет в точности целое число длин волн. Из фиг. 27 ясно, что эта разность

Фиг. 27. Дифракция на двух близко расположенных щелях.

Дифракционная картина представляет собой систему эквидистантных светлых и темных полос.



равна  $d \sin \varphi$ , где  $d$  — расстояние между отверстиями, а  $\varphi$  — угол отклонения. Поэтому на экране получится

светлое поле там, где  $d \sin \varphi = n\lambda$

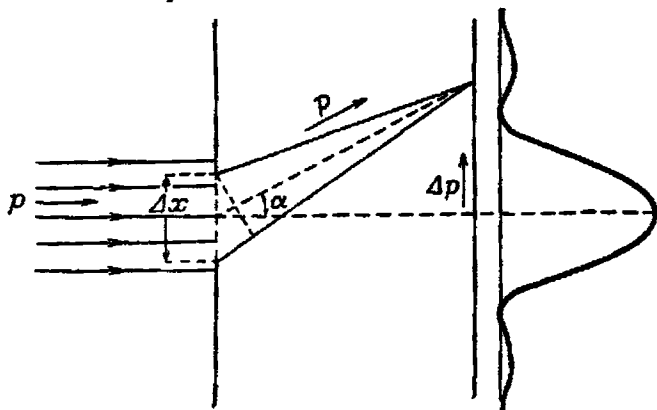
темное поле там, где  $d \sin \varphi = \left(n + \frac{1}{2}\right) \lambda$  } ( $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ).

Аналогичная дифракционная картина получается и при прохождении света через *одну щель*. Грубо говоря, это происходит вследствие взаимной интерференции между отдельно взятыми элементарными волнами Гюйгенса, исходящими из различных точек щели. Однако в двух пунктах этот случай существенно отличается от предыдущего. Во-первых, как нетрудно убедиться, соотношение

$$d \sin \varphi = n\lambda \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots),$$

где  $d$  — ширина щели, определяет теперь не светлые, а, наоборот, темные участки экрана. Действительно, в совокупности элементарных волн, исходящих от щели в заданном этим равенством направлении, все возможные «фазы» колебаний представлены в точности одинаковое число раз, т. е. количество волн, падающих на экран «гребнем», равно количеству волн, падающих «впадиной». Ясно поэтому, что все волны погасят

друг друга. Во-вторых, в предыдущем случае дифракционные максимумы были почти одинаково яркими, теперь же освещенность резко падает от максимума к максимуму, причем наибольшая освещенность приходится на средний максимум, как это изображено на фиг. 28 волнистой кривой справа. Необходимо особо подчеркнуть, что *дифракционная картина расплывается по мере уменьшения ширины щели*, что можно легко усмотреть либо из уравнения, определяющего минимум, либо непосредственно из фиг. 28.



Фиг. 28. Дифракция на одной щели.

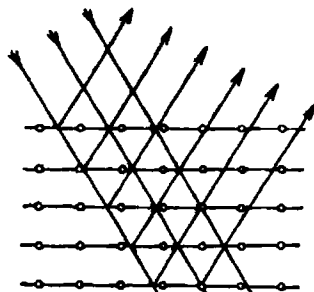
Дифракционная картина состоит из резкого максимума освещенности, отвечающего углу дифракции  $\alpha=0$ , и совокупности эквидистантных максимумов, интенсивность которых становится все меньше и меньше по мере увеличения угла дифракции.

Тот факт, что вид дифракционной картины существенно зависит от длины волны света, обеспечивает возможность использовать интерференционные явления для нужд спектрального анализа (дифракционные решетки, эшелоны, т. е. ступенчатые решетки, интерферометр Фабри — Перо, пластинка Льюммера). Чтобы дифракционная картина стала доступной наблюдению, необходимо, чтобы ширина щели была соизмерима с длиной волны света. Поэтому если мы хотим наблюдать интерференционные явления в рентгеновских лучах, то нужно взять дифракционные решетки с постоянной порядка величины  $1\text{ \AA} = 10^{-8}\text{ см}$ . Как показал Лауэ (1912 г.), сама природа дает нам в руки такие решетки. Это — кристаллы, межатомные расстояния в которых как раз и обладают нужным порядком величины. И в самом деле, прохождение пучка рентгеновских лучей сквозь кристалл действительно сопровождается интерференцией. Это явление, следуя Брэггу (1913 г.), можно истолковать как

интерференцию между отдельными лучами, отразившимися от различных плоскостей кристаллической решетки (фиг. 29). Более того, Комптону (1925 г.) и другим исследователям удалось получить интерференцию рентгеновских лучей даже на искусственных решетках: оказалось, что это все-таки возможно при скользящем падении лучей.

Фиг. 29. Дифракция рентгеновских лучей на кристалле.

Согласно Брэггу, лучи отражаются от плоскостей кристаллической решетки и поэтому интерferируют.



Интерференция рентгеновских лучей является мощным орудием исследования структуры кристаллов. Для этой цели не нужны даже большие куски кристалла — можно пользоваться кристаллическим порошком (Дебай — Шеррер, 1915 г.; Халл,



Фиг. 30. Логарифмическая шкала длин волн.

Приведенные числа представляют собой  $\ln(\lambda/\lambda_0)$ , где единица длины  $\lambda_0 = 1$  см.

1917 г.). В этом случае интерференционные картины имеют вид колец, расположенных вокруг первоначального направления пучка. Крупницы порошка могут при этом быть даже молекулярного размера. Более того, оказалось, что интерференционные картины, обусловленные дифракцией на отдельных атомах молекул, никоим образом не затуманиваются хаотичностью молекулярного движения в газе или жидкости. И здесь наблюдаются замкнутые интерференционные кольца, из распределения интенсивности в которых можно вывести определенные заключения о межатомных расстояниях в молекулах (Дебай, 1929 г.). Однако мы не будем здесь углубляться в описание этих методов, позволяющих понять ряд конкретных особенностей атомного строения вещества.

Приведем теперь шкалу длин волн различных типов излучения, подытоживающую наши современные знания в этой области. Шкала (фиг. 30) приведена в логарифмическом масштабе, так что нанесенные на ней цифры представляют собой показатели степени числа 10. За единицу принята  $\lambda_0 = 1$  см. К широкой области волн, применяемых в радиосвязи, примыкает область инфракрасных излучений, которые воспринимаются нашими органами чувств как тепловые лучи. Далее идет сравнительно узкая полоса видимого света (от 7700 до 3900 Å), затем — область ультрафиолетовых лучей и лучей Шумана, которая в свою очередь переходит в область рентгеновских лучей (от 10 до 0,05 Å). Радиоактивное  $\gamma$ -излучение охватывает области вплоть до 0,001 Å. В космическом излучении наблюдаются  $\gamma$ -лучи с чрезвычайно малой длиной волны ( $10^{-5}$  Å), которые оказываются за пределами нашей шкалы.

## § 2. Кванты света

Несмотря на огромный успех классических представлений в истолковании явлений интерференции, эти представления оказались совершенно бессильными при попытках объяснить процессы поглощения и излучения света. В этой области классическая электродинамика и классическая механика терпят полный провал.

Чтобы продемонстрировать это, вспомним, например, тот экспериментальный факт, что излучение водородного атома имеет вид бесконечной последовательности резко выраженных спектральных линий (гл. V, § 1). В атоме водорода имеется лишь один вращающийся вокруг ядра электрон. По законам электродинамики такой электрон будет непрерывно излучать, а стало быть, терять энергию. Поэтому в процессе движения он неизбежно должен приближаться к ядру все ближе и ближе и в конце концов упасть на него. Первоначально электрон, обладая какой-то определенной частотой обращения по орбите, будет излучать свет именно этой частоты. Когда же частота его движения (плавно) изменится из-за энергетических потерь, должна будет измениться и частота излучения. Но почему, спрашивается, в таком случае спектр водорода состоит из дискретных серий явно отделенных друг от друга линий? Понять этот факт оказывается совершенно невозможным.

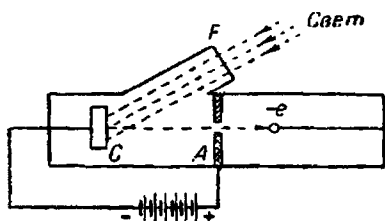
Совершенно не понятна с классической точки зрения и стабильность атомов. Для сравнения представим себе систему планет, обращающихся вокруг Солнца, каждая из которых движется, если нет никакого возмущающего влияния, по определенной неизменной орбите. Предположим, однако, что солнеч-

ная система оказалась бы вдруг в непосредственной близости, например, к Сириусу. Тогда это соседство уже само по себе искажило бы траектория планет. Если бы затем солнечная система вновь удалилась от Сириуса, то планеты стали бы вращаться вокруг Солнца уже по новым орбитам с новыми угловыми скоростями и периодами обращения. Если бы электроны в атоме подчинялись тем же механическим законам, что и планеты солнечной системы, то неизбежным следствием любого взаимодействия между двумя атомами было бы полное изменение основных частот электронов, так что после взаимодействия каждый атом излучал бы свет совершенно других длин волн. Этому, однако, в корне противоречит тот экспериментальный факт, что каждый атом газа, который, согласно кинетической теории, испытывает около 100 миллионов соударений в секунду, испускает тем не менее свет, отвечающий одним и тем же узким спектральным линиям и до, и после соударения.

Наконец, классическая механика и классическая статистика неспособны объяснить законы теплового излучения (излучения энергии). Здесь мы не будем входить в детали этого сложного вопроса (он рассмотрен в гл. VIII); отметим только основной результат, к которому, рассуждая аналогичным образом, пришел Планк (1900 г.). Оказалось, что для понимания законов излучения необходимо принять следующую гипотезу: *излучение и поглощение энергии материей происходит не непрерывно, а отдельными порциями — «квантами энергии»  $h\nu$*  (здесь  $h$  — постоянная Планка, равная  $6,62 \cdot 10^{-27}$  эрг·сек, и  $\nu$  — частота). С другой стороны, новая гипотеза все же сохраняет связь с классической электромагнитной теорией света, так что явления, сопутствующие распространению излучения (дифракция, интерференция), по-прежнему подчиняются классическим законам.

В 1905 году Эйнштейн пошел, однако, дальше Планка. Не ограничиваясь постулатом квантовых свойств процессов излучения и поглощения, он предложил считать, что такие свойства присущи свету вообще. В соответствии с *гипотезой световых квантов (фотонов)*, выдвинутой Эйнштейном, свет состоит из квантов (корпускул), несущих энергию  $h\nu$  и летящих в пространстве, подобно дробинкам, со скоростью света. Хотя на первый взгляд эта гипотеза может показаться слишком смелой, существует тем не менее целый ряд экспериментов, которые вряд ли можно истолковать в рамках волновой теории, но которые сразу же становятся понятными с позиций гипотезы световых квантов. Сейчас мы и перейдем к краткому разбору этих экспериментов, на которые указывал еще сам Эйнштейн, доказывая справедливость своей гипотезы.

Самый прямой путь превращения световой энергии в механическую реализуется в фотоэлектрическом эффекте (Герц, 1887 г.; Хальвакс, Эльстер и Гайтель, Ладенбург). Если коротковолновый (ультрафиолетовый) свет падает в условиях высокого вакуума на металлическую поверхность (щелочной металл), то тотчас же обнаруживается, что поверхность заряжается положительно (фиг. 31). Это означает, что поверхность отдает отрицательный электрический заряд, т. е. испускает электроны. Теперь можно, с одной стороны, измерить (регистраруя эти электроны) полный электрический ток с поверхности. С другой стороны, обратившись к опытам по отклонению или с помощью противодействующего поля, можно определить скорость электронов. Тщательные измерения показали, что



Фиг. 31. Получение фотоэлектронов (по Ленарду).

Свет, проходя сквозь отверстие  $F$ , попадает на катод  $C$  и выбивает из него электроны, которые затем ускоряются (или замедляются) электрическим полем между  $C$  и  $A$ .

скорость испускаемых электронов не зависит, как можно было бы ожидать, от интенсивности падающего света; с увеличением интенсивности возрастает лишь их число, причем возрастает пропорционально интенсивности. Что касается скорости фотоэлектронов, то она зависит только от частоты света  $\nu$ ; энергия электронов  $E$  определяется соотношением

$$E = h\nu - A,$$

где  $A$  — константа, характеризующая металл.

С точки зрения гипотезы световых квантов оба эти обстоятельства вполне понятны. Каждый световой квант, попадая в металл и взаимодействуя с одним из электронов, передает ему всю свою энергию и таким образом выбивает его из металла. Однако, прежде чем вырваться из металла, электрон теряет часть энергии, равную работе  $A$ , необходимой для его высвобождения. Число выбитых электронов пропорционально числу падающих световых квантов; последнее же определяется интенсивностью света.

Еще более очевидным указанием на существование квантов света служат эксперименты Э. Мейера и В. Герлаха (1914 г.) по фотоэлектрическому эффекту на мельчайших частицах металлической пыли. В результате облучения ультрафиолетовым

светом в этом случае снова освобождаются фотоэлектроны, так что частички металла оказываются заряженными положительно. Преимущество такой постановки опыта состоит в том, что при этом можно наблюдать сам процесс появления заряда на металлических пылинках. Для этого нужно только заставить их парить в электрическом поле, как это делалось в капельном методе Милликена при определении элементарного электрического заряда  $e$ . Каждый акт фотоизлучения электрона проявляет себя в ускорении, приобретенном частицей благодаря увеличению заряда.

Если считать, что падающий свет действительно представляет собой переменное электромагнитное поле, то нетрудно вычислить, зная размер пылинки, то время, в течение которого частичка металла поглотит достаточное для выброса электрона количество энергии. По порядку величины это время составляет несколько секунд. Если бы правильной оказалась классическая теория света, то фотоэлектрон никоим образом не смог бы покинуть пылинку раньше чем через несколько секунд после начала облучения. Но на опыте наблюдается как раз противоположная картина — фотонзлучение электронов начинается тотчас же вслед за началом облучения. Этот результат не объясним иначе, как на основе допущения, что свет представляет собой поток световых квантов, которые могут выбить электрон непосредственно в момент столкновения с частицей металла.

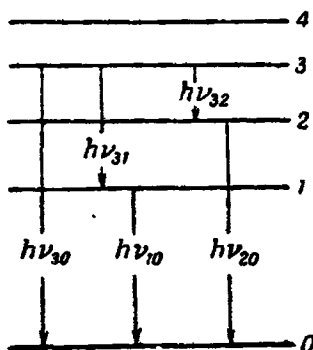
### § 3. Квантовая теория атома

Квантовая гипотеза Планка в своей первоначальной форме утверждала, что каждой спектральной линии соответствует гармонический осциллятор с определенной частотой  $\nu$ , который в отличие от классической теории может поглотить или испустить не произвольную порцию энергии, а только целое число элементарных порций  $h\nu$ . Нильс Бор (1913 г.) сделал большой шаг вперед на пути выяснения связи этих «осцилляторов» друг с другом и со строением атома в целом. Он отказался от представления о том, что электроны в самом деле ведут себя как осцилляторы, т. е. связаны квазиупругими силами. Основную идею Бора можно приблизительно выразить такими словами. Атом ни в коей мере не похож на классическую механическую систему, которая может поглощать энергию сколь угодно малыми порциями. Из факта существования узких спектральных линий поглощения и излучения, с одной стороны, и из гипотезы световых квантов Эйнштейна — с другой, следует скорее тот вывод, что атом может находиться только в определенных *дискретных стационарных состояниях* с энергиями  $E_0, E_1, E_2, \dots$



Таким образом, атом может поглощать лишь излучение таких частот  $\nu$ , что  $h\nu$  равно как раз той порции энергии, которая нужна для перевода атома из одного стационарного состояния в другое, более высокое. Поэтому *линии поглощения* определяются уравнениями  $E_1 - E_0 = h\nu_1$ ,  $E_2 - E_0 = h\nu_2$ , ..., где  $E_0$  — энергия самого низкого состояния, которое характерно для атома в отсутствие каких-либо возбуждающих влияний.

Если по какой-то причине атом возбуждается, т. е. переходит в состояние с энергией  $E_n > E_0$ , то он может вернуть эту энергию в виде излучения. Следовательно, он может испустить



Фиг. 32. Комбинационный принцип Ритца.

Атом в третьем возбужденном состоянии может излучить энергию либо в виде одного кванта с частотой  $\nu_{30}$ , либо в виде двух квантов, сумма частот которых должна быть в точности равна  $\nu_{30}$ .

любые световые кванты, энергия которых в точности равна разности энергий каких-то стационарных состояний. Линии излучения определяются поэтому уравнением

$$E_n - E_m = h\nu_{nm}.$$

Прямым подтверждением теории служит следующий факт. Коль скоро гипотеза Бора соответствует действительности, то возбужденный атом может возвращаться в основное состояние различными путями, отдавая каждый раз избыток энергии излучаемым квантам. Например, атом в третьем возбужденном состоянии может либо непосредственно вернуться в основное состояние (при этом испущенный световой квант будет обладать частотой  $\nu_{30}$ , так как разница в энергиях равна  $E_3 - E_0$ ), либо, например, перейти сначала в первое возбужденное состояние  $E_1$  (испустив квант энергии  $h\nu_{31}$ ), а уже затем — в основное (что соответствует частоте  $\nu_{10}$ ) и т. д. (фиг. 32). Поскольку в совокупности испущения энергия во всех случаях, несомненно, остается одной и той же, а именно равной  $E_3 - E_0$ , частоты излучения должны подчиняться следующим соотношениям:

$$\nu_{30} = \nu_{31} + \nu_{10} = \nu_{32} + \nu_{20} = \nu_{32} + \nu_{21} + \nu_{10}.$$

Этот комбинационный принцип должен выполняться при всех обстоятельствах, а так как он непосредственно следует из квантовых представлений, то им можно воспользоваться для экспериментальной проверки теории. Правда, исторически все сложилось как раз наоборот — комбинационный принцип был выдвинут Ритцем на основе анализа накопившихся к тому времени спектроскопических данных еще за восемь лет до создания боровской теории. никоим образом не следует думать, однако, что все возможные «комбинационные линии» и в самом деле доступны наблюдениям, т. е. обладают сколько-нибудь заметной интенсивностью.

Другое непосредственное подтверждение боровской теории дискретных атомных уровней энергии дал опыт Франка и Герца (1914 г.). Если атомы каким-то путем получают энергию, например в результате взаимодействия с электронами при бомбардировке вещества электронным пучком, то поглощение энергии происходит как раз такими порциями, которые соответствуют энергиям возбуждения атома.

Так, если кинетическая энергия налетающих электронов меньше разности между энергиями основного и первого возбужденного состояний атома, то электроны не передают атомам вообще никакой энергии (не говоря, конечно, о ничтожном количестве энергии, которое передается в силу законов упругого столкновения и которое влияет только на поступательное движение сталкивающихся частиц). В силу этого по отношению к низкоэнергетическим воздействиям основное состояние атома вполне устойчиво. Именно такого рода слабые воздействия испытывает атом, в частности при соударениях, обусловленных тепловым движением в газе. Это нетрудно проверить путем следующих грубых подсчетов. Как известно из гл. I, средняя кинетическая энергия частицы газа равна  $\bar{E} = \frac{3}{2}kT$ , где  $k = R/L = 1,37 \times 10^{-16}$  эрг/град. Если бы при соударении вся эта энергия шла на возбуждение атома, то поглощенный атомом энергетический квант определялся бы соотношением  $h\nu = \frac{3}{2}kT$ . Полагая  $T = 300^\circ \text{K}$  (комнатная температура), получаем, что частота  $\nu$  была бы примерно равна  $10^{13}$  сек<sup>-1</sup>. Но, с другой стороны, частоты линий поглощения в видимой или даже в инфракрасной части спектра составляют около  $10^{14}$  или  $10^{15}$  сек<sup>-1</sup>. Поэтому «тепловое возбуждение» атома возможно лишь при более высоких температурах.

Вернемся, однако, к опыту Франка и Герца. Как мы уже видели, атом остается в основном состоянии, если энергия  $E$  электронов меньше минимальной энергии возбуждения  $E_1 - E_0$ . Если же  $E$  становится больше  $E_1 - E_0$ , но меньше  $E_2 - E_0$ , то в результате столкновения атом может перейти в первое возбуж-

денное состояние. Возвращаясь в основное состояние, он может испустить световой квант только с частотой первой спектральной линии  $\nu_1 = \nu_{10}$ . Если, далее,  $E + E_0$  лежит между  $E_2$  и  $E_3$ , то атом может переходить либо в первое, либо во второе возбужденное состояние. Соответственно частоты излучения будут теперь равны  $\nu_{20}$ ,  $\nu_{21}$  и  $\nu_{10}$ . Аналогично рассматриваются и другие возможные ситуации (фото 12). Но можно также измерить и энергию электронов после столкновения, замедляя их в поле с известной разностью потенциалов и подсчитывая число электронов, проникших сквозь него. При этом оказывается, что наблюдаемые энергетические соотношения полностью подтверждают ожидаемый результат — энергия, потерянная электроном при столкновении, в точности равна энергии возбуждения атома  $E_n - E_0$ .

#### § 4. Эффект Комптона

Явления, которые мы рассматривали до сих пор, доказывают только тот факт, что энергетический обмен между светом и атомом или между электронами и атомом носит квантовый характер. Что касается *корпускулярной природы* самого света, то она самым очевидным образом доказывается законами *изменения частот при рассеянии рентгеновских лучей*. Мы уже обсуждали (гл. III, § 2) классическую теорию рассеяния рентгеновских лучей на сравнительно слабо связанных (почти свободных) электронах. Мы пришли к выводу, что рассеянная волна имеет всегда ту же частоту  $\nu$ , что и падающая; электрон колеблется в том же ритме, что и напряженность электрического поля в исходном излучении, поэтому он как всякий переменный диполь создает вторичную волну той же частоты.

Исследуя рассеяние рентгеновского света на парафине, Комpton обнаружил (1922 г.), что лучи, рассеянные на угол меньше  $90^\circ$ , обладают большей длиной волны, чем исходное излучение, так что частота  $\nu'$  вторичной волны оказывается вопреки классической теории меньше, чем частота  $\nu$  первоначального поля. С позиций волновой теории это явление необъяснимо.

Однако с корпускулярной точки зрения (Комптон, Дебай) этот результат вполне понятен. Рассмотрим упругое столкновение двух частиц — светового кванта и электрона (фиг. 33). В процессе столкновения квант  $h\nu$  передает часть своей энергии электрону. Таким образом, собственная энергия кванта уменьшится и, следовательно, энергия  $h\nu'$  рассеянного кванта окажется меньше  $h\nu$ . Точное вычисление энергетических потерь светового кванта проводится так же, как и в случае столкновения двух упругих сфер: нужно воспользоваться законами сохране-

ния полного импульса и полной энергии. Подробный расчет приведен в приложении 10, здесь же мы просто сформулируем окончательный результат. *Формула Комптона* для изменения длины волны светового кванта в результате столкновения имеет вид

$$\Delta\lambda = 2\lambda_0 \sin^2 \frac{\varphi}{2},$$

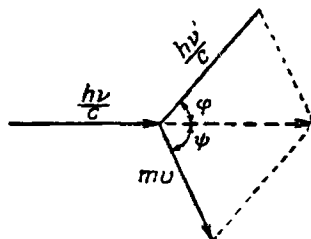
где

$$\lambda_0 = \frac{h}{mc} = 0,0242 \text{ \AA}$$

есть так называемая комптоновская длина волны. Согласно формуле, увеличение длины волны совершенно не зависит от самой длины волны и определяется только углом рассеяния  $\varphi$ .

Фиг. 33. Эффект Комптона.

Сталкиваясь с электроном, световой квант передает ему часть своей энергии, поэтому в результате рассеяния длина волны кванта увеличивается.



Теоретическое предсказание оказалось в полном согласии с опытом. Во-первых, как это проверил сам Комптон, формула Комптона дает правильную зависимость  $\Delta\lambda$  от  $\varphi$ . Во-вторых, Комптону удалось зафиксировать электроны отдачи, которые забирают у светового кванта энергию  $h\nu - h\nu'$  и появлением которых, согласно теории, неизбежно сопровождается процесс. При этом такие электроны наблюдаются не только в твердых телах, но и в камере Вильсона, где их можно увидеть непосредственно.

Но, как показали Комптон и Симон, можно пойти даже дальше и экспериментально проверить предсказанную теорией связь между углом рассеяния светового кванта  $\varphi$  и отклонения электрона  $\psi$ . Правда, световой квант не оставляет следа в камере Вильсона, но тем не менее направление движения рассеянного кванта все же можно иногда найти. Для этого нужно только, чтобы претерпевший рассеяние квант рассеялся еще раз. Тогда появится еще один электрон отдачи, и направление движения кванта определится прямой, соединяющей начальные точки треков двух этих электронов. Хотя интерпретация таких опытов часто содержит в себе элемент неуверенности (поскольку обычно возникает целый ряд треков и не всегда можно однозначно решить, какие именно связаны друг с другом в

указанном выше смысле, т. е. обусловлены одним и тем же световым квантом), Комптону и Симону все же удалось с достаточной надежностью установить совпадение теоретических и экспериментальных результатов.

Дальнейшее подтверждение корпускулярных воззрений на механизм комптон-эффекта было получено Боте и Гейгером. Изучая рассеяние рентгеновских лучей на водороде, они регистрировали момент появления электрона отдачи с помощью счетчика Гейгера. Другой счетчик при этом фиксировал момент прохождения рассеянного светового кванта. Таким способом удалось доказать, что рассеяние кванта и вылет электрона отдачи происходят одновременно.

Работы Якобсена, Боте и других исследователей (1936 г.), использовавших мощное современное оборудование, недвусмысленно подтвердили факт одновременного появления электрона отдачи и рассеянного светового кванта.

Таким образом, комптоновское рассеяние представляет собой типичный пример процесса, в котором свет ведет себя как частица с вполне определенной энергией и вполне определенным импульсом. Объяснение описанных опытных данных на основе волновой теории света, по-видимому, абсолютно невозможно. С другой стороны, явление интерференции совершенно несовместимо с корпускулярными представлениями о свете. Вплоть до последних лет казалось, что устранение этого противоречия в теории лежит за пределами человеческих возможностей.

### § 5. Волновая природа материи. Теория де-Бройля

Эта дилемма приобрела еще более острый характер, когда де-Бройль (1925 г.) выдвинул гипотезу о том, что корпускулярно-волновой дуализм, который присущ свету, распространяется и на вещество. По де-Бройлю, с частицей вещества связана волна материи, точно так же как с квантом света связана световая волна, причем соответствие между волновым и корпускулярным аспектами вновь устанавливается соотношением  $E = h\nu$ . Далее, из теории относительности следует, что энергия и импульс представляют собой родственные друг другу величины (импульс — это пространственная часть релятивистского 4-вектора, временная часть которого есть энергия). Поэтому ясно, что ради внутренней согласованности следует положить  $p = h\tau$ , где  $\tau$  — число длин волн, приходящихся на единицу длины (поскольку  $\nu$  — число колебаний в единицу времени). Иначе говоря,  $\tau$  — величина, обратная  $\lambda$ -длине, связанной с движением частицы-волны. Таким образом,  $p = h/\lambda$ .

Идею волны, заимствованную из оптики, можно перенести в механику вполне последовательно. Однако, прежде чем заняться этим, подчеркнем «иррациональность» (как говорил Бор) такой попытки объединения волной и корпускулярной точек зрения. Действительно,  $E$  и  $p$  относятся к точечной, т. е. обладающей пренебрежимо малыми размерами, массе. Напротив,  $\nu$  и  $\tau$  характеризует бесконечно протяженную во времени и пространстве волну. Трудно представить себе более далекие и несовместимые друг с другом идеи, чем эти две концепции, которые квантовая теория должна объединить в одно целое. К разрешению этого парадокса мы обратимся позже.

Сначала же попробуем развить теорию де-Бройля чисто формально. Итак, частицу с импульсом  $p$  и энергией  $E$ , движущуюся в направлении оси  $x$ , нужно ассоциировать при помощи двух соотношений

$$E = h\nu, \quad p = h\tau$$

с бесконечно протяженной волной

$$u(x, t) = Ae^{2\pi i(\nu t - \tau x)}.$$

Эта волна распространяется вдоль оси  $x$  с определенной скоростью — *фазовой скоростью*  $u$ . Значение  $u$  можно найти сразу же, рассмотрев поверхности постоянной фазы (плоскости). Из равенства

$$\varphi \equiv \nu t - \tau x = \text{const} \quad \text{или} \quad x = \frac{\nu}{\tau} t + \text{const}$$

следует, что

$$u = \left( \frac{dx}{dt} \right)_{\varphi = \text{const}} = \frac{\nu}{\tau} = \nu\lambda.$$

В силу того что  $\nu$ , вообще говоря, зависит от  $\lambda$  (и наоборот), это уравнение содержит в себе *закон дисперсии* волн.

Следует отметить, однако, что фазовая скорость есть чисто искусственное понятие, так как ее нельзя измерить на опыте. В самом деле, для ее измерения необходимо как-то «пометить» определенную часть бесконечной и плавной волны и затем проследить, с какой скоростью будет перемещаться «метка». Но единственный способ сделать такую «метку» состоит в том, чтобы наложить на исходную волну другую группу волн, так чтобы в результате интерференции на ранее гладкой волновой функции возник какой-либо горб. Таким образом, приходится измерять не фазовую скорость первоначальной волны, а скорость движения созданного горба. Последняя же называется *групповой скоростью*.

Общий метод вычисления групповой скорости дан в приложении 11. Здесь же мы ограничимся простым случаем, который приводит к тем же результатам и особенно наглядно демонстрирует различия между групповой и фазовой скоростями. На исходную волну  $u(x, t)$ , где  $u$  — определенная выше функция, наложим другое колебание с той же амплитудой, но слегка измененными частотой  $\nu'$  и длиной волны  $\lambda'$ . В этом случае, как известно, возникают «биения». Максимумом «биения» мы воспользуемся как «пометкой» на полученной группе волн. Теперь выясним, с какой скоростью перемещается этот максимум.

Математическая суперпозиция двух этих волн соответствует колебанию вида

$$u(x, t) = e^{2\pi i(\nu t - \tau x)} + e^{2\pi i(\nu' t - \tau' x)}.$$

Это выражение можно переписать как

$$\begin{aligned} u(x, t) &= e^{2\pi i\left(\frac{\nu+\nu'}{2}t - \frac{\tau+\tau'}{2}x\right)} \left\{ e^{2\pi i\left(\frac{\nu-\nu'}{2}t - \frac{\tau-\tau'}{2}x\right)} + \right. \\ &\quad \left. + e^{-2\pi i\left(\frac{\nu-\nu'}{2}t - \frac{\tau-\tau'}{2}x\right)} \right\} = \\ &= 2 \cos 2\pi\left(\frac{\nu-\nu'}{2}t - \frac{\tau-\tau'}{2}x\right) e^{2\pi i\left(\frac{\nu+\nu'}{2}t - \frac{\tau+\tau'}{2}x\right)}. \end{aligned}$$

Очевидно, что оно соответствует колебанию с частотой  $(\nu + \nu')/2$  и длиной волны  $2/(\tau + \tau')$ , амплитуда которого медленно изменяется сравнительно с самим колебанием (испытывает биения). Как легко вывести из формулы, фаза волны движется со скоростью  $(\nu + \nu')/(\tau + \tau')$ . С другой стороны, максимум амплитуды перемещается со скоростью  $(\nu - \nu')/(\tau - \tau')$ . В пределе, когда  $\nu'$  стремится к  $\nu$ , а потому и  $\tau'$  стремится к  $\tau$ , мы получим для фазовой скорости уже известное выражение:

$$u = \frac{\nu}{\tau} = \nu\lambda,$$

тогда как групповая скорость определяется предельным переходом

$$U = \lim_{\nu' \rightarrow \nu} \frac{\nu - \nu'}{\tau - \tau'}.$$

Но по определению это просто производная частоты  $\nu$  по волновому числу  $\tau$ , если считать  $\nu$  функцией  $\tau$  (закон дисперсии). Мы получаем поэтому

$$U = \frac{d\nu}{d\tau} = \frac{d\nu}{d\left(\frac{1}{\lambda}\right)}.$$

Как будет показано в приложении 11, эта формула для групповой скорости выполняется во всех случаях.

Применим теперь все это к случаю *свободной частицы*, движущейся со скоростью  $v$ . Обозначая  $v/c$  через  $\beta$  и пользуясь релятивистскими формулами для энергии и импульса (приложение 5), получаем

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{m_0 c}{h} \frac{c}{\sqrt{(1-\beta^2)}}, \quad \tau = \frac{p}{h} = \frac{m_0 c}{h} \frac{\beta}{\sqrt{(1-\beta^2)}}.$$

Фазовая скорость дается равенством

$$u = \frac{\nu}{\tau} = \frac{c}{\beta} = \frac{c^2}{v}$$

и оказывается поэтому больше скорости света  $c$ , когда  $v < c$ . Следовательно, фаза волны материи распространяется со скоростью, превосходящей скорость света, — это также свидетельствует о том, что фазовая скорость лишена определенного физического смысла. Для групповой скорости мы получаем

$$U = \frac{d\nu}{d\tau} = \frac{d\nu/d\beta}{d\tau/d\beta}.$$

Это выражение в точности равно скорости частицы, так как

$$\frac{d\nu}{d\beta} = \frac{m_0 c}{h} \frac{c\beta}{(1-\beta^2)^{3/2}},$$

$$\frac{d\tau}{d\beta} = \frac{m_0 c}{h} \frac{1}{(1-\beta^2)^{3/2}},$$

откуда  $U = c\beta = v$ .

Полученное соотношение чрезвычайно привлекательно, в частности велико искушение попытаться интерпретировать материальную частицу как волновой пакет, образованный суперпозицией некоторой группы волн. Однако эта соблазнительная интерпретация наталкивается на непреодолимые трудности, ибо такого рода волновой пакет, вообще говоря, неустойчив и очень скоро распыляется. Достаточно вспомнить аналогичное явление для волн на воде: если создать горб в любой точке гладкой водной поверхности, то он просуществует совсем недолго — возникнет расходящаяся волна и горб исчезнет.

## § 6. Экспериментальное доказательство существования волн материи

Ввиду смелости и необычности гипотезы де-Бройля о волновой природе вещества сразу же возникает естественный вопрос: можно ли и если можно, то каким именно образом проверить эту гипотезу экспериментально? Первый ответ на этот вопрос



был дан Эйнштейном (1925 г.), который указал, что идея волны позволяет без труда объяснить *вырождение электронов в металле* — экспериментальный факт, известный теоретикам еще до де-Бройля и проявляющийся в непонятном с точки зрения обычных представлений аномальном поведении теплоемкости металлов. Подробно эту тему мы обсудим в § 7 гл. VIII.

Далее, благодаря исследованиям Дэвиссона и Джермера (1927 г.) было установлено, что при отражении электронных пучков от металлов имеют место отклонения от той картины, которую предсказывает классическая теория: число электронов, отраженных в некоторых направлениях, оказывается больше, а в некоторых — меньше, чем следовало ожидать, так что можно говорить о своего рода избирательном отражении на определенных углах. В 1925 году Эльзассер выдвинул гипотезу о том, что здесь мы имеем дело с дифракцией электронных волн на атомной решетке металлов — эффектом, напоминающим дифракцию рентгеновских лучей в кристалле (стр. 100). Точные эксперименты, предпринятые тогда же Дэвиссоном и Джермером, действительно обнаружили интерференцию электронов. При этом по своей форме явление оказалось полностью аналогичным известной интерференции рентгеновских лучей (Лауэ).

Последующие опыты Дж. П. Томсона, Руппа и др. показали, что прохождение электронов сквозь тонкие пленки (металлические, слюдяные) сопровождается появлением характерной дифракционной картины точно того же вида, что и рентгеновские интерференционные кольца Дебая — Шеррера. Более того, если провести расчет, исходным пунктом которого являются заданные внешние условия процесса, окончательный результат процесса и известные параметры кристаллической решетки, то полностью подтверждается формула де-Бройля для длины волны и импульса электрона.

О порядке длин волн, с которыми мы встречаемся в электронных пучках, позволяет судить следующий грубый расчет. Согласно де-Бройлю, длина волны равна  $\lambda = h/p$ , или, если ограничиться не очень быстрыми электронами, так чтобы релятивистскими поправками можно было пренебречь,  $\lambda = h/mv$ . Но скорость электронов определяется величиной потенциала  $V$ , приложенного к катодной трубке:  $\frac{1}{2}mv^2 = eV$ . Следовательно,

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}},$$

или, если подставить численные значения  $e = 4,80 \cdot 10^{-10}$  ед. CGSE,  $m = 9,1 \cdot 10^{-28}$  г,  $h = 6,62 \cdot 10^{-27}$  эрг·сек,

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{V}} \text{ \AA},$$

где потенциал  $V$  выражен в вольтах. Поэтому ускоряющему потенциалу 10 000 *в* отвечает длина волны  $\lambda=0,122 \text{ \AA}$ . Таким образом, длины волн применяемых на практике электронных пучков лежат примерно в той же области, что и длины волн жестких рентгеновских лучей.

Хотя и удивительно, что дифракция электронов не была открыта раньше, этот факт все же следует считать чрезвычайно счастливой случайностью для зарождавшейся в то время атомной теории. Какая растерянность овладела бы учеными, если сразу вслед за открытием катодных лучей вдруг были бы одновременно поставлены эксперименты и по определению их заряда и способности к отклонению, и по изучению их способности к интерференции! Ведь и сама боровская теория атома, которой впоследствии суждено было послужить исходным рубежом для построения волновой механики, существенно базировалась на предположении, что электрон представляет собой электрически заряженную корпускулу.

В наши дни техника электронной дифракции достигла столь высокого развития, что в промышленности для определения структуры различных материалов пользуются уже этим методом вместо старого метода дифракции рентгеновских лучей. Преимущество электронной методики состоит, во-первых, в том, что она позволяет получать гораздо большие интенсивности, чем могут дать рентгеновские лучи. Так, например, интерференционная фотография структуры, которая, в рентгеновских лучах потребовала бы, возможно, многочасовой экспозиции, в электронных лучах при прочих равных условиях может быть сделана за время около одной секунды. Во-вторых, новая техника имеет то преимущество, что длину волны электронного пучка можно произвольно менять, варьируя ускоряющий потенциал  $V$ . Сдвигая ручку потенциометра, можно сразу видеть на экране, как дифракционная картина сжимается или расширяется при изменениях длины волны. Третье и наиболее важное преимущество электронных пучков обязано их способности отклоняться под действием электрических и магнитных полей. Никто пока не научился делать линзы для рентгеновских лучей. Электронный же пучок можно без труда фокусировать (Буш, 1927 г.) с помощью системы специально подобранных индукционных катушек и конденсаторов, что позволяет конструировать различные электронные линзы и электронные микроскопы. Благодаря малости длины волны разрешающая способность их гораздо выше, чем у оптических приборов, причем достигнутые в настоящее время на практике разрешающие способности электронных микроскопов еще очень далеки от теоретически достижимого предела.

Аналогичным образом можно убедиться в волновой природе вещества на примере медленных нейтронов. Дифракционная картина, возникающая в результате рассеяния нейтронов, дает, конечно, богатую информацию о кристаллической структуре твердых тел. Для тепловых нейтронов (т. е. нейтронов, энергия которых соответствует температуре  $300^\circ \text{K}$ ) де-Бройлевская длина волны равна  $\lambda = 1,81 \text{ \AA}$ .

Очень важным и впечатляющим было открытие Штерна и его сотрудников (1932 г.). Оказалось, что отражение *молекулярных пучков* (состоящих из  $\text{H}_2$  и He) от поверхности кристаллов также сопровождается дифракционными явлениями. Удалось даже с помощью приспособления, по своей конструкции аналогичного прибору для измерения скорости света, т. е. с помощью двух зубчатых колес, насаженных на одну ось, выделить пучок молекул, имеющих почти одинаковую скорость. Правильность соотношения де-Бройля для таких частиц была подтверждена с точностью до 1%. А здесь-то мы уже во всяком случае имеем дело с материальными частицами; ведь именно из таких частиц, как известно, состоят не только газы, но также и жидкости, и твердые тела. Если перехватить молекулярный пучок, уже претерпевший дифракцию на кристаллической решетке, и направить его в собирающий сосуд, то в сосуде окажется все тот же газ с самыми обычными свойствами.

Эти дифракционные эксперименты с целыми атомами показывают, что волновые свойства отнюдь не являются просто индивидуальной особенностью одних лишь электронных лучков. Напротив, здесь речь идет о новом принципиальном явлении всеобщего характера — классическая механика в целом уступает место новой *волновой механике*. В самом деле, ясно, что в случае дифракции атома именно его центр инерции (центр инерции составляющих атом частиц — ядра и электронов), т. е. некая абстрактная точка, подчиняется тем же волновым законам, что и отдельный свободный электрон. Волновая механика в своей законченной форме действительно описывает этот факт.

## § 7. Противоречие между волновой и корпускулярной теориями. Устранение этого противоречия

В предшествующих параграфах перед нашим взором прошел целый ряд фактов, которые, по-видимому, недвусмысленно указывают, что не только свет, но и электроны, и частицы вещества вообще в одних процессах ведут себя как волны, а в других — как обычные корпускулы. Как совместить эти два противоречащих друг другу аспекта?

Первоначально Шредингер предпринял попытку истолковать корпускулы, и в частности электроны, как *волновые пакеты*. Хотя формулы Шредингера совершенно правильны, его интерпретация все же не могла выстоять. Действительно, с одной стороны, как мы уже выяснили, волновые пакеты с течением времени расплываются. С другой стороны, описание взаимодействия между двумя электронами как взаимодействия двух волновых пакетов в обычном трехмерном пространстве наталкивается на непреодолимые трудности.

Общепринятая в настоящее время интерпретация была предложена Борном. С позиций этого толкования весь ход событий в физической системе определяется вероятностными законами. Тому или иному положению частицы в пространстве соответствует некоторая вероятность, определяемая ассоциируемой с состоянием частицы волной де-Бройля. Таким образом, механический процесс сопряжен с волновым процессом — процессом распространения вероятностной волны. Последняя подчиняется уравнению Шредингера, значение которого состоит в том, что оно определяет вероятность любого варианта хода событий в механическом процессе. Если, к примеру, в какой-то точке пространства волна вероятности имеет нулевую амплитуду, то это означает, что вероятность обнаружить электрон в этой точке исчезающе мала.

Физическое обоснование выдвинутой гипотезы вытекает из рассмотрения процессов рассеяния с двух точек зрения — корпускулярной и волновой. Проблема рассеяния света на небольших пылинках или на молекулах была хорошо разработана — с классических позиций — уже очень давно. Если же применить к этой проблеме концепцию световых квантов, то становится сразу же ясно, что число квантов в той или иной точке следует считать пропорциональным интенсивности света, как ее определяет классическая волновая теория. В этом смысле вполне естественной кажется попытка рассчитать рассеяние электронов на атомах с помощью волновой механики (Борн, 1926 г.). При этом исходный электронный пучок мы мыслим себе в ассоциации с соответствующей волной де-Бройля. Падая на атом, эта волна дает начало вторичной сферической волне. Исходя из оптической аналогии, мы ожидаем, что определенного вида квадратичная форма, образованная из амплитуды волны, может быть истолкована как плотность потока или, иначе говоря, число рассеянных электронов. Когда были проделаны соответствующие вычисления (Вентцель, Гордон), оказалось, что для рассеяния на ядре получается как раз формула Резерфорда (стр. 80; приложения 9 и 20). В дальнейшем были проделаны аналогичные расчеты и для многих других процессов рассеяния.

Полученные результаты хорошо согласуются с опытом (Борн, Бете, Мотт, Месси). Это дает все основания верить в правильность принятого нами принципа, связывающего амплитуду волны с числом частиц (иначе говоря, с вероятностью).

Эта простая схема предполагает, что отдельные частицы не зависят друг от друга. Если же принять во внимание и взаимодействие между частицами, то наглядность снова в какой-то мере утрачивается. Здесь возникают две возможности. Во-первых, можно рассматривать волны в пространстве более чем трех измерений (скажем, для двух взаимодействующих частиц будут  $2 \times 3 = 6$  координат). Другая возможность позволяет остаться в рамках трехмерного пространства, но лишь ценой отказа от простого представления об амплитуде волны как об обычной физической величине — в пользу чисто абстрактной математической концепции (вторичное квантование; Дирак, Йордан), входить в детали которой мы здесь не будем. Мы не станем также обсуждать здесь обширный математический аппарат квантовой теории, который возник первоначально из теории процессов рассеяния и впоследствии достиг такого развития, что в принципе любую проблему атомной механики, имеющую разумный физический смысл, можно теперь разрешить чисто теоретически (приложение 25).

Однако что значит «проблема, имеющая разумный физический смысл»? Для нас это в самом деле очень серьезный вопрос, ибо едва ли можно сомневаться, что корпускулярные и волновые идеи нельзя совместить в пределах монолитного и непротиворечивого формализма, не поступившись некоторыми фундаментальными классическими принципами. В качестве объединяющей основы выступает концепция вероятности, причем здесь она гораздо глубже связана с фундаментальными физическими принципами, чем в классической теории, например в кинетической теории газов (гл. 1, § 2 и 6). Выявлением этой взаимосвязи мы обязаны Гейзенбергу и Бору (1927 г.). Следуя им, мы должны прежде всего задать себе следующий вопрос. Какой, собственно говоря, смысл мы в конечном счете вкладываем в слова «описание процесса в терминах частиц» и «описание процесса в терминах волн»? До сих пор мы все время говорили о волнах и корпскулах как о чем-то само собой разумеющемся, нисколько не сомневаясь в правомерности этих понятий и не задумываясь над вопросом, есть ли какие-либо основания считать, что волны и частицы действительно существуют. Создававшаяся ситуация несколько напоминает положение вещей в то время, когда была выдвинута теория относительности. Ни один человек до Эйнштейна не усомнился в разумности и однозначности утверждения о том, что некоторые

два события произошли *одновременно*. Никто не задумывался даже над вопросом, можно ли экспериментально проверить факт одновременности двух событий, происшедших в различных точках пространства, и имеет ли концепция одновременности какой-либо смысл вообще. Кстати говоря, Эйнштейн доказал, что эта концепция должна быть «релятивизирована», ибо с точки зрения одной системы отсчета события могут произойти в один и тот же момент времени, а с точки зрения другой — в разные моменты. Столь же критическому анализу нужно, согласно Гейзенбергу, подвергнуть понятия волн и корпускул. С понятием корпускулы неразрывно связано предположение, что она всегда обладает строго определенным импульсом и находится в строго определенной точке пространства. Но возникает вопрос: возможно ли действительно точно измерить и положение «частицы», и ее скорость в данный момент времени? Если это невозможно, а, к слову сказать, это и в самом деле невозможно, иначе говоря, если в лучшем случае мы можем определить только одну из этих величин (точную координату или точный импульс) и если, определив одну, мы тем самым теряем право судить о значении другой (в тот же момент времени), то у нас нет ни малейших оснований утверждать и что изучаемый объект действительно может быть назван «частицей» в обычном смысле этого слова. Столь же мало оснований для такого утверждения даже и в том случае, когда значения обеих величин измерены одновременно, но лишь с какой-то степенью точности, т. е. когда ни та ни другая величина не определена совершенно точно (другими словами, когда из эксперимента следует лишь, что «такая-то вещь» находится где-то в пределах некоторого определенного объема и каким-то образом перемещается со скоростью, лежащей в пределах некоторого определенного интервала скоростей). Позднее мы покажем на примерах, что одновременное определение положения и скорости в самом деле невозможно, поскольку это противоречит квантовым закономерностям, надежно установленным на опыте.

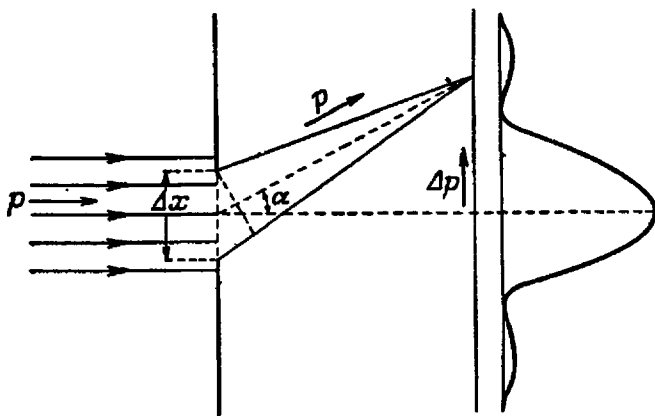
Конечная причина этой трудности заключена в том обстоятельстве (или, лучше сказать, философском принципе), что, пытаясь объяснить то или иное явление с помощью наглядной картины, апеллирующей не к разуму (т. е. математическому и логическому анализу), а к воображению, мы обречены пользоваться словами обычного языка. Но наш язык — это слепок с обыденного опыта человека; он никогда не сможет выйти за пределы этого опыта. Классическая физика как раз и ограничивается рассмотрением явлений, которые имеют в языке адекватный словесный эквивалент. Так, в результате анализа движений, доступных прямому наблюдению, она научилась сводить

все процессы такого рода к двум элементарным явлениям — движению частиц и распространению волн. Не существует иного способа наглядно описать движение. Даже в области атомных масштабов, где классическая физика терпит крах, мы все же принуждены пользоваться классическими образами.

Итак, все процессы можно интерпретировать либо в терминах корпускул, либо в терминах волн. Но, с другой стороны, не в наших силах доказать, что в каком-то конкретном случае мы имеем дело именно с волной, а не с частицей, или, наоборот, именно с частицей, а не с волной. Ведь мы никогда не можем определить одновременно именно те свойства объекта, которые лишь в своей совокупности и позволяют собственно сделать выбор между двумя представлениями. Поэтому можно утверждать, что к волновому и корпускулярному описанию следует относиться как к равноправным и дополняющим друг друга точкам зрения на один и тот же объективный процесс — процесс, который лишь в каких-то предельных случаях допускает адекватную наглядную интерпретацию. Рубеж, разделяющий две концепции — волн и частиц — определяется именно ограниченными возможностями измерения. По своему существу корпускулярное описание означает, что измерения имеют целью точно установить энергетические и импульсные соотношения для исследуемого объекта (как, например, в комптон-эффекте). Эксперименты же, в которых нас интересует место и время каких-то событий (например, опыты по прохождению электронных пучков сквозь тонкие пленки с последующей регистрацией отклоненных электронов), всегда можно осмыслить, опираясь на волновые представления.

Теперь мы перейдем к доказательству утверждения, что одновременное точное определение положения частицы (скажем, электрона) и ее импульса невозможно. Рассмотрим в качестве примера дифракцию электронов на узкой щели (фиг. 34). Если принять, что в свете корпускулярных представлений прохождение электрона через отверстие и регистрация дифракционной картины как раз и представляют собой одновременное измерение координаты и импульса электрона, то ширина щели  $\Delta x$  будет служить мерой «неопределенности» положения частицы (в плоскости, перпендикулярной направлению исходного пучка). В самом деле, факт появления дифракционной картины позволяет сделать лишь тот вывод, что электрон проник сквозь щель; в какой же именно точке щели это произошло, совершенно неизвестно. Далее, по корпускулярным воззрениям возникновение на экране дифракционной картины следует истолковать в том смысле, что каждый отдельно взятый электрон, пройдя через отверстие, отклоняется либо вверх, либо вниз. Но для этого он

должен приобрести составляющую импульса  $\Delta p$ , перпендикулярную направлению первоначального движения (причем полный импульс  $p$  остается неизменным). Из фиг. 33 ясно, что среднее значение  $\Delta p$  есть  $\Delta p \sim p \sin \alpha$ , где  $\alpha$  — средний угол отклонения. Но, с другой стороны, мы знаем, что удовлетворительное объяснение результатов этого опыта дают волновые представления, согласно которым угол  $\alpha$  связан с шириной щели  $\Delta x$  и длиной волны  $\lambda = h/p$  соотношением  $\Delta x \sin \alpha \sim \lambda = h/p$ . Таким образом, средняя величина проекции импульса



Фиг. 34. Дифракция электронов на щели.

частицы, претерпевшей дифракцию, на плоскость щели задается равенством  $\Delta p \sim p\lambda/\Delta x = h/\Delta x$  или

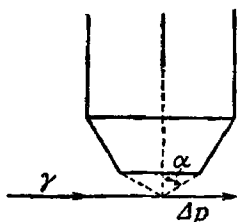
$$\Delta x \Delta p \sim h.$$

Это соотношение, более строгий вывод которого будет дан в приложении 12, и есть так называемое *соотношение неопределенностей Гейзенберга*. В нашем примере оно означает, что в результате измерения положения частицы (посредством щели, что предполагает неопределенность или, иначе говоря, возможную ошибку  $\Delta x$ ) частица приобретает дополнительный импульс, который параллелен щели и имеет величину порядка  $\Delta p \sim h/\Delta x$  (т. е. известен лишь в меру такой неопределенности). Максимальная точность информации об импульсе частицы, которую удастся извлечь из дифракционного опыта, не может превышать  $h/\Delta x$ . Таким образом, согласно соотношению неопределенностей, постоянная  $h$  является *абсолютным пределом точности одновременного измерения координаты и импульса*, пределом, который может быть (в самой благоприятной ситуации) дости-



жим, но перешагнуть который невозможно ни при каких обстоятельствах. Более того, в квантовой механике соотношение неопределенностей справедливо не только для координаты и импульса, но и для любой другой пары «сопряженных переменных» (приложение 13).

Второй пример, иллюстрирующий соотношение неопределенностей, — это определение положения частицы с помощью микроскопа (фиг. 35). Здесь мы рассуждаем так. Когда мы хотим определить местоположение электрона чисто оптическим путем, т. е. освещая его и наблюдая рассеянный свет, то ясно — и это общая оптическая закономерность, — что длина волны используемого света ограничивает предел разрешающей силы прибора, а вместе с ней и точность определения



Фиг. 35. Определение положения электрона с помощью  $\gamma$ -лучевого микроскопа.

координат частицы. Поэтому, чтобы достичь максимально возможной степени точности, нужно пользоваться самыми короткими световыми волнами ( $\gamma$ -лучами). Однако применение коротковолнового излучения приводит к заметному комптоновскому рассеянию света. В результате освещаемый электрон испытывает значительную и в какой-то мере не поддающуюся учету отдачу. Рассмотрим этот процесс математически. Пусть электрон находится против объектива микроскопа и на него под каким-то углом падает свет частоты  $\nu$ . Тогда по законам оптики (для разрешающей способности микроскопа) положение электрона определяется не точнее, чем с некоторой погрешностью, равной

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \alpha},$$

где  $\alpha$  — апертура объектива. Но, согласно корпускулярным законам, электрон в процессе облучения испытывает комптоновскую отдачу, приобретая импульс порядка  $h\nu/c$ . Направление этого импульса является неопределенным точно в той же мере, что и направление рассеявшегося светового кванта. Однако, поскольку по смыслу опыта рассеянный квант все-таки попадает в микроскоп, неопределенность направления светового

кванта совпадает с апертурой  $\alpha$ . Таким образом, компонента импульса электрона, перпендикулярная оптической оси микроскопа, в результате эксперимента содержит неопределенность  $\Delta p$  порядка

$$\Delta p \sim \frac{h\nu}{c} \sin \alpha.$$

Следовательно, соотношение

$$\Delta p \Delta x \sim h,$$

характеризующее порядок погрешностей измерения, выполняется и в этом случае.

Итак, всякое измерение местоположения приводит к неопределенности в значении импульса, а всякое измерение момента времени — к неопределенности в значении энергии (хотя последний факт мы пока и не доказали). Столь же справедливы и обратные утверждения. Чем точнее измеряются импульсы и энергия, тем менее определено можно судить о пространственной и временной протяженности события. Приведем пример — явление так называемой *резонансной флуоресценции*. Мы уже говорили (гл. IV, § 3), что атомы газа при облучении светом частоты  $\nu_{10}$ , соответствующей разности энергий основного и первого возбужденного состояний, переходят в это возбужденное состояние. Затем они возвращаются в основное состояние, испуская свет той же частоты  $\nu_{10}$ . Поэтому если давление мало, т. е. если число газо-кинетических соударений за время, пока атом остается в возбужденном состоянии, пренебрежимо мало, то вся поглощенная атомами газа световая энергия будет снова испущена. Таким образом, атом ведет себя в данной ситуации как классический резонатор, настроенный на частоту падающего света. В этом случае мы говорим о резонансной флуоресценции.

Но энергия атомных возбуждений может переходить не только обратно в излучение света, но в иные формы энергии, в чем можно убедиться, примешивая к исходному газу некоторое количество другого газа, служащего своего рода индикатором. Так, например, если добавленный газ состоит из не очень прочных двухатомных молекул, то энергия возбужденного состояния атомов первого газа может при столкновениях с двухатомными молекулами тратиться на диссоциацию последних (Франк, 1922 г.). Если же в качестве индикатора взять такой одноатомный газ, для которого первый возбужденный уровень атомов ниже первого возбужденного уровня для атомов исходного газа, то газо-кинетические соударения приведут также к излучению света и непосредственно атомами газа-индикатора. Это явление называется *сенсibiliзированной флуоресценцией*

(Франк). Так или иначе ясно, что под воздействием светового излучения часть атомов первого газа переходит в возбужденное состояние. Можно принять следующую точку зрения. Возбуждение под влиянием монохроматического света означает приобретение атомом строго определенного энергетического кванта  $h\nu_{10}$ . Поэтому мы совершенно точно знаем энергию возбужденного атома. Но из соотношения Гейзенберга  $\Delta E \Delta t \sim h$  следует, что конкретный момент поглощения кванта должен при этом быть абсолютно неопределенным. В этом действительно нетрудно убедиться, заметив, что необходимое условие любого эксперимента, ставящего цель определить этот момент времени, заключается в том, чтобы как-то «пометить» его на падающей волне, например сделать на ней обрыв. Но это значит нарушить монохроматический характер волны, что противоречит первоначальным предположениям. Строгий анализ ситуации показывает, что если падающий свет монохроматичен, то момент времени, в который происходит элементарный акт поглощения энергии, в самом деле полностью ускользает от наблюдения.

Соотношение неопределенностей можно вывести также из следующей *общей идеи*. Если мы вознамеримся из отдельно взятых плоских волн сконструировать волновой пакет, сосредоточенный в конечной части пространства (вдоль оси  $x$ ), то для этой цели нам понадобятся все монохроматические волны, частоты которых лежат внутри некоторого конечного частотного интервала, так что ввиду соотношения  $\lambda = h/p$  в нашем пакете будут представлены все импульсы из некоторого конечного интервала импульсов. Можно доказать в самом общем виде (приложение 12), что ширина волнового пакета  $\Delta x$  связана с протяженностью этого интервала импульсов  $\Delta p$  соотношением

$$\Delta p \Delta x \sim h.$$

Второе соотношение

$$\Delta E \Delta t \sim h$$

можно вывести аналогичным путем.

Бор любил говорить, что волновая и корпускулярная точки зрения взаимно *дополнительны*. Он имел в виду следующее. Если мы доказали, что эксперимент имеет корпускулярный характер, то ни при каких условиях нам не удастся доказать, что он одновременно имеет и волновой характер. Разумеется, справедливо и обратное. Проиллюстрируем это еще одним примером.

Рассмотрим *интерференционный опыт Юнга* (гл. IV, § 1), когда диафрагма имеет две щели. На экране мы обнаруживаем систему интерференционных полос. Сделав экран из вещества,

дающего заметный фотоэлектрический эффект, мы можем продемонстрировать корпускулярную природу света даже на полосах интерференции. Казалось бы, здесь-то уж, во всяком случае, мы имеем дело с опытом, в котором свет одновременно выступает в обоих своих обличиях — и в виде корпускул, и в виде волн. Однако на самом деле это не так. Действительно, говорить о частице абсолютно лишено смысла, пока не определены экспериментально по крайней мере две точки ее траектории. Точно так же совершенно бессмысленно говорить о волне, пока не зарегистрированы по крайней мере два интерференционных максимума. Намереваясь экспериментом «продемонстрировать корпускулу», прежде всего мы должны будем выяснить вопрос, через какую именно щель — верхнюю или нижнюю — пролегает ее путь к экрану. Поэтому нам придется повторить весь опыт еще раз, не только заменив экран чувствительным к фотоэффекту рецептором, но и использовав какое-то приспособление, позволяющее решить, сквозь какую щель прошел свет (например, тонкую фотографическую пленку или что-нибудь в этом роде). Но этот «контрольный пункт» в щели неизбежно столкнет световой квант с его невозмущенной траектории, поэтому вероятность попадания кванта в ту же точку рецептора (экрана) будет уже отличаться от первоначальной. Таким образом, наши предыдущие заключения, выведенные из волновых представлений об интерференции, оказываются иллюзорными. Итак, если целью эксперимента является регистрация интерференционного изображения, то мы принципиально не можем определить ни одной точки пути светового кванта, до того как он упадет на экран.

В заключение сделаем еще несколько общих замечаний о философской стороне дела. В первую очередь ясно, что дуализм «волна — частица» и органически связанный с ним индетерминизм принуждают нас отказаться от любых попыток построить *детерминистскую теорию*. Действительно, закон причинности, утверждающий, что весь ход событий в изолированной системе полностью определяется состоянием системы в момент времени  $t=0$ , теряет силу, по крайней мере в смысле классической физики. Что же касается новой теории, то она допускает две точки зрения на причинность. С одной стороны, мы можем рассматривать все процессы, подчеркивая их наглядные свойства и последовательно интерпретируя их в терминах корпускул и волн. В этом случае приходится, вне сомнения, считать, что закон причинности нарушается. С другой стороны, можно, как это и делается в последующем развитии теории, описывать мгновенное состояние системы посредством комплексной функции  $\psi$ , удовлетворяющей некоторому дифференциальному урав-

нению. Тогда зависимость функции  $\psi$  от времени полностью определяется ее формой в момент  $t=0$ , так что эволюция этой функции строго причинна. Однако физический смысл придается лишь величине  $|\psi|^2$  (квадрат амплитуды) и другим примерно так же сконструированным квадратичным выражениям (матричным элементам), совокупность которых определяет функцию  $\psi$  только частично. Отсюда следует, что начальные значения функции  $\psi$  принципиально нельзя найти полностью даже в том случае, если в момент  $t=0$  все физически наблюдаемые величины известны точно. Такая точка зрения эквивалентна утверждению, что события развиваются в соответствии со строгой причинностью, но что начальное состояние системы во всех его деталях нам неизвестно. Итак, закон причинности в этом смысле опять-таки оказывается бессодержательным. В силу своей природы физика лишена детерминизма и по этой причине является законным и безраздельным владением статистики.

# V

## СТРУКТУРА АТОМА И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ЛИНИИ

### § 1. Атом Бора; стационарные орбиты для простого периодического движения

Мы уже представили целый ряд аргументов (гл. IV, § 2), доказывающих, что классические законы движения теряют силу в сфере явлений, разыгрывающихся внутри атома. Читатель, конечно, помнит, например, о чрезвычайной стабильности атомов и о существовании резко выраженных спектральных линий. С классической точки зрения эти факты абсолютно непостижимы.

Объяснение атомных спектров, данное Бором и изложенное нами в § 3 гл. IV, указывает ту дорогу, по которой мы должны идти к нашей цели — построению новой механики атома. Фактически еще задолго до открытия волновой природы материи Бор успешно заложил основы *атомной механики*, по крайней мере в ее черновом предварительном варианте. Эта теория была в дальнейшем развита самим Бором и его сотрудниками, наиболее видным из которых был Крамерс.

Основополагающая идея *принципа соответствия* (Бор, 1923 г.) в широком ее понимании состоит в следующем. Законы классической физики прекрасно выдержали суровую экспериментальную проверку во всех процессах движения от макроскопического вплоть до микроскопического — движения атома как целого (кинетическая теория материи). Поэтому нужно принять как непререкаемый и без всяких ограничений необходимый постулат, что новая, пусть еще неизвестная, механика должна в применении ко всем таким проблемам давать тот же результат, что и классическая физика. Другими словами, необходимо потребовать, чтобы в предельном случае больших масс или макроскопических траекторий новая механика переходила в классическую. Конкретное представление о значении принципа соответствия нетрудно видеть на примере атома водорода, который состоит, согласно Резерфорду, из массивного ядра и вращающегося вокруг него электрона. По законам классической механики (первому закону Кеплера) орбита электрона представляет собой эллипс или в некоторых случаях окружность; в

последующем мы ограничимся как раз этим частным случаем. Пусть радиус круговой орбиты равен  $a$  и пусть, далее, орбитальное движение характеризуется угловой скоростью  $\omega$ . Два эти параметра связаны друг с другом соотношением

$$a^3\omega^2 = \frac{Ze^2}{m},$$

которое соответствует третьему закону Кеплера и следует из равенства центростремительной силы и силы кулоновского притяжения  $Ze^2/a^2$ , где  $Z$  — зарядовое число ядра (равное 1 для H, 2 для He<sup>+</sup>, 3 для Li<sup>2+</sup> и т. д.).

Сейчас нас интересует главным образом энергия вращающегося электрона. По закону сохранения энергии сумма кинетической и потенциальной энергий постоянна:

$$\frac{m}{2} a^2 \omega^2 - \frac{Ze^2}{a} = E.$$

В этом уравнении энергия, определенная лишь с точностью до аддитивной постоянной, нормирована таким образом, что  $E$  оказывается равной работе, которую нужно затратить, чтобы удалить электрон из атома, т. е. переместить его на бесконечно далекое расстояние от ядра ( $a \rightarrow \infty$ ) и оставить там в состоянии покоя ( $a\omega \rightarrow 0$ ). Комбинируя написанные выше уравнения, получаем

$$E = -\frac{m}{2} a^2 \omega^2 = -\frac{Ze^2}{2a} = -\left(\frac{Z^2 e^4 m \omega^2}{8}\right)^{1/2}.$$

Отсюда следует, что величина

$$\frac{|E|^3}{\omega^2} = \frac{Z^2 e^4 m}{8}$$

постоянна. Отметим, что это равенство справедливо и для эллиптических орбит (с большой полуосью  $a$ ). При этом  $\omega$  нужно понимать как  $2\pi/T$ , где  $T$  — период обращения электрона (см. также приложение 14).

Так выглядит атом водорода с точки зрения классических идей и общих принципов теории; любому радиусу орбиты  $a$  или любой угловой скорости  $\omega$  соответствует определенная энергия  $E$ , в то время как  $a$  или  $\omega$  могут принимать какие угодно значения.

Иначе обстоит дело в свете гипотезы Бора (гл. IV, § 3), по которой атом может находиться лишь в определенных дискретных состояниях, причем переход из одного состояния с энергией  $E_1$  в другое состояние с меньшей энергией  $E_2$  сопровождается излучением, отвечающим спектральной линии частоты  $h\nu = E_1 -$

— $E_2$ . Из частот излучения и поглощения можно найти энергии отдельных боровских состояний.

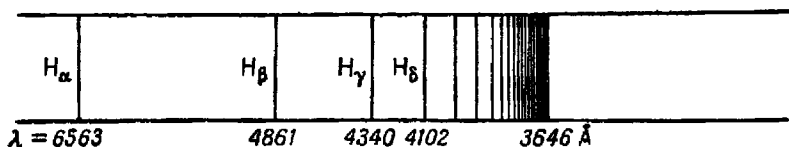
В настоящее время закономерности спектральных линий водорода известны очень хорошо (фиг. 36). В 1885 г. Бальмер впервые показал, что линии, расположенные в видимой части спектра — а это и все, которые тогда были известны, — подчиняются формуле

$$\nu = R \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{m^2} \right),$$

где каждому целому  $m > 2$  соответствует спектральная линия, а константа  $R$ , как впоследствии очень точно вычислил Пашен (1916 г.), равна

$$R = 109\,678 \text{ см}^{-1};$$

ее называют теперь постоянной Ридберга. Здесь  $\nu$  в согласии с принятой в спектроскопии традицией означает *волновое чис-*



Фиг. 36. Схема линий серии Бальмера.

Указаны принятые для отдельных линий обозначения.

ло, т. е. число длин волны, укладываемых в одном сантиметре,  $\nu = 1/\lambda$ .

Форма приведенной выше зависимости наводит на мысль, что общий закон для спектральных частот можно получить, заменив в формуле четверку ( $=2^2$ ) на  $n^2$ :

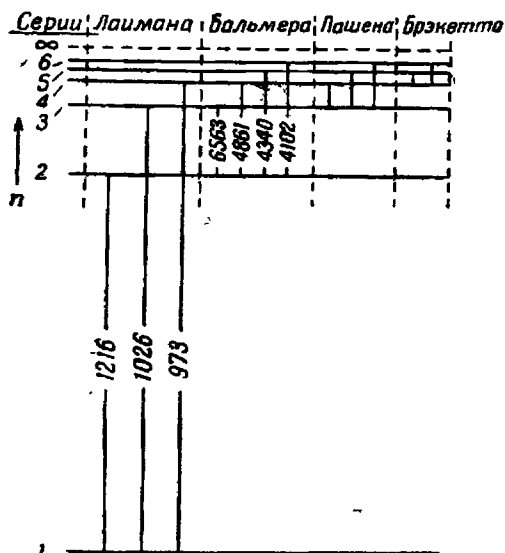
$$\nu = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

И в самом деле, все линии, следующие из этой формулы и соответствующие значениям  $n=1, 3, 4, \dots$ , удалось обнаружить спектроскопически; ранее они не были обнаружены лишь потому, что лежат вне видимой части спектра. В настоящее время известны следующие серии линий, названные в честь их первооткрывателей:

- $n=1$  — серия Лаймана (ультрафиолетовые лучи),
- $n=2$  — серия Бальмера (видимые лучи),
- $n=3$  — серия Пашена (инфракрасные лучи),
- $n=4$  — серия Брэкетта (инфракрасные лучи),



Следует специально отметить, что предсказанное формулой положение линий превосходно согласуется со спектроскопическими данными. Точность спектроскопических измерений столь высока, что позволяет определять положение линий, вплоть до пятого или шестого знака; тем не менее предсказанные значения отличаются от экспериментальных в худшем случае лишь на несколько единиц в последнем знаке. Уже сам вид формулы Бальмера, образуемый разностью двух одноподобных выражений, приводит в свете теории Бора к выводу, что эти выражения



Фиг. 37. Схема термов водородного атома.

Наиболее важные линии водородного спектра схематически изображены как переходы между различными термами (соответствующие данные воле даны в Å).

можно поставить в соответствие энергетическим уровням (термам) боровской модели атома:

$$E_n = -\frac{\hbar R}{n^2} \text{ (бальмеровские термы).}$$

Частота излучения, сопровождающего переход атома из состояния  $n$  в состояние  $m$ , дается в согласии с бальмеровской формулой соотношением

$$h\nu = E_n - E_m.$$

Если мы знаем схему атомных уровней, то мы сразу же можем представить себе и структуру спектра излучения. Для водородного атома схема уровней имеет вид, изображенной на фиг. 37. Энергетическая шкала выбрана таким образом, что нулевая энергия соответствует  $n \rightarrow \infty$ . Поэтому  $-E_n$  оказывается

равной работе, которую необходимо затратить, чтобы перевести электрон из состояния  $n$  в состояние покоя на бесконечности. Иначе говоря, это — энергия ионизации атома из состояния  $n$ . Энергия ионизации атома из основного состояния  $hR = -E_1$  представляет собой фундаментальную величину, которую обычно измеряют в электрон-вольтах и называют *потенциалом ионизации*. Расстояния между термами уменьшаются по мере увеличения номера  $n$ , а при  $n \rightarrow \infty$  уровни асимптотически приближаются к пределу  $E_\infty = 0$ .

На первый взгляд между интерпретацией спектральных линий водорода в терминах атомных переходов с одного дискретного квантового уровня на другой и классической теорией орбитального движения нет никакой связи. Однако на самом деле связь существует и очень тесная. Она определяется *принципом соответствия* Бора и позволяет постоянную  $R$ , введенную пока чисто феноменологически, рассчитать по механическим и электрическим свойствам электрона.

В применении к атому водорода принцип соответствия гласит: чем больше номер борковского состояния, тем лучше выполняются для него законы классической механики — по мере увеличения  $n$  расстояние между отдельными уровнями становится все меньше и меньше и в конце концов атом асимптотически приближается к состоянию движения, которое согласуется с классической теорией.

Если теперь подсчитать с помощью бальмеровской формулы частоту излучения в случае, когда и начальное и конечное состояния атома являются сильно возбужденными, то в предположении, что разность  $(m - n)$  мала по сравнению с  $m$  и  $n$ , получится

$$\nu \sim \frac{2R}{n^3} (m - n).$$

Наименьшая частота излучения отвечает случаю  $m - n = 1$ , т. е.

$$\nu_1 \sim \frac{2R}{n^3}.$$

Для  $m - n = 2$  мы получаем вдвое большую частоту, для  $m - n = 3$  — втрое большую и т. д. Таким образом, спектр излучения имеет тот же вид, что и спектр заряженной частицы, колеблющейся по законам классической механики с собственной частотой  $\omega = 2\pi\nu_1$  и соответствующими высшими гармониками. Если подставить теперь в формулу для энергии в бальмеровский терм основную частоту  $\nu_1$  вместо  $n$ , то получится следующее выражение (где  $\omega = 2\pi\nu_1$ ):

$$E \sim -hR \left( \frac{\nu_1}{2R} \right)^{3/2} = - \left( \frac{R h^3 \nu_1^2}{4} \right)^{1/2} = - \left( \frac{R h^3 \omega^2}{16\pi^2} \right)^{1/2}.$$

Это выражение зависит от частоты точно таким же образом, как и полученная ранее формула (стр. 128) для энергии классического вращения электрона. Как и раньше, имеем

$$\frac{|E|^2}{\omega^2} = \frac{R\hbar^2}{16\pi^2} = \text{const.}$$

Но по принципу соответствия в пределе очень больших чисел  $n$ , т. е. очень малых частот эти две формулы должны совпасть. Отсюда следует, что

$$R = R_0 Z^2,$$

где

$$R_0 = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3}.$$

Итак, уже на этой ранней стадии, исходя из принципа соответствия и предположения, что энергетические уровни действительно определяются формулой Бальмера, нам удалось сделать однозначное заключение о величине постоянной Ридберга, найдя тем самым возможность проверить теорию.

Подставив в формулу для  $R_0$  значения  $e$ ,  $m$  и  $h$ , измеренные другими методами, мы получаем  $R_0 \sim 3,290 \cdot 10^{15} \text{ сек}^{-1}$  или, если переписать это в волновых числах,  $R_0 \sim 109700 \text{ см}^{-1}$ , что в пределах той точности, с которой в настоящее время известны константы  $e$ ,  $m$  и  $h$  (до тысячных долей), согласуется с опытом. Более того, как показали измерения над ионами  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ , ..., формула правильно зависит от зарядового числа  $Z$ .

Добавочным свидетельством законности наших аргументов служит тот факт, что небольшое видоизменение формулы позволяет учесть также и *движение ядра*. Его влияние на величину термов, предсказанное таким путем, полностью подтвердилось на эксперименте. Именно в приведенных выше расчетах мы действовали так, как если бы ядро имело бесконечную массу, и поэтому считали его неподвижным. На самом же деле масса ядра, хотя и очень велика по сравнению с массой электрона  $m$  ( $\sim 1840 m$  для водорода), но все же конечна. Отсюда следует, что вращение электрона должно сопровождаться движением ядра, которое описывает круговую орбиту вокруг их общего центра тяжести с той же самой частотой, что и электрон (поскольку центр тяжести, разумеется, покоится). Обозначив радиусы орбит электрона и ядра через  $a_e$  и  $a_n$ , имеем по определению центра инерции:  $ma_e = Ma_n$ , где  $M$  — масса ядра. Равенство центростремительной силы и силы кулоновского притяжения приводит теперь к соотношению

$$ma_e \omega^2 = Ma_n \omega^2 = \frac{Ze^2}{(a_e + a_n)^2}.$$

В формуле для энергии движение ядра проявляет себя, во-первых, тем, что возникает новый член  $\frac{1}{2}Ma_n^2\omega^2$ , соответствующий кинетической энергии ядра, а во-вторых, тем, что в потенциальную энергию входит теперь не радиус орбиты электрона  $a_e$ , как раньше, а сумма  $a_e + a_n$ . С помощью тех же рассуждений, что и раньше (стр. 128), мы получаем следующее равенство:

$$E = - \left( \frac{Z^2 e^4 m M \omega^2}{8(m+M)} \right)^{1/2} = - \left( \frac{Z^2 e^4 m \omega^2}{8 \left(1 + \frac{m}{M}\right)} \right)^{1/2}.$$

Если теперь, следуя принципу соответствия, приравнять это выражение к тому, которое получается из рассмотрения бальмеровских термов с большими квантовыми числами, то постоянная Ридберга окажется равной

$$R = \frac{R_0 Z^2}{1 + \frac{m}{M}}, \quad R_0 = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3}.$$

Учет движения ядра сводится, таким образом, к появлению поправочного множителя, который изменяет первоначальное значение лишь на тысячные доли, но все же доступен наблюдению благодаря чрезвычайной точности спектроскопических методов.

Если не учитывать поправочный множитель, то, согласно теории, каждый четный энергетический терм однократно ионизированного гелия совпадает с термом водорода. Действительно, для  $\text{He}^+$  имеем  $Z=2$  и, стало быть, второй терм  $\text{He}^+$  совпадает с первым термом H, четвертый терм  $\text{He}^+$  — со вторым термом H и т. д. Если же принять во внимание и движение ядер, то соответствие термов нарушится, поскольку ядро гелия в четыре раза тяжелее ядра водорода и поэтому меньше влияет на движение электрона. Фактически четные (с номером  $2n$ ) термы  $\text{He}^+$  подчиняются формуле

$$(E_{\text{He}^+})_{2n} = - \frac{4R_0 h}{1 + \frac{m}{M_{\text{He}}}} \frac{1}{4n^2} = - \frac{R_0 h}{\left(1 + \frac{m}{M_{\text{He}}}\right) n^2},$$

в то время как водородные термы — формуле

$$(E_{\text{H}})_n = - \frac{R_0 h}{\left(1 + \frac{m}{M_{\text{H}}}\right) n^2}.$$

Поэтому в спектре гелия имеется целый ряд линий, которые почти (но все же не совсем) совпадают с линиями водородного спектра. Расстояние между родственными линиями нетрудно рассчитать по формулам, приведенным выше. Оно приблизи-

тельно в  $m/M$  раз меньше длины волны соответствующих линий и, стало быть, по порядку величины составляет примерно  $1 \text{ \AA}$ , что вполне доступно спектроскопическим измерениям. Экспериментальная проверка полностью подтвердила этот теоретический результат.

Нужно отметить далее, что то значение постоянной Ридберга, которое нашел Пашен по спектральным линиям водорода, относится не к  $R_0$ , а к  $R_0/(1+m/M_H)$ . Поэтому для  $R_0$  мы находим

$$R_0 = 109\,737 \text{ см}^{-1}.$$

Сразу же ясно, что зависимость частоты спектральных линий от массы ядра должна наблюдаться и в других атомах. Поэтому появляется возможность чисто спектроскопического обнаружения изотопов. Особенно важен случай тяжелого изотопа самого водорода — дейтерия, для которого наша формула выполняется точно, если, разумеется, подставить в нее массу ядра  $M_D$ . Фактически, как мы уже сказали (гл. III, § 5), изотоп D был впервые открыт именно спектроскопическими методами.

Ход рассуждений, которому мы до сих пор следовали, можно кратко резюмировать следующим образом. Классическая механика, опирающаяся на представление об электроном, обращающемся вокруг ядра, позволяет установить связь между радиусом орбиты, частотой обращения и энергией, но не способна объяснить спектр излучения атома. Для объяснения спектра мы должны вслед за Бором принять новую гипотезу, согласно которой атом обладает лишь дискретными уровнями энергии  $E_n = -hR/n^2$ . Почему это так, а не иначе, предоставляется объяснить новой механике. Из принципа соответствия, т. е. только из требования асимптотического совпадения новой механики со старой в пределе больших квантовых чисел, нам уже удалось получить определенную информацию о связи между экспериментально наблюдаемыми величинами — постоянной Ридберга и атомными константами  $e$ ,  $m$  и  $h$ . Но несмотря на это, мы по-прежнему не можем объяснить, почему вообще возникают балмеровские термы; пока мы знаем только, что если сделать специальное предположение о правильности формулы  $E_n = -R\hbar/n^2$ , то принцип соответствия приведет к определенной связи между коэффициентом пропорциональности  $R$  и величинами  $e$ ,  $m$  и  $h$ . Само же предположение еще нужно объяснить или по крайней мере как-то оправдать, и это обязана сделать новая теория. Забегая вперед, отметим, что эта задача не была решена вплоть до появления волновой механики. Тем не менее на последующих страницах мы рассмотрим кратко ос-

новые черты и самые важные результаты боровской квантовой теории атома, поскольку они не только необходимы хотя бы отчасти для обоснования волновой механики, но и позволяют объяснить многочисленные экспериментальные факты.

В первую очередь в связи с предыдущими вычислениями приведем несколько формул, играющих очень важную роль в последующем развитии теории Бора. Поскольку движение электронов в боровском атоме мыслится как обращение вокруг ядра по некоторым фиксированным орбитам (эллипсам, окружностям), естественно приписать каждому энергетическому уровню атома (в частном случае круговой орбиты) определенный радиус, определенную угловую скорость и т. д. в соответствии с формулами классической механики. Из уже приведенной формулы (стр. 128) сразу же следует, что *радиус a* круговой орбиты, относящейся к *n*-му энергетическому состоянию, есть (в пренебрежении движением ядра)

$$a = -\frac{Ze^2}{2E} = \frac{Ze^2 n^2}{2hR_0 Z^2} = a_1 \frac{n^2}{Z},$$

где величина

$$a_1 = \frac{h^2}{4\pi^2 m} = 0,528 \text{ \AA}$$

представляет собой радиус первой круговой боровской орбиты атома водорода или, как говорят, просто „боровский радиус“. Аналогично, для *угловой скорости* получается выражение

$$\omega = \frac{4\pi R_0 Z^2}{n^3} = \frac{\omega_1 Z^2}{n^3},$$

где

$$\omega_1 = 4\pi R_0 = 4,13 \cdot 10^{16} \text{ сек}^{-1}.$$

Особенно важна формула для орбитального момента (т. е. для момента количества движения), связанного с обращением электрона вокруг ядра. Из двух предшествующих формул следует, что

$$p = ma^2\omega = ma_1^2\omega_1 n = n \frac{h}{2\pi}.$$

Таким образом, в атоме Бора орбитальный момент всегда составляет целое число элементарных квантов  $h/2\pi$ . Это обстоятельство называют *квантовым условием для орбитального момента*.

Наоборот, мы могли бы постулировать это условие с самого начала. Тогда, обращая рассуждения и пользуясь формулами классической механики, мы пришли бы к формуле

Бальмера. Действительно, из соотношений (стр. 128)

$$E = -\frac{Ze^2}{2a} \quad \text{и} \quad a^3\omega^2 = \frac{Ze^2}{m}$$

следует, что

$$E = -\frac{Z^2e^4}{2ma^4\omega^2} = -\frac{Z^2e^4m}{2p^2},$$

где  $p = ma^2\omega$  — орбитальный момент. Подставив сюда значение  $p$  из квантового условия, сразу получим

$$E = -\frac{Z^2e^4m}{2} \frac{4\pi^2}{h^2n^2} = -\frac{hR_0Z^2}{n^2}.$$

Ввиду этого представляется совершенно естественным предположить, что квантовое условие для орбитального момента есть существенная черта новой механики. Постулируем поэтому, что оно универсально справедливо во всех случаях. При этом, однако, нужно показать на примерах, что принимаемый постулат приводит к разумным результатам. Хотя боровская теория и оставляет совершенно таинственными глубокими причины, лежащие в основе правила квантования момента, тем не менее это правило оказывается оправданным результатами, полученными в процессе дальнейшего развития теории.

В качестве примера рассмотрим случай *вращающейся молекулы*, которую мы будем трактовать как ротатор (т. е. как твердое тело с фиксированной осью вращения). Если  $A$  — момент инерции тела относительно этой оси, то, согласно классической механике, кинетическая энергия вращения с угловой скоростью  $\omega$  равна

$$E = \frac{A}{2} \omega^2,$$

а потенциальная энергия отсутствует. Момент количества движения относительно оси есть просто производная от энергии по  $\omega$ :

$$p = A\omega.$$

Воспользуемся теперь формулой момента, полученной для атома водорода:

$$p = n \frac{h}{2\pi},$$

где  $n$  — целое число. Исключая  $\omega$ , мы получаем формулу для энергии

$$E_n = \frac{p^2}{2A} = \frac{h^2}{8\pi^2A} n^2.$$

Это выражение, определяющее различные уровни энергии, соответствует *деландровским термам*. Такой схеме уровней отвечает определенный спектр излучения. Переход из  $n$ -го состояния в  $(n-1)$ -е сопровождается излучением, отвечающим спектральной линии с частотой

$$\nu = \frac{1}{h} (E_n - E_{n-1}) = \frac{h}{8\pi^2 A} [n^2 - (n-1)^2] = \frac{h}{4\pi^2 A} \left(n - \frac{1}{2}\right).$$

Спектр состоит из эквидистантной последовательности линий и представляет собой простейший пример *полосатых спектров*. Никакие другие переходы, кроме переходов с одного уровня на ближайший нижний (или ближайший верхний) уровень, невозможны, как то следует из принципа соответствия и будет сейчас непосредственно доказано. Действительно, мы уже видели в случае водородного атома, а это справедливо и в нашем теперешнем случае, что если система переходит из одного квантового состояния с большим квантовым числом в другое, минуя одно или два промежуточных состояния, то этот переход сопровождается излучением, частота которого вдвое или втрое больше основной частоты, т. е. соответствует различным гармоникам. Однако в разложении классического кругового движения (характерного для ротатора) в ряд Фурье фигурирует лишь основная частота

$$x = a \cos \omega t, \quad y = a \sin \omega t,$$

а следовательно, согласно классической теории, лишь эта частота присутствует и в излучении ротатора. Поэтому в силу принципа соответствия в квантовой теории также не должны появляться спектральные линии, отвечающие классическим гармоникам в фурье-разложении орбитального движения. Другими словами, мы получили *правила отбора* для ротатора:  $n \rightarrow n-1$  при переходе с излучением и  $n \rightarrow n+1$  при переходе с поглощением. Правда, поскольку мы пользовались принципом соответствия, мы доказали эти правила лишь для больших квантовых чисел; однако естественно предположить, что они справедливы и для всех переходов вообще.

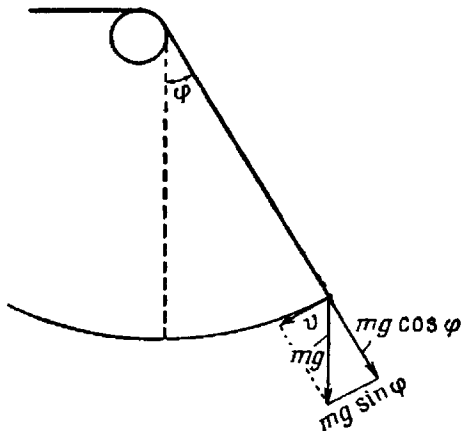
## § 2. Квантовые условия для простого и кратнопериодического движения

Квантовое условие для момента, выведенное из закономерностей серии Бальмера (взятых из опыта), и его применение к вращающейся молекуле, приведшее к закономерностям серии Деландра (согласующимся с опытом), указывают путь, по которому следует идти, строя новую механику. Ее основная



особенность, очевидно, заключается в том, что некоторые физические величины могут принимать только дискретные значения; такие величины называются квантованными. Встает вопрос, как находить такие квантованные величины в общем случае? Попробуем выяснить суть дела на простом примере; в приложении 13 мы сформулируем общую постановку задачи на основе гамильтоновой теории.

Здесь большую помощь может оказать одна идея Эренфеста (1914 г.). Рассмотрим механическую систему, обладающую



Фиг. 38. Математический маятник переменной длины.

При достаточно медленном уменьшении длины отношение энергии к частоте остается постоянным.

квантованными переменными, т. е. переменными, принимающими только целые значения. Если ввести малое возмущение, то выводы новой механики должны остаться столь же справедливыми для возмущенной системы, как и для невозмущенной, так что рассматриваемые величины должны сохранить свой квантовый характер. Следовательно, под действием возмущения они должны либо скачком измениться на целое число, либо остаться неизменными. Последнее должно выполняться, когда возмущение нарастает медленно; если это так, то соответствующие величины называются *адиабатически инвариантными*. Таким образом, весьма правдоподобно, что квантуются только адиабатически инвариантные величины. Поэтому возникает мысль: прежде чем строить новую теорию, стоит проверить, существуют ли такие величины в рамках классических законов движения.

Все это можно проиллюстрировать простым примером. Рассмотрим *математический маятник* (фиг. 38), длину которого можно менять, скажем, выбирая нить через блок. При медленном укорачивании нити мы совершаем работу: во-первых, про-

тив сил тяжести; во-вторых, против центробежной силы колеблющегося маятника. Пусть длина нити медленно меняется от  $l$  до  $l + \Delta l$ ; для определенности выберем  $\Delta l$  отрицательным, что соответствует укорачиванию нити. Составляющая веса, вызывающая натяжение нити, равна  $mg \cos \varphi$ , а центробежная сила равна  $ml\dot{\varphi}^2$ , где  $\dot{\varphi}$  — угловая скорость. Работа против силы тяжести и центробежной силы равна

$$A = \int_l^{l+\Delta l} (mg \cos \varphi + ml\dot{\varphi}^2) (-dl).$$

Предположим теперь, что нить укорачивается чрезвычайно медленно, так что за время этого процесса маятник выполняет очень большое число полных колебаний. В этом случае можно пренебречь зависимостью амплитуды колебаний от изменения длины нити, считая амплитуду постоянной. Тогда мы получаем

$$A = - (mg \overline{\cos \varphi} + ml \overline{\dot{\varphi}^2}) \Delta l,$$

где черта означает усреднение по невозмущенному движению. Ограничившись случаем малых амплитуд, мы можем заменить  $\cos \varphi$  выражением  $1 - \varphi^2/2$ . Тогда

$$A = -mg \Delta l + \left( mg \frac{\overline{\varphi^2}}{2} - ml \overline{\dot{\varphi}^2} \right) \Delta l = -mg \Delta l + \Delta W.$$

Первый член соответствует смещению точки равновесия вверх, которое нас не интересует. Второй член, равный произведению  $\Delta l$  на выражение в скобках, — это увеличение  $\Delta W$  энергии *колебательного движения*. Энергия невозмущенного колебательного движения равна

$$W = \frac{m}{2} l^2 \dot{\varphi}^2 + mgl (1 - \cos \varphi),$$

где первый член представляет собой кинетическую энергию, а второй — потенциальную энергию, отсчитываемую от положения равновесия. Заменяя  $1 - \cos \varphi$  его приближенным значением  $\varphi^2/2$ , мы получаем

$$W = \frac{m}{2} l^2 \dot{\varphi}^2 + mgl \frac{\varphi^2}{2}.$$

Но это выражение совпадает с энергией линейного осциллятора, колеблющегося с амплитудой  $q = l\varphi$ . Следовательно, движение есть простое гармоническое колебание  $\varphi = \varphi_0 \cos \omega t$ ,

а для него

$$\overline{\varphi^2} = \frac{\varphi_0^2}{2}, \quad \overline{\dot{\varphi}^2} = \frac{\varphi_0^2 \omega^2}{2},$$

откуда с учетом равенства  $\omega = 2\pi\nu = \sqrt{g/l}$  легко получается

$$W = \frac{m l^2 \varphi_0^2 \omega^2}{2} = m g l \frac{\varphi_0^2}{2};$$

из вида же второго члена в окончательном выражении для  $A$  следует, что

$$\Delta W = - \frac{m l \omega^2 \varphi_0^2}{4} \Delta l = - \frac{W}{2l} \Delta l.$$

Таким образом, мы имеем

$$\frac{\Delta W}{W} = - \frac{1}{2} \frac{\Delta l}{l}.$$

Но с другой стороны, поскольку  $\nu$  меняется как  $l^{-1/2}$ , имеем

$$\frac{\Delta \nu}{\nu} = - \frac{1}{2} \frac{\Delta l}{l},$$

так что

$$\frac{\Delta W}{W} = \frac{\Delta \nu}{\nu}.$$

Решая это дифференциальное уравнение для  $W$  как функции  $\nu$ , получаем

$$\frac{W}{\nu} = \text{const} = J.$$

Таким образом, при медленном (адиабатическом) укорачивании нити маятника величина  $J$  остается постоянной; в духе упомянутого выше принципа Эренфеста ее можно считать равной целому кратному  $h$ :

$$W = n h \nu.$$

Итак мы получаем уровни энергии гармонического осциллятора в согласии с фундаментальным предположением Планка (гл. IV, § 3).

В принципе аналогичным образом можно найти адиабатические инварианты и для других систем. Однако в общем случае этот прямой метод чрезвычайно трудоемок, и полезно выяснить, нет ли более простого метода выявления адиабатических инвариантов. Покажем, как это делается при помощи геометрической интерпретации инвариантной величины  $J = W/\nu$  на примере осциллятора (математический маятник с малой амплитудой).

Выпишем еще раз выражение для энергии, только в других переменных  $q=l\varphi$ ,  $p=m\dot{q}$ ,  $f=mg/l$ :

$$W = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{f}{2} q^2.$$

В плоскости  $pq$  (фиг. 39) это уравнение описывает эллипс с полуосями

$$a = \sqrt{2mW}, \quad b = \sqrt{\frac{2W}{f}},$$

что можно усмотреть, записав его в виде

$$\frac{p^2}{2mW} + \frac{q^2}{2W/f} = 1.$$

Как известно, площадь эллипса равна

$$\oint p dq = ab\pi,$$

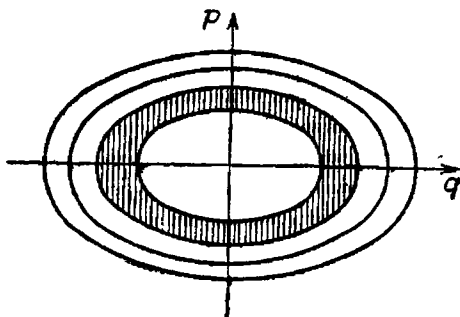
т. е. в нашем случае

$$\oint p dq = 2\pi W \sqrt{m/f}.$$

(Символ  $\oint$  означает, что интегрирование проводится по пол-

Фиг. 39. Фазовые кривые для линейного осциллятора.

Фазовые точки в  $pq$ -плоскости вырезают эллипсы, площади которых равны целому кратному величине  $h$ .



ному периоду, т. е. в данном случае по замкнутому эллипсу.) Но  $2\pi\nu = \sqrt{f/m}$ , так что

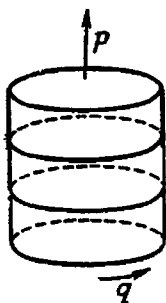
$$\oint p dq = \frac{W}{\nu} = J.$$

Следовательно, адиабатический инвариант представляет собой просто площадь эллипса, а квантовый постулат утверждает, что площадь замкнутой кривой, описываемой в  $pq$ -плоскости (фазовой плоскости) за один период движения, равна целому кратному  $h$  (Дебай, 1913 г.).

Сформулированное соотношение допускает непосредственное обобщение. Сначала в качестве примера системы с одной степенью свободы рассмотрим уже упоминавшийся выше *ротатор*. Координатой в этом случае служит азимут  $q = \varphi$ , которому канонически сопряжен момент  $p$ . В свободном вращении  $p$  постоянен, т. е. не зависит от угла поворота. Тогда

$$J = \oint p dq = p \oint dq.$$

Если изображать движение в плоскости  $pq$ , то интеграл должен браться по прямой линии  $p = \text{const}$ , а не по замкнутой кривой.



Фиг. 40. Изображение фазовой кривой ротатора на поверхности цилиндра.

Но следует напомнить, что в этой плоскости точки, отвечающие одинаковым  $p$  и отличающимся на  $2\pi$  координатам  $q$ , представляют одно и то же состояние ротатора. Таким образом, строго говоря, следует рассматривать не  $pq$ -плоскость, а  $pq$ -цилиндр (фиг. 40) с периодичностью  $2\pi$ , так что интегрирование должно проводиться по периоду цилиндра и дать  $2\pi$ . Таким образом, мы получаем  $J = 2\pi p$ . Из предположения, что правило квантования

$$J = \oint p dq = nh$$

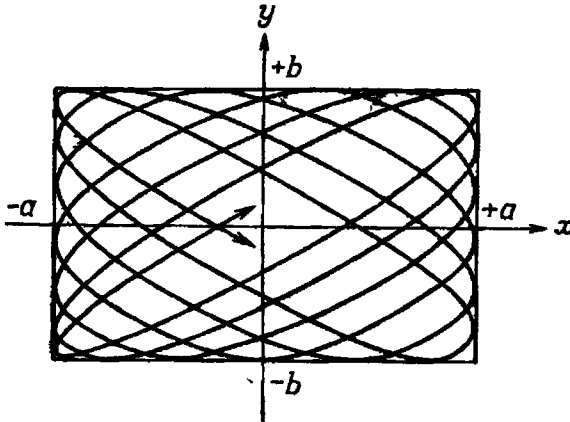
остаётся верным и в этом случае, следует тогда, что  $p = n(h/2\pi)$ . Эта формула уже была получена ранее совсем другим путем для водородного атома и с успехом применена к реальному ротатору для интерпретации линейчатых спектров.

Оказывается, что правило квантования

$$\oint p dq = nh$$

можно применять не только к системам с одной степенью свободы, но и к сложным системам со многими степенями свободы; оно всегда приводит к результатам, согласующимся с опытом.

Возможность применения его к системам с более чем одной степенью свободы обусловлена тем (Зоммерфельд, Вильсон, 1916 г.), что во многих случаях можно так ввести координаты  $q_1, q_2, \dots$ , что сопряженные им импульсы обладают ценным свойством, именно,  $p_1$  зависит только от  $q_1$ ,  $p_2$  — только от  $q_2$  и т. д.; системы такого рода называются системами с *разделяющимися переменными*. Вообще говоря, движение таких систем многократно периодично<sup>1)</sup>, и его можно представить в виде суперпозиции простых гармонических колебаний и их гармоник (так называемых



Фиг. 41. Кривая, изображающая движение системы с двумя степенями свободы, частоты которой  $\nu_1$  и  $\nu_2$  несоизмеримы (фигура Лиссажу).

фигур Лиссажу). Например, рассмотрим в плоскости с прямоугольными координатами  $x$  и  $y$  движение, представляющее собой наложение двух колебаний вдоль осей координат, с частотами  $\nu_1$  и  $\nu_2$  (фиг. 41). Если бы  $\nu_1$  равнялась  $\nu_2$ , то путь был бы окружностью, эллипсом или прямой линией в зависимости от соотношения между фазами. Если отношение  $\nu_1$  к  $\nu_2$  — рациональное число, мы опять получаем замкнутые орбиты. Если же  $\nu_1$  и  $\nu_2$  несоизмеримы, т. е. их отношение иррационально, кривая не замкнута, а равномерно заполняет весь прямоугольник, в границах которого меняются переменные. Многократно периодическому движению, вообще говоря, свойственны орбиты как раз такого типа. Однако если орбитальная кривая замыкается, совершив конечное число обращений, то фактически существует только один период и соответственно только одно

<sup>1)</sup> В русской литературе чаще пользуются термином «условно периодическое движение». — *Прим. ред.*

квантовое условие типа

$$\oint p dq = nh.$$

Если же орбита не замыкается, т. е. если система имеет два или более несоизмеримых периодов, то квантовых условий будет столько же, сколько периодов:

$$\oint p_1 dq_1 = n_1 h,$$

$$\oint p_2 dq_2 = n_2 h,$$

• • • • •

Этот общий случай называют *невырожденным*, тогда как случай совпадения или соизмеримости периодов называется случаем *вырождения*. Если  $u$  — число периодов, а  $v$  — число степеней свободы, то  $w = v - u$  называется *степенью вырождения*. В приложении 13 мы более подробно рассмотрим эти соотношения.

Вскоре мы узнаем, что это искусственное сочетание классической механики с квантовыми условиями было заменено последовательной квантовой механикой, в которой целые числа  $n_1, n_2, \dots$  появляются более естественным путем. Однако даже при этом выводы излагаемой теории приближенно остаются справедливыми для больших квантовых чисел (т. е. для случая, когда  $h$  мала по сравнению с величинами интегралов  $\oint p dq$ ), как и следовало ожидать с точки зрения принципа соответствия (гл. V, § 4).

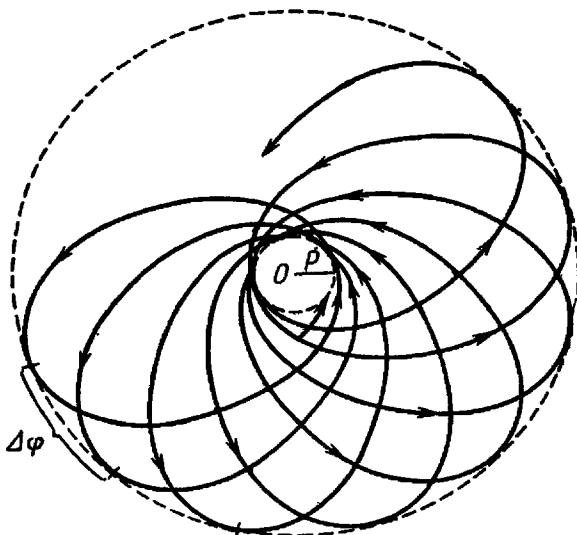
В качестве приложения изложенных выше правил мы обсудим теперь атом водорода, полное квантование которого провел Зоммерфельд. Согласно законам Кеплера, электрон движется вокруг ядра по эллипсу, и поэтому движение характеризуется одним периодом. Так как электрон обладает тремя степенями свободы, в этом случае имеется двойное вырождение. В приложении 14 мы выполним квантование кеплеровского эллипса, приводящее к правильным уровням энергии.

Вырождение частично снимается, если учесть *релятивистское изменение массы*, т. е. зависимость массы электрона от его скорости. В этом случае, согласно Зоммерфельду, орбита представляет собой прецессирующий эллипс (розетку); его большая ось вращается вокруг ядра в плоскости эллипса с постоянной угловой скоростью (фиг. 42). Движение становится двоякопериодическим; кроме первоначального периода обращения, остающегося неизменным пока прецессия мала, появляется еще и период прецессионного движения. В соответствии с этим мы

имеем два квантовых условия:

$$J_1 = nh, \quad J_2 = kh$$

(ср. приложение 14);  $n$  определяет главную полуось  $a$  приближенного эллипса, а  $k$  — его фокальный полупараметр  $q$ :



Фиг. 42. Розетка — орбита электрона, обращающегося вокруг ядра, с учетом релятивистского изменения массы.

Движение двукратно периодическое, при каждом витке перигелий смещается на угол  $\Delta\varphi$ .

$a = n^2 a_0$ ,  $q = k^2 a_0$  (фиг. 43). Далее, вычисление показывает, что полный момент равен

$$p = k \frac{h}{2\pi}$$

и что выражение для энергии содержит добавку к бальмеровскому уровню:

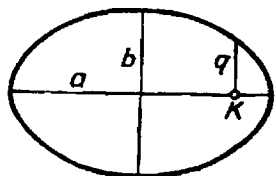
$$E = -\frac{R_0 h Z^2}{n^2} + \varepsilon(n, k).$$

Из первой формулы следует, что при  $k=0$  момент равен нулю; это соответствует «маятниковобразным» орбитам, на которых орбитальный эллипс вырождается в прямую линию. При  $k=n$  мы получаем максимальный момент, возможный для фиксированного  $n$ ; этот случай соответствует круговым орбитам. При  $k < n$  орбиты эллиптические. В спектрах не обнаружено



никаких признаков существования уровней энергии (термов), соответствующих маятникообразным орбитам. Поскольку такие термы не реализуются, их исключение из схемы термов должно быть оправдано теоретически. Причину мы видим в том, что маятникообразные орбиты проходят через ядро, и электрон в своем движении по ним сталкивался бы с ядром, что, конечно, невозможно.

Дополнительный член  $\varepsilon(n, k)$ , величина которого будет приведена ниже, отражает более тонкие детали водородных линий; его влияние состоит в расщеплении каждого бальмеровского термина на несколько уровней; их число определяется квантовым числом  $k$ . Следовательно, сами спектральные линии представляют собой системы более тонких линий, соответствующих переходам между уровнями высшего состояния ( $n=n_1$ ,



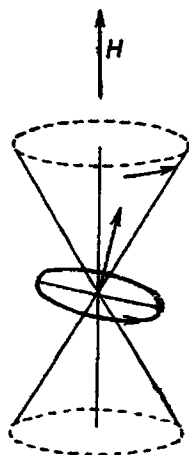
Фиг. 43. Эллиптическая орбита с ядром  $K$  в фокусе.

$k=1, 2, \dots, n_1$ ) и низшего состояния ( $n=n_2, k=1, 2, \dots, n_2$ ). Это — так называемая *тонкая структура* спектральных линий. Зоммерфельд разработал теорию тонкой структуры для водородоподобных атомов ( $H, He^+, Li^{2+}$ ), а Фаулер и Пашен на примере спектра однократно ионизированного гелия ( $He^+$ ) установили полное согласие теории с опытом. Проверка на  $He^+$  легче, чем на  $H$ , по следующей причине. Термы  $He^+$  отстоят друг от друга в 4 раза дальше, чем термы водорода благодаря тому, что заряд ядра удвоен, а соответствующий множитель для тонкого расщепления, как показывает теория, равен 16. Поэтому тонкую структуру линий  $He^+$  легче обнаружить и измерить.

При учете релятивистского изменения массы вырождение водородного атома снимается частично, и движение остается однократно вырожденным. Это последнее вырождение связано с тем, что в отсутствие внешнего поля плоскость орбиты электрона не меняется, причем ее ориентация в пространстве совершенно произвольна. Вырождение снимается только при включении внешнего поля. Если поместить атом в однородное магнитное поле  $H$ , возникает прецессионное движение плоскости орбиты вокруг направления поля (фиг. 44). В самом деле, вращение электрона в плоскости орбиты обуславливает механический, а также магнитный моменты атома; векторы этих моментов перпендикулярны плоскости орбиты. Магнитное поле,

взаимодействуя с магнитным моментом, стремится развернуть его вдоль поля. Этому противодействует инерция вращения электрона; характер этого противодействия хорошо известен с достаточной для наших целей полнотой из теории волчка (гироскопа). Результатом, как и в случае механического волчка, является прецессионное движение.

Это — третье периодическое движение, возможное для водородного атома. Согласно нашим правилам, оно должно быть



Фиг. 44. Гироскопическое движение перпендикуляра к плоскости орбиты во внешнем поле.

Показан конус, описываемый перпендикуляром.

квантованным так же, как и момент орбитального движения. Квантование приводит к формуле

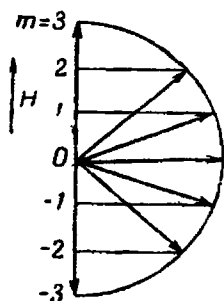
$$p_{\varphi} = m \frac{\hbar}{2\pi} \quad (m = -k, -k+1, \dots, +k),$$

где  $p_{\varphi}$  означает составляющую момента в направлении поля, так что квантуется именно эта составляющая. Следовательно, для момента (величина  $p$  которого должна быть целым кратным  $\hbar/2\pi$ ) и угол наклона к направлению  $H$  также может принимать лишь конечное число значений, именно  $2k+1$  значений (фиг. 45) соответственно  $2k+1$  возможным значениям компоненты  $p_{\varphi}$ , параллельной полю. Речь идет о *пространственном квантовании*. На эксперименте это пространственное квантование может быть продемонстрировано в опытах Штерна и Герлаха, которых мы коснемся позднее (гл. VI, § 7).

Прецессионное движение в магнитном поле дает дополнительный вклад в энергию, равный  $m\nu_L\hbar$ , где  $\nu_L = eH/4\pi mc$  — так называемая *ларморовская частота*, а  $m$  — масса электрона. Это значение для энергии получается следующим образом.

Потенциальная энергия магнитного момента  $M$  в однородном магнитном поле  $H$ , направленном под углом  $\theta$  к моменту, равна  $-HM \cos \theta$ . В нашем случае угол  $\theta$  определяется пространственным квантованием:  $\cos \theta = p_\phi / p = mh/2\pi r$ . С другой стороны, вращение заряда  $-e$  (массой  $\mu$  которого определяется механический момент) приводит, согласно электронной теории, к магнитному моменту  $-e\mu/2mc$ . Комбинируя эти результаты, и получают для дополнительной энергии приведенную выше величину.

Таким образом, магнитное поле расщепляет каждый терм на  $2k+1$  термов. Поэтому следует ожидать, что спектральные линии также обладают свойством расщепляться в магнитном



Фиг. 45. Пример пространственного квантования для случая  $k=3$ .

Угол наклона полного момента к направлению поля должен быть таким, чтобы его проекция  $m$  на направление поля была целым числом (в единицах  $\hbar/2\pi$ ).

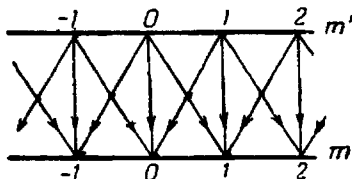
поле. Это расщепление обнаружил экспериментально Зееман в 1896 г., когда еще ничего не было известно о квантовой теории, и попытки объяснения оптических явлений опирались на классическую механику. Самые ранние наблюдения Зеемана показали следующее. Линии, наблюдаемые в поперечном поле (поле под прямым углом к лучу света), расщепляются каждая на три, причем средняя линия поляризована параллельно полю, а две крайние — под прямым углом к полю. Когда же наблюдение ведется в продольном поле (поле параллельно лучу света), каждая линия расщепляется на две, поляризованные по кругу в противоположных направлениях. Это явление называют теперь *нормальным эффектом Зеемана*. Лоренц показал, что поведение классического осциллятора в магнитном поле действительно может привести к такому эффекту. Предположим, что прямолинейные колебания осциллятора разложены на два противоположных движения по окружностям, плоскости которых перпендикулярны полю, и одно прямолинейное движение, параллельное полю. Тогда, согласно теории Лоренца, частота одного из круговых движений возрастет под действием поля как раз на величину ларморовской частоты  $\nu_L$ , а частота другого кругового движения соответственно уменьшится на ту же величину,

Это согласуется с наблюдаемыми в продольном и поперечном направлениях расщеплениями и поляризациями, как было описано выше.

Легко видеть, что наша квантовая теория ведет в точности к тому же самому результату. Несмотря на расщепление на  $2k+1$  термов, мы обнаружим у линии две или три компоненты соответственно тому, будем ли мы наблюдать ее в направлении магнитного поля или в перпендикулярном полю направления. В свете принципа соответствия этот результат можно сразу понять. Ведь данное Лоренцом классическое объяснение эффекта Зеемана имеет в виду, что действие магнитного поля сообщает атомной системе дополнительное вращение с ларморовской частотой  $\nu_L$ , иными словами, дополнительное чистое

Фиг. 46. Переходы в магнитном поле.

Вследствие правила отбора  $\Delta m = 0, \pm 1$  происходят только переходы, указанные стрелками. Поскольку в однородном магнитном поле термы, соответствующие различным значениям  $m$ , равноудалены друг от друга (эквидистантны), каждая спектральная линия расщепляется в магнитном поле только на три линии (нормальный эффект Зеемана).



круговое движение без гармоник. Согласно принципу соответствия, квантовая механика в пределе должна оставлять справедливым это положение; поэтому, как и в случае ротатора, мы приходим к правилам отбора  $\Delta m = \pm 1$ . С другой стороны, параллельная полю составляющая движения при этом не меняется; следовательно, мы получаем дополнительное правило отбора  $\Delta m = 0$ . Для возможных переходов получается отсюда схема, изображенная на фиг. 46, где расщепление верхнего и нижнего термов отмечено на горизонтальных линиях, а стрелки соответствуют возможным переходам. Величина скачка энергии одинакова для всех стрелок, направленных наклонно влево, так что соответствующие переходы сопровождаются излучением одной и той же частоты; точно так же обстоит дело со стрелками, направленными вертикально вниз или вправо. Таким образом, мы получаем простой триплет (или дублет).

Теория Бора объясняет только *нормальный эффект Зеемана*. В действительности, (для не очень сильных полей) картина расщепления состоит, вообще говоря, не из трех, а из значительно большего числа линий. Этот *аномальный эффект Зеемана* нельзя понять, не выходя за рамки концепций, использованных нами до сих пор. Более глубоко мы рассмотрим его в гл. VI.

Перейдем теперь к *спектрам атомов щелочных металлов* (фото 14). Существование серий в линиях этих спектров было открыто Пашеном и Рунге (1890 г.) и одновременно и

независимо Ридбергом (1890 г.). Возникновение этих серий представляют себе следующим образом: так называемый валентный электрон движется в поле ядра и остальных электронов и сам порождает весь спектр. Такая точка зрения оправдывается прежде всего тем, что у атомов щелочных металлов один электрон гораздо слабее связан, чем остальные, так что главным образом он отвечает за химическое поведение щелочных металлов. С другой стороны, мы увидим ниже, что остальные  $Z - 1$  электронов образуют так называемые замкнутые оболочки, вокруг которых вращается лишний, т. е. валентный, электрон. Поле, в котором он движется, центрально-симметрично, так что потенциал зависит только от расстояния до ядра; но кулоново поле ядра «экранировано» остальными  $Z - 1$  электронами — вот эти-то отклонения от кулонова поля и порождают отличия спектров щелочных металлов от спектра водорода.

Валентный электрон движется и в этом случае по прецессирующему эллипсу: орбита имеет форму точного эллипса лишь в чисто кулоновском поле, любое же отклонение от кулонова закона, как и отклонение, связанное с релятивистским изменением массы в атоме водорода, вызывает прецессию. Аналогичным образом, проквантовав движение, мы получим два квантовых числа  $n$  и  $k$ . По традиции термы обозначают числом и буквой: число совпадает с главным квантовым числом  $n$ , а для указания азимутального квантового числа приняты обозначения

$$k = 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad \dots,$$

Терм  $s \quad p \quad d \quad f \quad \dots$

Например,  $4d$  обозначает терм с  $n=4$  и  $k=3$ . Так как прецессионное движение — чисто гармоническое, принцип соответствия приводит, как и ранее, к правилу отбора  $\Delta k = \pm 1$ . Следовательно, переходы осуществляются: из  $s$ -терма только в  $p$ -терм, из  $p$ -терма только в  $s$ - и  $d$ -термы и т. д. В целях выделения наиболее важных серий спектральных линий им даны следующие наименования:

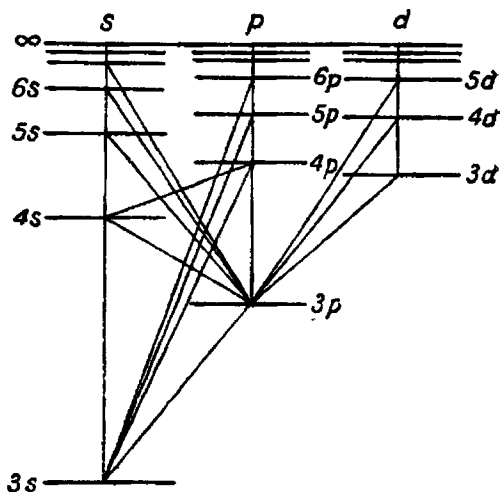
- $np \rightarrow n_0s$  главная серия;
- $ns \rightarrow n_0p$  резкая (побочная) серия,
- $nd \rightarrow n_0p$  диффузная (побочная) серия,
- $nf \rightarrow n_0d$  основная серия (серия Бергмана),

В этом списке слева выписаны термы, между которыми происходят переходы, причем  $n_0$  перед любой буквой обозначает наименьшее значение  $n$ , которое возможно в данном терме для данного атома. Справа стоит название серии, которая полу-

чается, если индексу  $n$  придавать различные значения. На схеме термов (фиг. 47) уровни с большей энергией расположены выше. Для каждого азимутального квантового числа  $k$  имеется серия уровней энергии, соответствующих различным значениям  $n$ ; значения энергии в серии сходятся к некоторой величине (*пределу серии*) при  $n \rightarrow \infty$ . Наклонные линии изображают возможные переходы; переходы на уровень  $3s$  соответствуют спектральным линиям главной серии, переходы с  $s$ -уровней на уровень  $3p$  — спектральным линиям резкой серии

Фиг. 47. Схема термов натрия (разрешение невелико).

Переходы между различными уровнями определяют линии излучения.



и т. д. Причина, по которой наименьшее значение  $n$  равно 3, а не 1, будет объяснена позднее (см. табл. 5, стр. 206). Построение такой схемы термов, полученной из теоретических соображений, вносит порядок в хаос спектральных линий, обнаруженных на опыте.

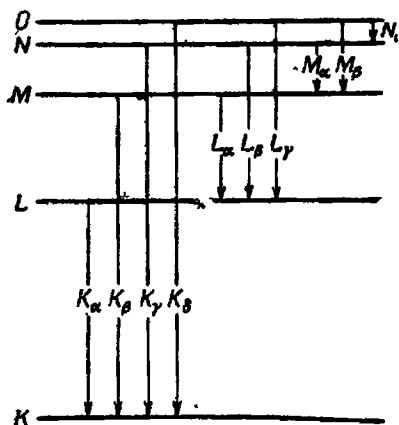
В качестве последнего применения теории Бора мы обсудим происхождение рентгеновских спектров (Баркла, 1908 г.). Существенная черта рентгеновских спектров в отличие от оптических состоит в том, что тип рентгеновских спектров (фото 15) одинаков для всех элементов, в то время как оптические спектры, обладающие сходной структурой для химически сходных элементов, резко отличаются для элементов из разных периодов системы Менделеева. Прежде всего это означает, что рентгеновские спектры должны иметь источник в глубине атома, в то время как характер оптических спектров, так же как и химическое поведение атома, определяются его внешней частью,

Обнаруженные на опыте линии, обозначаемые как  $K_\alpha$ ,  $K_\beta$ , ...,  $L_\alpha$ ,  $L_\beta$ , ...,  $M_\alpha$ ,  $M_\beta$ , ..., могут быть упорядочены в схему термов при помощи разностных соотношений:

$$K_\beta = K_\alpha + L_\alpha,$$

$$K_\gamma = K_\alpha + L_\beta = K_\beta + M_\alpha \text{ и т. д.}$$

Эти соотношения соответствуют комбинационному принципу Ритца; с большой тщательностью они проверялись на эксперименте, в результате чего было установлено, что они выполняются именно в такой форме.



Фиг. 48. Схема рентгеновских уровней (по Косселю) с переходами, соответствующими рентгеновским линиям.

Интерпретацию рентгеновских спектров дал Коссель (1917 г.). Электроны в атоме сгруппированы в оболочки; имеется  $K$ -оболочка,  $L$ -оболочка и т. д. Наиболее прочно связаны  $K$ -электроны, менее прочно  $L$ -электроны, еще менее прочно  $M$ -электроны и т. д. На фиг. 48 горизонтальными линиями изображены уровни энергии, соответствующие электронам различных оболочек. Согласно Косселю, возбуждение  $K$ -линии следует представлять себе так. В результате некоторого процесса (рассеяния, поглощения света)  $K$ -электрон оказывается выбитым из  $K$ -оболочки. Для этого требуется определенная минимальная энергия; поглощена же может быть всякая порция энергии, превышающая этот минимум. Поэтому в спектре поглощения появляется резко выраженная граница; поглощается излучение всех длин волн короче граничной. Линий же поглощения, подобных линиям видимой области, в рентгеновской области не обнаружено.

Если из  $K$ -оболочки выбит таким путем электрон, то  $L$ - или  $M$ -электрон может спуститься на  $K$ -оболочку, в резуль-

тате чего излучается квант энергии. В таких случаях в излучении появляются  $K_\alpha$ ,  $K_\beta$ , ... линии. Аналогичный эффект получается, когда в результате возбуждения выбивается электрон из  $L$ -оболочки.

Мозли (1913 г.) сумел из своих измерений вывести следующий закон для частот  $K$ -линий различных элементов:

$$\nu = \frac{3}{4} R_0 (Z - a)^2 = R_0 (Z - a)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right).$$

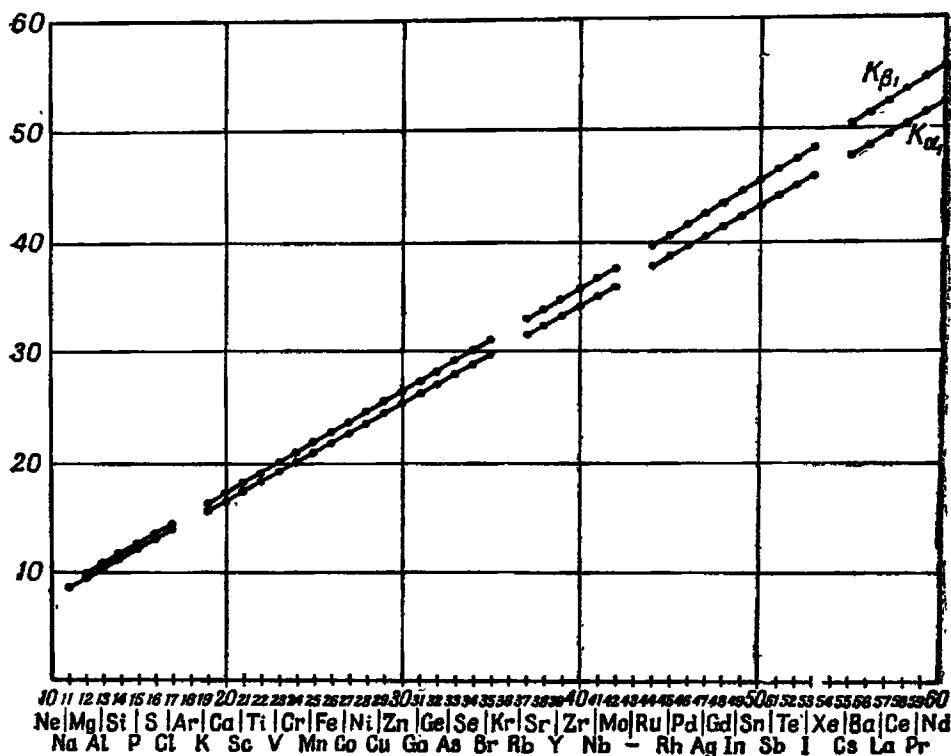
Здесь  $R_0$  — постоянная Ридберга, уже встречавшаяся нам (гл. V, § 1);  $a$  — величина, называемая постоянной экранировки и имеющая для всех элементов приблизительно одинаковое значение 1,0. Таким образом, из экспериментальных фактов, выражаемых законом Мозли, следует, что в рентгеновских спектрах термы — водородного типа (водородоподобные термы), причем заряд ядра экранирован. Этот результат нужно понимать так, что из-за большой величины заряда ядра ближайшие к нему электроны сильно связаны с ядрами и поэтому движутся подобно электрону в атоме водорода, тогда как остальные электроны атома лишь несущественно возмущают их орбиты. Поэтому получается схема термов, сходная со схемой термов атомов щелочных металлов. Фактически мы должны электронам  $K$ -оболочки приписать главное квантовое число  $n=1$ ,  $L$ -электронам — главное квантовое число  $n=2$  и т. д.

Точное исследование показывает далее, что  $K$ -уровень представляет собой синглет,  $L$ -уровень — триплет,  $M$ -уровень вырожден пятикратно, но объяснение этого факта мы отложим до следующей главы.

Закон Мозли предоставляет в наше распоряжение простой метод проверки порядка размещения элементов в периодической системе. Если изобразить на графике зависимость квадратного корня из частоты  $K_\alpha$ -линий от атомного номера  $Z$ , то экспериментальные точки должны лечь на одну прямую (фиг. 49). Если мы неправильно поместили элемент в периодической таблице, т. е. приписали неправильный заряд ядру его атома, то соответствующая точка на графике выпадет из прямой. Таким образом можно еще раз проверить, что, например, заряд ядра (атомный номер) кобальта меньше, чем атомный номер никеля, хотя масса кобальта больше; примеры такого рода отмечены двойной стрелкой в табл. 1 (стр. 52). Другим результатом работы Мозли было окончательное выявление пробелов в периодической системе, т. е. элементов, еще не известных в то время. В частности, таким образом оказалось возможным предсказать существование гафния ( $Z=72$ ) до его фактического открытия (Костер и Хевеши, 1923 г.).



Можно упомянуть далее, что Бор в своей теории структуры периодической системы реально опирался только на те простые свойства, которые проявляются в спектрах щелочных металлов и рентгеновских спектрах.



Фиг. 49. Абсциссы точек на диаграмме равны атомным номерам  $Z$ ; а ординаты — квадратному корню из частот  $K$ -линий.

На этом мы закончим свой очерк теории Бора. Хотя эта теория принесла с собой огромный прогресс в наших знаниях об атоме, в частности, о закономерностях спектральных линий, она сталкивается с многими принципиальными трудностями. Прежде всего, фундаментальное предположение Бора о справедливости условий для частот представляет собой прямое и необъяснимое противоречие законам классической теории. С другой стороны, чисто формальные правила квантования, составляющие основу теории, воспринимаются на первый взгляд как чуждый элемент, совершенно непонятный с физической точки

зрения. Позднее мы увидим, как в волновой механике обе эти трудности устраняются самым естественным образом.

Некоторые проблемы теория Бора оставляет без объяснения. Почему должны быть исключены маятникообразные орбиты? Указанная нами выше причина — ссылка на столкновения с ядрами — едва ли убедительна; кроме того, она выходит за рамки теории Бора. Каково происхождение аномального эффекта Зеемана? Как мы увидим в дальнейшем (гл. VI, § 1), объяснение этого эффекта требует учета того обстоятельства, что электрон сам по себе имеет механический и магнитный моменты. Наконец, уже в простейших случаях более чем двух тел, например в случае гелия, вычисления сталкиваются с трудностями и дают результаты, противоречащие экспериментальным данным.

### § 3. Матричная механика

Согласно Гейзенбергу (1925 г.), главная причина несостоятельности теории Бора заключается в том, что эта теория имеет дело с величинами, полностью ускользающими от наблюдения. Так, теория говорит об орбите электрона и скорости его движения вокруг ядра, вовсе не принимая во внимание то, что мы вообще не можем определить положение электрона в атоме, не разрушив при этом весь атом. Фактически для того, чтобы с какой бы то ни было точностью определить положение электрона в атоме (диаметр которого составляет величину порядка нескольких ангстрем), мы должны наблюдать атом в свете с существенно меньшей длиной волны, т. е. облучать атом чрезвычайно жесткими рентгеновскими либо  $\gamma$ -лучами; однако в таком случае комптоновская отдача электрона будет настолько велика, что его связь с атомом немедленно разорвется, и атом ионизируется.

Таким образом, с точки зрения Гейзенберга теория Бора несостоятельна потому, что фундаментальные идеи, на которые она опирается (картина орбит, справедливость классических законов движения и т. д.), никогда и никаким образом не могут быть проверены. Следовательно, мы выходим за пределы опыта и не должны удивляться, когда теория, построенная на основе гипотез, не допускающих экспериментальной проверки, оказывается частично несостоятельной в тех своих выводах, которые можно проверить на опыте.

При построении логически непротиворечивой схемы атомной механики в теорию нельзя вводить никаких величин, кроме физически наблюдаемых — нельзя, скажем, ввести орбиту электрона, но следует отправляться лишь от наблюдаемых частот и интенсивностей линий, излучаемых атомом. Исходя из этого

принципа, Гейзенберг заложил основы теории, развитой в дальнейшем им самим, Борном и Йорданом (1925 г.) — так называемой *матричной механики*, призванной заменить атомную механику Бора и необычайно успешной во всех ее применениях. Хотя по своей форме матричная механика совершенно отлична от волновой механики, излагаемой ниже, по своему содержанию, как показал Шредингер, обе теории идентичны.

В связи с этим мы не будем рассматривать матричную механику во всех деталях и удовлетворимся просто кратким резюме. Коль скоро отправной точкой наших рассуждений служат частоты

$$\nu_{nm} = \frac{E_n}{h} - \frac{E_m}{h},$$

как наблюдаемые величины, то совершенно естественно разместить их в виде квадратной таблицы:

$$\begin{pmatrix} \nu_{11} = 0 & \nu_{12} & \nu_{13} & \dots \\ \nu_{21} & \nu_{22} = 0 & \nu_{23} & \dots \\ \nu_{31} & \nu_{32} & \nu_{33} = 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

Если отныне мы всегда будем придерживаться такой схемы размещения, так что, скажем, место в четвертой строке и втором столбце всегда будет ассоциировано с переходом из четвертого во второе квантовое состояние, то можно расставить в подобной квадратной таблице и амплитуды  $a_{nm}$  «воображаемых осцилляторов», связанных с различными излучаемыми частотами, причем  $a_{nm}^2$  будет обозначать тогда интенсивность излучения соответствующей частоты:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

Аналогично можно расположить в схеме такого рода и другие величины, связанные с переходом  $n \rightarrow m$ .

Возникает вопрос: как обращаться с такими таблицами при вычислениях? Здесь полезно следующее замечание Гейзенберга: перемножая два колебания  $a_{nh} = \exp(2\pi i \nu_{nh} t)$  и  $a_{km} = \exp(2\pi i \nu_{km} t)$ , мы благодаря комбинационному принципу Ритца получаем

$$e^{2\pi i \nu_{nh} t} e^{2\pi i \nu_{km} t} = e^{2\pi i (\nu_{nh} + \nu_{km}) t} = e^{2\pi i \nu_{nm} t},$$

т. е. колебание из той же самой таблицы, так что правило образования произведения позволяет просто перейти к другому месту квадратной таблицы в согласии с правилом обозначения мест. Далее, можно определить произведение двух таких таблиц, причем так, что произведение это снова окажется квадратной таблицей того же самого типа. Правило умножения, выведенное Гейзенбергом только из экспериментальных фактов, гласит:

$$(a_{nm})(b_{nm}) = \left( \sum_k a_{nk} b_{km} \right).$$

Борн и Йордан заметили, что это правило умножения совпадает с другим, которое уже давно известно в математике как правило образования произведения двух «матриц», вроде тех, что появляются в теории линейных преобразований и теории определителей. Следовательно, квадратные таблицы Гейзенберга можно рассматривать как бесконечные матрицы и действовать с ними по известным правилам теории матриц.

Теперь перейдем к центральному пункту матричной механики, а именно к принципу, согласно которому с каждой физической величиной связана представляющая ее матрица описанного выше типа. Мы можем построить матрицу координаты, матрицу импульса и т. д., а затем действовать с этими матрицами практически точно так, как мы привыкли действовать с координатами, импульсами и т. д. в классической механике.

Между матричной и классической механикой имеется, однако, одно существенное различие; именно, когда в качестве координат  $q_k$  и импульсов  $p_k$  оперируют матрицами, произведение этих величин уже не коммутативно: не выполняется, как это было в классической механике, соотношение

$$p_k q_k - q_k p_k = 0.$$

Но значение такого коммутатора, как показывает теория, вовсе не произвольно; выражение в левой части, образованное парой канонически сопряженных переменных ( $p_k, q_k$ ), может иметь только одну определенную величину:

$$p_k q_k - q_k p_k = \frac{\hbar}{2\pi i}.$$

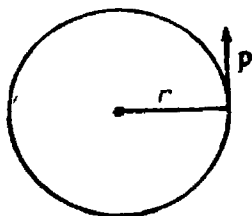
Эти *перестановочные соотношения* (Борн и Йордан, 1925 г.) играют здесь роль квантовых условий теории Бора. Рассуждения, оправдывающие введение перестановочных соотношений, и дальнейшее развитие матричной механики как формального аппарата мы для краткости опускаем. Однако в следующем параграфе мы выясним, что аналогичные перестановочные

соотношения самым естественным образом появляются в волновой механике. В приложении 15 на примере гармонического осциллятора мы разберемся, как и почему они приводят к правильным результатам.

В заключение отметим, что фундаментальная идея, лежащая в основе работы Гейзенберга, была весьма оригинальным образом разработана также Дираком (1925 г.).

#### § 4. Волновая механика

Совершенно независимо от только что описанного направления мысли, попытки решить проблему строения атома были предприняты и на основе идей, развитых в предыдущей главе.



Фиг. 50. Круговое движение с корпускулярной точки зрения.

Частица движется по определенной орбите с импульсом  $p$ .

Согласно гипотезе де-Бройля (гл. IV, § 5), каждой частице соответствует волна, причем длина этой волны связана в случае прямолинейного движения частицы с импульсом последней соотношением

$$\lambda = \frac{h}{p}.$$

Уже сама логика дела требовала попытки расширить теорию, применяя эту волновую идею к атому, т. е. к электрону, вращающемуся вокруг ядра; в таком случае атом следовало представлять себе как волновое движение вокруг выделенной точки — ядра. Задача теории состояла в том, чтобы вывести закон этого движения.

В качестве первого шага мы покажем, следуя де-Бройлю, что квантовые условия теории Бора можно сразу же интерпретировать на основе волновых представлений. С этой целью рассмотрим простой случай кругового движения электрона около фиксированной точки (фиг. 50). В теории Бора для такого вращения мы имели квантовое условие для момента:

$$p_{\phi} = r p = n \frac{h}{2\pi},$$

где  $p$  означает импульс электрона  $mv$ . Представим себе теперь вместо вращающегося электрона движущуюся по окружности

волну. Если радиус круговой орбиты очень велик, то для такой волны будет выполняться то же соотношение, что и для плоской, именно

$$p = \frac{h}{\lambda}.$$

Если подставить это значение импульса в предыдущее квантовое условие для момента, получится уравнение

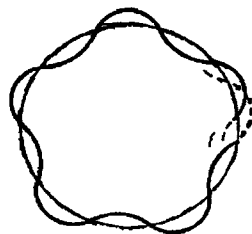
$$n\lambda = 2\pi r.$$

Здесь правая часть есть длина окружности: формула устанавливает, что по этой длине должно укладываться целое число длин волн.

Каков же тогда смысл квантового условия для момента? Если попытаться построить волну произвольной длины  $\lambda'$ , распространяющуюся вдоль круговой орбиты, размечая «след»

Фиг. 51. Круговое движение волны.

Определенная единая форма волны возможна только тогда, когда длина окружности в целое число раз больше длины волны.



волны вдоль окружности (фиг. 51), от точки  $P$  с «нулевой фазой», то после одного полного оборота волна достигнет точки  $P$ , вообще говоря, с фазой, отличной от нуля; после следующего оборота опять получится новая фаза и т. д. Мы не сможем *однозначно* поставить в соответствие определенную фазу каждой определенной точке. Совсем иначе будет обстоять дело, если длину волны выбрать так, чтобы было

$$n\lambda = 2\pi r.$$

Здесь благодаря выбору  $\lambda$  после полного оборота мы придем в точку  $P$  с той же самой фазой, с какой начали. В этом случае волновая картина, или волновое движение *однозначно*; полный оборот ничего не меняет.

Следовательно, в этом примере квантовое условие для момента идентично требованию, чтобы волновая функция соответствующего колебательного процесса была *однозначной*. Поэтому в качестве общего метода мы заменяем непостижимое до сих пор квантовое условие теории Бора обычным условием

однозначности (и конечности) волновой функции во всей области изменения независимых переменных.

Перейдем теперь к рассуждениям, которые привели к установлению дифференциального уравнения — *волнового уравнения*, выражающего закон волнового движения в атоме. Конечно, мы можем лишь предполагать по аналогии с другими колебательными процессами, что основной закон будет иметь вид дифференциального уравнения. Естественно, нельзя вывести волновое уравнение строго логически; формальные шаги, ведущие к нему, являются, в сущности, лишь остроумными догадками.

Начнем с движения *свободной частицы*; связанную с ней волну мы описываем волновой функцией

$$\psi = e^{2\pi i (\tau x - \nu t)} = e^{2\pi i / h (px - Et)}.$$

Здесь  $\nu$  и  $\tau$  обозначают частоту и волновое число, которые, согласно де-Бройлю, связаны с энергией и импульсом уравнениями

$$\nu = \frac{E}{h}, \quad \tau = \frac{1}{\lambda} = \frac{p}{h}.$$

Взяв частные производные по  $x$  и  $t$ , мы обнаруживаем, что

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p\psi, \quad -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi.$$

Теперь мы можем «прочитать» эти уравнения наоборот, считая, что дифференциальные уравнения даны, а требуется найти их решение. В случае, когда частица движется по *прямой линии* и допустимы все значения  $x$  между  $-\infty$  и  $+\infty$ , решением будет произведенная выше функция. Если же частица движется по окружности длиной  $l$ , а мы обозначим через  $x$  координату точки (например, измеряемое по дуге расстояние до этой точки от фиксированной начальной точки окружности), то для  $x$  будут допустимы значения только от 0 до  $l = 2\pi r$ ; увеличение  $x$  на  $l$  возвратит нас в ту точку, от которой мы отправлялись. Так как  $\psi$  должна быть однозначной на окружности, увеличение  $x$  на  $l = 2\pi r$  не должно менять функции. Теперь общее решение первого из двух выписанных выше уравнений есть функция  $\psi = A \exp[(2\pi i/h)px]$ . При увеличении  $x$  на  $l$  эта функция умножается на  $\exp[(2\pi i/h)pl]$ , поэтому, чтобы  $\psi$  была «собственной функцией», этот множитель должен равняться единице:

$$e^{(2\pi i/h)pl} = 1 = e^{2\pi i n},$$

или

$$\frac{pl}{h} = n, \quad p = p_n = \frac{nh}{l} = \frac{nh}{2\pi r}.$$

Это означает, что в случае кругового движения уравнение обладает допустимыми решениями не для всех значений  $p$ , а

только для дискретных «собственных значений»  $1h/l$ ,  $2h/l$ ,  $3h/l$ , ...

Наши уравнения можно интерпретировать также следующим образом. Когда волновая функция  $\psi$  известна, соответствующий импульс или его  $x$ -компоненту  $p_x$  мы получаем, беря частную производную волновой функции по  $x$ :  $(h/2\pi i)(\partial\psi/\partial x) = p_x\psi$ . Как принято говорить,  $x$ -компоненте импульса отвечает дифференциальный оператор

$$p_x = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x};$$

аналогичное верно и для  $y$ - и  $z$ -компоненты. Соответственно оператор, отвечающий энергии, есть

$$E = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}.$$

Операторы, или величины, производящие действия над какими-либо функциями (действуя на одну функцию, они порождают другую), можно представлять самыми разнообразными способами. Матрицы Гейзенберга являют собой лишь один определенный тип представления таких операторов; другим представлением является набор дифференциальных коэффициентов, соответствующих компонентам импульса и энергии. Для представления этого последнего типа перестановочные соотношения Борна — Йордана допускают простую интерпретацию; как мы только что видели,  $pq - qp$  означает здесь просто применение дифференциального оператора

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} q - q \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$$

к волновой функции  $\psi$ . Но

$$\frac{h}{2\pi i} \left( \frac{\partial q \psi}{\partial q} - q \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) = \frac{h}{2\pi i} \psi.$$

Следовательно, применение оператора  $pq - qp$  эквивалентно умножению  $\psi$  на  $h/2\pi i$ , или, в символической форме,  $pq - qp = h/2\pi i$ .

Формализм, который Шредингер (1926 г.) считал подходящим для волновой теории атома, базируется на следующем правиле. Запишем энергию  $H(p, q)$  гамильтоновой теории как оператор, заменив везде  $p$  на  $(h/2\pi i)(\partial/\partial q)$ ; оператор, соответствующий членом с  $p^2$ , получается повторением дифференцирования, а именно

$$p^2 = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} = -\frac{h^2}{4\pi^2} \frac{\partial^2}{\partial q^2}.$$



Оператором энергии  $H\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right)$  нужно действовать на волновую функцию  $\psi$ . Вместо уравнения для энергии  $H(p, q) - E = 0$  мы получаем дифференциальное уравнение

$$\left\{ H\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) + \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right\} \psi = 0.$$

Оно называется *уравнением Шредингера*.

Итак, мы имеем формализм, с которым можно приступить к решению любой механической задачи. Все, что нужно сделать, — это найти для нее однозначное и конечное решение волнового уравнения. Пусть, например, мы хотим найти *стационарные решения*, т. е. те решения, волновая функция которых состоит из амплитуды — функции, не зависящей от времени, и множителя, периодического во времени (стоячие волны). Тогда мы предполагаем, что  $\psi$  содержит время только в множителе типа  $\exp[-(2\pi i/h)Et]$ . Если подставить это в уравнение Шредингера, получится уравнение, совсем не содержащее времени, именно

$$\left\{ H\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) - E \right\} \psi = 0.$$

Теперь перед нами стоит типичная задача «на собственные значения»: нужно найти те значения параметра  $E$ , при которых это дифференциальное уравнение обладает *решениями, однозначными и конечными* во всей области изменения переменных (см. приложения 16—18). Если эта задача имеет с точностью до постоянного множителя только одно решение (собственную функцию), то собственное значение называют *простым*, или *невыврожденным*; когда существует несколько различных решений, собственное значение называют *выврожденным*.

Как пример метода построения волнового уравнения мы рассмотрим частицу, движущуюся вдоль прямой (координата  $q$ ) под действием силы такой, что потенциальная энергия частицы в ее поле равна  $V(q)$ ; тогда

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q).$$

Следуя описанным выше правилам, мы получаем уравнение Шредингера

$$\left( -\frac{1}{2m} \frac{h^2}{4\pi^2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q) + \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi = 0,$$

и соответственное не зависящее от времени уравнение стационарной задачи

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} + [E - V(q)] \psi = 0.$$

Важный пример осциллятора с  $V(q) = \frac{1}{2}fq^2$  мы вскоре рассмотрим (стр. 165).

Однако прежде чем попытаться искать точные решения волнового уравнения, объясним, почему приводит к удовлетворительным результатам метод квантования классических орбит, описанный в предыдущих параграфах. Разумеется, дело сведется к особому случаю принципа соответствия.

Если взять классическое уравнение для энергии  $H(p, q) = E$ , подставить в него наше специальное выражение для  $H$  и затем разрешить его относительно  $p$ , мы получим

$$p(q) = \sqrt{2m[E - V(q)]}.$$

Волновое уравнение можно записать в виде

$$\left(\frac{\hbar}{2\pi}\right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} + p^2(q) \psi = 0.$$

Попытаемся решить его (Джеффрис, 1924 г.; Вентцель, Крамерс, Бриллюэн, 1926 г.) подстановкой

$$\psi(q) = A e^{2\pi i/\hbar} \varphi(q),$$

где „фаза“  $\varphi(q)$  играет роль новой неизвестной функции; тогда

$$\left(\frac{\hbar}{2\pi}\right)^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q^2} = A e^{2\pi i/\hbar} \varphi \left[ \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{d^2 \varphi}{dq^2} - \left(\frac{d\varphi}{dq}\right)^2 \right].$$

Полагая в согласии с принципом соответствия величину  $\hbar$  малой и пренебрегая в правой части членом с множителем  $\hbar$ , сведем волновое уравнение к виду

$$\left(\frac{d\varphi}{dq}\right)^2 = p^2(q).$$

Это уравнение имеет решение

$$\varphi(q) = \int p(q) dq.$$

Если его подставить в экспоненту, через которую выражается  $\psi$ , то условие однозначности  $\psi$  в области изменения переменной  $q$ , очевидно, сведется к требованию, чтобы величина

$$\frac{1}{\hbar} \oint p(q) dq = n$$

была целой; в этом случае показатель в экспоненте будет увеличиваться на  $2\pi i n$  всякий раз, когда  $q$  завершает полный цикл своего изменения (гл. V, § 2). Но это как раз и есть квантовое условие Бора. Мы пришли здесь к более точной формулировке рассуждений де-Бройля (стр. 158).

Можно показать, что это приближенное решение представляет собой первый член асимптотического разложения точного решения по степеням  $\hbar$ , получающегося в результате последовательных шагов, причем не только фаза  $\varphi$ , но и амплитуда  $A$  считается функцией координаты  $q$ . Этот метод может быть обобщен и на системы со многими степенями свободы; таким путем получают в качестве первого приближения квантовые условия Зоммерфельда для кратнопериодических систем (гл. V, § 2).

Пример системы с тремя степенями свободы мы имеем в важном случае атома водорода. Здесь функция Гамильтона есть

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{e^2 Z}{r},$$

а выводимое из нее дифференциальное уравнение имеет вид

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \right)^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2 Z}{r} + \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right\} \psi = 0.$$

Если ввести обычный дифференциальный символ  $\Delta$  для оператора Лапласа  $\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$  и перейти, к не содержащему зависимости от времени уравнению, положив

$$\psi \sim e^{-(2\pi i/\hbar) Et},$$

мы получим уравнение

$$\left( \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta + E + \frac{e^2 Z}{r} \right) \psi = 0.$$

Это — волновое уравнение в трехмерном пространстве, и его решения мы исследуем позднее. Для читателя будет проще, если мы начнем с соответствующих задач в случаях одного и двух измерений; ради большей ясности мы возьмем наши примеры из классической механики (акустики).

Пример такого рода в одном измерении дает нам *колеблющаяся струна*. Ее дифференциальное уравнение выводится в теории упругости и имеет вид

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0.$$

Здесь  $c$  — постоянная, зависящая от механических условий (толщины струны, натяжения); фактически  $c$  представляет собой скорость волны, бегущей вдоль струны, так как любая функция от комбинации  $(x \pm ct)$  является решением уравнения. Сейчас мы рассмотрим стоячие волны, периодические во времени, с  $\psi \sim e^{2\pi i \nu t}$ ; тогда уравнение сводится к уравнению

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \lambda \psi = 0, \quad \lambda = \left( \frac{2\pi \nu}{c} \right)^2.$$

Здесь, как и во всех классических задачах, собственное значение параметра  $\lambda$  пропорционально квадрату частоты  $\nu$ , тогда как в задачах волновой механики на его месте фигурирует обычно энергия  $E = h\nu$ , так что там параметр пропорционален самой частоте  $\nu$ . Решения дифференциального уравнения имеют вид

$$\psi(x) = a \cdot \begin{cases} \cos \sqrt{\lambda} x, \\ \sin \sqrt{\lambda} x. \end{cases}$$

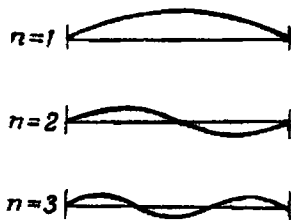
Вследствие граничных условий  $\psi(0) = 0$  и  $\psi(l) = 0$  (струна длиной  $l$  с закрепленными концами) колебание по закону косинуса исключается как не удовлетворяющее по крайней мере первому граничному условию. Но даже и синусоидальное колебание не представляет решения краевой задачи, пока  $l\sqrt{\lambda}$  не окажется целым кратным  $\pi$ , так чтобы  $\psi$  исчезала при  $x = l$ . Только для определенных значений  $\lambda$  (собственных значений) осуществляются возможные типы колебаний; такие типы определяются равенствами

$$\psi(x) = \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), \quad \lambda = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2.$$

Колебание с  $n=1$  — основное, с  $n=2$  — первая гармоника (октава) и т. д. В процессе колебаний в определенных местах

Фиг. 52. Виды колебаний струны с закрепленными концами.

Показаны основное колебание ( $n=1$ ) и первые две гармоники ( $n=1$  и  $n=2$ ).



струны находятся *узлы*, т. е. точки, покоящиеся во все время колебания (фиг. 52). Число узлов зависит от параметра  $n$  и, очевидно, равно  $n - 1$ .

В качестве более актуального примера такой системы с одной степенью свободы мы рассмотрим в рамках квантовой теории *гармонический осциллятор*, о волновом уравнении для которого мы уже говорили выше. Решению этого уравнения посвящено приложение 16. Вместо введения Планком уровней энергии  $E = nh\nu$  волновая механика, точно так же как и матричная (см. приложение 15), приводит к термам:

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu.$$

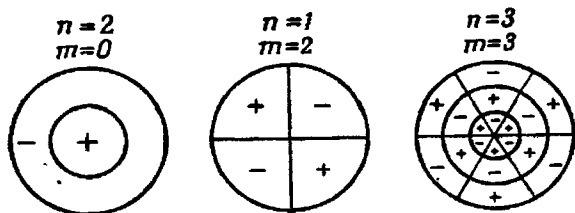
Основное состояние (т. е. в смысле величины энергии низшее состояние,  $n=0$ ) обладает, следовательно, конечной энергией  $E=hc\nu/2$  (нулевая энергия). В дальнейшем мы используем это (гл. IX, § 7; приложение 39).

Рассмотрим далее как пример двумерного механического колебания колеблющуюся *круглую мембрану*, для которой дифференциальное уравнение в случае стоячих волн приводится к виду

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \lambda\right)\psi = 0.$$

И здесь собственное значение параметра  $\lambda$  зависит от природы мембраны и пропорционально квадрату частоты. Дифференциальное уравнение легко решить в полярных координатах (приложение 17), и в этом случае возможные типы колебаний осуществляются только для некоторых определений значений  $\lambda$ . Вместо узлов здесь имеются узловые линии, причем двух типов:

- 1) линии, на которых  $r = \text{const}$ ; их нумерует радиальное порядковое число, или «квантовое число»  $n=1, 2, \dots$ ;
- 2) линии, на которых  $\varphi = \text{const}$ , соответствующие азимутальному «квантовому числу»  $m=0, 1, 2, \dots$



Фиг. 53. Некоторые формы колебаний круглой мембраны, закрепленной по краю.

Здесь (в противоположность обычным обозначениям волновой механики) число радиальных узловых линий обозначено через  $n$ , а число азимутальных — через  $m$ ;  $n$  и  $m$  представляют собой «квантовые числа» колебательного состояния.

На фиг. 53 изображено несколько примеров. Знаки «+» и «-» в различных областях указывают, что соседние области колеблются всегда в противоположных фазах.

Задача об *атоме водорода* как трехмерная квантовая задача также может быть решена в сферических координатах; это сделано в приложении 18. Необходимо добавить, что в этой задаче мы не можем говорить об обычных граничных условиях, так как область изменения независимых переменных включает все трехмерное пространство. Естественно наложить условие,

чтобы на бесконечности волновая функция убывала «быстрее», чем  $1/r$ . Это следует из статистической интерпретации квадрата амплитуды волновой функции как вероятности найти электрон в определенной точке пространства (гл. V, § 7). Указанное условие эквивалентно требованию, чтобы электрон с достоверностью находился в конечной части пространства.

Учтя это «граничное условие», мы получаем решения волнового уравнения, соответствующие связанному электрону (эллиптические орбиты атома Бора), только для определенных дискретных значений  $E$ . В качестве собственных значений мы получаем таким путем в точности термы Бальмера с правильной постоянной Ридберга,  $E = -Rh/n^2$ . Здесь  $n$  — главное квантовое число. Кроме него, появляются также азимутальное квантовое число  $l$  и магнитное квантовое число  $m$ . Число узловых поверхностей  $r = \text{const}$  равно  $n - l - 1$ ; следовательно, при данном  $n$  число  $l$  может быть любым целым от 0 до  $n - 1$ ; что же касается  $m$ , то оно может принимать все целые значения от  $-l$  до  $+l$ .

Если принять во внимание релятивистскую поправку для массы, энергия начинает зависеть и от  $l$ . Кроме того, как следует из формы этой зависимости,  $l + 1$  соответствует квантовому числу  $k$  Бора, так что теперь нашу номенклатуру термов нужно понимать следующим образом:

$$l = 0, 1, 2, \dots,$$

$$\text{Терм } s, p, d, \dots$$

В магнитном поле энергия  $E$  зависит и от  $m$ ; действительно, точно так же, как в теории Бора, в качестве добавки к энергии появляется член  $m v_L \hbar$ . В той стадии, которой мы достигли в ее изложении к настоящему моменту, волновая механика объясняет только нормальный эффект Зеемана (см. § 2 этой главы). Квантованию по правилам теории Бора теперь соответствует конечное число значений  $m$ , т. е. уровней энергии в магнитном поле; фактически появляется  $2l + 1$  уровней вместо каждого одиночного уровня, существовавшего в отсутствие магнитного поля. Волновая механика качественно и количественно верно описывает (Шредингер, 1926 г.) расщепление термов в *электрическом поле* (эффект Штарка).

Обсуждавшиеся до сих пор состояния атома водорода соответствуют, очевидно, эллиптическим орбитам старой теории Бора: в обоих случаях электрон остается на конечном расстоянии от ядра. Но в классической механике возможны и гиперболические орбиты. Что же соответствует им в квантовой механике? Очевидно, решения волнового уравнения, не исчезающие

на бесконечности. Чтобы получить их, мы должны отбросить граничное условие — обращение в нуль решения на бесконечности — и искать решения, которые на больших расстояниях от ядра ведут себя приблизительно как плоские волны. В действительности такие решения существуют, причем для всех положительных значений энергии. Их физическая интерпретация дает картину того, что происходит, когда электрон, двигаясь из бесконечности, пролетает вблизи ядра и отклоняется в его поле. На самом деле можно показать, что формула Резерфорда для рассеяния строго справедлива и в волновой механике — мы еще вернемся к этому (гл. V, § 7; приложение 20). Непрерывный спектр энергии обнаруживает себя и другими путями. Согласно принципам Бора, любой переход между двумя состояниями соответствует акту излучения или поглощения света. Если одно или оба эти состояния принадлежат к непрерывной области значений энергии, соответствующий спектр частот света будет также непрерывным. Это объясняет появление непрерывного рентгеновского спектра, порождаемого столкновениями электронов с металлической мишенью (гл. V, § 7).

Добавим несколько замечаний о *проблеме многих тел* в волновой механике. Здесь мы, конечно, имеем дело с решениями волнового уравнения в многомерном пространстве; так, вычисление спектра гелия требует учета не только шести координат, а спектра лития — девяти. Ясно, что в этих случаях нельзя ожидать точного решения, так что мы вынуждены довольствоваться приближенным решением задачи. Методы хорошо развитой *теории возмущений* позволяют нам продвинуться в этом приближении так далеко, как мы того пожелаем; однако объем вычислений беспредельно возрастает с ростом порядка приближения. Этими методами были успешно вычислены низшие термы He,  $\text{Li}^+$  и Li, причем результаты оказались в хорошем согласии с опытом (Хиллераас, 1930 г.).

Совершенно точные суждения можно извлечь из любых *свойств симметрии*, которыми должна обладать волновая функция в силу симметрии, присущей соответствующей задаче. Наиболее важное из этих свойств симметрии состоит в полной эквивалентности электронов и следующей отсюда неразличимости их; волновая функция должна быть, конечно, одинаковой в случаях, когда, скажем, первый электрон находится на  $K$ -оболочке, а второй — на  $L$ -оболочке и когда, наоборот, второй находится на  $K$ -оболочке, а первый — на  $L$ -оболочке. Это ведет к общим правилам расположения термов в атомах с несколькими валентными электронами. Однако полученные таким образом результаты еще не доступны сразу же непосредственному сопоставлению с опытом, так как в рассказанном до настоящего мо-

мента о волновой механике недостаёт существенного принципа, который был открыт Паули и который предстанет нашему вниманию только в гл. VI.

### § 5. Механический момент (момент импульса) в волновой механике

Механический момент играл в теории Бора особую роль при классификации спектральных линий и систематизации термов; было выяснено, что он соответствует квантовому числу  $k$ . Это вновь наводит на идею пространственного квантования, экспериментальное подтверждение которой в опытах Штерна и Герлаха, возможно, является наиболее впечатляющим доказательством фундаментального различия между классической и квантовой механикой. Итак, возникает вопрос: как обстоит дело с этим в волновой механике? Способна ли она естественным образом описать пространственное квантование?

В волновой механике моменту, как и импульсу, соответствует свой дифференциальный оператор, компоненты которого суть

$$m_x = yp_z - zp_y = \frac{\hbar}{2\pi i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right),$$

$$m_y = zp_x - xp_z = \frac{\hbar}{2\pi i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right),$$

$$m_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{2\pi i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

В чем значение этих операторов? Состояние электрона определяется волновой функцией  $\psi$ . Для ответа на вопрос, принадлежат ли этому состоянию определенные значения компонент момента вдоль трех координатных осей, мы должны, согласно правилам волновой механики, «применить» упомянутые операторы к волновой функции  $\psi$ , т. е. совершить над нею дифференцирования, указанные в операторах. Тогда появятся две возможности: либо эта операция воспроизводит волновую функцию с точностью до множителя, либо нет. В первом случае волновая функция называется собственной функцией уравнения для момента

$$m_x \psi = m_x \psi,$$

а состояние, представляемое собственной функцией, обладает поэтому определенным моментом вдоль оси  $x$ , величина которого равна «собственному значению»  $m_x$  (причем  $m_x$  здесь — обычное число, а не оператор, как  $m_x$ ). Если, однако, применив оператор  $m_x$  к волновой функции, мы получим другую функцию.



вовсе не совпадающую с точностью до постоянного множителя с волновой функцией, т. е., как говорят в таких случаях, если  $\psi$  не является собственной функцией уравнения для момента, то это будет означать, что рассматриваемое состояние электронов не связано с фиксированным значением момента вдоль оси  $x$ . В случае собственных функций, приведенных в приложении 18, благодаря самому выбору полярной оси (оси  $z$ ) мы выделили ее с самого начала. Согласно теории Бора, составляющая момента вдоль этой оси должна быть квантованной. Так вот, волновая механика действительно показывает, что собственные значения  $z$ -компоненты момента представляют собой целые кратные величины  $h/2\pi$ . Именно, введя сферические координаты, мы имеем

$$m_z = \frac{h}{2\pi i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

а применив этот оператор к собственной функции состояния, характеризующегося квантовыми числами  $n$ ,  $l$ ,  $m$ , мы получаем после учета формы зависимости волновой функции от  $\varphi$  (зависимости вида  $e^{im\varphi}$ ):

$$m_z \psi_{nlm} = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{nlm} = m \frac{h}{2\pi} \psi_{nlm},$$

так что собственные значения компоненты  $m_z$  момента действительно равны  $mh/2\pi$ . Что же касается компонент момента вдоль двух других осей координат, то, как легко обнаружить, в данном случае мы не можем найти собственных значений и поэтому не получаем определенных величин  $m_x$  и  $m_y$ . С другой стороны, величина полного момента атома, который может свободно вращаться (в отсутствие внешнего поля), — эта величина во всех случаях квантуется. Для краткости мы сошлемся на приложение 19, содержащее необходимые вычисления, а здесь дадим только результат: квадрат величины полного момента

$$m^2 = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2$$

равен, согласно волновой механике,  $l(l+1)(h/2\pi)^2$ , а не  $l^2(h/2\pi)^2$ , как в теории Бора. Эта отличительная черта характерна для всей волновой механики атома, и в следующей главе мы будем часто встречаться с ней. Более того, как мы узнаем там, картина расщепления термов при аномальном эффекте Зеемана дает прямое подтверждение тому факту, что квадрат момента пропорционален  $l(l+1)$ , а не  $l^2$ . Однако если не говорить об этом различии, то в волновой механике мы сможем представлять моменты с помощью векторной диаграммы, известной из теории Бора; таким образом, и здесь мы изображаем

полный момент вектором  $l$ , о котором мы должны раз навсегда запомнить, что его абсолютная величина равна  $\sqrt{l(l+1)}$ . В случае, когда  $z$ -направление выделено, скажем, присутствием (очень и очень) слабого магнитного поля  $H$ , действующего вдоль этого направления, составляющая вектора момента в выделенном направлении может принимать только целые значения  $m$  (в единицах  $\hbar/2\pi$ ), и это положение вещей сохранится даже в предельном случае  $H \rightarrow 0$ . В целях большей ясности здесь, и в особенности в гл. VI, мы сохраним векторное представление момента, прецессирующего вокруг выбранной оси и имеющего в направлении этой оси компоненту, величина которой может принимать только целые значения.

Однако мы настойчиво подчеркиваем, что просто так, без дальнейшего обоснования, эту идею нельзя органически включить в общую систему понятий волновой механики. Такая задача и, в частности, доказательство того, что в волновой механике два момента можно векторно складывать точно так же, как и в полуклассической теории Бора, требует использования сложных математических методов, в особенности так называемой теории групп. По этой причине мы не станем сейчас углубляться далее в эти вопросы. Однако можно упомянуть, что дальнейшее развитие теории привело к тому, что электрон стали рассматривать не как частицу, полностью описываемую тремя координатами в пространстве, но как подобное волчку образование, само по себе обладающее моментом. С такой «спиновой» теорией электрона мы будем иметь дело позднее (гл. VI, § 1).

## § 6. Четность

Мы уже видели (§ 4 этой главы), что при работе с волновым уравнением Шредингера интерес представляют однозначные и конечные его решения — так называемые собственные функции уравнения. Оказывается, что, вообще говоря, эти решения обладают определенной симметрией относительно отражения осей координат около начала, коль скоро гамильтониан симметричен относительно этого преобразования. Те функции, которые при этой операции остаются неизменными, называют *четными*, а те, которые меняют знак, — *нечетными*. То, что весь результат такого преобразования сводится лишь к возможному изменению знака, удается усмотреть из такого простого примера. Предположим, что гамильтониан системы  $H\left[\left(\frac{\hbar}{2\pi i}\right)\left(\frac{\partial}{\partial q}\right), q\right]$  симметричен

$$H\left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) = H\left(-\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, -q\right).$$

Рассмотрим типичную собственную функцию  $\psi(q)$ , отвечающую собственному значению  $E$ , так что

$$\left\{ H\left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) - E \right\} \psi(q) = 0.$$

Заменяя  $q$  на  $-q$  и используя симметрию  $H$ , мы имеем

$$\left\{ H\left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) - E \right\} \psi(-q) = 0.$$

Таким образом, и  $\psi(q)$ , и  $\psi(-q)$  удовлетворяют одному и тому же дифференциальному уравнению: значит (см. § 4 этой главы), коль скоро речь идет о невырожденном собственном значении  $E$ , отсюда следует, что два решения могут отличаться только постоянным множителем. Итак,

$$\psi(q) = A\psi(-q).$$

Заменяя  $q$  на  $-q$ , получим

$$\psi(-q) = A\psi(q) = A^2\psi(-q).$$

Следовательно,  $A^2=1$  и  $A=\pm 1$ ; это показывает, что  $\psi(q)$  и  $\psi(-q)$  совпадают с точностью до возможной разницы в знаке. Например, как нетрудно видеть, сферические гармоники  $Y_l^{(m)}$  (приложение 18), являющиеся собственными функциями момента, либо четны, либо нечетны соответственно тому, четно или нечетно  $l$ .

Далее, можно доказать, что до тех пор, пока гамильтониан симметричен относительно пространственных отражений, четность собственных функций не меняется со временем. Как говорят, четность *сохраняется*. Позднее мы узнаем, что, хотя обычно четность и сохраняется, существуют, однако, некоторые процессы слабых взаимодействий, которые описываются несимметричными гамильтонианами, так что четность не сохраняется.

## § 7. Статистическая интерпретация волновой механики

В заключение нам предстоит еще рассмотреть *смысл волновой функции* самой по себе; до сих пор она фигурировала в качестве, так сказать, побочного продукта при нахождении собственных значений. Но для колебательного процесса знание амплитуды по крайней мере так же важно, как и знание собственной частоты. Следует ожидать, что и в волновой механике должна приобрести большое физическое значение волновая функция  $\psi$  или, вернее, квадрат ее модуля, так как само по себе мгновенное значение осциллирующей функции, разумеется, не

может играть роли ввиду высокой частоты осцилляций. Квадрат модуля берется по той причине, что сама волновая функция (из-за мнимого коэффициента перед производной по времени в дифференциальном уравнении) комплексна, в то время как величины, допускающие физическую интерпретацию, конечно, должны быть вещественными.

Мы уже упоминали об интерпретации волновой функции, данной Борном (гл. IV, § 7). Пусть собственная функция  $\psi_E$  соответствует некоторому состоянию; тогда

$$|\psi_E|^2 dv$$

есть вероятность, что электрон (рассматриваемый как частица) находится в элементе объема  $dv$ .

Эта интерпретация станет совершенно очевидной, если рассмотреть не собственные квантовые состояния (с дискретными отрицательными значениями энергии), а состояния с положительной энергией, соответствующие гиперболическим орбитам теории Бора. В этом случае мы должны решить волновое уравнение

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta + E - V(r) \right\} \psi = 0,$$

где вместо кулоновского потенциала

$$-\frac{e^2 Z}{r}$$

фигурирует некоторый более общий потенциал  $V(r)$ , взятый так, чтобы учесть возможную экранировку поля ядра со стороны прочно связанных электронов. Для частиц, вторгающихся в атом с очень высокими скоростями и, следовательно, с очень большой энергией  $E$ ,  $V(r)$  принимается во внимание только как малое «возмущение»; если им пренебречь, мы получим в качестве решения уравнения

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta + E \right\} \psi = 0$$

плоскую волну  $\psi = e^{(2\pi i/\hbar) p z}$ , где

$$E = \frac{p^2}{2m},$$

а направление нормали к волне без утраты общности выбрано параллельным оси  $z$ . В первом приближении возмущение можно учесть, подставив в качестве  $\psi$  плоскую волну в член  $V(r)\psi$  первоначального уравнения; тогда мы должны найти решение уравнения (Борн, 1926 г.)

$$\left( \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta + E \right) \psi = V(r) e^{(2\pi i/\hbar) p z}.$$

соответствующее волне, расходящейся от ядра. Совершенно ясно, особенно в свете аналогии с рассеянием световых волн, что интенсивность вторичной волны дает число электронов, отклоненных в определенном направлении и принадлежавших к данному налетающему пучку; фактически это и подразумевает предложенную выше статистическую интерпретацию. Более строгое исследование приведено в приложении 20; там показано, как надо определять интенсивность, т. е. число частиц в потоке, падающем на квадратный сантиметр за секунду. В частности, если потенциал  $V(r)$  выбран так, что соответствует (экранированному) кулоновскому полю, то в результате получается (Вентцель, 1926 г.) в точности формула рассеяния Резерфорда (гл. III, § 3). Фактически вывод проводился только для быстрых частиц, но можно показать (Гордон, Мотт, 1928 г.), что результат справедлив совершенно строго. Точное решение отличается от приближенного только членами, не влияющими на интенсивность потока. Этот весьма замечательный факт находится в аналогии с тем, что в случае кулоновского поля волновая механика дает значения дискретных термов, совпадающие с вычисленными на основе квантования классических орбит.

Если перенести описанную статистическую интерпретацию на случай дискретных состояний, когда  $E_n$  — энергия, а  $\psi_n$  — собственная функция такого дискретного состояния, то  $|\psi_n|^2 dv$  есть вероятность того, что электрон будет найден именно в элементе объема  $dv$ ; это справедливо несмотря на тот факт, что при проведении эксперимента полностью разрушалась бы связь электрона с атомом. Согласно нашей интерпретации, вероятность нахождения электрона вообще где-либо в атоме должна равняться 1; другими словами, множитель, который после решения (однородного) волнового уравнения оставался бы совершенно неопределенным, следует выбирать так, чтобы удовлетворялось уравнение

$$\int |\psi_n|^2 dv = 1.$$

Этот «нормировочный интеграл», имеющий смысл лишь для дискретных значений энергии, играет существенную роль, так как он не меняется со временем даже тогда, когда мы, ограничиваясь лишь стационарными состояниями, подставляем в качестве  $\psi$  вообще любое решение волнового уравнения, явно содержащее время.

Часто мы говорим о *распределении плотности электронов* в атоме или об *электронном облаке* вокруг ядра. Мы подразуме-

меваем под этим распределение заряда, которое получается умножением функции вероятности  $|\psi_n|^2$  определенного состояния на заряд электрона  $e$ . С точки зрения статистической интерпретации смысл этого распределения ясен; на фото 16 показано, как можно изобразить это распределение. Изображения представляют собой проекции (тени) электронных облаков в различных состояниях; нетрудно непосредственно выявить положения узловых поверхностей.

С другой стороны, статистическая интерпретация волновых функций указывает путь расчета излучения атома на основе принципов волновой механики. В классической теории излучение определяется электрическим дипольным моментом  $p$  атома, вернее, скоростью изменения  $p$  во времени. По принципу соответствия эта связь должна сохраниться и в волновой механике. В волновой механике дипольный момент  $p$  легко вычисляется; если придерживаться аналогии с классической атомной механикой, то он равен

$$p = e \int r |\psi_n|^2 dv = e \int r \psi_n^* \psi_n dv,$$

где  $r$  означает радиус-вектор, проведенный от ядра к точке интегрирования. (Как обычно, звездочкой помечена комплексно сопряженная величина.) Очевидно, интеграл представляет положение «электрического центра тяжести электронного облака». Легко проверить, что для всех стационарных состояний атома этот интеграл обращается в нуль, так что производная дипольного момента, а вместе с ней и излучение равны нулю; таким образом, в стационарных состояниях излучение отсутствует. Это объясняет непонятный с точки зрения теории Бора факт, что вращающийся вокруг ядра электрон может двигаться по своей орбите, не излучая, хотя по классическим законам он должен испускать свет той же частоты, что и частота его обращения. В волновой механике отсутствие излучения вызвано тем, что компоненты излучения, испускаемые по классической теории отдельными движущимися элементами электронного облака, гасят друг друга в результате интерференции.

Но теперь по аналогии с функцией распределения вероятности  $\psi_n^* \psi_n$ , определенной выше, можно образовать, для начала чисто формально, «плотность перехода»  $\psi_m^* \psi_n$ , соответствующую переходу из состояния  $n$  в состояние  $m$ . Физически она соответствует хорошо известным «явлениям биения», возникающим при наложении двух колебаний с близкими частотами; частота биений определяется временным множителем плотности перехода

$$e^{-2\pi i t/h} (E_n - E_m) t$$

и выражается через разность энергий двух состояний как

$$\nu_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h}.$$

Аналогично этому образуем и дипольный момент, соответствующий переходу из состояния  $n$  в состояние  $m$ :

$$p_{nm} = e \int r \psi_m^* \psi_n d\tau = e r_{nm} e^{-2\pi i \nu_{nm} t}.$$

Он осциллирует с найденной выше частотой биений. Величина  $r_{nm}$  называется *матричным элементом вектора координаты  $r$* ; как показал Шредингер, этот матричный элемент идентичен элементу, стоящему в  $n$ -й строке и  $m$ -м столбце гейзенберговской матрицы координаты (приложение 15; см. также приложение 25).

Теперь мы можем применить принцип соответствия, используя классическое выражение для энергии, излучаемой осциллятором с моментом  $p = eS$ , именно (приложение 8)

$$I = \frac{2}{3c^3} |\ddot{p}|^2.$$

Но нужно учесть, что каждое квантовое состояние  $n$  имеет два соседних состояния, одно выше, другое ниже, которые (для больших квантовых чисел) по энергии отделены от рассматриваемого состояния одинаковой величиной  $h\nu_{nm}$ . Следовательно, если мы заменим  $p$  матричным элементом  $p_{nm}$ , мы должны в то же время домножить выражение на 2, так что для излучения, испускаемого в единицу времени, получится выражение (см. также приложение 28)

$$I = \frac{4}{3c^3} |\ddot{p}_{nm}|^2 = \frac{4e^2}{3c^3} (2\pi\nu_{nm})^2 |r_{nm}|^2.$$

Итак, мы рассчитали излучение, опираясь только на принципы соответствия в связи с правилами классической электродинамики. Отсюда автоматически следует, что в спектрах могут появляться только те линии, частота которых совпадает с «частотой биений» между двумя состояниями атома. Это как раз те линии, для объяснения которых Бор вынужден был ввести как основной постулат своей теории квантовое условие излучения

$$h\nu_{nm} = E_n - E_m,$$

совершенно непостижимое с классической точки зрения. Однако не следует понимать дело так, что если происходит излучение, то оба состояния  $n$  и  $m$  одновременно возбуждены; скорее речь идет о их виртуальном существовании. Фактически для того, чтобы произошло самопроизвольное излучение спектральной

линии, тем или иным образом должно быть возбуждено верхнее состояние; тогда излучение является процессом, сопровождающим перескок в нижнее квантовое состояние (колебанием соответствующего виртуального резонатора).

Интенсивность спектральной линии представляет собой произведение двух множителей: числа возбужденных атомов и интенсивности излучения  $I$  отдельного атома, которую мы только что вычислили. Таким образом, волновая механика сохраняет во всей полноте те идеи теории Бора об условиях возбуждения линий, которые блестяще подтверждены экспериментом. Она добавляет более точный расчет интенсивности  $I$  в отдельном элементарном акте излучения, вычисляя интегралы, входящие в матричные элементы, в то время как теория Бора, используя принцип соответствия, может сделать в этом пункте лишь немногочисленные приближенные утверждения.

Как показано в приложении 21, в случае атома водорода вычисление матричных элементов приводит к правилам отбора

$$\Delta l = \pm 1 \quad \text{и} \quad \Delta m = 0, \pm 1,$$

т. е. все матричные элементы, которые не соответствуют какому-либо из перечисленных переходов, обращаются в нуль, а вместе с ними исчезает и излучение соответствующих частот. Применение этого подхода к водородоподобным атомам (таким, как атомы галогенов) дает теоретическое обоснование тем фактам, что, например, происходят переходы только между  $s$ - и  $p$ -термами или между  $p$ - и  $d$ -термами, но не между  $s$ - и  $d$ -термами или между  $p$ - и  $f$ -термами.

Кроме дискретных состояний, существуют еще состояния, принадлежащие к непрерывной области (положительных) энергий; они соответствуют гиперболическим орбитам теории Бора (§ 4 этой главы). Перескоки с одной гиперболы на другую или в стационарное состояние приводят к излучению рентгеновских лучей с непрерывным спектром, испускаемых, когда ядро расщепляет электрон или захватывает его на стационарную орбиту. Крамерс (1923 г.) вычислил интенсивность в таком спектре с позиций теории Бора, очень остроумно применив принцип соответствия. Теперь его результаты можно подтвердить и проверить, вычислив матричные элементы между двумя состояниями, одно из которых или оба принадлежат непрерывному спектру энергий (Оппенгеймер, 1925 г.).

Только что описанный метод расчета испускаемого (или поглощаемого) атомом излучения может быть поставлен на строгую основу. В сущности, он представляет собой частный случай весьма общей теории переходов между стационарными



состояниями данной системы, индуцированных внешними силами, или, вернее, связью с другой системой, имеющей очень плотное распределение стационарных состояний. Для вероятности перехода в единицу времени между состояниями  $n$  и  $m$  данной системы, когда переход происходит под влиянием другой системы с плотностью состояний  $\rho(\varepsilon)$  (функцией энергии  $\varepsilon$ ), мы получаем выражение

$$P_{mn} = \frac{4\pi^2}{h} |H'_{mn}|^2 \rho(\varepsilon),$$

где  $H'_{mn}$  — матричный элемент энергии взаимодействия, соответствующий двум состояниям (приложение 27). Дирак показал, как эту формулу можно применить к случаю испускания, поглощения и рассеяния излучения атомом (он разложил электромагнитное поле на большое число осцилляторов различных энергий). Результат подтверждает приведенную выше формулу для излучаемой энергии. Формула переходов нашла много других применений; позднее (гл. VII, § 7) мы применим ее к  $\beta$ -распаду атомных ядер.

В этих основанных на волновой механике расчетах матричные элементы появляются самым естественным образом. В действительности общий математический формализм квантовой механики (приложение 25) показывает, что кратко обрисованная выше «матричная механика» и «волновая механика» — совершенно эквивалентны, в двух формах выражая одну и ту же сущность. Первая подчеркивает сходство законов новой механики и классической механики частиц, в то время как вторая оперирует волновыми представлениями. Совместимы они одна с другой только в связи со статистической интерпретацией, философское значение которой уже обсуждалось в гл. IV, § 7. Последнее заключается в признании того факта, что дуализм волновой и корпускулярной картины приводит к взаимно исключающим и дополнительным описаниям экспериментальных ситуаций, причем связь между этими описаниями количественно задана принципом неопределенности. Здесь мы должны упомянуть еще один важный момент. Соотношения неопределенностей, полученные нами путем простого взаимного противопоставления описаний процесса на языке волн и языке корпускул, могут быть и строго выведены из формализма квантовой механики, в сущности, как строгие неравенства. Например, между координатой  $q$  и импульсом  $p$  мы имеем соотношение

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{h}{4\pi},$$

если  $\Delta p$  и  $\Delta q$  определены как корни из средних квадратичных флуктуаций соответствующих величин (приложение 26).

# VI

## СПИН ЭЛЕКТРОНА И ПРИНЦИП ПАУЛИ

### § 1. Дублеты щелочных металлов и спин электрона

Огромные успехи теории Бора, и особенно волновой механики, показывают, что в деле интерпретации атомных процессов мы находимся на правильном пути. Однако, как мы неоднократно подчеркивали в предыдущей главе, теория остается еще не завершенной. В частности, мы еще не дали объяснения аномальному эффекту Зеемана, структуре оболочек в атоме и т. д. В том виде, как мы ее обрисовали к настоящему моменту, волновая механика атома еще нуждается в глубоком обобщении. Оно осуществляется путем привлечения новых идей и гипотез, которые и составят тему настоящей главы.

Отправным моментом нам послужит то наблюдение, что линии главных серий щелочных металлов являются дублетными. Хорошо известен пример  $D$ -линии натрия, дублетную природу которой обнаруживают даже простейшие спектроскопические приборы. Расщепление линии довольно значительно — оно составляет 6 Å; две компоненты ее обозначаются как  $D_1$  и  $D_2$ , и длины волн их равны  $\lambda = 5896$  Å и  $\lambda = 5890$  Å соответственно. Анализ термов в спектрах щелочных металлов, к которым принадлежит и спектр натрия, совершенно определенно показывает, что в этих спектрах

$s$ -термы ( $l = 0$ ) синглетны,

$p$ -,  $d$ -, ... -термы ( $l = 1, 2, \dots$ ) дублетны.

Этот экспериментальный факт невозможно объяснить ни с точки зрения теории Бора, ни с точки зрения изложенной до сих пор волновой механики. Выше (гл. V, § 4) мы рассмотрели самое общее движение электрона в атоме, исходя из его трех степеней свободы, и пришли к заключению, что движение полностью определяется и описывается тремя квантовыми числами  $n$ ,  $l$ ,  $m$ . Поэтому любое дальнейшее расщепление термов, помимо обусловленного этими квантовыми числами, необъяснимо до тех пор, пока мы придерживаемся представления, что движение электрона не более чем тройко периодически.

Под давлением экспериментальных фактов Уленбек и Гаудсмит (1925 г.) выдвинули следующую смелую гипотезу. Если бы можно было рассматривать электрон как тело конечной протяженности, то, подобно всякому протяженному телу, он обладал бы, помимо трех поступательных, тремя вращательными степенями свободы. Соответственно он имел бы механический момент  $\mathbf{h}$ , кроме того, как всякое вращающееся заряженное тело, магнитный момент. Но идея конечной протяженности электрона была к тому времени сильно дискредитирована, как мы уже знаем из предыдущего изложения (гл. III, § 2). Несмотря на это, авторы гипотезы предположили, что экспериментальные факты можно понять, приписав электрону механический момент и магнитный момент столь же формальным образом, как приписываются ему масса  $m$  и заряд  $e$ . Что же касается величин магнитного и механического моментов, то в первую очередь решать должен, конечно, эксперимент; впоследствии можно попытаться вывести эти величины теоретически.

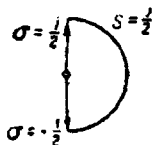
То свойство электрона, вследствие которого он обладает механическим и магнитным моментами, называется его *спином*.

Величина *механического момента* следует непосредственно из фактов, известных о спектрах щелочных металлов. Подобно всякому моменту, момент электрона должен, конечно, быть квантованным, причем то же самое справедливо для его компоненты в выделенном направлении (внешнее магнитное поле). Поэтому, если величина механического спинового момента равна  $s$  (в единицах  $\hbar/2\pi$ ), то по правилам пространственного квантования для него должны быть возможны  $2s+1$  ориентаций (или наклонов) относительно выделенного направления, в которых значения выбранной компоненты, обозначаемые через  $\sigma$ , отличаются друг от друга на единицу. Чтобы понять это, вспомним аналогичные соотношения в атоме Бора, где плоскость орбиты, отвечающей моменту  $l$ , имеет в точности  $2l+1$  возможных ориентаций относительно выделенного направления, причем эти ориентации характеризуются компонентами  $m$  момента в выбранном направлении (см. фиг. 45, стр. 148). Такая экстраполяция представлений об орбитальном моменте на спиновый момент не только оправдывается тем, что выведенные из нее следствия полностью согласуются с опытом, но и может быть обоснована теоретически. Тут мы снова можем сослаться на то, что говорилось в § 5 гл. V о применимости классической векторной модели к описанию состояний атома в волновой механике. В этой главе мы будем интересоваться только принципиальным положением вещей, и поэтому пользоваться наглядной векторной моделью, отложив обсуждение спина электрона с точки зрения волновой механики до конца главы (§ 8).

Как только что было выяснено, спин  $s$  электрона должен иметь  $2s+1$  возможных ориентаций относительно выбранного направления. Но опыт показывает, что, за исключением  $s$ -термов, все термы натрия дублетны. Это понуждает заключить, что спин имеет только две возможные ориентации (фиг. 54),

Фиг. 54. Ориентация спина по отношению к выделенному направлению.

Возможны две ориентации — параллельная и антипараллельная этому направлению.



если только предположить, что спин определяет расщепление термов, вообще верно. Следовательно, должно быть  $2s+1=2$ , или

$$s = \frac{1}{2}$$

(в единицах  $\hbar/2\pi$ ). Две возможные ориентации характеризуются компонентами

$$\sigma_1 = +\frac{1}{2}, \quad \sigma_2 = -\frac{1}{2}.$$

На первый взгляд, появление полуцелых «квантовых чисел» противоречит нашим представлениям о квантовании момента. Однако необходимо отметить, что представление о вращающемся протяженном электроны имеет лишь эвристическое значение, и мы должны быть готовы к трудностям на пути дальнейшего развития этого представления. (Например, точка на поверхности электрона должна двигаться со сверхсветовой скоростью, чтобы вычисленные по классической теории значения механического и магнитного момента согласовались с экспериментально найденными значениями.) Но использование полуцелых компонент для спина последовательно ведет к результатам, находящимся в полном согласии с экспериментальными данными. С другой стороны, волновая механика обладающего спином электрона в форме, которую ей придал Дирак, приводит к полуцелым значениям спина автоматически вследствие только условий линейности и релятивистской инвариантности без каких-либо дополнительных предположений.

Вращающийся вокруг ядра электрон обладает орбитальным моментом  $l$ ; кроме того, он имеет спиновый момент  $s$ . Возникает вопрос: как должны складываться эти два момента? Теория Бора ответила бы, что это должно происходить по правилам сложения векторов. То же самое правило сложения дает волновая механика, хотя доказательство этого (Вигнер,

Нейман, 1927 г.) требует современных математических методов (теории групп). Таким образом,  $l$  и  $s$  складываются векторно, образуя результирующий (или полный) момент  $j$  (в единицах  $\hbar/2\pi$ ), так что

$$j = l + s.$$

Следуя Зоммерфельду,  $j$  иногда называют «внутренним квантовым числом»; оно представляет полный механический момент атома. Допустимые значения  $j$  должны отличаться на целые числа. Так как  $s = 1/2$ , то единственными возможностями будут

$$j_1 = l + \frac{1}{2}, \quad j_2 = l - \frac{1}{2};$$

следовательно, в этом случае значение  $j$  — полуцелое. Каждому значению  $l$  соответствуют два возможных значения полного механического момента, так что соответствующие термы оказываются дублетами. Одни лишь  $s$ -термы ( $l=0$ ) составляют исключение; они всегда синглетны, поскольку в этом случае допустимо только значение  $j = s = 1/2$ , ибо полный момент  $j$  всегда должен быть положительным. Двойная возможность ориентации спина электрона относительно его орбиты эквивалентна расщеплению уровней энергии вследствие магнитного взаимодействия спина и орбиты. Величина расщепления прямо равна энергии, необходимой для разворота спина в магнитном поле орбиты из одной ориентации относительно  $l$  в другую.

Возьмем в качестве примера случай  $D$ -линий натрия, с которого мы начали. Анализ термов показывает, что верхнее состояние представляет собой  $p$ -терм, а нижнее —  $s$ -терм. Первый из них — дублет, соответственно двум возможным значениям полного момента:  $j = 1/2$  и  $j = 3/2$ ; нижний, как и полагается  $s$ -терму, является синглетом ( $j = 1/2$ ). Линия  $D_1$  соответствует переходу с  $p$ -терма (внутреннее квантовое число  $j = 1/2$ ), линия  $D_2$  — переходу с  $s$ -терма с  $j = 1/2$ .

Правило векторного сложения можно применять и к случаю нескольких электронов; в этом случае орбитальные моменты  $l_1, l_2, \dots$  отдельных электронов и их спины  $s_1, s_2, \dots$  складываются, образуя полный момент  $j$ . Здесь  $j$  будет целым или полуцелым, судя по тому, четно или нечетно число электронов. Аналогично и проекция  $m$  — полного момента в выбранном направлении может быть целой или полуцелой.

В заключение упомянем еще тот факт, что по самому смыслу  $j$  как полного момента система как целое вращается с постоянной угловой скоростью вокруг направления  $j$ . Как мы подробно объяснили в предыдущей главе (§ 2), это приводит к правилам отбора  $\Delta j = \pm 1$  для испускаемого излучения. Од-

нако теория указывает в полном согласии с опытом, что имеются еще и переходы с  $\Delta j = 0$ . Они соответствуют такому изменению состояния, при котором полный момент не меняется. Что такие переходы разрешены, тогда как переходы с  $\Delta l = 0$  (или с  $\Delta k = 0$ , см. гл. V, § 2) запрещены, можно объяснить, опираясь на принцип соответствия. Однако мы не будем подробнее обсуждать этот вопрос.

## § 2. Аномальный эффект Зеемана

Здесь мы покажем, как собственный магнитный момент электрона, тесно связанный с его механическим моментом, позволяет объяснить *аномальный эффект Зеемана*, заключающийся в том, что в (слабом) магнитном поле каждая спектральная линия расщепляется на значительное число линий (фото 17), в то время как классическая теория, да и квантовая теория, пока она не учитывает спина, дают только *нормальный эффект Зеемана*, т. е. расщепление каждой спектральной линии на лоренцев триплет.

Напомним вкратце объяснение нормального зееман-эффекта. Обращение электрона вокруг ядра в атоме создает *механический момент*  $p_l$  орбитального движения, квантуемый по известному правилу

$$p_l = l \frac{h}{2\pi}.$$

С другой стороны, обращающийся вокруг ядра электрон действует как круговой ток с силой тока  $I = e(\omega/2\pi)$ , где  $\omega$  — частота обращения электрона, порождая тем самым магнитное поле. Но магнитное поле кругового тока  $I$  эквивалентно, как известно, полю магнитного диполя с моментом  $M = AI/c$ , где  $A$  — площадь, охватываемая током, и  $c$  — скорость света. Следовательно, магнитные свойства обращающегося по орбите электрона будут такими же, что и у магнитного диполя с моментом  $\pi r^2 (e/c) \omega/2\pi$ ; поскольку, с другой стороны, орбитальный момент равен  $p_l = \mu r^2 \omega = l(h/2\pi)$ , то *магнитный момент*  $M_l$  при орбитальном движении оказывается равным

$$M_l = \frac{eh}{4\pi mc} l = \frac{e}{2mc} p_l.$$

Поэтому величина  $eh/(4\pi mc)$  представляет собой наименьший магнитный момент, связанный с орбитальным движением в атоме; она названа *магнетоном Бора*.

В однородном магнитном поле, как уже было показано (гл. V, § 2), атом будет прецессировать вокруг направления

магнитного поля (фиг. 55). Поэтому компонента момента  $l$  вдоль этого направления, равная  $m$ , должна быть целым числом (пространственное квантование). Дополнительная энергия, которую приобретает атом, оказавшийся в магнитном поле, составляет

$$E_{\text{магн}} = -M_l H \cos \theta,$$

где  $\theta$  — угол между направлением магнитного поля и магнитным моментом, т. е. направлением  $l$ . Но  $\cos \theta$ , очевидно, равен  $m/l$ , поэтому

$$E_{\text{магн}} = -\frac{eh}{4\pi mc} Hm.$$

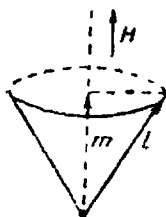
Вследствие этого термы в магнитном поле расщепляются, причем расстояние между уровнями становится равным

$$h\nu_{\text{магн}} = \frac{eh}{4\pi mc} H = h\nu_L,$$

где

$$\nu_L = \frac{e}{4\pi mc} H = 1,4 \cdot 10^6 H \text{ сек}^{-1},$$

а это и есть уже введенная нами (гл. V, § 2) ларморовская частота, т. е. величина, на которую по классической теории изменяется в магнитном поле частота колеблющейся электрической системы.



Фиг. 55. Прецессия орбитального момента вокруг направления магнитного поля (без учета спина при этом получался бы только нормальный эффект Зеемана).

Несмотря на то, что каждый терм расщепляется на  $2l+1$  равноотстоящих терма соответственно  $2l+1$  возможным ориентациям, каждая линия может расщепиться только на три компоненты. Дело в том, что прецессия является чисто периодическим движением, и поэтому начинают действовать правила отбора  $\Delta m = 0, \pm 1$ . Следовательно, мы получаем только *нормальный эффект Зеемана* (см. фиг. 46, стр. 149).

Даже учитывая спин электрона, мы не смогли бы ничего изменить в этих соотношениях, приписав электрону магнитный момент, связанный с его механическим спиновым моментом  $p_s = s(h/2\pi)$  тем же соотношением, какое связывает орбиталь-

ные магнитный и механический моменты, т. е. приняв

$$\frac{M_s}{p_s} = \frac{M_l}{p_l} = \frac{e}{2\mu c}.$$

В самом деле, полный механический момент при этом равнялся бы  $j$ , а полный магнитный момент  $M_j = (eh/4\pi\mu c)j$ . Тогда  $j$  и  $M_j$  были бы одинаково направлены и, помещенные в магнитное поле, прецессировали бы вместе вокруг направления поля в соответствии с правилами пространственного квантования. Единственное отличие, возникающее при учете спина, свелось бы к тому, что число возможных ориентаций составляло бы не  $2l+1$ , а  $2j+1$ , и поэтому каждый невозмущенный терм расщеплялся бы в магнитном поле на  $2j+1$  уровней. Но это расщепление происходило бы таким образом, что его величина осталась бы прежней и в спектрах вообще не появилось бы никакого отличия.

Однако оказывается возможным полностью объяснить аномальный эффект Зеемана, предположив, что магнитный спиновый момент получается из механического умножением не на  $e/2\mu c$ , как для орбитальных моментов, а на  $e/\mu c$ , так что

$$M_s = 2 \frac{eh}{4\pi\mu c} s.$$

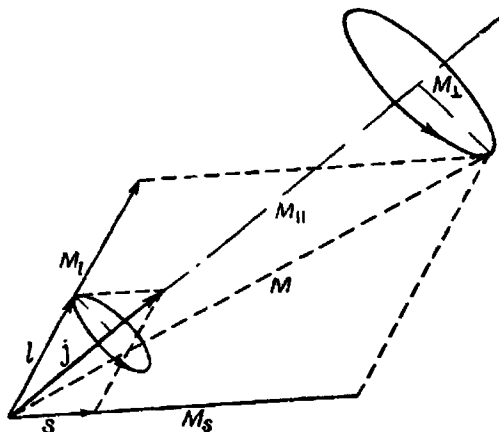
Поскольку механический спиновый момент всегда равен  $s = 1/2$ , магнитный момент электрона оказывается в точности равным магнетону Бора  $eh/4\pi\mu c$ . Это отличие в поведении спиновых моментов по сравнению с орбитальными может быть обосновано теоретически, как показал сначала Томас (1926 г.), а затем, более просто, Крамерс (1935 г.). Оно с необходимостью следует из теории относительности. Более того, соотношение между механическим и спиновым моментами в той форме, в какой оно было только что принято, строго выводится из релятивистского уравнения Дирака.

Именно этому отличию между орбитальным и спиновым моментами обязан своим происхождением аномальный эффект Зеемана. Оно приводит к тому, что направление векторной суммы магнитных моментов, т. е. направление полного магнитного момента  $M$ , обычно не совпадает с направлением полного механического момента  $j$ . На фиг. 56 это изображено в общем случае произвольных векторов  $l$  и  $s$ , направления которых различны. Для наглядности орбитальный магнитный момент  $M_l$  взят вдвое большим, чем орбитальный механический момент  $l$ . Тогда, как следует из сказанного выше, спиновый магнитный момент  $M_s$  должен быть взят вчетверо большим, чем спиновый



механический момент  $s$ . Поэтому направления результирующих векторов  $M$  и  $j$  оказываются различными.

В соответствии со смыслом вектора  $j$  — полного углового момента мы должны считать, что атом, а вместе с ним вся векторная диаграмма вращаются вокруг направления вектора  $j$ ,



Фиг. 56. Векторная модель, демонстрирующая аномальный эффект Зеемана.

Направление полного механического момента не совпадает с равнодействующей магнитных моментов. Влияние магнитного поля создается только компонентой  $M_{||}$ , параллельной  $j$ ; компонента же  $M_{\perp}$  исчезает при усреднении из-за вращения векторной фигуры вокруг направления полного момента  $j$ .

в силу чего любой вектор, направленный не вдоль вектора  $j$ , прецессирует вокруг него. Частота таких прецессионных движений велика (можно показать, что соответствующая ей величина  $h\nu$  имеет тот же порядок, что и «тонкое расщепление» термов, которое определяется связью векторов  $l$  и  $s$  с вектором  $j$ ). Например, для  $D$ -линий натрия порядок этой величины  $h\nu$  равен порядку величины расщепления  $p$ -термов, т. е. приблизительно  $\nu \sim 5 \cdot 10^{11}$  сек $^{-1}$ . В связи с этим для величин, медленно меняющихся по сравнению с указанной частотой, достаточно знать средние по времени. Так, например, во внешнем поле атом ведет себя так, как если бы он имел магнитный момент  $\bar{M}$ , где черта означает усреднение по времени.

Но среднее от  $M$  равно проекции  $M$  на ось вращения, иначе говоря, компоненте  $M_{||}$ , тогда как компонента  $M_{\perp}$ , перпендикулярная к оси, при усреднении выпадает. Поэтому в (слабом) внешнем поле атом обладает эффективным магнитным моментом  $M_{||}$ , направленным вдоль  $j$ . Имея механический момент, атом будет прецессировать вокруг направления поля, так что

проведенные выше рассуждения будут справедливы и в этом случае: прецессия ведет к тому, что  $j$  может ориентироваться по отношению к полю  $2j+1$  способами, причем эти ориентации характеризуются компонентой  $m$  вектора  $j$  в направлении поля. Каждой ориентации соответствует энергия, равная  $-M_{\parallel} H m/j$ , поэтому невозмущенный терм расщепляется магнитным полем на  $2j+1$  терма, отстоящих друг от друга на величину  $M_{\parallel} H/j$ .

Таким образом, мы получили «эффективный» магнитный момент атома, который в общем не равен произведению магнетона Бора на полный механический момент, но зависит также и от остальных квантовых чисел, особенно от углов, характеризующих направления векторов в нашей модели. Если записать

$$M_{\parallel} = \frac{eh}{4\pi mc} jg,$$

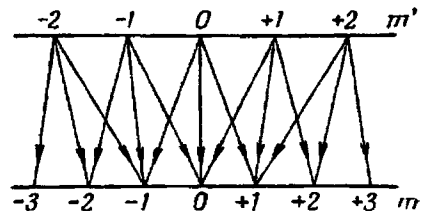
то множитель  $g$  будет описывать различие, возникающее в нашей векторной модели по сравнению с теорией нормального эффекта Зеемана. При этом дополнительная энергия равна

$$E_{\text{магн}} = -M_{\parallel} H \frac{m}{j} = -\frac{eh}{4\pi mc} H m g = -h\nu_L m g,$$

где, как и выше,  $\nu_L$  означает классическую ларморовскую частоту. Отсюда вновь следует, что невозмущенный терм расщепляется магнитным полем на  $2j+1$  равноотстоящих уровней,

Фиг. 57. Переходы при аномальном эффекте Зеемана.

Поскольку для разных групп термов расщепление различно, в итоге получается столько отдельных линий, сколько всего имеется возможных переходов.



но величина расщепления  $h\nu_L g$  будет не такой, как при нормальном эффекте Зеемана, т. е. не  $h\nu_L$ , а будет отличаться от нее на множитель  $g$ , названный по имени открывшего его ученого фактором расщепления Ланде (1923 г.). Фактор Ланде различен для разных термов и служит, таким образом, причиной необычного поведения атомов при аномальном эффекте Зеемана. Расщепляющиеся линии образуют не ларморовский триплет, но появляется большое число линий соответственно тому, что разности энергий, определяемые правилами отбора  $\Delta m = -1, 0, +1$ , не одинаковы для разных значений  $m$  (фиг. 57), как это было в случае нормального эффекта Зеемана.

Расщепление линий при аномальном эффекте Зеемана существенно зависит поэтому от факторов Ланде для верхнего

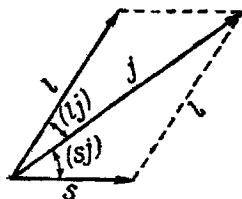
и нижнего состояний. Эти факторы, как мы сейчас покажем, можно относительно просто найти из векторной модели. С этой целью мы определим величину компоненты  $M_{\parallel}$  магнитного момента. Из фиг. 58 можно сразу усмотреть соотношение

$$M_{\parallel} = M_l \cos(l, j) = M_s \cos(s, j).$$

Мы воспользуемся для  $M_{\parallel}$  приведенным выше выражением  $(eh/4\pi mc) jg$ , а для  $M_l$  и  $M_s$  напомним

$$M_l = g_l \frac{eh}{4\pi mc} l, \quad M_s = g_s \frac{eh}{4\pi mc} s,$$

где  $g_l$  и  $g_s$  называются соответственно орбитальным и спиновым  $g$ -факторами. Они дают отношение между магнитным и



Фиг. 58. Векторное сложение орбитального момента  $l$  и спинового момента  $s$  дает полный момент  $j$ .

механическим моментами соответственно для орбитального и спинового движений. Обращаясь к стр. 183 и 185, мы видим, что для электрона  $g_l=1$  и  $g_s=2$ . Однако впоследствии мы столкнемся с той же проблемой применительно к протону и нейтрону, где  $g_l$  и  $g_s$  имеют другие значения; поэтому ради общности мы будем решать задачу при произвольных  $g_l$  и  $g_s$ . Итак, приведенное выше уравнение принимает вид

$$\frac{eh}{4\pi mc} jg = \frac{eh}{4\pi mc} [g_l l \cos(l, j) + g_s s \cos(s, j)],$$

что дает

$$g = g_l \frac{l}{j} \cos(l, j) + g_s \frac{s}{j} \cos(s, j).$$

Значения косинусов, входящих в это уравнение, можно написать сразу же, рассмотрев триэдр векторов  $l$ ,  $s$  и  $j$  (фиг. 58)

$$\cos(l, j) = \frac{j^2 + l^2 - s^2}{2jl}, \quad \cos(s, j) = \frac{j^2 + s^2 - l^2}{2js}.$$

Отсюда получаем для фактора Ланде

$$g = g_l \frac{j^2 + l^2 - s^2}{2j^2} + g_s \frac{j^2 + s^2 - l^2}{2j^2}.$$

По принципу соответствия эта классическая формула должна при больших квантовых числах приближенно выполняться и

для квантовой механики. Квантовомеханическое рассмотрение показывает, что действительно так оно и есть. Для квантового числа  $l$ , описывающего орбитальный момент, это показано в приложении 19. В результате получается, что классическое значение  $l^2$  надо заменить на  $l(l+1)$ . То же самое справедливо для  $j$  и  $s$ , так что мы можем переделать формулу для фактора Ланде в квантовомеханическую, написав везде  $j(j+1)$ ,  $l(l+1)$ ,  $s(s+1)$  вместо  $j^2$ ,  $l^2$ ,  $s^2$ :

$$g = \frac{1}{2} \left\{ (g_s + g_l) - (g_s + g_l) \frac{s(s+1) - l(l+1)}{j(j+1)} \right\}.$$

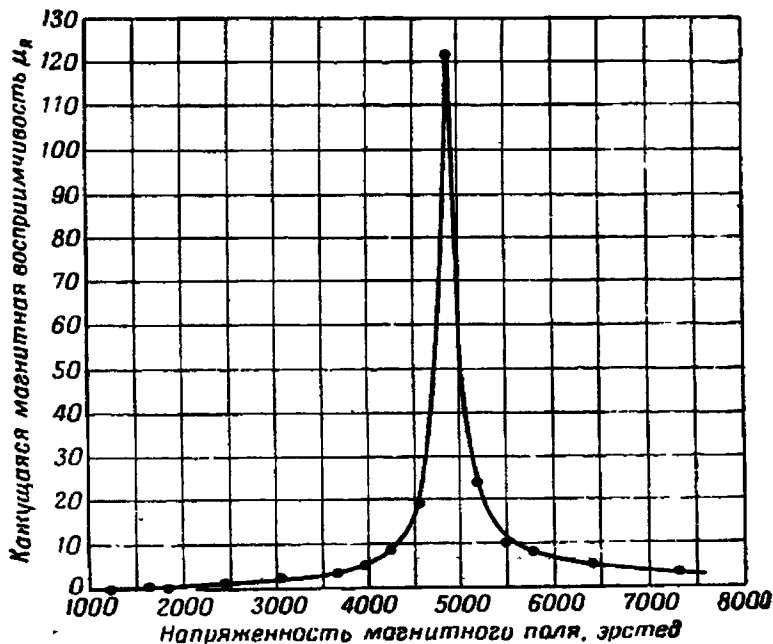
Для атома, у которого  $g_l = 1$  и  $g_s = 2$ ,

$$g = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}.$$

В приложении 22 рассчитана картина расщепления линий в случае аномального эффекта Зеемана для  $D$ -линий натрия. Даже на этом простом примере — атоме с одним валентным электроном — видно, что эта картина сравнительно сложна. Однако правильность таких вычислений полностью, со спектроскопической точностью, подтверждается экспериментом. Во всех экспериментально изученных случаях аномального эффекта Зеемана теория и эксперимент полностью согласны друг с другом. Огромное количество данных, собранных к настоящему времени и неизменно и с успехом объясняемых сразу по введению факторов Ланде, является одним из самых мощных столпов, на которых зиждется квантовая теория электрона.

Современные исследования дают и другие, более прямые доказательства правильности теории, утверждающей, что причиной эффекта Зеемана являются прецессионные движения в атоме. «Радиолокационная» техника, первоначально применявшаяся для радиолокационного обнаружения удаленных объектов, представляет теперь возможность получать и использовать в физических экспериментах электромагнитные волны с длиной волны в несколько сантиметров. Длина волны  $\lambda = 1$  см соответствует частоте  $\nu = c/\lambda \sim 3 \cdot 10^{10}$  сек<sup>-1</sup>. Если сопоставить это число с ларморовской частотой (стр. 184)  $\nu_L = 1,4 \cdot 10^8$  Н сек<sup>-1</sup>, то мы увидим, что поле порядка 10 000 гаусс дает значение  $\nu_L$ , лежащее в области радиолокационных волн. Если теория верна и прецессионные движения действительно существуют, то, облучая вещество, находящееся в магнитном поле, электромагнитными волнами, мы получаем в случае резонанса, т. е. при равенстве частот, сильное взаимодействие радиоволн с веществом (рассеяние их, поглощение). Этот эффект применяется следующим образом.

Исследуемый образец вещества помещается в постоянное магнитное поле порядка  $10\,000$  гаусс, и через него пропускают электромагнитные волны известной частоты, лежащей в микроволновой области. Затем плавно меняют магнитное поле до тех пор, пока сильное поглощение электромагнитных волн не укажет, что действительно имеет место резонансный эффект. Это



Фиг. 59. Ферромагнитный резонанс в супермаллозе.

открытие было сделано русским физиком Завойским (1946 г.) на обычных парамагнитных веществах и подробно изучено Блини, Холидеем и др., в частности для парамагнитных атомов или ионов, образующих кристаллическую решетку. В этом случае атомные электроны находятся в сильном асимметричном электрическом поле кристалла, поэтому природу резонанса нельзя описать простой формулой, приведенной выше. Однако более глубокий анализ позволяет получить значительную информацию о структуре кристалла и связанного с ним электрического поля. Электроны взаимодействуют также с магнитным моментом и электрическим квадрупольным моментом ядер (гл. VII, § 2), что вносит сверхтонкую структуру в резонансную кривую. Из

формы такой кривой часто удается определить ядерные моменты, а также величину спина ядра.

Ферромагнитный резонанс впервые изучал Гриффитс (1946 г.), а затем Киттель и др. Обычно эксперимент заключается в том, что ферромагнитный материал помещают в полый резонатор и изучают резонанс магнитной проницаемости этого вещества. Особенно острый резонанс, обнаруженный Ягером и Бозортом (1947 г.) в железо-никелевом сплаве («супермаллой»), показан на фиг. 59. Это явление можно объяснить (приняв во внимание размагничивающие эффекты), если считать фактор  $g$  несколько превышающим 2, а это означает, что ферромагнетизм связан главным образом со спином электрона (см. выше, стр. 188 и § 7 этой главы).

Таким образом, резонансный метод является мощным оружием исследования магнитных свойств атомов и молекул. Эту же идею можно применить и к магнитным моментам атомных ядер, о чем мы расскажем позже (гл. VII, § 2).

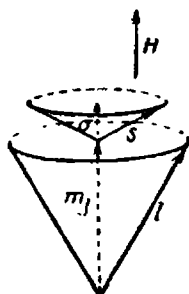
В заключение скажем несколько слов еще об одном явлении, которое наблюдается при зееман-эффекте и называется по имени открывших его физиков *эффектом Пашена — Бака* (1921 г.). При выводе фактора Ланде мы предположили, что магнитное поле не слишком велико. Мы неявно пользовались этим предположением, заменяя магнитный момент его средним по времени  $\bar{M} = M_{II}$ . Это оправдано лишь постольку, поскольку вращение всей векторной модели вокруг углового момента  $j$  происходит гораздо быстрее прецессии вокруг направления магнитного поля, частота которой приблизительно равна  $\nu_L = 1,4 \cdot 10^6 \text{ Н сек}^{-1}$ . Расщеплению натриевых термов, для которых  $\Delta l \sim 6 \text{ А}$  (стр. 179), соответствует частота вращения вокруг углового момента, равная  $\Delta \nu \sim 5 \cdot 10^{11} \text{ сек}^{-1}$ , т. е. в этом примере необходимое условие наверняка выполняется вплоть до полей в несколько тысяч гаусс.

Если, однако, повысить напряженность магнитного поля настолько, что упомянутые две частоты станут одинаковыми по порядку величины, то наше рассуждение уже не будет точным, так как в этом случае все будет зависеть не от среднего  $M$  по времени, а от самого  $M$ . Тогда мы и оказываемся в области эффекта Пашена — Бака. То же самое можно сформулировать иначе, сказав, что в области эффекта Пашена — Бака внутренняя энергия прецессии вокруг  $j$  становится сравнимой с внешней энергией прецессии  $j$  вокруг  $H$ , и поэтому обусловленное спином тонкое расщепление достигает по порядку величины расщепления термов в магнитном поле. Если и дальше увеличивать напряженность магнитного поля, так что энергия, зависящая от ориентации в поле, намного превысит энергию связи

между орбитальным моментом  $l$  и спиновым моментом  $s$ , то мы получим нормальный эффект Зеемана. Действительно, в таких условиях эта связь практически полностью разрывается, и орбитальный и спиновый моменты независимо друг от друга прецессируют вокруг направления поля  $H$  (фиг. 60). При этом полная энергия, обусловленная магнитным полем, равна

$$E_{\text{магн}} = -\frac{e\hbar}{4\pi mc} H (l \cos(l, H) + 2s \cos(s, H)).$$

Если по-прежнему обозначать через  $m_l$  (целочисленную) проекцию  $l$  на направление поля и учесть, что в этом случае спин может ориентироваться только параллельно или антипараллельно



Фиг. 60. Векторная модель, демонстрирующая эффект Пашена — Бака (переход к нормальному эффекту Зеемана).

Поскольку энергии, связанные с орбитальными и спиновыми моментами, больше энергии магнитного взаимодействия между орбитой и спином, орбитальный и спиновый моменты по отдельности прецессируют вокруг направления поля.

полю ( $\sigma = \pm 1/2$ ), то из записанного выражения при учете того, что спин имеет полуцелые значения, следует

$$E_{\text{магн}} = -\frac{e\hbar}{4\pi mc} H (m_l \pm 1).$$

Таким образом, в этом случае терм расщепляется на уровни соответственно нормальному эффекту Зеемана. Итак, плавно увеличивая магнитное поле, мы постепенно переходим от аномального к нормальному эффекту Зеемана; переходная зона и составляет область эффекта Пашена — Бака. Заметим, что принятая терминология не вполне удачна: при нормальных условиях (обычные напряженности поля) получается «аномальный» эффект Зеемана, а «нормальный» эффект — лишь при ненормально больших напряженностях поля.

### § 3. Атом водорода и рентгеновские термы

Перейдем к вопросу о том, как отражается существование спина на величинах термов. Начнем с простого примера атома водорода и схемы термов, которую можно назвать водородо-подобной (термы щелочных металлов, рентгеновские термы).

В гл. V (§ 1 и 4) мы изучали эти термы на основе теории Бора и волновой механики, но не учитывая спин электрона. Повторим кратко основные полученные результаты. Водородоподобные спектры возникают, когда электрон движется в кулоновом поле (термы водорода), или в близком к кулонову центральном поле (экранирование остальными электронами, характеризующее термы щелочных металлов и рентгеновские термы). Величины термов зависят в основном от главного квантового числа (серия Бальмера,  $Rh/n^2$ ). Если поле немного отличается от кулонова, то необходимо ввести поправку, зависящую не только от  $n$ , но и от азимутального квантового числа  $l$  — раньше (гл. V, § 2) мы обозначили эту поправку через  $\varepsilon(n, k)$  где  $k=l+1$ . Аналогичная поправка необходима при учете релятивистского изменения массы; о влиянии этого эффекта на водородные термы упоминалось выше (гл. V, § 2).

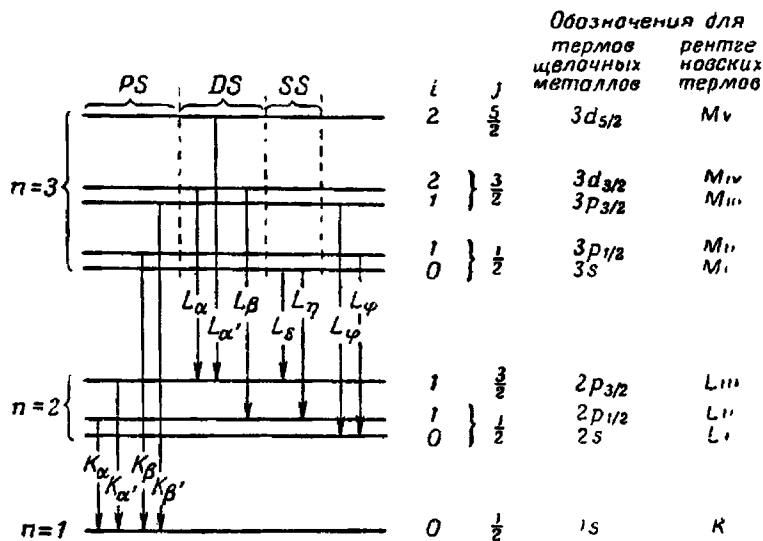
Спин электрона вносит еще одну поправку в картину термов, так как благодаря спину появляется еще одно квантовое число  $j=l\pm 1/2$ . Это приводит, как было показано в § 1 настоящей главы, к расщеплению термов на дублеты. Лишь  $s$ -термы, и только они, остаются нерасщепленными, так как для них  $j$  может иметь единственное значение, именно  $1/2$ . Поэтому вместо схемы термов, показанной на фиг. 47 (стр. 150), мы получаем схему фиг. 61. Прежде всего, термы разделяются на далеко отстоящие друг от друга группы соответственно главному квантовому числу  $n$  ( $n=1, 2, 3\dots$ ). В изображенной схеме пропорции далеко не соблюдены — на самом деле расстояние между двумя такими группами с различными квантовыми числами  $n$  в  $10^3$  —  $10^4$  раз больше, чем расщепление внутри группы термов; в оптических спектрах переходы между двумя различными группами термов соответствуют длинам волн в тысячи  $\text{Å}$ , а тонкая структура измеряется самое большее несколькими  $\text{Å}$ .

В предыдущей главе (§ 2) отдельные термы внутри группы с одним и тем же главным квантовым числом различались по азимутальному квантовому числу  $k$ . Теперь вместо  $k$  мы имеем два квантовых числа, именно азимутальное квантовое число  $l$ , соответствующее  $k-1$ , и внутреннее квантовое число  $j$ . Вместо  $l=0, 1, 2\dots$  (или, как было сначала  $k=1, 2, 3\dots$ ) было принято соглашение пользоваться буквами  $s, p, d, \dots$  (о чем уже говорилось в § 4 гл. V); величина  $j$  записывается в виде индекса при этих буквах. Примеры таких обозначений приведены на фиг. 61 для случая термов щелочных металлов. Для рентгеновских термов установлены другие обозначения: различные термы обозначаются большими буквами, определяющими оболочки, к которым они относятся ( $K$ -оболочка для  $n=1$ ;  $L$ -оболочка для  $n=2$  и т. д.), а порядок нумерации внутри каждой



оболочки обозначается римскими цифрами в индексах при этих буквах.

Случай водорода имеет одну особенность. Эксперимент обнаруживает значительно меньше термов, чем это определяется схемой на фиг. 61: для  $n=2$  обнаружены только 2 терма, для  $n=3$  — только три и т. д. Теоретические вычисления показывают, что иногда два терма совпадают (это, так сказать, математическое совпадение) по той причине, что релятивистские



Фиг. 61. На диаграмме кратко перечислены обозначения для различных линий и термов в спектрах щелочных металлов и рентгеновских спектрах

и спиновые поправки частично компенсируют друг друга. Оказывается, что термы с одинаковыми внутренними квантовыми числами  $j$ , но разными азимутальными числами  $l$  всегда в точности совпадают, например термы  $ns_{1/2}$  и  $np_{1/2}$ , термы  $np_{1/2}$  и  $nd_{3/2}$  и т. д. На схеме фиг. 61 такие пары термов находятся близко друг от друга. Формулу для величины термов предложил Зоммерфельд (1916 г.) еще до возникновения волновой механики; эту же формулу можно получить, рассматривая атом водорода методами релятивистской волновой механики Дирака. Формула с огромной точностью воспроизводит величины водородных термов и имеет вид

$$E + E_0 = E_0 \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{(n_r + \sqrt{n_\phi^2 - \alpha^2 Z^2})^2} \right]^{-1/2}$$

Здесь  $E$  — энергия связанного электрона за вычетом энергии покоя,  $E_0$  — энергия покоя  $mc^2$ ,  $n_r$  — радиальное квантовое число, а  $n_\phi$  в обозначениях Зоммерфельда идентично азимутальному квантовому числу  $k$  Бора и соответствует поэтому  $l+1$  волновой механики. Однако, как мы только что узнали, при учете спина два терма с различными  $l$ , но одинаковыми  $j$  всегда совпадают. Поэтому классификация термов по квантовому числу  $n_\phi$  тождественна классификации по  $j$ , откуда следует, что  $n_\phi = j + 1/2$ . Главное квантовое число при этом выражается суммой  $n = n_r + n_\phi$ . Постоянная  $\alpha$  имеет вид

$$\alpha = \frac{2\pi e^2}{hc} \sim \frac{1}{137};$$

вычислив размерность (гл. III, § 2), мы сразу же убеждаемся, что  $\alpha$  — безразмерное число. Число  $\alpha$  — единственная безразмерная величина, которую можно образовать из трех электронных констант  $e$ ,  $h$  и  $c$ . Поскольку она определяет тонкую структуру расщепившихся термов, ее называют (по Зоммерфельду) *постоянной тонкой структуры*. В формуле Резерфорда  $Z$  — атомный номер (равный 1 для водорода, 2 для  $\text{He}^+$  и т. д.). Ввиду малости  $\alpha$  формулу Зоммерфельда можно разложить в ряд по степеням  $\alpha^2 Z^2$ ; простые вычисления дают

$$E = -\frac{RhZ^2}{n^2} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{n_\phi} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right\},$$

где через  $R$  обозначена величина  $E_0 \alpha^2 / 2h$ , т. е.  $R$  — хорошо известная постоянная Ридберга. К бальмеровскому терму  $-RhZ^2/n^2$  добавляется поправочный член, зависящий от  $n_\phi$ , который и дает тонкую структуру. Величина  $\varepsilon(n, k)$  из формулы на стр. 145 равна как раз этой добавке

$$-\frac{R\alpha^2 Z^4}{n^4} \left( \frac{n}{n_\phi} - \frac{3}{4} \right).$$

Формула Зоммерфельда хорошо описывает не только оптические спектры (атом H, ионы  $\text{He}^+$ ,  $\text{L}^{2+}$  и т. д.), но и рентгеновскую область спектра. Так как релятивистское волновое уравнение Дирака для электрона приводит в точности к тому же результату, эта формула долгое время считалась одним из немногих точных и окончательных физических результатов. Однако в этой уверенности пришлось разочароваться, так как были открыты отклонения от нее. Инструментом для этих открытий послужила «радарная» техника, о которой мы уже упоминали в связи с эффектом магнитного резонанса. Появление тонкой структуры связано с прецессионным движением (см. классическую картину, фиг. 42, стр. 145), и поэтому ее можно

обнаружить по резонансному эффекту в достаточно коротких электромагнитных волнах. Величина расщепления по формуле Зоммерфельда ( $Z=1$ ) есть величина порядка

$$\frac{E}{h} \sim \frac{R\alpha^2}{n^2},$$

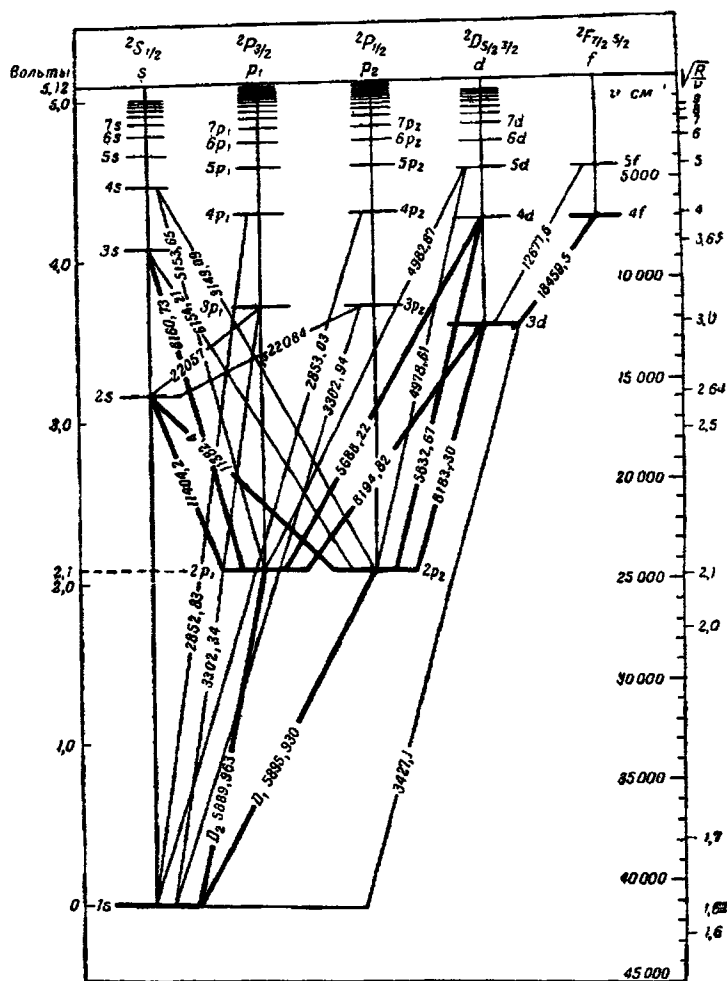
где (гл. V, § 1)  $R \sim 3,3 \cdot 10^{15} \text{ сек}^{-1}$ , что соответствует длине волны

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{ch}{E} = \frac{c}{R\alpha^2} n^2 \sim 0,17 n^2 \text{ см.}$$

Для  $n=2$  эта величина составляет почти 1 см и, так как действительное смещение термов составляет доли соответствующей частоты, необходимые длины волн лежат в области сантиметровых радиоволн. Лэмб и Ризерфорд (1948 г.) показали, что, исследуя влияние атомов водорода на распространение таких радиоволн, можно непосредственно определить энергетические уровни атомов. При этом они обнаружили малые отклонения от формулы Зоммерфельда — Дирака. Позже прямые оптические измерения подтвердили эти факты (Кун и Сериес, 1948 г.). Оказалось, что  $p$ -уровни остаются прежними, а  $s$ -уровни немного смещаются (приблизительно на 10%). В этом эффекте проявляется принципиальная недостаточность современной теории. Были предприняты успешные попытки уточнить теорию, и можно надеяться, что вместе с другими открытиями это приведет к более глубокому пониманию природы электронов и полей.

О принципиальной важности постоянной тонкой структуры мы уже говорили в связи с другим вопросом (гл. III, § 2).

Едва ли можно сомневаться в том, что существование этой безразмерной величины, единственной, которую можно получить из величин  $e$ ,  $c$  и  $h$ , олицетворяет более глубокую связь между электродинамикой и квантовой теорией, чем это представляется с точки зрения современной науки. Поэтому физики понимают необходимость чисто теоретического определения ее численного значения. Вероятно, решение этой проблемы тесно связано с будущей единой теорией элементарных частиц. До сих пор попытки оставались безуспешными. Наиболее известная из них была предпринята Эддингтоном. Он считает, что  $1/\alpha$  равно  $\frac{1}{2}n^2(n^2+1)+1$  для  $n=4$ , т. е. в точности 137. Идея целочисленности  $1/\alpha$  привлекательна, и, по-видимому, ее подтверждают позднейшие эксперименты, дающие число 137,030 ( $\pm 0,016$ ), что очень близко к целому. Все же теория Эддингтона не смогла предсказать некоторых новых явлений (таких, как существование различных типов мезонов, эффекта



Ф и Г. 62. Схема термов натрия с учетом спина.

Слева приведены энергии термов в эв (отсчитываются от основного состояния), справа — частоты (выраженные через волновые числа), которые излучаются при переходах с границы серии на нижние уровни, а также величины  $\sqrt{R/v}$ .

Лэмба — Ризерфорда и др.) и, кроме того, слишком фантастична, чтобы быть приемлемой<sup>1)</sup>.

Вернемся теперь к изучению спектральных линий, соответствующих приведенной схеме термов. Мы уже установили правила отбора (§ 1 этой главы) в виде

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta j = 0, \pm 1;$$

они разрешают только те переходы, которые в схеме термов отмечены стрелками на фиг. 61. В спектрах водорода и щелочных металлов, как было сказано при обсуждении простой теории Бора (фиг. 47, стр. 150; фиг. 61), соответствующие переходам с  $p$ -уровня в основное состояние ( $s$ -уровень) линии называются линиями главной серии. Главная серия более высокого порядка содержит линии, отвечающие переходам на следующий  $s$ -уровень (на нашей диаграмме — на  $2s$ -уровень). Переходы с  $d$ -уровней на  $p$ -уровни дают диффузную серию, а с  $s$ -уровней на  $p$ -уровни — резкую серию. Высшие серии (основная серия и другие) соответствуют переходам с более высоких уровней на уровни третьего квантового состояния ( $n=3$ ) и поэтому выходят за пределы нашей системы термов. Таким образом, мы получаем — для случая натрия — диаграмму уровней и линий, показанную на фиг. 62, вместо простой диаграммы фиг. 61.

Для рентгеновских спектров общеприняты существенно другие обозначения, приведенные на той же фиг. 61 (см. также фиг. 48, стр. 151). Линии, соответствующие переходу на  $K$ -уровень, называются  $K$ -линиями; при переходе на уровень, лежащий в  $L$ -оболочке, мы получаем  $L$ -линии и т. д. Внутри этих общих классов отдельные линии различаются при помощи малых греческих букв в соответствии с условными правилами, что также показано на фиг. 48 (стр. 152). Линии  $K_\alpha$  и  $K_\alpha'$  образуют дублет, излучаемый при переходе электрона с  $L$ - на  $K$ -орбиту;  $K_\beta$  и  $K_\beta'$  отвечают переходам с орбиты  $M$  на  $K$  и т. д.

#### § 4. Атом гелия

В атоме гелия вокруг ядра (заряд ядра  $2e$ ) обращаются два электрона. Поэтому в задаче фигурируют 6 координат вместо трех, в результате чего ее точное решение уже невозможно. Однако для получения общей информации о возможных состояниях вовсе не нужны точные решения. Следуя Бору, можно в

<sup>1)</sup> Любопытно, что по существу весьма родственная аргументация была использована для той же цели в последние годы в работах Гейзенберга по теории, призванной описать единым образом все многообразие известных сейчас элементарных частиц. — *Прим. ред.*

качестве первого шага пренебречь взаимодействием электронов между собой и в первом приближении решать задачу, как если бы два электрона двигались в поле ядра без всяких возмущений. Затем можно учесть взаимодействие с помощью теории возмущений.

Поэтому каждому из двух электронов мы будем приписывать (как и в задаче об атоме водорода) три квантовых числа:

$$n_1, l_1, j_1; \quad n_2, l_2, j_2$$

и примем раз навсегда, что при различных  $l$  большее азимутальное квантовое число отвечает первому электрону ( $l_1 > l_2$ ). Соответствующие моменты складываются векторно (если пренебречь взаимодействием между двумя электронами), давая полный механический момент

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2,$$

а также полные орбитальный и спиновый моменты

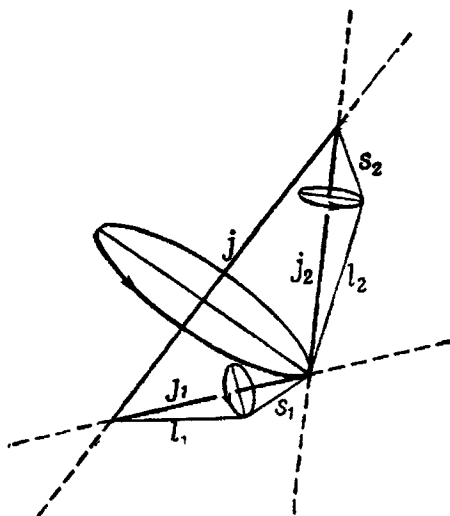
$$\mathbf{l} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2, \quad \mathbf{s} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2.$$

Если, однако, принять во внимание взаимодействие между электронами, то механический момент каждого электрона в отдельности уже не будет больше интегралом движения и поэтому векторы механического момента уже не будут фиксированы в пространстве. Но *полный* момент  $\mathbf{j}$  остается постоянным, и его, конечно, по-прежнему нужно квантовать даже в случае произвольной системы электронов, ибо он отвечает вращению электронной конфигурации как целого. Возникает вопрос, можно ли в задаче с несколькими (двумя) электронами по-прежнему пользоваться, хотя бы приближенно, квантовыми числами для остальных моментов. Важным фактором здесь является взаимодействие двух электронов и связь между векторами индивидуальных моментов (орбитального и спинового). Если взаимодействие слабое, а потому и прецессия медленная, то орбитальным моментам можно приближенно сопоставить соответствующие квантовые числа, именно те числа, которые эти моменты имели бы в отсутствие связи. Здесь все дело в величине различных связей.

Обычно делается предположение, что орбитальный и спиновый моменты каждого электрона связаны сильной связью, тогда как друг на друга электроны влияют относительно слабо. Тогда каждый электрон в отдельности можно характеризовать квантовым числом его момента  $j$  (орбитальный плюс спиновый). Другими словами, векторы  $\mathbf{l}_\nu$  и  $\mathbf{s}_\nu$  для  $\nu$ -го электрона, хотя бы в приближенном смысле, продолжают прецессировать вокруг направления своей суммы  $\mathbf{j}_\nu$ , несмотря на

возмущающее влияние других электронов. А векторы  $j_v$  различных электронов объединяются в полный угловой момент  $j$  и в свою очередь прецессируют вокруг этого вектора (фиг. 63).

В другом предельном случае связи поотдельности объединяются векторы спина и векторы орбитального момента в суммарные векторы  $l$  и  $s$ , так что для двух электронов мы получаем диаграмму фиг. 64. Векторы  $l_1$  и  $l_2$  вращаются вокруг полного орбитального момента  $l$ , а векторы спина  $s_1$  и  $s_2$  — вокруг  $s$ ;



Фиг. 63. Схема так называемой ( $jj$ )-связи.

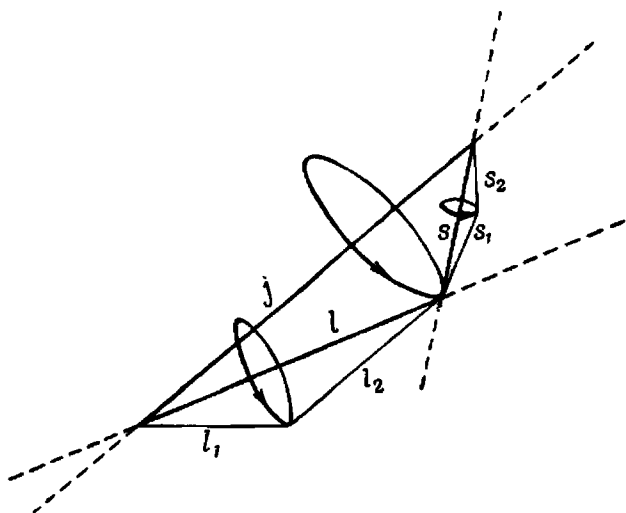
В первом приближении орбитальный и спиновый моменты объединяются в каждом электроне отдельно, а векторная сумма этих двух равнодействующих дает полный момент  $j$ .

наконец, два вектора  $l$  и  $s$  прецессируют вокруг  $j$ . Можно объяснить, как осуществляется эта векторная модель, предположив, что, кроме электрических сил отталкивания, между электронами действуют также другие, магнитные силы. Эти силы определяются магнитными моментами электронов и создают сильную связь между векторами спинов этих электронов.

Эксперимент свидетельствует, что, как правило (для гелия и щелочноземельных металлов), осуществляется только второй тип связи, получивший название  $LS$ -связи, или по имени исследователей, ее открывших, связи Рэссела — Саундерса. Мы будем рассматривать только этот случай, хотя в действительности встречается и случай, описанный раньше ( $jj$ -связь), и промежуточные между этими двумя предельными случаями типы свя-

зей. Напомним здесь весьма похожую картину, имеющую место при аномальном эффекте Зеемана, где увеличение связи между внешним магнитным полем и индивидуальными магнитными моментами определяет переход к эффекту Пашена — Бака, а затем к нормальному эффекту Зеемана.

В гелии осуществляется нормальная связь. Поэтому сначала складываются два орбитальных момента  $l_1$  и  $l_2$ , образуя



Фиг. 64. Схема связи Рассела — Саундерса, или ( $ls$ )-связи.

В первом приближении орбитальные моменты электронов объединяются в полный орбитальный момент  $l$ , аналогично спиновые моменты объединяются в результирующий спиновый момент  $s$ , а затем  $l$  и  $s$  складываются в полный момент  $j$ .

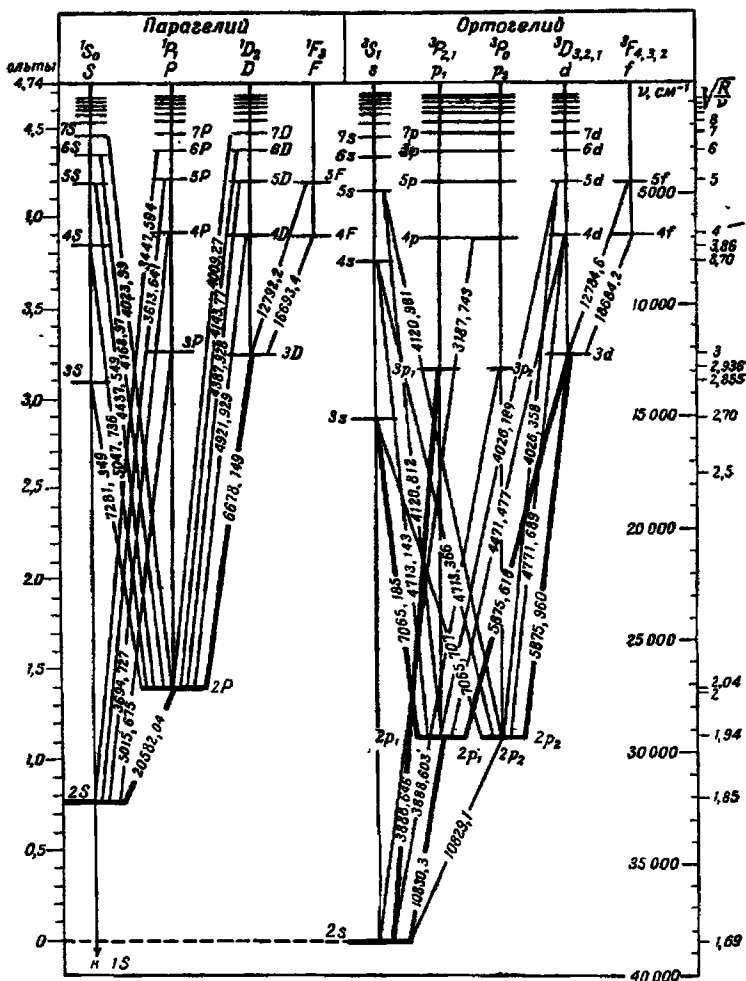
полный орбитальный момент  $l$ , который должен быть целочисленным и поэтому может принимать только значения

$$l = l_1 - l_2, l_1 - l_2 + 1, \dots, l_1 + l_2.$$

Подобно этому, два вектора спина,  $s_1$  и  $s_2$ , объединяясь, образуют полный спиновый момент, который (для двух электронов) также должен быть целочисленным. Значения  $s_1$  и  $s_2$  равны  $1/2$ , поэтому возможны только значения  $s=0$  и  $s=1$ ; в первом случае спины антипараллельны, во втором — параллельны. (На фиг. 64 в целях наглядности мы приняли, что спины образуют некоторый угол — в действительности они всегда должны быть либо параллельны, либо антипараллельны друг другу).

В связи с этим схема термов гелия (фиг. 65) распадается на две отдельные группы в зависимости от того, равен полный





Фиг. 65. Схема термов гелия.

Линии, соответствующие взаимным переходам между ортогелием и парагелием, отсутствуют. Линии ортогелия (когда дисперсия не слишком велика) образуют систему дублетов. Терм 1S парагелия расположен гораздо ниже остальных, как указано стрелкой.

спин нулю или единице. В первом случае получаем *термы парагелия*, во втором — *термы ортогелия*. Это разделение термов на две группы можно оправдать тем фактом (он подтверждается экспериментально и легко может быть обоснован теоретически), что между термами первой группы и термами второй группы вообще нет переходов. Поэтому с физической точки зрения можно провести резкое различие между парагелием и ортогелием, особенно ввиду того, что лишь в исключительных случаях удастся так воздействовать на излучающий пара-спектр атом гелия, что он начнет излучать ортогелиевые линии.

В *парагелии* полный спиновый момент  $s$  равен 0 и, значит, полный орбитальный момент совпадает с полным механическим моментом атома:  $j=l$ . В силу этого все термы парагелия — синглеты, так что каждому азимутальному квантовому числу  $l$  соответствует нерасщепленный уровень с внутренним квантовым числом  $j$ , равным  $l$ .

В *ортогелии*, напротив, полный спиновый момент равен 1, и он векторно складывается с полным орбитальным моментом, давая полный механический момент  $j$ . Поскольку все три вектора целочисленны,  $j$  в этом случае может принимать следующие три значения:

$$j = l - 1, \quad l, \quad l + 1.$$

Поэтому каждому значению азимутального квантового числа соответствуют три уровня и схема термов ортогелия образует систему триплетов. Но и здесь, так же как в рассмотренных выше дублетных спектрах (§ 1),  $s$ -терм не расщепляется. Действительно, для него  $l=0$  и  $j$  может быть только равен  $s$ , т. е. единице. В щелочноземельных металлах (Be, Mg, Ca, Sr, Ba), которые, подобно гелию, имеют по два внешних электрона, триплетный характер спектров легко наблюдается. Однако спектр гелия имеет особенность: практически он состоит из дублетов, так как уровни  $P_1$  и  $P_2$  почти совпадают. В качестве примера рассмотрим первую линию резкой серии; она соответствует переходу из  $3S$  на  $2P$ . Точные измерения, проведенные Хоустоном, показали, что эта линия состоит из трех компонент:

$$\left. \begin{array}{l} 3S \rightarrow 2P_0 \quad 7065,707 \text{ \AA} \\ 3S \rightarrow 2P_1 \quad 7065,212 \text{ \AA} \\ 3S \rightarrow 2P_2 \quad 7065,177 \text{ \AA} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \Delta\lambda = 0,495 \text{ \AA}, \\ \Delta\lambda = 0,035 \text{ \AA}. \end{array}$$

Из этих цифр видно, что расщепление между двумя нижними уровнями составляет только около одной четырнадцатой расщепления между ними и верхним уровнем. Незначительность

этого расщепления была причиной того, что долгое время спектр гелия считался дублетным.

Добавим несколько слов об обозначениях термов. Выше для некоторых линий мы пользовались прописными буквами  $S$ ,  $P$ ,  $D$ , ... вместо строчных (гл. V, § 4). Это принято делать, когда имеется несколько электронов, чтобы обозначить полный механический момент. Кроме того, принято указывать мультиплетность, другими словами, указывать число уровней, принадлежащих отдельному мультиплету (все они имеют одинаковые главные и азимутальные квантовые числа), записывая это число сверху слева от символа терма. Мультиплетность записывается всегда для больших  $l$ , когда она равна  $2s+1$ . Действительно, векторная сумма  $l+s=j$  дает следующие значения:

$$\text{для } l \geq s: \quad l-s, l-s+1, \dots, l+s-1, l+s \\ (2s+1 \text{ значений})^*$$

$$\text{для } l \leq s: \quad s-l, s-l+1, \dots, s+l-1, s+l \\ (2l+1 \text{ значений}).$$

Если, например,  $s=1$ , то мы получаем триплет, но это выполняется только начиная с  $l=1$  ( $P$ -термы), в то время как терм  $l=0$  ( $S$ -терм) будет синглетом. В обозначениях мы не принимаем во внимание эту особенность, и оба терма записываются  ${}^3S$ ,  ${}^3P$ , хотя в действительности первый из них синглет.

Отдельные уровни триплета  ${}^3P$  различаются по индексу справа внизу, который указывает величину  $j$ ; например, в случае гелия

$${}^1P_1 \quad \text{— для парагелия,} \\ {}^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2 \quad \text{— для ортогелия.}$$

Итак, коротко говоря, употребляются следующие обозначения. Первое число означает главное квантовое число — оно определяет оболочку, занимаемую электронами. Если электроны находятся в разных оболочках, это квантовое число нужно опустить. Буква означает полный орбитальный момент, причем буквы  $S$ ,  $P$ , ... соответствуют квантовым числам  $l=0, 1, \dots$ . Индекс слева сверху дает максимальное число уровней, объединенных в группу, определяемую главным квантовым числом и буквой; он равен  $2s+1$ . Индекс справа внизу характеризует отдельные уровни этой группы, указывая внутреннее квантовое число  $j$  полного момента.

Более детальную теорию спектров атома гелия, не опирающуюся на грубую векторную модель, можно построить на основе уравнения Шредингера для двух электронов в поле ядра

(Гейзенберг, 1927 г.). Этот подход приводит к той же классификации термов и, кроме того, позволяет провести приближенные численные расчеты величин термов. Превосходные результаты были получены Хиллераасом (1929 г.) и др. Например, вычисления показывают, что для удаления из атома парагелия одного электрона, находящегося в основном состоянии  $1^1S$  (это состояние не показано на диаграмме фиг. 65, так как оно лежит гораздо ниже остальных уровней), необходима энергия, равная 24,4 эв. Эту энергию можно измерить; экспериментальное ее значение, как указано в таблице ионизационных потенциалов — последний столбец табл. 5 (стр. 206), — равно 24,56 эв. Это превосходное согласие, пожалуй, лучше демонстрирует силу квантовой механики, чем все качественные результаты.

В связи с замечанием о  $1^1S$ -терме возникает вопрос, почему в диаграмме не указан  $1^3S$ -терм, т. е. предполагаемое основное состояние ортогелия. Это было сделано потому, что спектроскопические исследования не дают ни одной линии, которую можно было бы связать с переходом на этот уровень. Приходится сделать вывод, что у ортогелия состояние  $1^3S$  отсутствует. Именно, поскольку можно приближенно вычислить положение этого терма, то можно (также приближенно) указать и области спектра, в которых должны находиться линии, соответствующие переходу на этот уровень. Несмотря на весьма тщательные спектроскопические поиски, в этих областях не было обнаружено ни одной простой линии, которую можно было бы отнести к такому переходу.

Этот результат никак не объясняется ранее установленными принципами. Если же искать причину его в каких-то специальных свойствах самого терма, то обращает на себя внимание, что на этом уровне все квантовые числа двух электронов одинаковы. Так, оба электрона находятся на  $K$ -оболочке и поэтому имеют одинаковые главные квантовые числа  $n_1 = n_2 = 1$  (что имеет место и для терма парагелия  $1^1S$ ). Далее, поскольку азимутальное квантовое число электрона не может превосходить  $n - 1$ , то оно должно быть нулевым для обоих электронов:  $l_1 = l_2 = 0$ . (Для высших  $S$ -уровней каждый из двух орбитальных моментов может быть отличен от нуля, но тогда моменты антипараллельны, что приводит к нулевому полному моменту.) Наконец, спины обоих электронов в ортогелии параллельны, так что компоненты их тоже одинаковы:  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1/2$ . Таким образом, два набора квантовых чисел полностью совпадают. У парагелия же спины электронов антипараллельны, поэтому квантовые числа электронов отличаются проекциями компонент спина.

## Распределение электронов в атомах

В таблице приведены не только те данные о распределении электронов и об основных уровнях, которые непосредственно получены из спектрометрических наблюдений, но и те, которые построены по аналогии, — эти последние отмечены звездочкой у символа элемента. В некоторых случаях (актиниды) приведены два различных возможных варианта, один из них в скобках (Синборг, 1949 г.).

Элемент	K			L			M			N		Основное состояние	Ионизационный потенциал (электрон-вольты)
	1,0 1s	2,0 2s	2,1 2p	3,0 3s	3,1 3p	3,2 3d	4,0 4s	4,1 4p					
H 1	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	$^2S_{1/2}$	13,59	
He 2	2	—	—	—	—	—	—	—	—	—	$^1S_0$	24,56	
Li 3	2	1	—	—	—	—	—	—	—	—	$^2S_{1/2}$	5,40	
Be 4	2	2	—	—	—	—	—	—	—	—	$^1S_0$	9,32	
B 5	2	2	1	—	—	—	—	—	—	—	$^2P_{1/2}$	8,28	
C 6	2	2	2	—	—	—	—	—	—	—	$^3P_0$	11,27	
N 7	2	2	3	—	—	—	—	—	—	—	$^4S_{3/2}$	14,55	
O 8	2	2	4	—	—	—	—	—	—	—	$^3P_2$	13,62	
F 9	2	2	5	—	—	—	—	—	—	—	$^2P_{3/2}$	17,43	
Ne 10	2	2	6	—	—	—	—	—	—	—	$^1S_0$	21,56	
Na 11	Конфигурация неона			1	—	—	—	—	—	—	$^2S_{1/2}$	5,14	
Mg 12	неона			2	—	—	—	—	—	—	$^1S_0$	7,64	
Al 13	неона			2	1	—	—	—	—	—	$^2P_{1/2}$	5,97	
Si 14	неона			2	2	—	—	—	—	—	$^3P_0$	8,15	
P 15	неона			2	3	—	—	—	—	—	$^4S_{3/2}$	10,9	
S 16	неона			2	4	—	—	—	—	—	$^3P_2$	10,36	
Cl 17	неона			2	5	—	—	—	—	—	$^2P_{3/2}$	12,90	
Ar 18	неона			2	6	—	—	—	—	—	$^1S_0$	15,76	
K 19	Конфигурация аргона					—	1	—	—	—			
Ca 20	аргона					—	2	—	—	—			
Sc 21	аргона					1	2	—	—	—			
Ti 22	аргона					2	2	—	—	—			
V 23	аргона					3	2	—	—	—			
Cr 24	аргона					5	1	—	—	—			
Mn 25	аргона					5	2	—	—	—			
Fe 26	аргона					6	2	—	—	—			
Co 27	аргона					7	2	—	—	—			

Таблица 5. Продолжение

Элемент	K		L			M			N		Основное состояние	Ионизационный потенциал (в электрон-вольтах)
	1,0 1s	2,0 2s	2,1 2p	3,0 3s	3,1 3p	3,2 3d	4,0 4s	4,1 4p				
Ni 28	Конфигурация аргона					8	2	—	$^3F_4$	7,63		
Cu 29						10	1	—	$^2S_{1/2}$	7,72		
Zn 30						10	2	—	$^1S_0$	9,39		
Ga 31						10	2	1	$^2P_{1/2}$	5,97		
Ge 32						10	2	2	$^3P_0$	8,13		
As 33						10	2	3	$^4S_{3/2}$	10,5		
Se 34						10	2	4	$^3P_2$	9,73		
Br 35						10	2	5	$^2P_{3/2}$	11,76		
Kr 36						10	2	6	$^1S_0$	14,00		
Элемент	Строение внутренних оболочек	N		O			P	Основное состояние	Ионизационный потенциал (в электрон-вольтах)			
		4,2 4d	4,3 4f	5,0 5s	5,1 5p	5,2 5d	6,0 6s					
Rb 37		—	—	1	—	—	—	$^2S_{1/2}$	4,17			
Sr 38		—	—	2	—	—	—	$^1S_0$	5,69			
Y 39		1	—	2	—	—	—	$^2D_{3/2}$	6,5			
Zr 40		2	—	2	—	—	—	$^3F_2$	6,95			
Nb 41	Конфигурация криптона	4	—	1	—	—	—	$^6D_{1/2}$	6,77			
Mo 42		5	—	1	—	—	—	$^7S_3$	7,06			
Tc 43		6	—	1	—	—	—	$^6D_{9/2}$	7,1			
Ru 44		7	—	1	—	—	—	$^5F_5$	7,5			
Rh 45		8	—	1	—	—	—	$^4F_{9/2}$	7,7			
Pd 46		10	—	—	—	—	—	$^1S_0$	8,1			
Ag 47	Конфигурация палладия	—	—	1	—	—	—	$^2S_{1/2}$	7,58			
Cd 48		—	—	2	—	—	—	$^1S_0$	8,99			
In 49		—	—	2	1	—	—	$^2P_{1/2}$	5,79			
Sn 50		—	—	2	2	—	—	$^3P_0$	7,30			
Sb 51		—	—	2	3	—	—	$^4S_{3/2}$	8,64			
Te 52		—	—	2	4	—	—	$^3P_2$	8,96			
I 53		—	—	2	5	—	—	$^2P_{3/2}$	10,44			
Xe 54		—	—	2	6	—	—	$^1S_0$	12,13			

Таблица 5. Продолжение

Элемент	Строение внутренних оболочек	N		O			P	Основное состояние	Ионизационный потенциал (в электрон-вольтах)
		4,2 4d	4,3 4f	5,0 5s	5,1 5p	5,2 5d	6,0 6s		
Cs 55	Конфигурация палладия  Оболочки 1s — 4d содержат 46 электронов	—	—	—	—	—	1	$^2S_{1/2}$	3,89
Ba 56		—	—	—	—	—	2	$^1S_0$	5,21
La 57		—	—	—	—	1	2	$^2D_{3/2}$	5,61
Ce* 58		2	—	—	—	—	2	$^3H_4$	(6,54)
Pr* 59		3	—	—	—	—	2	$^4I_{11/2}$	(5,76)
Nd* 60		4	—	—	—	—	2	$^5I_4$	(6,31)
Pm* 61		5	Оболочки	Оболочки	—	—	2	$^6H_{5/2}$	(6,3)
Sm 62		6	5s — 5p	—	—	—	2	$^7F_0$	(5,6)
Eu* 63		7	содержат	содержат	—	—	2	$^8S_{7/2}$	5,64
Gd* 64		7	8 электронов	—	1	—	2	$^9D_2$	6,7
Tb* 65		8	—	—	1	—	2	$^6H$	(6,74)
Dy* 66		9	—	—	1	—	2	$^5I$	(6,82)
Ho* 67		10	—	—	1	—	2	$^4I$	
Er* 68	11	—	—	1	—	2	$^3H$		
Tm 69	12	—	—	—	—	2	$^2F_{7/2}$		
Yb 70	13	—	—	—	—	2	$^1S_0$	6,2	
Lu* 71	14	—	—	—	—	2	$^2D_{5/2}$	5,0	

Элемент	Строение внутренних оболочек	O		P			Q	Основное состояние	Ионизационный потенциал (в электрон-вольтах)
		5,2 5d	5,3 5f	6,0 6s	6,1 6p	6,2 6d	7,0 7s		
Hf 72	Оболочки 1s — 5p содержат 68 электронов	2	—	2	—	—	—	$^3F_2$	5,5
Ta 73		3	—	2	—	—	—	$^4F_{3/2}$	6,0
W 74		4	—	2	—	—	—	$^5D_0$	7,94
Re 75		5	—	2	—	—	—	$^6S_{3/2}$	7,87
Os 76		6	—	2	—	—	—	$^5D_4$	8,7
Ir 77		9	—	0	—	—	—	$^4F_{3/2}$	9,2
Pt 78		9	—	1	—	—	—	$^3D_3$	8,96
Au 79		—	—	1	—	—	—	$^2S_{1/2}$	9,23
Hg 80		—	—	2	—	—	—	$^1S_0$	10,44
Tl 81		—	—	2	1	—	—	$^2P_{1/2}$	6,12

Таблица 5. Продолжение

Элемент	Строение внутренних оболочек	O		P			Q	Основное состояние	Ионизационный потенциал (в электрон-вольтах)
		5,2 5d	5,3 5f	6,0 6s	6,1 6p	6,2 6d	7,0 7s		
Pb 82		—	2	2	—	—	$^3P_0$	7,42	
Bi 83		—	2	3	—	—	$^4S_{3/2}$	(8,8)	
Po 84		—	2	4	—	—	$^3P_2$	(8,2)	
At* 85	Оболочки	—	2	5	—	—	$^2P_{3/2}$	(9,6)	
Rn 86	1s — 5d	—	2	6	—	—	$^1S_0$	10,75	
Fr* 87	содержат	—	2	6	—	1	$^2S_{1/2}$	(4,0)	
Ra* 88	78 электронов	—	2	6	—	2	$^1S_0$	75,2	
Ac* 89		—	2	6	1	2	$^2D_{3/2}$		
Th 90		1 (—)	2	6	1 (2)	2	$^3F_2$		
Pa* 91		2 (1)	2	6	1 (2)	2	$(^4K)$	4,0	
U* 92		3	2	6	2	2	$^5L_6$		
Np* 93		5 (4)	2	6	— (1)	2	$(^6M)$		
Pu* 94		6 (5)	2	6	— (1)	2	$(^7K)$		
Am* 95		7	2	6	—	2	$(^8H)$		
Cm* 96		7	2	6	1	2	$^9D$		

## § 5. Принцип запрета Паули

Обрисованная выше ситуация, а именно отсутствие в системе термов ортогогеля предполагаемого основного состояния, т. е. уровня  $1^3S$ , заставила Паули (1925 г.) провести общую проверку спектров, с целью выяснить, не выпадают ли иногда определенные термы и в случаях других элементов, и при других условиях. Оказалось, что это действительно имеет место. Кроме того, анализ термов указывает, что во всех случаях выпадения термов все квантовые числа электронов одинаковы. Обратное, оказалось, что термы всегда выпадают, когда одинаковы все квантовые числа. Это открытие привело Паули к формулировке следующего принципа.

Квантовые наборы двух (или многих) электронов никогда не могут полностью совпадать; две системы квантовых чисел, которые можно перевести одну в другую перестановкой двух электронов, определяют *одно* состояние.

Вторая часть этого принципа утверждает *неразличимость* электронов. Она имеет большое значение для нумерации



возможных состояний, необходимой в теории периодической системы, и особенно в статистике. Отметим еще, что для применения этого принципа пространственное вырождение следует считать устраненным (например, наложением внешнего магнитного поля). При этом каждый отдельный электрон можно описывать при помощи четырех квантовых чисел:

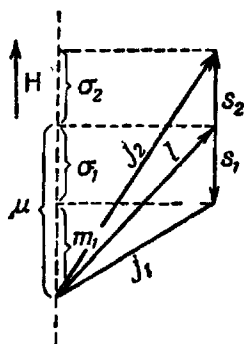
$$n = 1, 2, \dots,$$

$$l = 0, 1, \dots, n - 1,$$

$$j = l - \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}$$

$$m = -j, -j + 1, \dots, +j \quad \left. \vphantom{m} \right\} \text{или} \quad \left\{ \begin{array}{l} \mu = -l, -l + 1, \dots, +l, \\ \sigma = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}. \end{array} \right.$$

Здесь  $n$  означает главное квантовое число; оно может принимать все значения от 1 и выше;  $l$  — азимутальное квантовое



Фиг. 66. Орбитальный момент  $L$ , спиновый момент  $S$  и полный момент  $J$ .

Показаны их проекции на выделенное направление.

число, изменяющееся от 0 до  $n - 1$ ;  $j$  — внутреннее квантовое число, которое может принимать только два указанных выше значения;  $m$  — проекция  $j$  на специально выбранное направление, по правилам пространственного квантования изменяющаяся от  $-j$  до  $+j$ , пробегая  $2j + 1$  значений. При желании вместо  $j$  и  $m$  можно пользоваться проекциями  $l$  и  $s$  на заданное направление, т. е. числом  $\mu$ , которое раньше обозначалось  $m_l$  (§ 2 этой главы), и  $\sigma$  (фиг. 66).

Другой часто применяемый подход состоит в следующем. Говорят, что два электрона эквивалентны, если у них одинаковые  $n$  и одинаковые  $l$ . Поэтому два эквивалентных электрона по принципу Паули должны отличаться друг от друга направлением либо спина, либо  $l$ , так что для них возможны не все, но лишь некоторые определенные значения  $\mu$  и  $\sigma$ . Другое дело, когда два электрона неэквивалентны — имеют разные (главное

или азимутальное, или оба сразу) квантовые числа: в этом случае допустимы все значения  $\mu$  и  $\sigma$ .

В приложении 23 будет дан пример перечисления термов в обоих случаях — неэквивалентных и эквивалентных электронов. Здесь мы не будем вдаваться в более подробное обсуждение — в принципе это просто, но требует громоздких вычислений, и перейдем к наиболее важному и непосредственному применению принципа Паули — к развитой Бором теории периодической системы.

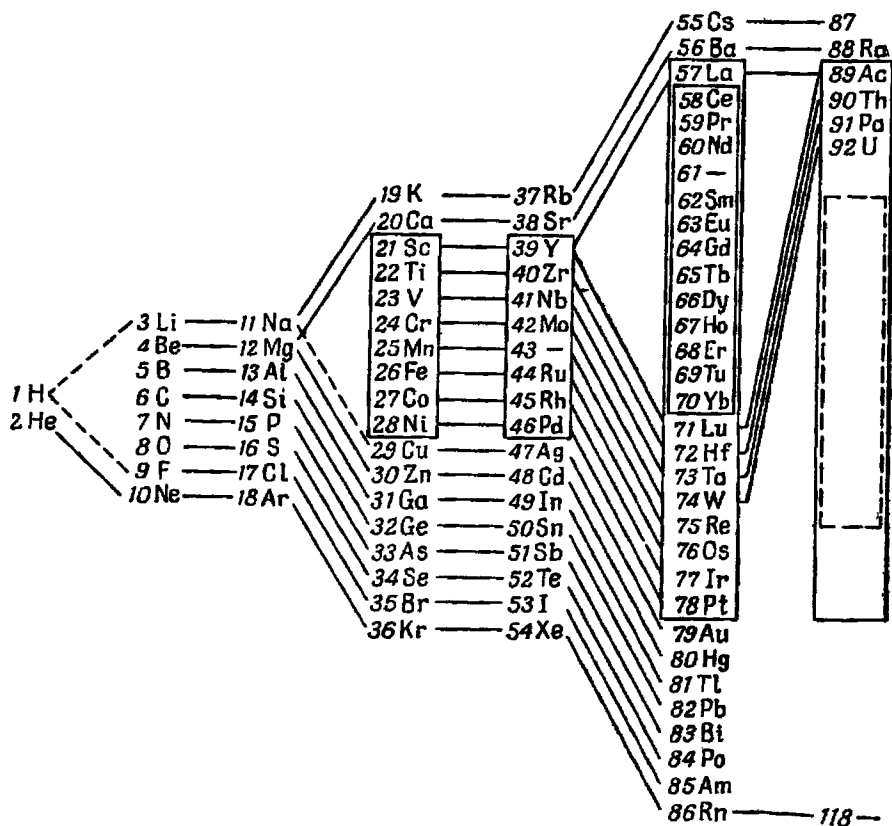
## § 6. Периодическая система. Заполненные оболочки

Мы уже часто обращались к периодической системе, или периодической таблице элементов Менделеева (табл. 1, стр. 52; на фиг. 67 она же представлена в несколько другой форме). В периодической таблице элементы расположены по правилам, которые первоначально основывались на их химических свойствах и атомных весах. Оказалось, однако, что в действительности решающий фактор — не атомный вес (вспомним об изотопах), а атомный номер  $Z$ , т. е. число электронов, окружающих ядро в нейтральном атоме. Одним из наиболее важных применений принципа Паули является объяснение оболочечной структуры атомов, т. е. свойства, выражающегося в периодичности химических свойств атомов. Следуя Бору (1921 г.), мы будем развивать теорию периодической системы, шаг за шагом переходя от простых элементов к следующим, более сложным. Поэтому в начале каждого шага мы имеем элемент с известной электронной конфигурацией, затем предполагаем, что заряд ядра этого атома увеличился на единицу и одновременно на периферии электронной оболочки появился еще один электрон. Собственно, мы и хотим узнать, как происходит это добавление электрона.

Начнем с простейшего элемента — водорода ( $Z=1$ ). Его электрон в основном состоянии находится на нижней орбите, поэтому его главное квантовое число  $n=1$ ; мы говорим (см. гл. V, § 2), что электрон находится на  $K$ -оболочке. При переходе к гелию появляется второй электрон; для обоих этих электронов  $n=1$ , и поэтому  $l=0$ , а также и  $\mu=0$ . Отсюда по принципу запрета Паули следует, что они должны иметь разные компоненты спина. Так как существуют только два возможных значения, именно  $\sigma_1 = +1/2$  и  $\sigma_2 = -1/2$ , то в  $K$ -оболочке имеются места только для двух электронов.

Если теперь прибавить третий электрон, то ему не найдется места в  $K$ -оболочке, и он должен поселиться на  $L$ -оболочке. Подсчитаем число мест в  $L$ -оболочке. Во-первых, как и в  $K$ -обо-

лочке, на  $L$ -оболочке имеются два электрона с  $l=0$ ; они отличаются друг от друга только компонентами спина. Далее, есть еще 6 мест для электронов с  $l=1$ , так как  $\mu$ , конечно, может



Фиг. 67. Схема периодической системы элементов, предложенная Н. Бором (1921 г.), которая отображает и строение оболочек, и химические свойства атомов.

иметь три значения:  $-1$ ,  $0$ ,  $1$ , и для каждого из них возможны две ориентации спина. Таким образом, всего в  $L$ -оболочке 8 мест, и они подразделяются (Стойер, 1924 г.) на две подоболочки с двумя и шестью электронами. По мере увеличения атомного номера  $L$ -оболочка постепенно заполняется. Соответствующие атомы — это Li, Be, B, C, N, O, F, Ne. Атом Ne имеет полностью укомплектованную  $L$ -оболочку, и следующий элек-

трон должен водвориться уже на *M*-оболочку (см. табл. 5, стр. 206—209).

Распределение мест в *M*-оболочке представим в виде таблицы:

$l = 0, \mu =$	0,	$\sigma = \pm \frac{1}{2} : 2$ электрона
$l = 1, \mu =$	-1, 0, 1,	$\sigma = \pm \frac{1}{2} : 6$ электронов
$l = 2, \mu =$	-2, -1, 0, 1, 2,	$\sigma = \pm \frac{1}{2} : 10$ электронов
Всего		18 электронов

Значит, в *M*-оболочке имеется 18 мест, разделенных на три подгруппы. Первые две подгруппы образуют второй короткий период (из 8 элементов) — это элементы от Na до Ag. После этого, однако, появляются отклонения от кажущегося естественным порядка, в котором электроны заселяют свои места. В действительности этот порядок всегда определяется энергией, освобождающейся, когда в атоме поселяется (т. е. приходит в связанное состояние) новый электрон. Но энергетические соотношения не всегда таковы, что одна оболочка непременно должна заполниться до того, как электроны начнут занимать места в следующей. Наоборот, может оказаться, что с энергетической точки зрения электрон будет крепче связан на *s*-орбите высшей оболочки, чем на *d*- или *f*-орбитах низшей, еще не заполненной оболочки. Как раз такая ситуация возникает при дальнейшем заполнении *M*-оболочки. Как показывает опыт, десять пустующих *3d*-термов в смысле энергии лежат выше *4s*-термов, соответствующих связи электронов на *N*-оболочке. Поэтому следующие два электрона (K, Ca) занимают места в *N*-оболочке. Лишь после этого начинается заполнение *M*-оболочки, продолжающееся от Sc ( $Z=21$ ) до Zn ( $Z=30$ ). Затем формируется *N*-оболочка, вплоть до элемента Kг ( $Z=36$ ). Описанное выше явление повторяется в *N*-оболочке. Два следующих электрона (Rb, Sr) заселяют *O*-оболочку ( $n=5$ ), а затем снова начинается заполнение *N*-оболочки, перемежающееся с заселением *O*-оболочки. Редкоземельные элементы (называемые также лантанидами, т. е. элементами, следующими после лантана) соответствуют окончательному заполнению *N*-оболочки, причем предварительно два электрона появляются в *P*-оболочке, что и объясняет химическое сходство этих элементов. Мы уже упоминали, что химическое поведение элементов, как правило, определяется, электронной конфигурацией в самой

внешней оболочке. Поэтому элементы с одинаковой структурой самой внешней оболочки обладают в большой степени эквивалентными химическими свойствами. Еще раз эта характерная черта проявляется у группы тяжелых элементов — актинидов (от Ac89 до Cm95). С другой стороны, этот же принцип объясняет возникновение периодичности в системе элементов. Так, например, у всех инертных газов, Ne, Ar, Kr, Xe и Rn, заполнены оболочки из 8 электронов; для щелочных металлов характерен один электрон, вращающийся в атоме вокруг заполненных оболочек; с другой стороны, галогенам не хватает для заполнения оболочки одного электрона. В гл. IX мы еще раз займемся проблемой химической связи и химического поведения атомов и рассмотрим ее подробнее.

### § 7. Магнетизм

В § 2 этой главы мы детально изучили расщепление термов атома в магнитном поле. Оно определяется ориентирующей силой со стороны магнитного поля, действующей на магнитные моменты спина и орбитального движения электронов в атоме.

За магнитные свойства состоящего из атомов вещества отвечают все те же магнитные моменты атомов. При этом необходимо различать два случая. Вещество называется *парамагнитным*, если его атомы (или молекулы) обладают магнитным моментом. Ясно, что зависящее от магнитного момента намагничение вещества будет направлено вдоль поля, поскольку, несомненно, оно возникает как следствие ориентации магнитных моментов вдоль поля. Далее, для намагничения характерна сильная зависимость от температуры, так как ориентации элементарных магнитов вдоль поля противодействует размазывание по направлениям, обусловленное тепловым движением. Мы займемся этим подробнее в приложении 27. Напротив, вещество называется *диамагнитным*, если его атомы не обладают постоянным магнитным моментом. В этом случае намагничивание происходит в противоположном полю направлении и практически не зависит от температуры.

Немногие твердые тела, например элементы группы железа Fe, Co, Ni, обладают в определенном интервале температур тем свойством, что образец остается намагниченным даже после исчезновения внешнего поля. Их называют *ферромагнетиками*. Для объяснения этого эффекта необходимо предположить, что даже между весьма отдаленными частицами действуют силы, стремящиеся ориентировать их моменты параллельно друг другу. Действительно, по современной теории (Гейзенберг, 1928 г.) причиной магнитного эффекта служат свободные электроны, переносящие в этих металлах электрический ток. При

этом спины электронов стремятся быть параллельными друг другу. Однако теория слишком сложна, чтобы рассматривать ее здесь.

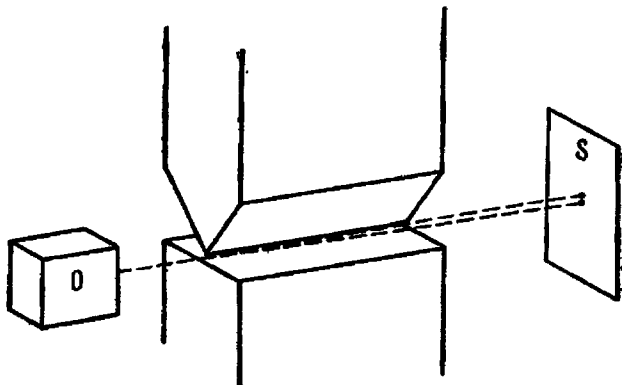
Величину магнитных моментов дает атомная теория (ср. результаты, полученные выше в связи с аномальным эффектом Зеемана, § 2 этой главы). Так, момент атомов с заполненными внешними оболочками оказался равным нулю (инертные газы, а также, согласно измерениям Штерна, Zn, Cd, Hg). Далее, S-термы не имеют орбитального момента ( $l=0$ ), так что магнитный момент атома в этом случае полностью обусловлен спином. Например, у щелочных металлов с их одним валентным электроном на s-орбите магнитный (спиновый) момент равен 1 магнетону Бора; то же самое верно и для благородных металлов (Cu, Ag, Au). Элементы, обладающие еще не заполненными промежуточными оболочками, имеют большие магнитные моменты (например, элементы группы железа и редкие земли).

Выводы теории о величине магнитных моментов атомов можно проверить, определив магнитную восприимчивость данного вещества (Вейсс, около 1910 г.). Однако эти измерения дают лишь величину, усредненную по всем направлениям и всем встречающимся значениям магнитных моментов. Поэтому такой метод не дает возможности непосредственно проверить теорию.

Однако, как показали Штерн и Герлах (1921 г.), можно измерить величину моментов и у отдельных атомов. Их метод имеет по сравнению с макроскопическим методом Вейсса все преимущества, подобные преимуществам метода Астона определения масс атомов против макроскопического метода определения атомных весов: последний дает только средние по всем имеющимся изотопам значения. Метод Штерна и Герлаха основан на отклонении молекулярного пучка в неоднородном магнитном поле. Атом, обладающий магнитным моментом, можно считать элементарным магнитом с малыми, но конечными размерами. Помещенный в однородное магнитное поле, такой магнит не будет испытывать действия силы, ибо магнитное поле будет действовать на его северный и южный полюсы с одинаковыми, но противоположно направленными силами — поэтому, хотя ось магнита еще может колебаться или прецессировать вокруг направления поля, его центр инерции будет либо строго покоиться, либо двигаться по прямой.

Иначе обстоит дело, когда поле неоднородно. В этом случае силы, действующие на северный и южный полюсы, не совсем одинаковы. Поэтому, кроме пары сил, возникающей даже в однородном поле, на магнит в целом будет действовать

результатирующая сила. Она сообщает магниту ускорение либо в направлении поля, либо против него. Таким образом, пролетая через неоднородное магнитное поле, элементарный магнит будет отклоняться от своего первоначального направления. Величина отклонения определяется степенью неоднородности поля. Для практического получения заметных отклонений неоднородность должна быть столь значительной, чтобы поле резко менялось уже в пределах длины магнита (порядок которой в нашем случае не превосходит линейных размеров атома, т. е.



Фиг. 68. Схема опыта Штерна и Герлаха.

Молекулярный пучок, вылетающий из печи *O*, проходит между полюсами магнита (один из которых имеет форму лезвия ножа) и падает на экран *S*.

$10^{-8}$  см). Штерн добился достаточной неоднородности, удачно сконструировав полюсы магнита, создающего поле. Один полюс имел вид лезвия, а второй, помещенный против него, был плоским либо с выемкой (фиг. 68). Благодаря этому магнитные силовые линии сгущались у лезвия, так что напряженность поля около него была значительно больше, чем у другого полюса. Выбрасываемый из печи сквозь систему диафрагм тонкий пучок атомов пролетал между полюсами. Каждый отдельный атом отклонялся в неоднородном поле в соответствии с величиной и направлением его момента. Следы отдельных атомов можно было увидеть на экране (усиливая их в случае необходимости, как в фотографии).

С классической точки зрения на экране должен был получиться при этом расширившийся пучок — ведь по классической теории моменты летящих сквозь поле атомов могут иметь все направления относительно поля. Но в квантовой теории, с учетом пространственного квантования, возможны не все ориен-

тации, а лишь некоторое конечное число их. Выше в связи с аномальным эффектом Зеемана мы уже подробно рассмотрели это (§ 2 этой главы). Следовательно, на экране след пучка будет *расщеплен* на конечное число отдельных следов. Реально на экране должно появиться в точности  $2j+1$  отдельных следов, если атомы находятся в состоянии с внутренним квантовым числом  $j$ . (В этом случае имеется как раз  $2j+1$  возможных ориентаций полного механического, а вместе с ним и полного магнитного момента относительно направления поля.)

Проведенные опыты действительно обнаружили разделение пучка на несколько отдельных пучков. Например, пучок атомов лития расщепился на два (фото 18). Этого и следовало ожидать, поскольку основным термом атома лития является  $^2S$ -терм (один валентный электрон со спином  $1/2$  на  $s$ -орбите,  $l=0$ ). По величине расщепления можно определить и значение магнитного момента. Таким путем Герлаху удалось получить прямое доказательство того, что спиновый магнитный момент в точности равен одному магнетону Бора. Систематические исследования различных элементов дали результаты, находящиеся в полном согласии с теорией.

Штерн и Раби добились столь исключительной точности измерений, что появилась возможность измерять магнитные моменты ядер. Но это относится уже к области ядерной физики, и мы займемся этим в следующей главе (гл. VII, § 2).

## § 8. Волновая теория спина электрона

На предыдущих страницах мы рассматривали теорию спина и связанные с ней вопросы — тонкую структуру, принцип запрета Паули и т. д. — исключительно на основе векторной модели. Векторы моментов мы считали заданными и оперировали ими по правилам полуклассической теории Бора. Уже упоминалось (§ 2 этой главы), что такая процедура может быть оправдана волновой механикой. Здесь мы не можем привести полной схемы волновой механики электрона со спином, но хотелось бы по крайней мере показать, как в действительности вводится в волновую механику спин электрона.

Такое обобщение волновой механики предложил Паули (1925 г.). Основная идея его теории состоит примерно в следующем. Для простоты рассмотрим свободный электрон. Согласно Шредингеру, его состояние описывается волновой функцией  $\psi(x, y, z, t)$ , причем  $|\psi|^2$  дает вероятность того, что электрон будет обнаружен в рассматриваемой точке. Мы могли бы ввести спин в волновое уравнение, пользуясь представлением о вращающемся электроне. Для этого было бы необходимо



учесть вращательные степени свободы. Однако сразу видно, что это невозможно. Дело в том, что при этом, как для всякой вращающейся системы, в решениях появились бы два новых квантовых числа (например, при обращении электрона вокруг ядра — числа  $l$  и  $m$ ). Следовательно, мы получили бы существенно большее число состояний, чем это наблюдается на опыте. Итак, представление о вращающемся электроне нельзя понимать буквально.

Как уже было показано в § 1 этой главы, спектр, особенно спектры щелочных металлов, с несомненностью свидетельствует о том, что при фиксированных значениях трех квантовых чисел  $n$ ,  $l$ ,  $m$  электрон может находиться в двух и только двух различных состояниях, обладающих при этом различными энергиями. Можно учесть эту новую степень свободы формально, если ввести, помимо обычных, одну добавочную координату  $\sigma$ , допустив для нее всего лишь два значения. Обозначим эти значения  $\sigma = +$  и  $\sigma = -$  соответственно. Для наглядности можно представить себе, что одно значение новой переменной характеризует состояние, в котором спин параллелен выбранному направлению, а другое значение отвечает состоянию с антипараллельной ориентацией спина. Таким образом, мы получаем новую функцию, зависящую уже от пяти координат:  $\psi = \psi(x, y, z, t, \sigma)$ . Само собой напрашивается разбиение такой волновой функции на две компоненты

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_+(x, y, z, t) \\ \psi_-(x, y, z, t) \end{pmatrix},$$

каждой из которых соответствует одно из возможных значений переменной  $\sigma$ . Очевидно, что  $|\psi_+|^2$  определяет вероятность обнаружить в данном месте электрон со спином, параллельным выбранному направлению. С другой стороны,  $|\psi_-|^2$  дает вероятность противоположного направления спина.

Теперь возникает вопрос: как должны мы проводить вычисления с такими функциями? Паули предложил для этого следующий метод. В волновой механике каждой физической величине соответствует оператор, действующий на волновую функцию. В качестве таких операторов можно взять дифференциальные операторы, как это делается в теории Шредингера [например, оператор компоненты импульса есть  $p_x = (\hbar/2\pi i)(\partial/\partial x)$ ], или матрицы, как в теории Гейзенберга. Можно воспользоваться и другими подобными математическими образами. Итак, естественно поставить подходящие операторы в соответствие компонентам  $s_x$ ,  $s_y$ ,  $s_z$  спинового момента (измеренного в единицах  $1/2\hbar/2\pi$ ). Но эти операторы действуют не на координаты

$x, y, z, t$ , а на переменную  $\sigma$ , принимающую два значения. Под этим подразумевается, что применение таких операторов либо меняет значение  $\sigma$ , либо оставляет его неизменным. В то же время сама волновая функция может оказаться умноженной на число. Удобнее всего считать эти операторы «линейными преобразованиями» (матрицами). Обычно мы используем для них выражения (матрицы Паули).

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Пусть в общем случае

$$a = \begin{pmatrix} a_{++} & a_{+-} \\ a_{-+} & a_{--} \end{pmatrix}$$

будет такой матрицей. Тогда действие  $a$  на двухкомпонентный вектор  $\psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$  дает новый вектор по следующему правилу:

$$a\psi = \begin{pmatrix} a_{++} & a_{+-} \\ a_{-+} & a_{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{++}\psi_+ + a_{+-}\psi_- \\ a_{-+}\psi_+ + a_{--}\psi_- \end{pmatrix}.$$

Таким образом, мы имеем:

$$\begin{aligned} s_x\psi &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_- \\ \psi_+ \end{pmatrix}, \\ s_y\psi &= \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\psi_- \\ -i\psi_+ \end{pmatrix}, \\ s_z\psi &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ -\psi_- \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Матрицы выбраны таким образом, что они подчиняются тем же перестановочным соотношениям, что и обычные компоненты момента (гл. V, § 5). Кроме того, в этом случае  $z$ -направление является выделенным направлением, и именно вдоль него ориентирован спин, представленный пятой координатой. Действительно, матрица  $s_z$  диагональна, а ее собственные значения (диагональные элементы) равны  $+1, -1$ . Следовательно,  $z$ -компонента момента принимает одно из фиксированных значений, либо  $+1$ , либо  $-1$ . С другой стороны, матрицы  $s_x$  и  $s_y$  недиагональны. Поэтому значения  $s_x$  и  $s_y$  нельзя измерить одновременно с  $s_z$ , а можно определить лишь статистически.

Теперь пусть существует магнитное поле, параллельное оси  $z$ . Тогда, согласно § 2 настоящей главы, выражение для

магнитной энергии при заданной ориентации спина относительно направления поля имеет вид

$$E_{\text{магн}} = -2 \frac{e}{2mc} H \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} s \cos(s, H) = -\frac{eh}{4\pi mc} H s_z.$$

Множитель 2 возникает здесь вследствие аномального характера соотношения между магнитным и механическим моментами для спина по сравнению с аналогичным соотношением для орбитальных моментов. Эта аномалия, упомянутая на стр. 185, объяснена Томасом как следствие теории относительности. В выписанном уравнении  $s$  есть оператор полного спина, а  $s_z = s \cos(s, H)$  — его компонента в направлении поля.

Что касается самого волнового уравнения, то в отсутствие магнитного поля оно в точности аналогично уравнению Шредингера для рассматриваемой задачи

$$(W_0 - E)\psi = 0.$$

Здесь  $W_0$  — оператор полной энергии, состоящей из кинетической и потенциальной энергий. В случае одного электрона мы имеем

$$W_0 = \frac{1}{2m} \left( \frac{h}{2\pi i} \right)^2 \Delta + V.$$

Поскольку  $W_0$  не действует на спиновую переменную  $\sigma$ , волновое уравнение можно разделить на две компоненты:

$$(W_0 - E)\psi_+ = 0, \quad (W_0 - E)\psi_- = 0.$$

Это означает, что в отсутствие магнитного поля переходы между состояниями с двумя различными ориентациями спина запрещены, а электроны ведут себя так, как если бы они не имели магнитного момента.

Если же атом находится в однородном магнитном поле, направленном вдоль оси  $z$ , то к обычному оператору энергии  $W_0$  добавляется член, обусловленный полем; именно член  $-(eh/4\pi mc) H s_z$ . Волновое уравнение выглядит тогда как

$$\left( W_0 - \frac{eh}{4\pi mc} H s_z - E \right) \psi = 0.$$

Его также можно расщепить на два уравнения для двух отдельных функций. Именно, вспоминая вид оператора  $s_z$ , получаем

$$\begin{aligned} \left( W_0 - \frac{eh}{4\pi mc} H - E \right) \psi_+ &= 0, \\ \left( W_0 + \frac{eh}{4\pi mc} H - E \right) \psi_- &= 0. \end{aligned}$$

Отсюда видно, что магнитная энергия просто добавляется к обычной энергии или вычитается из нее, так что невозмущенный уровень  $E_0$  расщепляется магнитным полем на два уровня

$$E_0 + \frac{eh}{4\pi mc} H \quad \text{и} \quad E_0 - \frac{eh}{4\pi mc} H.$$

Эта двойная возможность в ориентации и служит причиной появления дублетов в спектрах одноэлектронных атомов.

Здесь мы не будем касаться дальнейшего развития теории Паули. Отметим только, что она вполне удовлетворительна, по крайней мере до тех пор, пока скорости электрона не слишком велики. Отметим, однако, что эта теория никак не может претендовать на объяснение существования спина, поскольку, когда она создавалась, такие экспериментальные факты, как двойная возможность ориентации спина и отношение механического и магнитного моментов, были просто внесены в нее извне.

Существенный успех в этом направлении был достигнут релятивистской волновой теорией спина (Дирак, 1928 г.). Дирак преследовал цель получить волновое уравнение, которое удовлетворяло бы принципу относительности Эйнштейна. Согласно этому принципу, пространственные координаты  $x$ ,  $y$ ,  $z$  и время  $t$  (умноженное на  $c\sqrt{-1}$ , где  $c$  — скорость света) считаются совершенно равноправными. Но дифференциальное уравнение Шредингера (гл. V, § 4) не симметрично по четырем координатам; оно второго порядка по пространственным производным, но содержит лишь первую производную по времени. Дирак же вывел волновое уравнение, удовлетворяющее релятивистскому требованию симметрии, — уравнение первого порядка по всем четырем переменным. Хотя мы и не можем детально обсуждать эту теорию, мы должны особо подчеркнуть, что в ней из весьма общих принципов и без каких-либо специальных предположений о спине выводятся все те свойства электрона, которые в совокупности именуются его спином (в частности, правильное отношение механического момента к магнитному)<sup>1)</sup>. По своим результатам эта теория во многом эквивалентна теории Паули, но область ее применения значительно шире, чем теории Паули,

<sup>1)</sup> При выводе своего знаменитого уравнения Дирак действительно считал, что он совершает единственно разумное обобщение уравнения Шредингера на релятивистский случай и что, следовательно, существование и величина спина электрона следуют из общих принципов без дополнительных допущений. В дальнейшем выяснилось, однако, что возможны релятивистские уравнения для частиц с любым — целым или полуцелым — значением спина. Частицы с нулевым спином ( $\pi$ - и  $K$ -мезоны) уже давно наблюдаются на опыте. Поэтому с современной точки зрения электрон подчиняется уравнению Дирака, а не какому-либо другому, потому, что его спин равен половине (в единицах  $\hbar/2\pi$ ). — Прим. ред.

особенно в отношении быстрых электронов. Основное различие между теориями заключается в том, что теория Дирака оперирует четырехкомпонентной волновой функцией вместо двухкомпонентной функции ( $\psi_+$ ,  $\psi_-$ ) Паули. Поэтому, кроме двух ориентаций спина, состояние электрона должно характеризоваться двумя возможными значениями еще некоторой другой величины. Что это может быть за величина?

Соотношение, связывающее в теории относительности энергию и компоненты импульса, квадратично по всем этим величинам. Оно имеет вид (приложение 5)

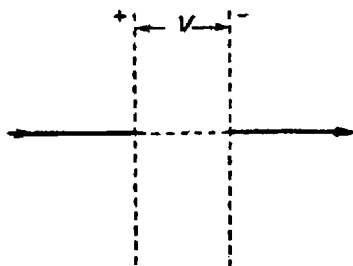
$$E^2 = p^2 c^2 + m_0 c^4.$$

Следовательно, данному импульсу  $p$  всегда соответствуют два значения энергии  $+E$  и  $-E$ . Именно этот двойной знак энергии, и заставляет нас пользоваться 4-компонентной  $\psi$ -функцией в волновом уравнении Дирака. Но каков смысл отрицательных значений энергии для свободной частицы? Необычность и странность понятия отрицательной энергии очевидны, поскольку в классической (неквантовой) механике энергию всегда можно считать положительной. Тривиальное в нерелятивистском случае, так как кинетическая энергия пропорциональна квадрату скорости, это утверждение сохраняет силу и для релятивистской механики. Действительно, с наименьшим значением  $p$ , а именно с  $p=0$ , мы связываем энергию  $E_0 = +m_0 c^2$ ; но  $p$  и  $E$  меняются непрерывно, поэтому всем значениям  $p > 0$  соответствуют энергии  $E > m_0 c^2 > 0$ . Иначе выглядит ситуация в квантовой механике, в которой изменение состояния может быть скачкообразным. Но что тогда может помешать энергии  $E$  понизиться в некотором процессе более чем на  $2m_0 c^2$ , так что энергия, перескочив через запрещенную область значений от  $-m_0 c^2$  до  $+m_0 c^2$ , попадет в отрицательную область  $E < -m_0 c^2$ ? Простой пример такого процесса предложил Клейн; он назван парадоксом Клейна. Пусть электрон вынужден лететь через две расположенные одна за другой проволочные сетки, к которым приложено встречное поле (фиг. 69). В полете электрон теряет часть своей кинетической энергии. С увеличением тормозящего потенциала потеря энергии становится больше и больше, и наконец электрон, не способный более проходить сквозь сетки, будет отражаться. С классической точки зрения до сих пор все было в порядке. Но теория Дирака показывает, что если и дальше увеличивать тормозящее поле, то электрон снова получит возможность пролететь сквозь сетки, если только разность потенциалов между ними станет больше удвоенной энергии покоя электрона  $2m_0 c^2$ . Однако в этом случае электрон выйдет из поля, имея отрицательную энергию. Вычислив вероятность

прохождения сквозь такое встречное поле, мы обнаруживаем, что она увеличивается с увеличением напряженности поля между сетками, но что для всех электростатических полей, какие можно получить в лабораторных условиях, такая вероятность исчезающе мала. Хотя это обстоятельство и успокаивает, снимая опасения за применимость теории Дирака к обычным задачам, сама возможность переходов в состояния с отрицательной энергией остается. Ведь в атомных процессах, несомненно, встречаются огромные градиенты потенциала, достаточные, чтобы обеспечить такие переходы. Поэтому возникает вопрос: что же означают состояния с отрицательной энергией на языке эксперимента?

Фиг. 69. Иллюстрация парадокса Клейна.

По релятивистской волновой механике Дирака электрон может преодолеть задерживающее поле, если разность потенциалов превосходит удвоенную свободную энергию электрона  $m_0c^2$ .



Дирак ответил на этот вопрос, проведя следующие смелые рассуждения.

В формальной теории состояния с положительной и отрицательной энергиями совершенно равноправны. Однако это равноправие не проявляется в природе; все обычные процессы движения проходят в области положительной энергии. Для объяснения этого факта Дирак предположил, что обычно все состояния с отрицательной энергией заняты отрицательными электронами, но эти электроны никак не обнаруживают себя на эксперименте. Поэтому мы должны считать, что электроны со всеми возможными (отрицательными) энергиями постоянно окружают нас со всех сторон, но мы их вообще не замечаем. Конечно, это означает изменение обычных законов электродинамики: порождать поле могут только электроны с положительной энергией. Электромагнитное поле, скажем, поглотившись в атоме, может вырвать электрон из этого электронного моря, простирающегося от  $-\infty$  до уровня  $-m_0c^2$ , и перевести его в область энергий  $E > m_0c^2$ . Тогда-то он и становится обычным электроном и порождает электромагнитное поле в соответствии с обычными законами. Однако после него в море отрицательных энергетических состояний остается пустое место — дырка. Ясно, что она обладает всеми свойствами положительного

заряда. Формулы Дирака показывают, что эта дырка среди обычных отрицательных электронов с отрицательными энергиями ведет себя в точности, как положительный электрон с положительной энергией. Теперь парадокс Клейна можно легко разрешить, применив принцип запрета Паули, согласно которому каждое состояние (определяемое полным набором квантовых чисел) может быть занято только одним электроном. Состояние с отрицательной энергией, в которое переходил бы электрон, пролетев через тормозящее поле, уже занято другим электроном; поэтому процесс невозможен.

Первоначально Дирак считал, что дырки соответствуют протонам, хотя он и сознавал трудность, связанную с разницей в массах. Но когда Андерсон обнаружил первые указания на существование позитронов (гл. II, § 7), Дирак сразу же увидел в этом подтверждение своей теории и, предсказав ряд явлений, принял участие в разработке направления экспериментальных исследований.

Наиболее важное следствие теории состоит в том, что при поглощении энергичных световых квантов возможно рождение пары электрон + позитрон, и наоборот, две такие частицы могут объединиться, порождая пару световых квантов. Электрон и позитрон могут также в течение короткого времени перед аннигиляцией находиться в метастабильном связанном состоянии. Это состояние, называемое *позитронием*, подобно атому водорода, но роль протона в нем играет позитрон. Вычисление вероятности таких процессов проводится обычными методами волновой механики, поскольку, согласно Дираку, первый процесс состоит на деле в том, что электрон поднимается из состояния с отрицательной энергией, а во втором он падает с высшего состояния в дырку. В настоящее время оба процесса уверенно демонстрируются на опыте. С первым из них мы встречаемся в ливнях, образуемых космическими лучами (гл. II, § 7); кроме того, при облучении легких элементов  $\gamma$ -квантами наблюдались случаи появления положительных и отрицательных электронов, которые также можно отнести к такому процессу рождения пары. В обратном процессе — процесс нейтрализации двух электронов противоположного знака освобождается энергия  $2m_0c^2 = 10^6$  эв (если пренебречь кинетической энергией электронов). Но должен сохраняться и импульс, а это запрещает испускание одного светового кванта, который, конечно, обладает определенным импульсом  $m_0c^2/c = m_0c$ . Поэтому возможны два случая: либо в пустом пространстве возникают два световых кванта, каждый с энергией  $m_0c^2 = 1/2 \cdot 10^6$  эв, либо соседняя частица принимает на себя остаток импульса. Если ею будет электрон, то он унесет треть энергии  $2m_0c^2$ , так что световому кванту ос-

танется  $\frac{4}{3}m_0c^2 = 680\,000$  эв. Если же этой частицей будет ядро, то из-за своей огромной массы оно примет лишь очень небольшую энергию, и поэтому световой квант получит полностью свои  $2m_0c^2 = 10^6$  эв. В действительности при рассеянии  $\gamma$ -лучей на атомах, кроме обычного комптоновского рассеяния, испускаются монохроматические волны, одна из которых обладает энергией почти точно в полмиллиона электрон-вольт. По всей вероятности, она возникает при соединении электрона и позитрона, первоначально образовавшегося при поглощении  $\gamma$ -лучей (Грей и Тэррант, Жолио). Этот процесс был убедительно продемонстрирован Клемперером (1934 г.). Он вызвал искусственную радиоактивность у бора и углерода, бомбардируя их протонами и дейтронами (см. гл. III, § 5); эти вещества стали мощными источниками позитронов. Позитроны поглощались куском металла, помещенным между двумя полусферическими счетчиками  $\gamma$ -квантов (гл. II, § 4). При этом, как оказалось, оба счетчика одновременно регистрируют кванты, а частота таких совпадений намного превышает частоту любых возможных случайных совпадений. Таким образом, два световых кванта в один и тот же момент испускаются в противоположных направлениях. По поглощению же можно судить, что это как раз кванты с энергией в полмиллиона электрон-вольт. Два других процесса чрезвычайно редки (в согласии с теорией).

Недавние (1955—1956 гг.) открытия антипротона  $\bar{p}$  и антинейтрона  $\bar{n}^0$ , сделанные Чемберленом, Сегре, Виганом и Ипсилантисом, принесли с собой дальнейшее подтверждение основных идей теории Дирака. Эти частицы находятся в том же отношении к протону и нейтрону (соответственно), в каком позитрон — к электрону.

Несмотря на значительные успехи, дираковская теория дырок-позитронов все же далека от совершенства, поскольку в ней не учитывается должным образом взаимодействие большого числа электронов отрицательной энергии с полем излучения. Мы уже знаем (гл. IV, § 1), что, рассматривая взаимодействие электромагнитного излучения с атомами и электронами, излучение следует считать квантованным. Формально можно применить хорошо разработанную схему квантования таких волновых полей — процедуру «вторичного квантования». Далее, из соображений симметрии следовало бы ожидать, что волновое поле Дирака также должно быть квантованным. Действительно, это квантование можно провести подобным же образом. В результате мы получаем теорию, в которой физическая система состоит из ансамбля электронов и позитронов с положительными энергиями, взаимодействующих с ансамблем фотонов. При этом в теории допускается возможность рождения или аннигиляции



любого члена системы. Но здесь возникают новые трудности. Одна из них связана с тем, что собственная энергия электрона, обусловленная его взаимодействием с полем излучения, бесконечна. Другая — с явлением, обычно называемым поляризацией вакуума: даже если в действительности не образуется электрон-позитронных пар, виртуальное существование таких состояний приводит к реальным физическим следствиям, именно к появлению распределения плотности заряда в вакууме, как если бы вакуум обладал диэлектрической поляризуемостью. Математические выражения для этих величин часто приводят к бесконечностям.

Однако оказалось возможным ликвидировать эти бесконечности, пользуясь техникой перенормировок массы и заряда (Бете, 1947 г.; Крамерс, 1948 г.; Тати и Томонага, 1948 г.; Швингер, 1948 г.; Дайсон, 1949 г.). Например, эффект взаимодействия электрона с полем излучения состоит в том, что появляется добавочная энергия, пропорциональная кинетической энергии электрона, причем коэффициент пропорциональности имеет вид логарифмически расходящегося интеграла. Но эта добавочная энергия могла бы быть обусловлена и увеличением массы покоя электрона с  $m$  до  $m + \delta m$ , где  $\delta m$  и содержит расходящийся интеграл. Поскольку, однако, всякий электрон непременно взаимодействует с полем излучения, его наблюдаемая масса покоя равна именно  $m + \delta m$ , так что величина  $m + \delta m$  должна с *самого начала* использоваться в теории. Поэтому в современной теории мы должны компенсировать это увеличение массы, вычитая добавки к кинетической энергии, обусловленные  $\delta m$ . Это как раз и приведет к сокращению бесконечной части собственной энергии электрона. Такой процесс, известный как *перенормировка массы*, удаляет бесконечности, появляющиеся в теории в результате учета взаимодействия с излучением. Остающиеся бесконечности, связанные с поляризацией вакуума, можно ликвидировать с помощью аналогичного процесса, называемого *перенормировкой заряда*. В этом случае возникающие бесконечности эквивалентны изменению заряда электрона на  $\delta e$ , причем  $\delta e$  представляет собой заряд, индуцированный в вакууме, и включает все расходящиеся интегралы. Поскольку, однако, вакуум всегда присутствует, наблюдаемый заряд всегда равен  $e + \delta e$ . Как и в перенормировке массы, для компенсации этого необходимо вычесть члены, обусловленные  $\delta e$ , что снова в точности компенсирует пресловутые бесконечности.

Итак, хотя главная непреодоленная трудность теории заключается в непременном появлении бесконечных величин, процесс перенормировки обеспечивает возможность однозначно ликвидировать их.

### § 9. Плотность электронного облака

Вернемся теперь к проблеме, рассматривавшейся в § 6 настоящей главы. Обсудим, как можно осуществить экспериментальное исследование плотности вероятности  $|\psi|^2$  электронного облака при помощи измерения интенсивности рентгеновских лучей и электронов, рассеянных в веществе.

Мы видели (гл. III, § 2; приложение 8), что обычный свет рассеивается на свободных электронах. Как известно, падающий луч интенсивности  $I_0$  вызывает излучение, интенсивность  $I_f$  которого в точке, удаленной на расстоянии  $r$  от рассеивателя и лежащей на линии, образующей угол  $\theta$  с направлением падающего луча, равна

$$I_f(\theta) = I_0 \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta}{r^2}.$$

Если же электроны не свободны, а связаны в атоме, это выражение оказывается неверным, и его необходимо умножить на коэффициент, зависящий от плотности электронного облака. Вычисление (проведенное в приложении 14) дает

$$I(\theta) = |F(\theta)|^2 I_f(\theta),$$

где

$$F(\theta) = 4\pi \int_0^{\infty} r^2 |\psi(r)|^2 \frac{\sin Kr}{Kr} dr.$$

$F(\theta)$  называют *атомным формфактором*. Фигурирующая в нем величина  $K$  зависит от угла  $\theta$  между направлением падающего луча и направлением наблюдения:

$$K = 2k \sin \frac{1}{2} \theta,$$

где  $k = 2\pi/\lambda$  — волновое число (число волн на  $2\pi$  см).

Наблюдения  $F(\theta)$  для всех углов отклонения  $\theta$  дают возможность определить  $|\psi(r)|^2$ , для чего необходимо решить приведенное выше интегральное уравнение. Хотя математически сделать это просто — требуется лишь обратить обычный интеграл Фурье, — практическое осуществление этой операции чрезвычайно сложно. Дело в том, что мы вынуждены изучать не отдельные атомы, а совокупности огромных количеств их в газах, жидкостях или твердых телах. Структура среды приводит к образованию интерференционных картин, накладывающихся на картины, связанные с формфактором. В газах и жидкостях, атомы которых расположены беспорядочно, мы получаем кольца уменьшающейся интенсивности вокруг падающего луча. Вид колец в основном зависит от среднего расстояния

между атомами. В твердых кристаллах получают хорошо известные интерференционные картины Лауэ — Брегга. Формфактор модифицирует распределение интенсивностей в этих эффектах, но не он один влияет на него. Имеются чисто геометрические факторы, такие, как ширина и удаленность используемых щелей, температурный эффект, связанный с тепловым движением атомов, влияние неидеальности кристалла и т. д. Поэтому не так легко отделить эффект формфактора от действия всех остальных причин, определяющих наблюдаемую интенсивность.

В случае рассеяния электронов с достаточно большими скоростями мы получаем следующее выражение для числа частиц, отклоненных на угол  $\theta$  в единице телесного угла (приложение 24), называемого *дифференциальным сечением*:

$$Q(\theta) = |f(\theta)|^2,$$

где

$$f(\theta) = \frac{e^2}{2mv^2} \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta} \{Z - F(\theta)\};$$

это сводится к формуле Резерфорда (гл. III, § 3; приложения 9 и 20), если пренебречь членом  $F(\theta)$ . Следовательно, *формфактор*  $F(\theta)$  описывает экранирование заряда ядра электронным облаком.

Практическое применение этой формулы наталкивается на те же трудности, что и в случае рентгеновских лучей. Трудности связаны с коллективным воздействием многих атомов, расположенных беспорядочно или в определенном порядке, а также со всеми другими эффектами, упомянутыми выше. Кроме того, формула рассеяния справедлива только для быстрых электронов, а рассеяние медленных электронов требует применения более тонких методов расчета.

Все эти обстоятельства указывают на желательность теоретического определения формфактора. Такая задача эквивалентна вычислению  $|\psi|^2$  теоретическим путем.

Простейший метод, предложенный независимо Томасом (1926 г.) и Ферми (1928 г.), состоит в полном пренебрежении характером состояний отдельных электронов и замене индивидуальных волновых функций статистическим средним. Как мы видели в § 2 гл. V, первоначальные квантовые условия Бора — Зоммерфельда можно интерпретировать следующим образом.

Пусть пара сопряженных величин, координата  $q$  и импульс  $p$ , представляют координаты точки в  $pq$ -плоскости. Тогда квантовое условие означает, что семейство кривых постоянной энергии  $H(p, q) = \text{const}$  разрезает плоскость таким образом, что все площади между соседними кривыми равны  $h$ . Если эти площади назвать ячейками, то можно сказать, что на каждую

ячейку приходится точно одно состояние. Квантовая механика подтверждает этот факт. Он следует из принципа неопределенности Гейзенберга, согласно которому  $\Delta p \Delta q \sim \hbar$  и который можно интерпретировать в том смысле, что разделение  $pq$ -плоскости на ячейки, меньшие  $\hbar$ , физически ничего не означает. Эти качественные аргументы можно сформулировать как строгое утверждение, рассмотрев детально возможные состояния свободной частицы, как это будет сделано позднее (гл. VIII, § 2). Переходя к движению в пространстве, мы получаем три координаты и три импульса. Поэтому вместо  $pq$ -плоскости имеется 6-мерное пространство, которое должно быть разделено на ячейки с 6-мерным объемом  $\hbar^3$ .

Будем теперь считать, что все электроны в атоме находятся в совершенно одинаковых условиях. В частности, каждый электрон подчиняется закону сохранения энергии; причем потенциальная энергия равна  $e\phi$ , где  $\phi$  — средний потенциал, создаваемый ядром и всеми остальными электронами.

Затем применим принцип Паули, утверждающий, что в каждом состоянии, т. е. в каждой ячейке объемом  $\hbar^3$ , может находиться только два электрона (а не один, поскольку возможны две ориентации спина). Если максимальный из появляющихся импульсов равен  $P$ , то в пространстве импульсов будет заполнен объем, ограниченный сферой радиуса  $P$  (с центром в точке  $P=0$ ) и равный поэтому  $\frac{4}{3}\pi P^3$ . Это выражение представляет собой объем в 6-мерном  $pq$ -пространстве, если объем в координатном пространстве принять за единицу. Умножив его на 2 и разделив на  $\hbar^3$ , мы получим число электронов в единице объема, обладающих импульсами меньше  $P$ . Произведение этого числа  $\frac{8}{3}\pi P^3/\hbar^3$  на заряд электрона  $e$  представляет собой плотность электронов с  $p < P$ :

$$\rho = -\frac{8\pi e}{3} \left(\frac{P}{\hbar}\right)^3.$$

Теперь и  $\rho$ , и  $P$  можно выразить через средний электростатический потенциал  $\phi$ .

Для  $\rho$  это сделать очень просто — возьмем уравнение Пуассона, которое в предположении, что и  $\rho$ , и  $\phi$  симметричны относительно ядра и зависят только от расстояния  $r$  до него, имеет вид

$$\Delta\phi = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\phi) = -4\pi\rho.$$

С другой стороны,  $P$  можно получить из закона сохранения энергии

$$\frac{p^2}{2m} - e\phi(r) = E,$$

учитывая, что в атоме связаны только те электроны, для которых работа, необходимая чтобы перенести их на «поверхность» атома, положительна. В случае атома водорода (гл. V, § 1) электрон только один, и, следовательно, такой поверхности нет; нуль энергии соответствует бесконечному расстоянию. Позднее будет видно, что то же самое справедливо для всех нейтральных атомов. Однако, чтобы включить в рассмотрение и ионы с суммарным зарядом  $ez$ , мы должны ввести поверхность, а именно сферу радиуса  $R$ , вне которой потенциал имеет кулоновский вид  $ez/r$ . Очевидно, этот потенциал не должен учитываться при подсчете работы, необходимой для удаления электрона. Принимая  $E=0$  для электрона на такой сфере, мы получим для максимального импульса выражение

$$P = [2me\phi(r)]^{1/2}.$$

для  $\phi$  — граничные условия

$$\phi(R) = 0, \quad \left(\frac{d\phi}{dr}\right)_R = \left[\frac{d}{dr}\left(\frac{ez}{r}\right)\right]_R = -\frac{ez}{R^2}.$$

Другое граничное условие мы найдем, заметив, что вблизи ядра вклад электронов в потенциал пренебрежимо мал, так что  $\phi(r) \rightarrow eZ/r$ , или

$$r\phi(r) \rightarrow eZ \quad \text{при } r \rightarrow 0.$$

Подставляя значение  $P$  в формулу для  $\rho$ , мы получаем

$$\rho = -\frac{8\pi}{3} \frac{e}{h^3} [2me\phi(r)]^{3/2}.$$

Умноженное на  $-4\pi$ , это выражение представляет собой правую часть уравнения Пуассона, которое теперь содержит только одну неизвестную функцию  $\phi(r)$ . От всех численных постоянных можно избавиться, введя новые единицы для длины и потенциала. Именно, введем

$$\begin{aligned} x &= \frac{r}{a}, & \Phi(x) &= \frac{1}{Ze} r\phi(r), \\ X &= \frac{R}{a}, & a &= a_1 \left(\frac{9\pi^2}{128Z}\right)^{1/3}, \end{aligned}$$

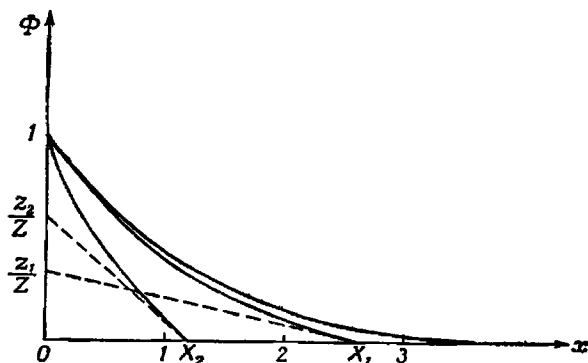
где  $a_1 = h^2/4\pi^2 me^2$  — радиус первой боровской орбиты для водорода (гл. V, § 1). Если подставить все это в наше дифференциальное уравнение, то после элементарных вычислений оно приведет к виду

$$\frac{d^2}{dx^2} \Phi = \sqrt{\frac{\Phi^3}{x}}.$$

а граничные условия будут иметь вид

$$\Phi(0) = 1, \quad \Phi(X) = 0, \quad X \left[ \frac{d\Phi}{dx} \right]_X = -\frac{z}{Z}.$$

Следовательно, решение зависит только от отношения  $z/Z$  — ионного заряда всей системы к заряду ядра, так что различные ионы с одинаковым отношением  $z/Z$  обладают сходными распределениями, отличающимися только по масштабам для радиусов и потенциалов.



Фиг. 70. Кривые Томаса — Ферми для нейтрального атома (внешняя кривая) и для положительного иона при двух степенях ионизации (внутренние кривые).

Точки  $X_1, z_1$  соответствуют меньшей ионизации,  $X_2, z_2$  — большей ионизации.

В случае нейтрального атома ( $z=0$ ) граничными условиями будут  $\Phi=0$  и  $d\Phi/dx=0$  при  $x=X$ . Из дифференциального уравнения тогда следует, что  $d^2\Phi/dx^2=0$  при  $x=X$ , а после повторного дифференцирования — что все производные обращаются в нуль при  $x=X$ . Это возможно только при условии, что  $X=\infty$ , так как в противном случае  $\Phi(x)$  тождественно обращалась бы в нуль. Таким образом, по этой простой теории радиус нейтрального атома оказывается бесконечным (как и упоминалось выше).

Соответствующая кривая на графике (фиг. 70) самая верхняя; она столь быстро приближается к нулю, что теоретическая бесконечность радиуса на практике не играет роли. Эта кривая, а также другие, относящиеся к положительным ионам, были найдены Ферми путем численного решения уравнения. Его результаты были подтверждены на современной счетной машине — дифференциальном анализаторе (Буш и Колдуэлл, 1931 г.). Точки пересечения кривых с осью абсцисс, обозначенные через

$X_1, X_2$ , соответствуют радиусам положительных ионов, а касательные к кривым в этих точках пересекают ось ординат в точках  $z_1/Z, z_2/Z$ , соответствующих различным состояниям ионизации.

Конечно, такие кривые дают лишь грубую картину распределения электронов. Картина будет достаточно точной для внутренних областей тяжелых атомов, но она совершенно неверна для легких атомов, а также для внешних слоев всех атомов. Далее, трудно усмотреть непосредственно оболочечную структуру. Однако Ферми показал, что его простая модель содержит наиболее важную черту периодической системы, связанную с оболочечной структурой. Мы можем определить значение атомного номера  $Z$ , при котором квантовое число  $l$  механического момента  $m$  впервые принимает одно из значений  $0, 1, 2, 3, \dots$ , или, другими словами, при котором впервые появляются орбиты типа  $s, p, d, f, \dots$ . Для этого необходимо подсчитать количество тех точек внутри сферы радиуса  $P$  в пространстве импульсов, которые соответствуют данному значению момента. Оказывается, что для данного  $l$  таких точек может не оказаться, если  $Z$  меньше некоторой определенной величины. Таким образом обнаружено, что состояния  $s, p, d$  и  $f$  впервые должны появиться при  $Z=1, 5, 21$  и  $55$ , в то время как в действительности они появляются (см. табл. 5, стр. 206) у  $H1, B5, Sc21, Ce58$ . Согласно вполне удовлетворительное.

Явное выражение для атомного формфактора можно получить, подставив  $\rho = -e|\psi|^2$  в вышеприведенную общую формулу, а для  $\rho$  — взяв его выражение через  $\varphi(r)$  или  $\Phi(x)$ :

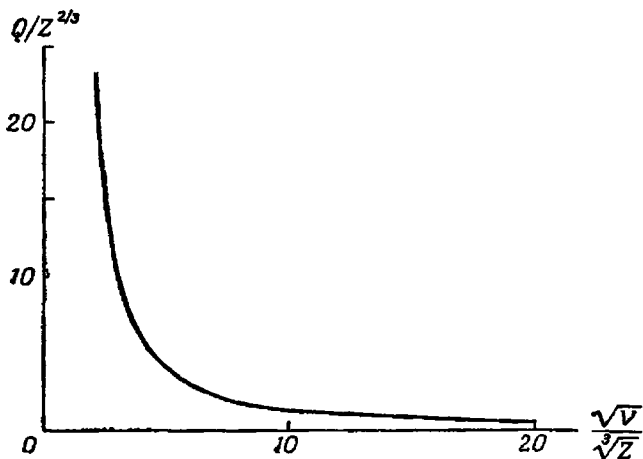
$$F(\theta) = Z \int_0^{\infty} x^{1/2} [\Phi(x)]^{3/2} \frac{\sin \sigma x}{\sigma x} dx, \quad \sigma = \frac{4\pi a}{\lambda} \sin \frac{1}{2} \theta,$$

где  $a$  — введенная выше характерная длина, пропорциональная  $Z^{-1/2}$ . Универсальная функция  $F(\theta)/Z$  может быть протабулирована как функция переменной  $\sigma$ , зависящей от отношения длины волн к атомному «радиусу»  $a$ .

Подобным же образом можно вычислить дифференциальное и полное сечения для столкновений электронов. Оказывается, что полное сечение  $Q$ , умноженное на  $Z^{-2/3}$ , является функцией только  $V^{1/2}Z^{-1/2}$ , где  $V$  — ускоряющий потенциал. График этой функции изображен на фиг. 71. Он дает представление о размерах препятствия, образуемого атомами с различными  $Z$  на пути пучка быстрых электронов.

Мы не учитывали возможность возбуждения атома. Теория этого эффекта может быть построена подобным же путем

(Борн, 1926 г.) и сразу приводит к объяснению опыта Франка и Герца (гл. IV, § 3). В этом опыте энергия, теряемая падающими электронами, передается электронам атома, поэтому мы



Ф и г. 71. Полное сечение  $Q$  для рассеяния электрона на атоме с атомным номером  $Z$  (без потери энергии на возбуждение, т. е. для «упругого столкновения»), вычисленное по модели Томаса — Ферми.

По оси абсцисс отложено  $V^{1/2}Z^{-1/2}$ , где  $V$  — ускоряющий потенциал в вольтах; по оси ординат —  $QZ^{-2/3}$  в единицах  $\text{ла}^2$ .

говорим о *неупругом рассеянии*. Сечение каждого из таких процессов можно выразить через потенциальную энергию взаимодействия с помощью приближения того же типа, которое использовалось для упругих столкновений (что справедливо для высоких скоростей). Конечно, при практических расчетах модель Томаса — Ферми бесполезна, поскольку она применима только к основному состоянию. Для получения приближенных волновых функций электронов атома практически нужно использовать более тонкие методы.

Очень мощный метод, называемый методом *самосогласованного поля*, был разработан Хартри (1928 г.). Для каждого электрона в отдельности решается уравнение Шредингера в потенциале, усредненном по всем другим электронам. Но потенциал зависит в свою очередь от движения самих электронов, так что задача может быть решена только методом проб и ошибок. Например, можно начать с потенциала Томаса — Ферми для группы электронов и определить движение остальных электронов в таком поле. Проделав это поочередно для каждого электрона,



мы можем вычислить исправленный средний потенциал. Такая процедура повторяется до тех пор, пока результат не окажется самосогласованным, т. е. пока дальнейшие повторения не перестанут вносить изменения. Фок (1934 г.) показал, как при этом можно учесть неразличимость электронов и принцип Паули.

В этом направлении была проделана громадная вычислительная работа, и теперь для многих атомов имеются таблицы волновых функций электронов в данных оболочках ( $K, L, \dots$ ). Их можно использовать для вычисления формфакторов, сечений рассеяния и других наблюдаемых величин.

# VII

## ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

### § 1. Размеры ядра и $\alpha$ -распад

Основные факты относительно атомных ядер уже были изложены в гл. III и многократно использовались в последующих главах книги. Сейчас наша задача состоит в том, чтобы разобраться, в какой степени современная квантовая механика способна объяснить эти элементарные свойства и многие другие экспериментальные факты более сложного характера.

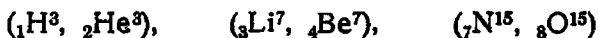
Простейшее свойство ядра — это его размер, который, как мы выяснили, имеет порядок  $10^{-13}$  см, т. е. тот же порядок, что и диаметр электрона. Уже само по себе это представляется достаточным, чтобы исключить мысль о том, что электроны могут в каком-либо геометрическом смысле входить в состав ядра; другие соображения также приводят к тому же выводу (гл. III, § 4; гл. VII, § 2). Возникает естественный вопрос: можно ли получить более подробные сведения о «радиусах» различных ядер?

Если бы мы были вправе считать, что ядра подчиняются законам классической механики и что они представляют собой твердые шарики, то эффективные сечения, которые можно определить из опытов по рассеянию (это описано в гл. III, § 3), совпали бы с геометрическими поперечными сечениями  $\pi R^2$ , где  $R$  — радиус ядра. Вообще говоря, ни то, ни другое предположение не соответствует истине. Однако все-таки можно считать, что приближенно они выполняются, если в роли рассеивающихся частиц выступают быстрые нейтроны. Действительно, для незаряженных частиц существуют лишь короткодействующие силы, а при больших скоростях дебройлевская длина волны  $\lambda$  мала в сравнении с радиусом ядра  $R$ , так что обычная механика должна оказаться хорошим приближением.

Таким образом, было обнаружено, что радиус тяжелых элементов, таких, как Рb или U, составляет  $10^{-12}$  см, а элементы средней части периодической системы обладают заметно меньшим радиусом,  $6 \cdot 10^{-13}$  см.

Другой метод оценки ядерного радиуса основан на рассмотрении пар таких ядер, которые отличаются друг от друга

только заменой нейтрона на протон — так называемых «зеркальных» ядер. Таковы, например,



и многие другие пары. Оказывается, что энергии связи ядер-компаньонов различны и что ядро с большим зарядом обладает большей энергией. Можно считать, что короткодействующие ядерные силы (гл. II, § 8) одинаковы для любой пары нуклонов (протонов и нейтронов). Поэтому разницу в энергиях связи между двумя зеркальными ядрами следует полностью отнести за счет электростатической энергии, обязанной лишнему протону. Эта энергия равна  $W = e^2 Z^2 / R$  (см. приложение 29).

Сравнивая это выражение с наблюдаемой величиной  $W$  (которая вычисляется по дефекту масс), мы получаем численное значение  $R$ . Оно подчиняется эмпирической формуле

$$R = 1,5 \cdot 10^{-13} A^{1/2} \text{ см.},$$

где  $A$  — массовый номер (т. е. ближайшее к атомному весу целое число, см. гл. III, § 4) или, иначе говоря, полное число нуклонов. Более тонкий анализ проблемы, учитывающий обменные эффекты и отличия в распределении плотности от модели однородного шара, приводит, однако, к другому выражению,

$$R = (1,3 \pm 0,1) \cdot 10^{-13} A^{1/2} \text{ см.}$$

Это, меньшее значение подтверждено недавними экспериментами (Хоффштайтер, 1953 г.) по кулоновскому рассеянию высокоэнергичных электронов на ядрах. Оказалось, что такие эксперименты можно удовлетворительно интерпретировать, только предположив, что в ядре существует область уменьшения плотности, лежащая вблизи поверхности и имеющая толщину порядка  $R/3$ , где  $R$  теперь дается соотношением

$$R \approx 1,2 \cdot 10^{-13} A^{1/2} \text{ см.}$$

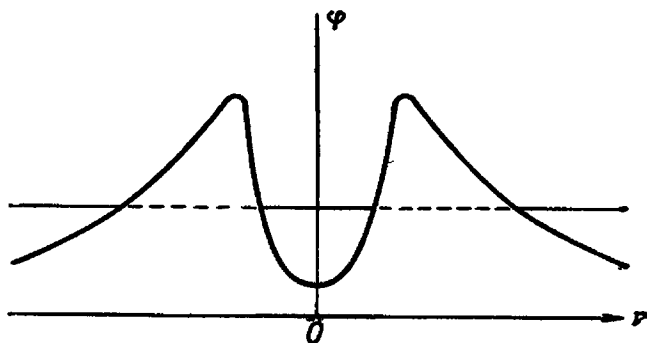
Близкое значение  $R$  получается также из рассмотрения свойств  $\mu$ -мезоатомов (т. е. атомов, в которых связанные электроны замещены  $\mu$ -мезонами). Если последнюю формулу переписать в виде  $4\pi R^3 / 3A = \text{const}$ , то станет ясно видно, что на долю каждого нуклона приходится приблизительно один и тот же объем; этот очень разумный результат подтверждает исходное предположение о силах взаимодействия между нуклонами. Кроме того, формула хорошо согласуется с результатами уже упоминавшихся опытов по рассеянию нейтронов, а если ее экстраполировать на большие атомные номера, то и с другим методом, применимым к радиоактивным ядрам.

В этом методе мы сталкиваемся с самым фундаментальным приложением квантовой механики к ядрам — с объяснением радиоактивного распада. Как мы уже говорили, существуют два различных вида естественных распадов:  $\alpha$ -распад и  $\beta$ -распад. Здесь мы рассмотрим только излучение  $\alpha$ -частиц, отложив  $\beta$ -распад на следующие параграфы.

Важный количественный закон для  $\alpha$ -распада был экспериментально открыт Гейгером и Нутталом в 1911 г.; он устанавливает связь между скоростью  $\alpha$ -частицы  $v$  и временем жизни радиоактивного ядра  $T$ . Именно, закон Гейгера — Нуттала гласит

$$\ln T = A + B \ln v,$$

где  $A$  и  $B$  — константы.



Фиг. 72. Кратерообразный потенциал силового поля, удерживающего  $\alpha$ -частицу внутри ядра.

Теоретическое объяснение, которое было дано независимо Гамовым и Кондоном и Гюри в 1928 г., основывается на глубоком отличии квантовой механики от классической, отличии, которое играет важную роль и в других случаях (например, для эффекта холодной эмиссии электронов). Чтобы получить динамическую картину связи  $\alpha$ -частицы с другими частями ядра, нужно вообразить себе некоторое силовое поле, которое могло бы удержать ее внутри ядра, так что его потенциал должен был бы иметь форму, напоминающую кратер (фиг. 72). Форма внешних стенок кратера нам известна: из экспериментов по рассеянию следует, что закон Кулона выполняется вплоть до очень малых расстояний (гл. III, § 3) — для урана, например, вплоть до расстояний, меньших чем  $r_0 = 3 \cdot 10^{-12}$  см. Вершина кратера поэтому наверняка выше, чем  $2e^2(Z-2)/r_0$  (вспомним, что  $\alpha$ -частица несет двойной заряд). Для  $Z \sim 90$  это составляет  $14 \cdot 10^{-6}$  эрг. Но энергия излучаемых  $\alpha$ -частиц не достигает и

половины этой величины. Поэтому, если первоначально  $\alpha$ -частица находится внутри кратера, то по законам обычной механики она никогда и не смогла бы выйти наружу.

Иначе обстоит дело в квантовой механике. Движение частицы внутри кратера в этом случае соответствует волновому процессу, или лучше сказать — стоячей волне. Рассмотрим оптическую аналогию: полное отражение светового луча, прошедшего сквозь стекло и встретившего на своем пути плоскую поверхность, разделяющую стекло и воздух и образующую острый угол с первоначальным направлением луча. В согласии с волновой теорией, при этом и в воздухе возникнут своего рода волновые возбуждения, правда, не уносящие энергии и проникающие в воздушное пространство лишь на расстояние порядка нескольких длин волн. Но если взять другую стеклянную пластинку и расположить ее параллельно первой настолько близко, что ее поверхность окажется в той области воздушной прослойки, где волновые возбуждения имеют еще заметную интенсивность, то сейчас же небольшое количество энергии начнет просачиваться во второе тело и возникнет продолжение — правда, очень слабое — исходного луча. Очевидно, по мере сближения пластинок интенсивность прошедшей сквозь воздушную прослойку волны будет быстро увеличиваться, и в пределе, когда пластинки придут в тесное соприкосновение, первоначальный луч будет пронизывать границу не изменяясь.

В волновой механике, рассматривая стенки кратера, мы встречаемся точно с таким же положением вещей. Если стенки имеют конечную высоту и ширину, то стоячие волны внутри кратера никоим образом не ограничены его размерами — в ослабленном виде они проникают сквозь стенки, превращаясь снаружи в расходящиеся волны. Но поскольку квадрат амплитуды волны  $|\psi|^2$  определяет вероятность обнаружить частицу, мы должны заключить, что прохождение частицы сквозь потенциальный барьер возможно и что число таких событий пропорционально  $|\psi|^2$ . Ясно, что квадрат амплитуды будет стремительно уменьшаться по мере увеличения толщины барьера; особенно существенна при этом его толщина на той высоте, которая соответствует энергии  $\alpha$ -частицы (см. фиг. 72). Поэтому у быстрых  $\alpha$ -частиц гораздо больше шансов покинуть ядро; это качественно соответствует закону Гейгера и Нуттала. Точный анализ (приложение 30) приводит к сравнительно сложной формуле аналогичного характера. При выводе этой формулы не нужны какие-либо специальные предположения о внутреннем устройстве энергетического кратера: фактически существенны только его радиус и высота. Для всех тяжелых радиоактивных ядер значение радиуса оказалось приблизительно равным  $8 \cdot 10^{-13}$  см. Именно

постоянство эффективного радиуса для этой группы ядер является причиной того, что в формуле Гейгера — Нуттала константы  $A$  и  $B$  фиксированы. «Прозрачность» потенциального барьера делает понятным также тот факт, что литий можно расщепить настолько медленными протонами (гл. III, § 6), что расстояние наибольшего сближения протона с ядром будет намного превышать радиус последнего. Протонная волна все-таки проникает в литий; поэтому протон может с какой-то вероятностью попасть внутрь ядра, которое при этом становится нестабильным и распадается на две  $\alpha$ -частицы.

Из этого примера видно, что предложенная Гамовым модель ядра оказывается полезной и при объяснении некоторых эффектов взаимодействия ядер с другими частицами. Однако, вообще говоря, модель слишком примитивна, чтобы описать все явления такого рода: эффекты бомбардировки ядер, упругого рассеяния, проникновения внутрь ядра с последующим распадом последнего — все зависят от энергии налетающей частицы и от природы ядра весьма сложным и специфическим образом.

Позднее мы еще вернемся к этим вопросам (гл. VII, § 9). Сейчас же подчеркнем только еще раз, что значение радиуса, полученное этим методом, составляет  $8 \cdot 10^{-13}$  см, а из формулы, выведенной для рассеяния электронов, следует, например, для радиуса ядра урана ( $A=238$ ) значение  $7,5 \cdot 10^{-13}$  см, что неплохо согласуется с предыдущим.

Можно сравнить с этой величиной дебройлевскую длину волны связанного нуклона в ядре. Для последней мы имели (гл. IV, § 6) выражение  $\lambda = h/\sqrt{2meV}$ , где  $m$  — масса рассматриваемых частиц, а  $eV$  — их энергия. Приравнявая эту энергию средней энергии связи частицы в ядре ( $8 \text{ Мэв}$ ), а  $m$  — массе нуклона, получаем  $\lambda = 9 \cdot 10^{-13}$  см, что вполне разумно, так как совпадает по порядку величины с диаметром ядра.

## § 2. Момент количества движения и магнитный момент

Другое простое свойство ядер — это их момент количества движения. Разумеется, заранее можно ожидать, что он подчиняется законам квантовой механики (гл. VI, § 5), и это предположение оказывается правильным.

Впервые оно было доказано в результате исследования сверхтонкой структуры спектральных линий. Уже давно было известно, что спектральные линии некоторых элементов, например ртути, на самом деле представляют собой целый набор очень тонких линий, что нельзя было объяснить, рассматривая только строение электронного облака атома. Систематические

исследования показали, что существуют два вида сверхтонкой структуры. В первом случае причиной расщепления линий служит присутствие в химическом элементе некоторого количества ядер-изотопов: небольшая разница в массах вызывает смещение спектральных линий, что для смеси изотопов и воспринимается как сверхтонкая структура. Второй случай гораздо важнее и связан с ориентацией ядра. Приходится считать, что ядро воздействует на внешние электроны не просто как точечный заряд. Силы взаимодействия зависят от квантового состояния ядра, точнее, от его момента, так что переход ядра из одного состояния в другое сказывается на полной энергии, которая поглощается или выделяется.

Квантовомеханическая трактовка явления очевидна. Ядерный момент количества движения  $I$  (в единицах  $h/2\pi$ ) и электронный момент количества движения  $J$  образуют в результате векторного сложения полный момент  $F$ . Поскольку каждое из этих квантовых чисел является либо целым, либо полуцелым, возникают различные комбинации спектральных линий, точно так же, как и в случае мультиплетов обычной тонкой структуры. Можно также призвать на помощь эффект Зеемана и выяснить, как изменяется сверхтонкая структура под действием магнитного поля. Для того чтобы найти значение  $I$ , достаточно просто подсчитать число линий сверхтонкой структуры.

Таким образом были определены величины  $I$  для многих ядер. Для других ядер момент  $I$  был вычислен другими методами, которые мы еще обсудим. Некоторые результаты представлены в табл. 6. У элементов с четным  $Z$  и четным  $A$  расщепление линий не наблюдается ( $I = 0$ ); по-видимому, в этом случае моменты нуклонов попарно нейтрализуются. Элементы с нечетным  $Z$  по большей части обладают полуцелым моментом; важным исключением является азот, для которого  $I = 1$ .

Из этих данных мы можем извлечь новые и наиболее убедительные аргументы в пользу отсутствия в ядре электронов. Рассмотрим, например, азот ( $Z=7$ ). Если бы ядро азота состояло из 14 протонов и 7 электронов, то полный момент этих частиц, каждая из которых имеет спин  $1/2$  и число которых нечетно, был бы с необходимостью полуцелым, в то время как на самом деле он равен единице. Наоборот, изотопы Cd, Hg и Pb с нечетным  $A$  должны были бы содержать нечетное число электронов (так как  $Z$  четное), и потому суммарное число частиц в ядре оказалось бы четным. Однако реально у них наблюдается полуцелый момент количества движения. С другой стороны, все эти факты полностью согласуются с гипотезой Гейзенберга о том, что ядра образованы из нейтронов и протонов, причем спин и тех и других равен  $1/2$ . Если считать, что ядро азота состоит из 7 протонов

Таблица 6

Значения механического момента  $I$ , магнитного момента  $\mu$   
и электрического квадрупольного момента  $q$  для некоторых ядер

$Z$	Ядро	$A$	$I$	$\mu$	$q, 10^{-24} \text{ см}^2$
0	$n$	1	1/2	-1,9125	0
1	H	1	1/2	2,7928	0
		D	2	1	0,8565
2	He	3	1/2	(-) 2,131	0
		4	0	0	
3	Li	6	1	0,821	
		7	3/2	3,2532	
4	Be	9	3/2	-1,176	
5	B	11	3/2	2,686	
6	C	12	0	0	
		13	1/2	0,701	0
7	N	14	1	0,403	
8	O	15	1/2	-0,280	0
9	F	16	0	0	
17	Cl	19	1/2	2,625	0
29	Cu	35	5/2	1,368	
		63	3/2	2,2265	-0,1
		65	3/2	2,3847	-0,1
		111	1/2	-0,65	0
48	Cd	113	1/2		
		110		0	
		112	0	0	
		114			
		116			
		151	5/2	3,6	1,2
63	Eu	153	5/2	1,6	2,5
70	Yb	173	5/2	-0,65	3,9
		199	1/2	0,5	0
		201	3/2	-0,6	0,5
		198			
80	Hg	200	0	0	
		202			
		204			
		207	1/2	0,6	0
82	Pb	204			
		206	0	0	
		208			
		209	9/2	3,6	-0,4



и 7 нейтронов, т. е. из 14 частиц, то полный момент его должен быть целым, как и свидетельствуют наблюдения. Так же обстоит дело и в случае Cd, Hg и Pb и во всех других случаях.

Существует и другой метод определения ядерного момента, использующий соотношения между интенсивностями в полосатых спектрах молекул (гл. IX, § 3), однако здесь мы не станем касаться этих проблем.

С вращением ядра связан также магнитный момент  $\mu$ . Напрашивается предположение, что именно момент  $\mu$ , порождая магнитное поле, приводит к деформации электронного облака атома, которая экспериментально проявляется как сверхтонкая структура: С этой точки зрения должна существовать возможность рассчитать смещение линий, зная  $\mu$ , и наоборот. Таким способом удалось определить с помощью сравнительно простого математического расчета значения  $\mu$  для многих ядер, хотя точность метода и не очень высока.

Наиболее важную роль играет магнитный момент протона. Естественно думать, что он окажется в 1840 раз меньше магнетона Бора. Это сразу же следует из соответствующей формулы после замены электронной массы  $m$  на массу протона  $M$ . Таким образом, ядерный магнетон равен

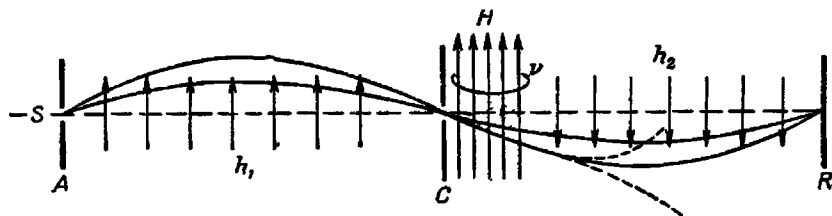
$$\frac{eh}{4\pi Mc}$$

В 1933 году Штерн исследовал эту проблему с помощью своего метода молекулярных пучков, усовершенствованного таким образом, что чувствительность прибора Штерна — Герлаха (гл. VI, § 8) повысилась соответственно требованию эксперимента в колоссальное число раз. Опыт привел к обескураживающему результату — магнитный момент протона оказался почти в три раза больше, чем ожидалось.

Раби и его сотрудники (начиная с 1936 г.) в значительной мере улучшили метод молекулярных пучков, комбинируя его с методом уже описанного нами магнитного резонанса (гл. VI, § 2; см. также резонансный метод в применении к тонкой структуре H-атома, гл. VI, § 3).

Идея состоит в том, чтобы воздействовать на ларморовскую прецессию ядра в магнитном поле посредством подобранной в резонанс электромагнитной волны. Для этого не нужен даже излучатель ультракоротких волн, так как по оптическим масштабам частоты ядерной прецессии в полях разумной интенсивности чрезвычайно малы и находятся в диапазоне легко доступных электромагнитных колебаний. Прибор (фиг. 73) создает два неоднородных магнитных поля, которые последовательно отклоняют молекулярный пучок в противоположных направлениях;

таким образом возникает своего рода фокусирующий эффект. Приблизительно в середине траектории пучка имеется также сильное постоянное магнитное поле, которое, собственно, и вызывает ларморовскую прецессию каждого ядра с частотой, зависящей от магнитного момента последнего. В этой же области сосредоточено переменное поле. Если оно приходит в резонанс с прецессией одного из ядер, то возникает интенсивное взаимодействие, сталкивающее частицу с ее нормальной траектории. Изменяя либо постоянное магнитное поле при заданной частоте переменного поля, либо, наоборот, частоту при заданном поле,



Фиг. 73. Схема опыта Раби.

Вылетающие из источника  $S$  атомы проходят сквозь входную щель  $A$  и отклоняются в неоднородном поле  $h_1$ . Двигаясь по различным траекториям (соответственно их скорости), они достигают щели коллиматора  $C$ , проходят через нее и затем отклоняются в противоположном направлении неоднородным полем  $h_2$ . Таким образом, пучок фокусируется и направляется к приемнику  $R$ . За коллиматором  $C$  на сильное магнитное поле  $H$  наложено переменное поле. Если частота последнего  $\nu$  попадает в резонанс с частотой ларморовской прецессии в поле  $H$ , то траектории атомов резко изменяются (пунктирные линии) и фокусировка нарушится.

можно выявить все возможные разновидности ларморовской прецессии ядер: каждая разновидность обнаруживает себя в резком падении интенсивности атомного пучка.

Таким способом можно с большой точностью определить число термов и расстояния между ними, т. е. ядерный механический момент  $I$  и магнитный момент  $\mu$ .

По отношению к протону измерения подтвердили результат Штерна; правильное значение оказалось равным 2,79 ядерного магнетона (Раби и сотрудники, 1939 г.). Поэтому удовлетворительную теорию протона нельзя получить, просто подставив другую массу в уравнение Дирака.

Альварецу и Блоху (1940 г.) удалось даже, используя мощное нейтронное излучение из циклотрона, измерить магнитный момент нейтрона. Поскольку большая проникающая способность нейтронов не позволяет применить метод отклонения узких пучков с помощью щели, Альварецу и Блоху пришлось довольствоваться более широким пучком, коллимированным кадмиевой трубой и защищенным от случайных нейтронов объемистыми кусками парафина. Вместо отклонения использовалась

«поляризация». Блох (1936 г.) обнаружил, что интенсивность нейтронного пучка, последовательно прошедшего две параллельные ферромагнитные пластины, зависит от угла между направлениями намагниченности пластин. Поэтому также пластины могут служить поляризатором и анализатором, точно так же, как призмы Николя в оптике. Если теперь в пространстве между пластиной-поляризатором и пластиной-анализатором совместить сильное постоянное магнитное поле со слабым переменным полем, то число прошедших нейтронов будет резко сокращаться в случаях, когда частота их ларморовской прецессии попадет в резонанс с переменным полем. Недавно был найден способ получать еще большую степень поляризации нейтронных пучков, основанный на отражении нейтронов от листа намагниченного кобальта.

Самые точные измерения (Арнольд и Робертс, 1946 г.) дали для магнитного момента нейтрона значение  $\mu = -1,91$ , где отрицательный знак указывает, что направления магнитного и механического моментов противоположны — наиболее интересный результат, свидетельствующий о безнадежности попыток объяснить свойства элементарных частиц на основе простых механических моделей.

Естественно думать, что магнитный момент дейтрона можно получить, складывая магнитные моменты протона и нейтрона; в самом деле, такая сумма  $2,79 + (-1,91) = 0,88$  хорошо согласуется с экспериментально найденным значением 0,86. Однако небольшое различие этих двух цифр все же существенно. Аддитивность моментов может иметь место лишь в том случае, когда орбитальное движение не дает вклада в магнитный момент. Незначительное отклонение от аддитивности указывает поэтому, что существует относительное орбитальное движение двух нуклонов, или, иначе говоря, что основное состояние дейтрона не может быть чистым  $s$ -состоянием ( $l=0$ ). Мы вернемся к этому вопросу немного ниже.

Ядерные моменты можно измерять также с помощью резонансных методов и на массивных образцах вещества; именно этими методами были реально получены наиболее точные значения магнитных моментов ядер. Перселл, Торри и Паунд (1946 г.) разработали метод, в котором поглощение энергий переменного магнитного поля ядрами, помещенными в постоянное магнитное поле напряженностью в несколько тысяч гаусс, позволяет найти частоты ларморовской прецессии, а стало быть, и ядерный  $g$ -фактор. Изучаемый образец окружается несколькими витками спирали, которая создает осциллирующее магнитное поле меньше чем в один гаусс, перпендикулярное постоянному полю. Либо частота переменного, либо напряжен-

ность  $H$  постоянного поля может при этом меняться (последнее, впрочем, удобнее). Резонансные частоты в этом случае определяются теми значениями  $H$ , для которых наблюдается наибольшее поглощение энергии осциллирующего поля.

В аналогичном методе Блоха, Хансена и Паккарда (1946 г.) резонанс фиксируется по максимальному сигналу в регистрирующем витке, расположенном перпендикулярно как постоянному, так и переменному полю.

Спин и магнитный момент служат простейшими указаниями на анизотропию ядерной структуры. Но существуют также и другие эффекты более высокого порядка, связанные с анизотропией. Это легко понять, рассмотрев электростатический потенциал  $\Phi$ , созданный произвольным распределением заряда на большом расстоянии  $r$ . В первом приближении  $\Phi$  окажется кулоновским потенциалом, пропорциональным  $1/r$ . Но появятся и члены высших порядков, пропорциональные  $1/r^2$ ,  $1/r^3$ , ..., так что для ядра с атомным номером  $Z$ , обладающего аксиальной симметрией, получится

$$\Phi(r, \theta) = \frac{e}{r} \left[ Z + \frac{p}{r} P_1(\cos \theta) + \frac{1}{2} \frac{q}{r^2} P_2(\cos \theta) + \dots \right],$$

где  $\theta$  — угол между радиус-вектором и направлением спина, а  $P_1, P_2, \dots$  — так называемые сферические функции (полиномы Лежандра). Коэффициенты  $p, q, \dots$  зависят от распределения заряда;  $p$  есть дипольный момент,  $q$  — квадрупольный момент. В качестве иллюстрации представим себе ядро как равномерно заряженный эллипсоид вращения, ось симметрии которого равна  $a$ , а другая ось —  $b$ . Тогда справедливо равенство

$$q = \frac{2}{5} Z (a^2 - b^2).$$

Действие квадрупольного момента ядра было действительно обнаружено; оно состоит в нарушении эквидистантности линий сверхтонкой структуры (Шулер и Шмидт, 1935 г.). Этот эффект можно объяснить, предположив, что в энергию взаимодействия, кроме членов, пропорциональных  $\mu \cos(I, J)$  (см. гл. VI, § 2), входят также и члены с  $\cos^2(I, J)$ . Разумеется, такие члены можно извлечь из приближений высшего порядка по магнитному моменту; при этом, однако, множитель при  $\cos^2(I, J)$  окажется пропорциональным  $\mu^2$ .

На изотопах элемента европия  $\text{Eu}^{151}$  и  $\text{Eu}^{153}$  были проведены соответствующие измерения  $\mu$  и множителя при квадратичном члене; выяснилось, что пропорциональность последнего удвоенной величине  $\mu^2$  не наблюдается. Возникшее расхождение можно объяснить влиянием квадрупольного момента. Непосредственное

определение  $q$  провел Раби (1939 г.) с помощью своего магнито-резонансного метода молекулярных пучков. Было получено значение  $q = 2,73 \cdot 10^{-27} \text{ см}^2$ . Оно свидетельствует об очень незначительной анизотропии. Действительно, из последней формулы мы получаем для малых  $(a-b)$  и  $Z=1$

$$\frac{a-b}{a} = \frac{5}{2} \frac{q}{2a^2} = \frac{3,41 \cdot 10^{-27}}{3^2 \cdot 10^{-26}} \sim 0,04,$$

где  $a$  положено приблизительно равным  $3 \cdot 10^{-23} \text{ см}$ . Несмотря на малость этой величины, ее существование оказывается, как мы сейчас увидим, решающим для теории ядерных сил.

### § 3. Дейтрон и ядерные силы

Теперь нам предстоит рассмотреть те свойства ядер, которые зависят от их структуры — от того, как именно построены ядра из нуклонов и с помощью каких сил.

Следует, пожалуй, сделать впрямь одно общее замечание. Тот факт, что мы берем на себя смелость говорить о структуре ядра, целиком основан на убежденности, что составными частями ядра являются тяжелые частицы, а не электроны или позитроны. Под действием ядерных сил легкие частицы двигались бы настолько быстро, что на первый план выступали бы релятивистские эффекты. Однако полностью удовлетворительная релятивистская квантовая механика сильно взаимодействующих частиц пока отсутствует — дираковская теория электрона (гл. VI, § 8) успешно применяется лишь для слабых взаимодействий. Что касается тяжелых частиц, то их скорости в ядре настолько незначительны, что нерелятивистская квантовая механика остается хорошим приближением. По ходу нашего изложения мы встретили новые аргументы в пользу того, что именно нуклоны являются составными частями ядра.

Простейшее составное ядро — это дейтрон, образованный из протона и нейтрона. Для начала примем самое простое из возможных предположений: будем считать, что между этими двумя частицами действуют центральные силы, обладающие потенциальной энергией  $V(r)$ . Тогда задача сводится к квантово-механической проблеме двух тел, которая аналогична проблеме водородного атома и только в двух пунктах существенно отличается от последней: массы частиц в нашем случае почти одинаковы, а радиус сил взаимодействия очень мал. Хотя волновое уравнение для относительного движения частиц останется тем же, что и в гл. V, § 7, решение будет выглядеть уже совершенно иначе. Вместо массы в уравнение нужно подставить приведенную массу  $M_n M_p / (M_n + M_p)$ , что очень близко к  $1/2 M$ , где  $M$  —

средняя масса нуклона. Мы уже упоминали о том, что из данных по рассеянию нейтронов на протонах можно заключить, что радиус сил взаимодействия мал по сравнению с дебройлевской длиной волны, соответствующей средней энергии нуклона. Поэтому конкретная зависимость потенциала  $V$  от расстояния не так уж существенна. Испробуем сначала потенциал  $V(r)$ , который приводит к очень простому решению, — потенциал, имеющий форму «сферической ямы»:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{при } r < a, \\ 0 & \text{при } r > a. \end{cases}$$

Полагая, что в основном состоянии орбитальный момент количества движения равен нулю ( $l=0$ ), получаем волновое уравнение для  $u(r) = r\psi(r)$  (приложение 31)

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{4\pi^2M}{h^2} [E - V(r)] u = 0.$$

Здесь множитель  $[E - V(r)]$  при втором члене постоянен в обеих областях изменения  $r$ : при  $r < a$  он совпадает с  $E + V_0$ , а при  $r > a$  — с  $E$ . Поэтому решение можно найти сразу же (приложение 31). Важный результат состоит в том, что ширина и глубина потенциальной ямы оказываются связанными друг с другом некоторым соотношением. Именно,

$$\operatorname{ctg} \left[ \frac{2\pi a}{h} \sqrt{M(V_0 - W)} \right] = -\sqrt{\frac{W}{V_0 - W}},$$

где  $W = -E$  есть энергия связи. Задавая разумную величину  $a$  и пользуясь экспериментальным значением  $W$ , можно определить глубину ямы  $V_0$ . Она оказывается равной  $V_0 = 21 \text{ Мэв}$ . Волновая функция, отвечающая «прямоугольному» потенциалу, почти не изменится и в том случае, если выбрать потенциалы другого типа:  $e^{-(\pi r)^2}$ ,  $e^{-\pi r}$  или, как это сделал Юкава,  $e^{-\pi r/r}$  (гл. II, § 8).

До сих пор мы вообще не принимали во внимание спин частиц. Вспомним теперь, что все нуклоны обладают спином  $1/2$ , в то время как полный механический момент дейтрона равен 1 (см. табл. 6, стр. 241). Это означает, что основное состояние дейтрона характеризуется параллельной ориентацией спинов нуклонов (т. е., если пользоваться спектроскопической терминологией, — это триплетное состояние). Далее, в § 2 этой главы мы отмечали, что основное состояние дейтрона не может быть чистым  $S$ -состоянием, а должно соответствовать некоторому орбитальному моменту количества движения (поскольку полный магнитный момент дейтрона не равен в точности сумме магнитных моментов нейтрона и протона и поскольку существует

квадрупольный момент). Отсюда следует, что силы взаимодействия нуклонов в дейтроне не могут быть центральными, так как в этом случае состояние с наименьшей энергией с необходимостью оказалось бы  $S$ -состоянием. Качественные черты поведения системы двух тел под действием нецентральных сил описаны в приложении 31. Здесь же достаточно отметить, что, подбирая в должной пропорции нецентральные и центральные силы, создающие потенциал вида «сферической ямы», можно дать количественную интерпретацию всех свойств основного состояния.

Два взаимодействующих нуклона могут находиться в самых различных состояниях (характеризуемых определенными квантовыми числами); пока мы узнали кое-что лишь об основном состоянии дейтрона, но возможны и другие его состояния. Каждый нуклон описывается спиновым квантовым числом  $\sigma = -1/2, +1/2$  (указывающим в единицах  $\hbar/2\pi$  проекцию спина на выделенное направление). Другое квантовое число  $\tau$  приходится ввести для описания зарядового состояния, причем  $\tau = -1$  соответствует нейтральному состоянию нуклона — нейтрону, а  $\tau = 1$  — заряженному состоянию — протону. Этот зарядовый оператор  $\tau$  можно представить  $2 \times 2$ -матрицей того же типа, что и спиновые матрицы Паули (гл. VI, § 8). Имеется далее квантовое число, определяющее орбитальный момент количества движения,  $l = 0, 1, 2, \dots$ . Возможны самые разнообразные комбинации этих квантовых чисел; они должны, однако, удовлетворять принципу запрета Паули, в согласии с которым волновая функция двух нуклонов должна быть антисимметричной относительно перестановки частиц. Если, например,  $\tau_1 = -1$  и  $\tau_2 = 1$ , а  $\sigma_1 = 1/2$  и  $\sigma_2 = 1/2$ , что соответствует системе протон — нейтрон с параллельной ориентацией спинов (как в основном состоянии дейтрона), то волновая функция будет антисимметрична по зарядам и симметрична по спинам. Следовательно, она должна быть симметричной по переменным, характеризующим орбитальное движение частиц, откуда можно вывести, что квантовое число  $l$  четно ( $l = 0, 2, \dots$ ). Таким образом можно построить следующую таблицу:

Спин	Заряд	$l$	Типичный терм
Триплет	Триплет	Нечетное	$^3P$
	Синглет	Четное	$^3S$
Синглет	Триплет	Четное	$^1S$
	Синглет	Нечетное	$^1P$

Нет никаких оснований думать, что ядерные силы одинаковым образом зависят от расстояния во всех этих различных состояниях. Даже когда потенциал имеет форму «ямы», глубина ее может все-таки варьироваться. Именно такое положение вещей и было обнаружено на экспериментах по рассеянию. Наблюдаемая величина эффективного сечения рассеяния медленных нейтронов на протонах составляет приблизительно  $20 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$ , тогда как теоретическое рассмотрение чисто триплетного основного состояния ( $^3S$ ) приводит к значению  $2,4 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$ . Это противоречие можно устранить, приняв во внимание синглетное взаимодействие. Это будет эквивалентно введению синглетного  $S$ -состояния ( $^1S$ ), которое не обязано быть реальным (виртуальное состояние с энергией на  $0,05 \text{ Мэв}$  выше уровня распада). Природа сил взаимодействия в  $P$ -состоянии, которые не так хорошо изучены, как силы в  $S$ -состоянии, может проясниться лишь на основе более детального экспериментального материала по высокоэнергетическому рассеянию ядер.

Те же самые силы, которые удерживают вместе два нуклона в дейтроне, должны отвечать и за сцепление частиц в других ядрах. Здесь появляется новая характерная особенность — так называемое «насыщение» ядерных сил, очень напоминающее хорошо известное свойство химической связи: два водородных атома, например, объединившись в молекулу, воздействуют на третий атом водорода уже с пренебрежимо малой силой.

Полная энергия связи ядра оказывается, грубо говоря, пропорциональной числу нуклонов  $A$ . Имеются, правда, играющие важную роль отклонения от этого правила, о которых мы узнаем позднее, но все-таки можно с приемлемой точностью говорить о средней энергии связи одной частицы. Часто утверждается, что именно этот факт указывает на «насыщающий» характер ядерных сил (которые в этом отношении подобны силам химической связи), т. е. на то, что нуклон взаимодействует лишь с небольшим числом своих соседей. Это утверждение базируется на предположении, что силы обычного характера приводят к пропорциональности полной энергии квадрату числа частиц, так что энергия связи ядра оказалась бы в этом случае пропорциональной  $A^2$ . Однако это суждение ошибочно, как можно видеть из классической теории обычных жидкостей или твердых тел. По этой теории полная энергия системы  $N$  частиц равна  $1/2 N\Phi$ , где  $\Phi$  есть работа выхода одной частицы — конечная величина, не зависящая от  $N$ , если  $N$  не чересчур мало. Насыщающий характер ядерных сил следует, однако, из свойств стабильности легких ядер. Нельзя беспредельно добавлять к дейтрону все новые и новые нейтроны; известна только одна



такая комбинация с одним добавочным нейтроном—тритон. Протон, таким образом, может образовывать связанные состояния не более чем с двумя нейтронами. Небольшое число изобаров и изотопов, т. е. небольшой диапазон изменения  $A$  и  $Z$ , внутри которого легкие ядра представляют собой устойчивые конфигурации, можно объяснить лишь на основе предположения, что каждый нуклон способен объединиться лишь с ограниченным числом других нуклонов. (В случае ядер с большими  $A$  можно, как мы увидим в § 5 этой главы, несколько более грубым образом объяснить размеры диапазона стабильности, основываясь на различии объемных и поверхностных сил.)

Вплоть до последних лет думали, что эффект насыщения допускает удовлетворительное описание в терминах обменных сил, действующих между нуклонами в ядре. Рассматривая такие силы, нужно заменить обычный потенциал  $V(r)$  на  $PV(r)$ , где  $P$ —оператор перестановки, который, действуя на собственную функцию  $\psi(1, 2)$  двух наборов переменных, переставляет в ней некоторые из переменных:  $P\psi(1, 2) = \psi(2, 1)$ . Существуют два независимых типа таких операторов, именно  $P_\sigma$  и  $P_\tau$ , переставляющие соответственно спины и заряды частиц. Третью возможную операцию — перестановку координат — нетрудно выразить в терминах операторов  $P_\sigma$  и  $P_\tau$ , поскольку применение всех трех операций равносильно полной перестановке двух частиц. В самом деле, по принципу Паули  $P_\tau P_\sigma P_\tau = -1$ , и так как  $P_\sigma^2 = P_\tau^2 = 1$ , то  $P_\tau = -P_\sigma P_\tau$ . В качестве  $P$  можно выбрать либо  $P_\tau$  (как предложил Гейзенберг в 1932 г.), либо  $P_\sigma$  (Барлетт, 1936 г.), либо, наконец,  $P_\sigma P_\tau$  (Майорана, 1933 г.). Центральный потенциал в самой общей форме представляет собой линейную комбинацию всех возможных членов, включая и обычный:

$$V_0(r) + P_\tau V_1(r) + P_\sigma V_2(r) + P_\sigma P_\tau V_3(r).$$

Подробный анализ показывает, что правильно подобранная комбинация этих членов приведет к насыщению.

В том, что обмен зарядами происходит в действительности, нетрудно убедиться с помощью камеры Вильсона (Лоуренс, 1948 г.). Пучок быстрых нейтронов в водороде (остающийся невидимым) приводит в результате центральных столкновений с протонами к появлению протонных треков. Естественно ожидать, что быстрый нейтрон, столкнувшись с протоном, отклонится на большой угол от первоначального направления (около 90 градусов), в то время как протон придет в движение параллельно нейтронному пучку. Однако на самом деле все происходит как раз наоборот: направления наблюдаемых треков, соответствующих движению протона, составляют значительные углы

с направлением пучка нейтронов. Таким образом, заряд как бы перепрыгивает с одной частицы на другую<sup>1)</sup>.

Недавние эксперименты по нуклон-нуклонному рассеянию указывают, однако, что хотя силы взаимодействия и в самом деле имеют обменный характер, смесь обычного потенциала с обменным оказывается все же такой, что сама по себе она не может привести к насыщению. На первый план выходит другое свойство ядерных сил. Именно, если на больших расстояниях между нуклонами действуют преимущественно силы притяжения, то при тесном сближении нуклонов (на расстоянии порядка  $0,5 \cdot 10^{-13}$  см) возникает резкое отталкивание — как если бы нуклоны обладали отталкивающимися друг от друга сердцевинами. Подробные расчеты показывают, что именно эти сердцевинки несут главную ответственность за эффект насыщения.

#### § 4. Структура ядра

Занимаясь структурой ядер, мы вынуждены иметь дело с системой  $Z$  протонов и  $N (= A - Z)$  нейтронов, взаимодействующих друг с другом посредством чрезвычайно запутанных и сложных ядерных сил. Современный математический аппарат не позволяет дать полное квантовомеханическое описание такой системы. Поэтому для того, чтобы теоретически объяснить более специфические свойства ядер, приходится строить различные

<sup>1)</sup> Автор несколько упрощает картину экспериментального наблюдения эффекта обмена зарядом. Дело в том, что наблюдая столкновения быстрых нейтронов с протонами в камере Вильсона, мы не можем одновременно определять параметр удара для каждого индивидуального столкновения и поэтому не можем выделить, в частности, и одни лишь центральные столкновения, дискуссией которых ограничивается автор. Наблюдению доступна лишь статистическая картина, возникающая при усреднении по всем значениям параметра удара. Поэтому, если бы рассеяние (без учета эффекта перезарядки) было сферически симметричным (в системе центра масс), то угловое распределение протонов, возникших при перезарядке рассеянных нейтронов, ничем не отличалось бы от углового распределения протонов отдачи. В таком случае (он реально осуществляется при энергиях падающих нейтронов меньше  $20 + 30$  Мэв) перезарядка не приводила бы ни к каким наблюдаемым следствиям. При больших энергиях, однако, можно, опираясь на разработанный автором этой книги метод приближенного анализа процессов рассеяния при высоких энергиях, утверждать, что рассеяние не должно быть сферически симметричным: угловое распределение рассеянных нейтронов должно (без учета эффекта перезарядки) иметь максимум в направлении вперед, а распределение протонов отдачи, следовательно, — максимум в направлении назад. По этой причине, когда на опыте был обнаружен не только пик в угловом распределении протонов, направленный назад, но и второй пик, в направлении вперед, можно было заключить, что этот второй пик образован теми протонами, которые возникли из рассеянных нейтронов в результате обмена зарядом. — *Прим. ред.*

модели, которые можно было бы считать некоторым грубым приближением к реальному физическому ядру. Такие модели напрашиваются сами собой, если принять во внимание хорошо известные свойства ядер и разнообразные полуклассические соображения.

Наиболее характерная особенность ядерных явлений, которая в значительной мере способствовала построению моделей, — это существование ядер, соответствующих так называемым «магическим числам». Обнаружено, что ядра, у которых либо  $Z$ , либо  $A - Z$ , либо оба эти числа равны 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, обладают рядом замечательных свойств. Например:

1) такие ядра гораздо чаще, чем другие, встречаются в космических лучах;

2) энергия связи оказывается наибольшей у ядер с магическими числами;

3) квадрупольный момент ядра как функция  $Z$  или  $A - Z$  меняет знак на магических числах.

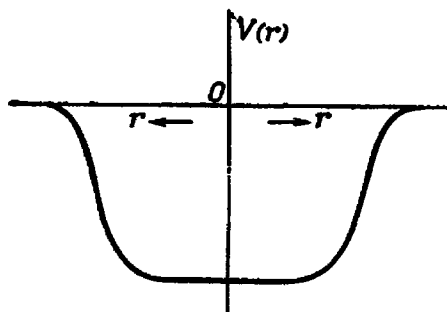
Существование особенно устойчивых ядер, характеризуемых определенным числом протонов и нейтронов, сразу же напоминает аналогичное положение вещей в случае атомов, когда некоторые атомы (инертных газов) также обнаруживают значительную стабильность. У атомов стабильность объясняется заполнением электронных оболочек. Это сейчас же наводит на мысль, что и в случае ядер магические числа могут указывать на какую-то оболочечную структуру. Именно такая точка зрения послужила отправным пунктом для модели ядерных оболочек.

### § 5. Оболочечная модель ядра

Основная идея оболочечной модели ядер состоит в том, что взаимодействие любого нуклона ядра с остальными нуклонами можно в основном описать статической потенциальной «ямой» (фиг. 74), размеры и форма которой должны близко передавать распределение плотности в ядре. И в самом деле, можно просто допустить считать, что благодаря малому радиусу действия ядерных сил потенциальная энергия нуклона, грубо говоря, пропорциональна числу его непосредственных соседей, т. е. ядерной плотности.

Такой потенциал приведет к образованию целого ряда одночастичных уровней энергии  $E(n, l)$ , где  $n$  — главное квантовое число, а  $l$  — орбитальное квантовое число, определяющее момент количества движения (см. приложение 18). Взаиморасположение уровней при этом зависит от глубины, размера и формы потенциальной ямы. Структура уровней для ямы, глубина которой составляет приблизительно 40 Мэв, а радиус —

$8 \cdot 10^{-13}$  см, показана на фиг. 75. (Такие размеры ямы соответствуют тяжелым ядрам, близким к свинцу; для легких ядер, радиус которых меньше, энергетические уровни дальше отстоят один от другого, а число возможных связанных состояний нуклона не так велико. Однако в соответствии с этим, на имеющихся уровнях должно разместиться уже меньшее число нуклонов.) Предполагается далее, что энергетические уровни заполняются нейтронами и протонами, причем число частиц, попадающих на каждый уровень, определяется принципом запрета. Легко видеть, что в согласии с приведенной схемой возникают



Фиг. 74. Потенциальная энергия нуклона  $V(r)$ .

широкие энергетические щели, разделяющие различные группы уровней, и что максимальное количество нейтронов или протонов, способных попасть на уровни ниже одной из первых щелей, в точности совпадает с одним из магических чисел 2, 8, 20 [вспомним, что каждый уровень может вместить  $2(2l+1)$  частиц]. Старшие магические числа, однако, из этой картины не следуют.

Но в 1948 г. Майеру и Йенсену удалось показать, что можно естественным образом получить и старшие магические числа. Они обратили внимание на то, что ввиду зависимости ядерных сил от спина необходимо принять, что нуклон в ядре участвует в интенсивном спин-орбитальном взаимодействии вида  $C\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$ , где  $l$  — орбитальный момент количества движения,  $s$  — спиновый момент нуклона, а коэффициент  $C$  приблизительно постоянен. Если теперь  $\mathbf{j}$  — вектор полного момента ( $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ ), то

$$j^2 = l^2 + s^2 + 2\mathbf{l} \cdot \mathbf{s},$$

так, что заменяя  $j^2$ ,  $l^2$  и  $s^2$  соответственно на  $j(j+1)$ ,  $l(l+1)$  и  $s(s+1)$  (гл. VI, § 2), получаем

$$C\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \frac{1}{2}C[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)].$$

Но для нуклона  $s = 1/2$ , а  $j = l \pm 1/2$ , поэтому для двух возможных значений  $j$  спин-орбитальная энергия равна

$$j = l + \frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2} Cl;$$

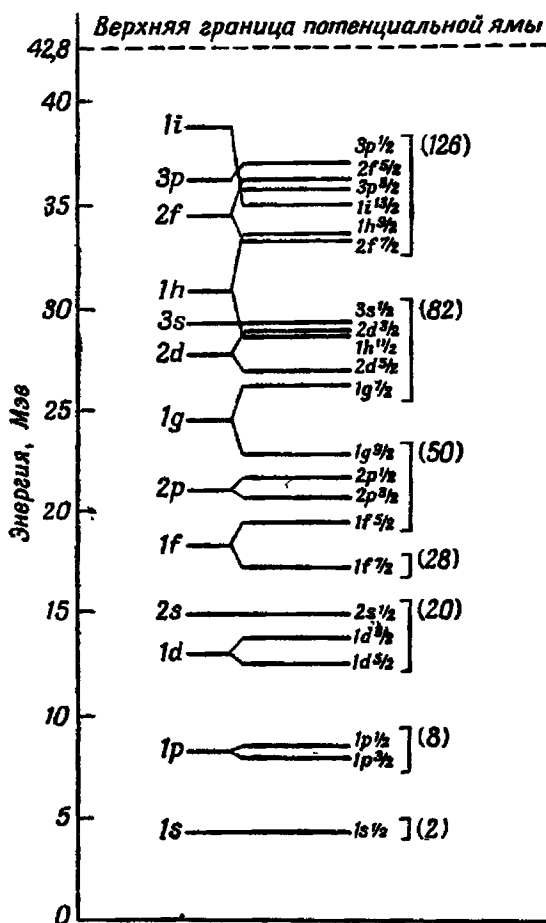
$$j = l - \frac{1}{2}, \quad -\frac{1}{2} C(l+1).$$

Это означает, что каждый уровень  $(n, l)$  расщепляется на два подуровня  $(n, l, j)$  с  $j = l \pm 1/2$ , причем расстояние между подуровнями составляет  $1/2 C(2l+1)$ . Таким образом, если константа  $C$  отрицательна и достаточно велика, то мы получим схему энергетических уровней, изображенную справа на фиг. 75.

Каждый уровень, соответствующий полному моменту  $j$ , может содержать  $2j+1$  частиц. Последовательно заполняя в согласии с принципом запрета все уровни, лежащие ниже какой-либо достаточно широкой энергетической щели, мы естественным образом получим, как легко видеть, все магические числа. Причина состоит в том, что из-за спин-орбитального взаимодействия расщепление уровней старших групп (с большими орбитальными моментами) настолько велико, что нижние компоненты ( $j = l + 1/2$ ) возникающих дублетов смещаются на всю ширину энергетической щели и попадают в младшую группу уровней.

Теперь мы попробуем выяснить, в какой мере такая наивная модель ядра способна объяснить его реальные свойства. Достигнутые на этом пути успехи очень значительны. Рассмотрим прежде всего вопрос о ядерном спине. Здесь нужно остановиться на том факте, что нуклоны в ядре движутся не вполне независимо друг от друга. Хотя силы взаимодействия между нуклонами отчасти учитываются введенной нами усредненной потенциальной ямой, существует все же и добавочное взаимодействие, представляющее собой разность между действительной потенциальной энергией нуклона и упомянутым усредненным потенциалом. Из известных свойств ядерных сил следует ожидать, что это добавочное взаимодействие будет способствовать объединению нуклонов на различных энергетических уровнях в пары, такие, чтобы суммарный момент количества движения каждой пары был равен нулю. Соответственно этой тенденции ядра, содержащие четное число протонов и четное число нейтронов, вовсе не будут обладать моментом количества движения, поскольку моменты всех нуклонов скомпенсируются. Это согласуется с тем экспериментальным фактом, что так называемые четно-четные ядра имеют нулевой спин. Однако у ядер с нечетным  $A$  последний заполненный протонный или нейтронный энергетический уровень занят либо неспаренным протоном, либо неспаренным нейтроном. Только эта «лишняя» частица и дает

вклад в ядерный спин, который соответственно совпадает с ее полным моментом  $j$ .



Фиг. 75. Энергетические уровни в потенциальной яме типа изображенной на фиг. 74.

Использованы обычные спектроскопические обозначения. Квантовое число  $l$  принимается равным числу узлов волновой функции минус число узлов радиальной ее части (нули в начале координат в расчет не берутся). Справа приведены магические числа, определяющие число нуклонов, необходимых для заполнения всех предшествующих уровней.

Так, например,  $O^{17}$  составлен из 8 протонов и 9 нейтронов; момент «лишнего» нейтрона равен  $j = 5/2$ ; точно такое же значение имеет и спин  $O^{17}$ . Аналогично,  $Co^{59}$  образован 27 протонами

и 32 нейтронами; у «лишнего» протона  $j = 7/2$ , что опять-таки совпадает с экспериментальным значением спина. Весьма важно, однако, что в тех случаях, когда из таких рассуждений следовало бы ожидать, что ядерный спин будет велик (например, когда занимается уровень с  $j = 11/2$ ), это не имеет места. Причина состоит в том, что ядерные силы, приводящие к спариванию, гораздо эффективнее действуют в состояниях с высокими значениями момента, поэтому частицы стремятся объединиться в пары именно в этих состояниях, даже ценой перехода нуклона из низшего по моменту состояния в высшее. В этом случае спин ядра оказывается равным моменту количества движения частицы, занимающей один из низших уровней. Учитывая этот эффект, можно с помощью простой модели ядерных оболочек получить спины почти всех ядер с нечетным  $A$ . Однако в случае нечетно-нечетных ядер (т. е. ядер с нечетным  $Z$  и нечетным  $N$ ) оболочечная модель в той форме, как мы ее пока изложили, может предсказать лишь, что спин этих ядер должен быть целым.

Модель ядерных оболочек способна также предсказывать четность ядер (понятие четности было введено ранее, — см. гл. V, § 6). Говорят, что ядро является «четным» или «нечетным», если его волновая функция не меняется или, соответственно, меняет знак при отражении координатных осей. В частности, как мы видели, частица с орбитальным моментом  $l$  обладает четностью  $+1$  или  $-1$  в зависимости от того, четно или нечетно  $l$ . Поскольку в оболочечной модели за свойства ядра отвечает главным образом «лишняя» частица, ясно, что ядерная четность должна совпадать с четностью этого «лишнего» нуклона и поэтому определяется его орбитальным моментом  $l$  (предполагается, что  $A$  нечетное). И в этом случае теория очень хорошо согласуется с экспериментом.

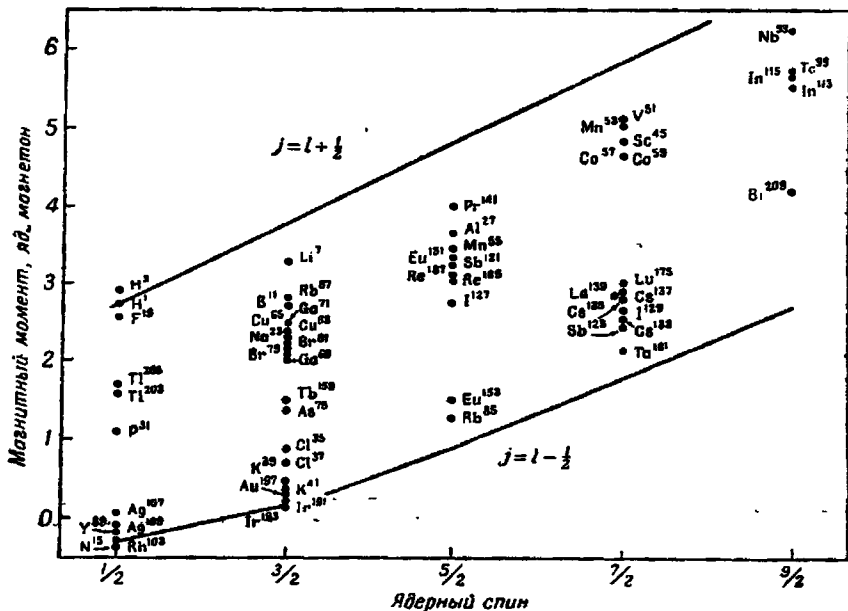
Самым, быть может, поразительным успехом оболочечной модели является ее способность описать общее поведение магнитных моментов ядер с нечетными  $A$ . Магнитный момент этих ядер должен, в согласии с предсказаниями модели, совпасть с магнитным моментом «лишней» частицы — протона и нейтрона. Это объясняется тем, что магнитные моменты остальных нуклонов в точности компенсируют друг друга благодаря эффекту спаривания. Из-за сильной спин-орбитальной связи ситуация, возникающая в оболочечной модели, формально аналогична положению вещей в случае одноэлектронного атома в слабом магнитном поле (гл. VI, § 2). Поэтому магнитный момент ядра дается равенством

$$\mu = gJ \frac{eh}{4\pi Mc},$$

где  $M$  — масса протона,  $e\hbar/4\pi Mc$  — так называемый ядерный магнетон (яд. м.),  $j$  — полный момент «лишнего» нуклона, а  $g$  — его фактор Ланде,

$$g = \frac{1}{2} \left[ (g_l + g_s) + (g_l - g_s) \frac{l(l+1) - 3/4}{j(j+1)} \right].$$

Здесь для «лишнего» протона  $g_l = 1$ ,  $g_s = 5,586$ , а для «лишнего» нейтрона  $g_l = 0$ ,  $g_s = -3,826$ . Теоретические и экспериментальные



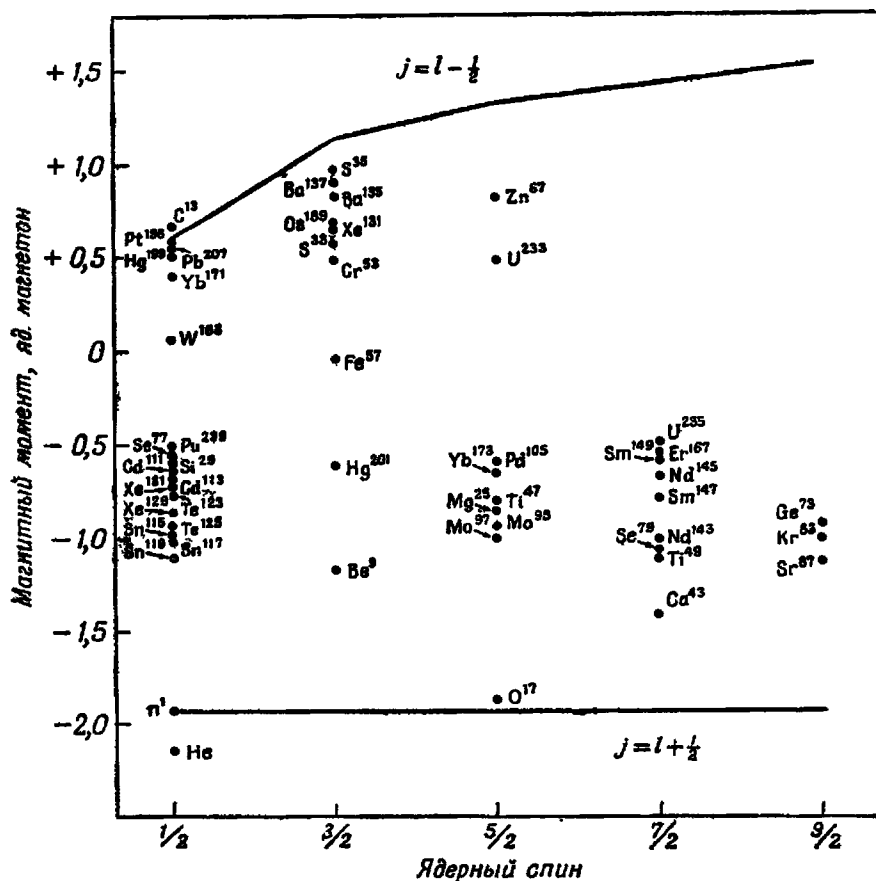
Фиг. 76. Диаграмма Шмидта для ядер с «лишним» протоном.

результаты представлены в форме так называемых диаграмм Шмидта (фиг. 76 и 77) для ядер с «лишним» протоном и «лишним» нейтроном соответственно. По горизонтальной оси отложен ядерный спин  $j$  в единицах  $\hbar/2\pi$ , а по вертикальной оси — магнитный момент в ядерных магнетонах. Сплошные линии соответствуют теоретическим значениям магнитного момента, полученным из вышеприведенной формулы для двух случаев  $j = l \pm 1/2$ , и, естественно, имеют физический смысл только в соответствующих полупроцелому спину точках, где как раз и отложены экспериментальные значения. Качественное согласие между теорией и экспериментом оказывается на удивление хорошим. Уточняя и



совершенствуя оболочечную модель, можно добиться еще более близкого согласия.

Переходя к рассмотрению электрического квадрупольного момента ядра  $Q$ , мы, однако, сразу же сталкиваемся с вопиющим несоответствием теории эксперименту (см. табл. 6, стр. 241)



Фиг. 77. Диаграмма Шмидта для ядер с «лишним» нейтроном.

Главным образом оно характерно для интервалов  $150 < A < 185$  и  $225 < A$ , где экспериментальные значения  $Q$  подчас в 30 раз превосходят теоретические. Теоретические значения квадрупольного момента при этом подсчитываются точно так же, как и значения магнитного момента, т. е. квадрупольный момент ядра:

отождествляется с квадрупольным моментом «лишнего» нуклона. В частности, поскольку нейтрон незаряжен, предполагается, что ядра с «лишним» нейтроном имеют нулевой момент  $Q$ . Этого, однако, никогда не наблюдается на опыте. Важен также тот факт, что существуют ядра с квадрупольным моментом, во много раз превышающим квадрупольный момент одного нуклона. Этот факт указывает на своего рода коллективный эффект, определяемый вкладом большого числа частиц. Несколько ниже мы обсудим это в подробностях.

Из других свойств ядер следует рассмотреть еще природу возбужденных состояний. Такое ядро как, например,  $O^{17}$  содержит 8 протонов, 8 нейтронов — причем каждая из этих двух совокупностей заполняет «магическую» и поэтому чрезвычайно стабильную замкнутую оболочку — и «лишний» нейтрон в состоянии с  $j = 5/2$ . Поэтому естественно ожидать, что возбуждение ядра не затрагивает замкнутых оболочек и сводится (как, например, в аналогичном случае атома натрия) к переходу «лишнего» нейтрона в одно из высших состояний. Таким образом, первые возбужденные состояния ядра должны включать состояние с  $j = 3/2 (1d_{3/2})$  и состояние с  $j = 1/2 (2s_{1/2})$ . Это согласуется с экспериментом. Во многих других сходных случаях можно дать столь же простую интерпретацию низших возбужденных состояний ядра. Однако рассмотренный пример слишком прост и потому едва ли типичен. Для более сложных ядер, в которых некоторая часть нуклонов находится вне «магических» замкнутых оболочек, получить схему возбужденных состояний уже гораздо труднее. Тогда приходится прибегать к детальным расчетам, учитывающим дополнительное «непотенциальное» взаимодействие между нуклонами, причем возбужденные состояния тогда интерпретируются как результат определенного перестраивания нуклонов на незамкнутых оболочках. Описывая взаимодействие смесью обычных сил с обменными силами Майораны, Гейзенберга и Бартлетта (§ 3 этой главы), удалось довольно подробно объяснить как свойства основного состояния, так и свойства возбужденных состояний многих ядер. Однако когда число нуклонов вне замкнутых оболочек велико, необходимые вычисления уже практически невыполнимы. Но именно в этой области успешно работает коллективная модель ядра, предложенная и развитая Оге Бором (1952 г.).

Прежде чем перейти к коллективной модели, мы должны разобраться в еще одном, последнем, вопросе: почему, собственно, модель ядерных оболочек приводит к таким хорошим результатам? Основное допущение оболочечной модели состоит в том, что нуклоны движутся более или менее независимо друг от друга в гладкой потенциальной яме. В пользу этого

допущения мы привели правдоподобные аргументы. Но эти аргументы совершенно игнорируют тот факт, что при сближении двух нуклонов в ядре их потенциальная энергия испытывает колоссальные флуктуации, поскольку ядерные силы очень велики и обладают малым радиусом действия. А факт этот как раз полностью противоречит исходному предположению о приблизительной независимости движущихся частиц.

Важность такого рода флуктуаций подтверждается огромным числом ядерных реакций, в которых, например, столкновение нейтрона с ядром приводит к поглощению нейтрона и переходу ядра в возбужденное состояние. Такой захват не мог бы произойти, если бы нейтрон двигался в ядре так, как это предполагает оболочечная модель. Действительно, независимость движущихся частиц эквивалентна относительной «прозрачности» ядра. Причину, почему, несмотря на это очевидное противоречие, оболочечной модели все же можно доверять, впервые объяснил Вайскопф (1952 г.). Он указал, что для нуклонов, расположенных в глубине потенциальной ямы, флуктуации энергии совершенно несущественны. Это объясняется тем, что ядро — чрезвычайно сильно вырожденная система, в которой все низшие состояния заняты и большая часть переходов при взаимодействии двух нуклонов запрещена принципом Паули. Таким образом, резкие колебания потенциала практически не сказываются на большинстве нуклонов. С другой стороны, в случае ядерной реакции энергия налетающего нейтрона по крайней мере на 8 Мэв превышает энергию любого нуклона в ядре, так как нуклоны заполняют потенциальную яму лишь до уровня, отстоящего от края приблизительно на 8 Мэв. Это означает, что привнесенной энергии вполне достаточно для перехода даже довольно глубоко скрытых в потенциальной яме частиц в одно из незанятых возбужденных состояний. Поэтому внешняя частица интенсивно взаимодействует с ядром, в то время как внутриядерные нуклоны движутся более или менее независимо друг от друга. Не так давно Бракнер (1954 г.) и Бете (1956 г.) показали, что эти идеи можно сформулировать и количественно, что позволяет полностью обосновать модель ядерных оболочек.

### § 6. Коллективная модель ядра

В предыдущем параграфе говорилось, что квадрупольные моменты целого ряда ядер значительно превышают, вопреки предсказаниям оболочечной модели, квадрупольный момент одного нуклона. Во всех таких ядрах значительная часть нуклонов расположена вне замкнутых оболочек, и, кроме того,

имеется большое число «слабо связанных» частиц, причем некоторые из них обладают большим моментом количества движения. Эти частицы приводят к появлению вблизи поверхности ядра заметных деформирующих сил, которые стремятся исказить форму ядра таким образом, что, грубо говоря, вместо сферы возникает довольно-таки вытянутый эллипсоид, создавая тем самым большой квадрупольный момент. По своему существу это — коллективный эффект, так как в деформации ядра принимает участие большое число нуклонов.

Нужно ожидать, что в случае сильно деформированных ядер появятся экспериментально наблюдаемые возбужденные состояния ротационного характера (О. Бор, 1952 г.). Они аналогичны соответствующим состояниям двухатомной молекулы (гл. IX, § 2) и характеризуются вращением ядра как целого во-круг перпендикулярного к оси симметрии направления. Энергия таких состояний дается формулой

$$E_j = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 I} j(j+1),$$

где  $j=0, 2, 4, \dots$  — квантовое число орбитального момента, а  $I$  — момент инерции. Замечательным для такой простой схемы успехом является экспериментальное подтверждение теории: энергетические уровни, очень хорошо согласующиеся с написанной выше формулой, наблюдаются как раз там, где это и ожидалось (в областях  $150 < A < 185$ ,  $A > 225$ ).

Интересная особенность такого рода вращательных энергетических уровней состоит в следующем. Момент инерции  $I$ , определенный по расстояниям между уровнями, составляет примерно лишь половину той величины, какая получилась бы, если бы ядро вращалось как твердое тело. Это означает, что ядро в каком-то смысле напоминает жидкую каплю (§ 8 этой главы), — можно считать, что вращается только внешняя часть ядра, которая подобно волне скользит по его неподвижной сердцевине.

Коллективное движение ядерного вещества возможно также и в областях, где  $Q$  не так велико; здесь оно должно иметь вид гармонических колебаний около положения равновесия. Такого сорта движение характеризуется совокупностью эквидистантных уровней энергии (гл. V, § 4). При этом

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \nu,$$

где  $\nu$  — частота собственных колебаний ядра. Ценно снова, что для ряда ядер энергетические уровни этого типа наблюдались экспериментально. Имеются указания, что на самом деле

существует резкая граница при  $N=88$ , так что ядра с  $N>88$  обладают характерными спектрами вращательных уровней, тогда как при  $N<88$  возбужденные состояния по своей природе связаны с колебательным движением.

В целом оболочечная модель и коллективная модель дают прекрасное полуколичественное описание ядерных свойств и в настоящее время являются наиболее удачными теоретическими схемами ядерной физики. В последнее время, однако, появился целый ряд работ, в которых развивается техника непосредственного математического рассмотрения устрашающих проблем, связанных с многочастичной структурой ядра (Бракнер, 1954 г., Бете, 1956 г.). Такие работы призваны — и это одна из их главных целей — дать способ вычисления различных параметров, которые мы до сих пор вводили в наши модели эмпирически (таких, как размер ядра, распределение плотности, энергия связи и глубина потенциальной ямы). Некоторые результаты, касающиеся ядерного размера и энергии связи, уже получены, и кажется несомненным, что в ближайшие несколько лет в этом направлении будет достигнут значительный прогресс.

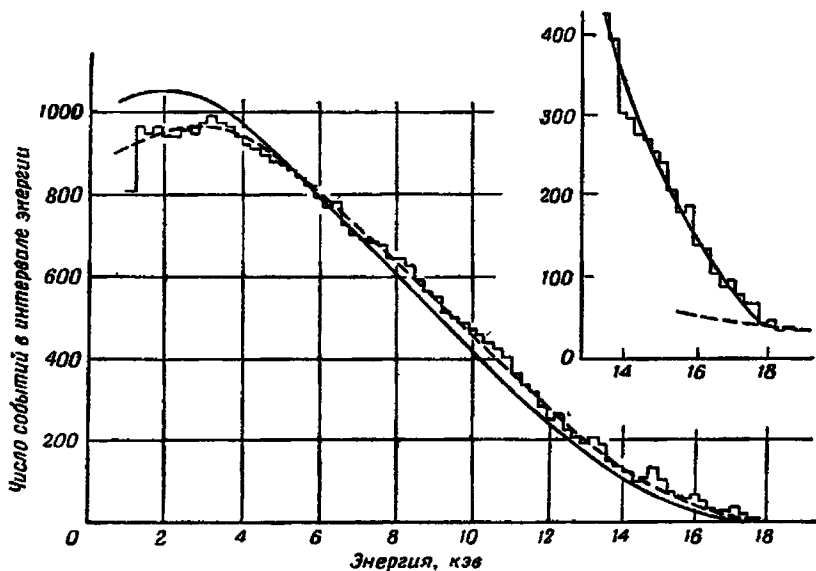
## § 7. $\beta$ -распад и $K$ -захват

Мы уже говорили в общих чертах об особенностях  $\beta$ -распада и о теоретическом объяснении этих особенностей (гл. III, § 4).

Главным экспериментальным фактом является вполне определенное и, по ядерным масштабам, большое время жизни  $\beta$ -активных ядер в сочетании с непрерывным энергетическим  $\beta$ -спектром (Чедвик, 1914 г.), который имеет довольно ярко выраженную верхнюю границу, как это показано на фиг. 78 для ядра  ${}^3\text{H}$ .

Теория, предложенная Паули и развитая в 1934 г. Ферми, основана на том предположении, что между нуклонами и электронами действует особое взаимодействие, вследствие которого нуклоны могут, если такой процесс энергетически возможен, совершать переходы из протоинного состояния в нейтронное (и обратно), сопровождаемые излучением электрона. Поскольку имеются многочисленные свидетельства того, что и возникающее в результате распада, и исходное ядро находятся в состоянии с определенной энергией и определенным моментом, необходимо предположить, что одновременно с электроном излучается также и нейтрино со спином  $1/2$  ( $\hbar/2\pi$ ). Верхняя граница  $\beta$ -спектра соответствует при этом случаю, когда всю освобожденную при ядерном превращении энергию забирает электрон, ничего не оставляя на долю нейтрино. Поэтому (если масса

покоя нейтрино пренебрежимо мала) эта верхняя граница должна определяться деленной на  $c^2$  разностью масс исходного и дочернего ядер. Последнее подтверждено на ряде случаев, когда из других соображений удается найти разность масс с достаточной точностью.



Фиг. 78.  $\beta$ -спектр трития по данным Куррана, Ангуса и Кокрофта (1949 г.).

Сплошная линия представляет собой теоретическую кривую, исправленную с учетом конечной разрешающей способности пропорционального счетчика, который использовался в измерениях.

Чтобы вычислить вероятность перехода в единицу времени, нужно воспользоваться общей формулой (гл. V, § 7; см. также приложение 27)

$$P_{if} = \frac{4\pi^2}{h} |H'_{if}|^2 \rho_f(W).$$

Здесь  $i$  обозначает начальное, а  $f$  — конечное состояние системы, состоящей из двух частей: часть 1 обладает дискретным, а часть 2 — непрерывным спектром с плотностью  $\rho$ ;  $W$  означает разность энергий части 1 в состояниях  $i$  и  $f$ . В нашем случае часть 1 системы представляет собой ядро;  $i$  есть состояние  $(A, Z)$ , а  $f$  — состояние  $(A, Z \pm 1) + \beta^\mp + \nu$ , где символ  $\nu$  приписан нейтрино;  $W/c^2$  — разность масс исходного и дочернего ядер. Закон сохранения энергии теперь требует, чтобы выполнялось

равенство

$$W = E_e + E_\nu.$$

Таким образом, при заданной величине  $W$  возможно все же бесконечное число различных переходов, и  $\rho_f(W)$  нужно заметить дифференциалом  $\rho_f(W, E_e) dE_e$ . Поэтому мы должны пользоваться слегка измененной формулой,

$$dP_{if} = \frac{4\pi^2}{h} |H'_{if}|^2 \rho_f(W, E_e) dE_e.$$

Некоторые стороны теории можно значительно упростить, если вспомнить, что дебройлевская длина волны электрона, так же как и нейтрино, весьма велика по сравнению с радиусом ядра (в предположении, что нейтрино по крайней мере не тяжелее электрона). Отсюда следует, что  $H'_{if}$  не должен заметным образом зависеть от распределения энергии между легкими частицами, поскольку внутри ядра волновые функции электрона и нейтрино практически постоянны и не зависят от энергии. Поэтому мы получим адекватную картину явления, положив

$$H_{if} = g \frac{M_{if}}{V},$$

где  $g$  — константа Ферми, характеризующая силу связи нуклонов с легкими частицами,  $M_{if}$  — величина, описывающая ядерное превращение  $i \rightarrow f$ , а  $V$  — объем, служащий для нормировки волновых функций электрона и нейтрино. Множитель  $1/V$  представляет в этом случае произведение значений нормированных волновых функций электрона и нейтрино внутри ядра.

После всех этих упрощений естественно ожидать, что форма  $\beta$ -спектра должна определяться только плотностью уровней  $\rho_f(W, E_e)$ . Как мы уже видели, обсуждая модель атома Томаса — Ферми, каждой ячейке  $dp_x dp_y dp_z = h^3$  в  $pq$ -плоскости любой пары сопряженных переменных соответствует одно квантовое состояние. Поэтому для частицы, заключенной в объем  $V$ , число состояний в элементе  $dp_x dp_y dp_z$  есть  $V dp_x dp_y dp_z / h^3$ , или, если перейти к полярным координатам,  $V p^2 dp d\Omega / h^3$ , где  $d\Omega$  — элемент телесного угла (гл. VIII, § 4). Предположив, что корреляция между направлениями излучения двух частиц отсутствует, мы получим следующее выражение для числа состояний, в которых электрон обладает импульсом, лежащим в элементе фазового объема  $dp_e$ , а нейтрино — в элементе  $dP_\nu$ :

$$V^2 \frac{(4\pi)^2}{h^6} p_e^2 dp_e p_\nu^2 dp_\nu.$$

Если выразить здесь  $p_e$  и  $p_\nu$  через  $E$  и  $W$ , то получится

$$\rho_f(W, E_e) dW dE_e.$$

Далее,

$$c^2 p_e^2 = E_e^2 - m_e^2 c^4, \quad c^2 p_\nu^2 = E_\nu^2 - m_\nu^2 c^4.$$

и, следовательно,

$$p_e^2 dp_e = \frac{1}{c^3} E_e \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} dE_e, \quad p_\nu^2 dp_\nu = \frac{1}{c^3} E_\nu \sqrt{E_\nu^2 - m_\nu^2 c^4} dE_\nu.$$

Заменяя  $E_\nu$  на  $W - E_e$ , а стало быть,  $dE_\nu$  на  $dW$ , получаем

$$\rho_f(W, E_e) = \left( \frac{4\pi V}{c^3 h^3} \right)^2 E_e (W - E_e) \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} \sqrt{(W - E_e)^2 - m_\nu^2 c^4}.$$

Удобно ввести безразмерные величины

$$\varepsilon = \frac{E_e}{m_e c^2}, \quad w = \frac{W}{m_e c^2}, \quad \mu = \frac{m_\nu}{m_e}$$

и определить функцию  $P(w, \varepsilon)$  равенством

$$dP_{if} = \frac{4\pi^2}{h} |H'_{if}|^2 \rho_f(W, E_e) dE_e = P(w, \varepsilon) d\varepsilon.$$

Тогда мы получим

$$P(w, \varepsilon) = C^2 \varepsilon (w - \varepsilon) \sqrt{\varepsilon^2 - 1} \sqrt{(w - \varepsilon)^2 - \mu^2},$$

где

$$C^2 = \frac{m_e c^2}{h} \left( \frac{8\pi^2 g m_e^2 c}{h^3} \right)^2 |M_{if}|^2.$$

Функция  $P(w, \varepsilon)$  представляет собой плотность числа случаев  $\beta$ -распада в энергетической шкале, где собственная энергия электрона выбрана за единицу.  $P$  исчезает при  $\varepsilon=0, \pm 1$ , а также при  $\varepsilon=w \pm \mu$  и  $\varepsilon=w$ ; физический смысл имеет только интервал  $1 < \varepsilon < \varepsilon_m$ , где  $\varepsilon_m = w - \mu$  определяет границу спектра. Член  $-\mu$ , очевидно, соответствует энергии, необходимой для рождения нейтрино. Сведения об этой энергии  $m_\nu c^2$  можно получить, изучая экспериментальную кривую (см. фиг. 78) вблизи ее верхнего конца. Обозначив расстояние от этого конца через  $x = \varepsilon_m - \varepsilon$ , получим

$$P = C^2 (\varepsilon_m - x) (\mu + x) \sqrt{(\varepsilon_m - x)^2 - 1} \sqrt{x(2\mu + x)}.$$

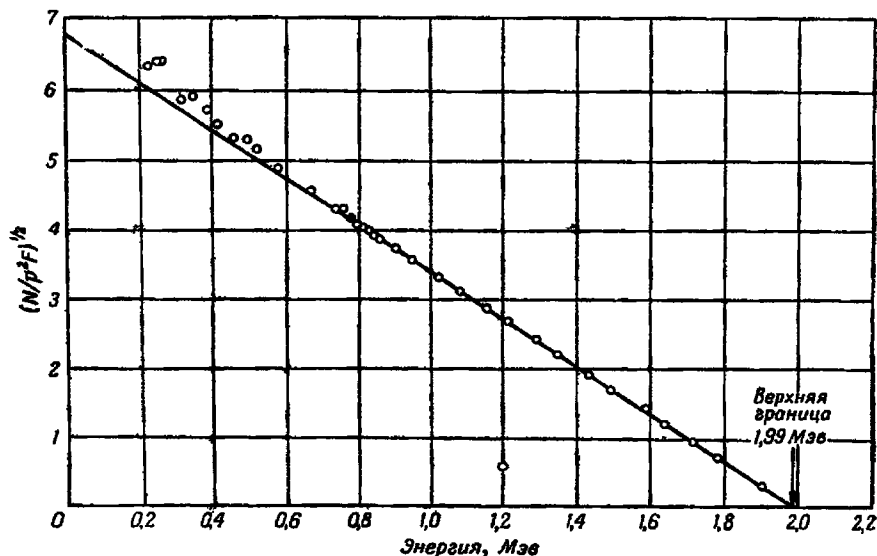
Отсюда следует, что при конечных  $\mu$  функция  $P$  ведет себя вблизи  $x=0$  как  $\sqrt{x}$ , т. е. кривая плотности должна иметь вертикальную касательную. Это противоречит эксперименту, что ясно видно из фиг. 78. Поэтому приходится считать, что нейтрино имеет нулевую массу покоя  $m_\nu = 0$  и, следовательно,



$\mu=0$ . Измерения, сделанные в 1948 г. Курраном, определенно показали, что  $\mu < 1/100$ . Итак, теперь границей спектра будет  $\varepsilon_m = \omega$ , а  $P$  будет иметь вид

$$P(\omega, \varepsilon) = C^2 \varepsilon (\omega - \varepsilon)^2 \sqrt{\varepsilon^2 - 1},$$

что согласуется с результатами эксперимента.



Фиг. 79. Диаграмма Кюри для  $^{114}\text{In}$  (Лоусон и Корк, 1940 г.).

Если вместо  $P(\varepsilon, \omega)$  пользоваться функцией

$$F(\varepsilon, \omega) = \sqrt{\frac{P(\varepsilon, \omega)}{\varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - 1}}},$$

то

$$F(\varepsilon, \omega) \sim \omega - \varepsilon.$$

Поэтому кривая зависимости  $F$  от  $\varepsilon$  (так называемый график Кюри) должна иметь вид прямой линии, пересекающей ось  $\varepsilon$  при  $\varepsilon = \omega$ . Во многих случаях экспериментальная проверка этого предсказания затруднительна частично потому, что трудно учесть влияние конечной толщины источника, а частично потому, что высокоэнергетические источники, для которых эффект конечной толщины не так уж существен, обладают малым временем жизни. Однако точные измерения все же подтвердили теорию в этом ее пункте; на фиг. 79 изображен график Кюри

для  $^{114}\text{In}$  (Лоусон и Корк, 1940 г.). Значение  $W$  оказалось равным 1,99 Мэв. В других случаях были обнаружены отклонения графика от прямолинейности. Некоторые из этих отклонений можно объяснить электростатическим взаимодействием между  $\beta$ -частицей и образующимся ядром. Квантовомеханический анализ такого взаимодействия показывает, что оно стимулирует излучение медленных электронов и подавляет излучение медленных позитронов. Электростатическим взаимодействием можно пренебречь, если энергия  $\beta$ -частицы велика по сравнению с  $K$ -энергией дочернего атома.

Полную вероятность распада — величину, обратную среднему времени жизни  $t$ , — нетрудно получить, интегрируя  $P(\varepsilon, w)$  по  $\varepsilon$  от 1 до  $w$ . Она имеет вид

$$\frac{1}{t} = \sum P_{if} = \int_1^w P(\varepsilon, w) d\varepsilon = C^2 f(w),$$

где

$$f(w) = \int_0^w \varepsilon (w - \varepsilon)^2 \sqrt{\varepsilon^2 - 1} d\varepsilon.$$

Эта функция резко зависит от  $w$  — при  $w \gg 1$  она ведет себя как  $w^5/30$ . В принятом нами грубом приближении  $tf(w)$  оказывается константой (равной  $C^{-2}$ ) при условии, что  $M_{if}$  одинаков для всех ядер. Матричный элемент  $M_{if}$  зависит от характеристик ядерного превращения и по порядку величины равен единице. Существуют ядра, для которых можно считать, что орбита  $\beta$ -излучающего нуклона практически не меняется в результате  $\beta$ -распада (зеркальные ядра, см. § 1 этой главы). Для этих ядер  $M$  должен был бы быть одинаковым. Некоторые такие случаи перечислены в табл. 7.

Таблица 7

Процесс	$t$ (сек)	$w$ (Мэв)	$ft$
$n \rightarrow p + e^- + \nu^0$	702	1,294	1180
$^3\text{H} \rightarrow ^3\text{He} + e^- + \nu^0$	$3,92 \cdot 10^9$	0,019	1137
$^{16}\text{O} \rightarrow ^{16}\text{N} + e^+ + \nu^0$	124	2,855	4400
$^{17}\text{F} \rightarrow ^{17}\text{O} + e^+ + \nu^0$	66	2,770	2330
$^{40}\text{Ca} \rightarrow ^{40}\text{K} + e^+ + \nu^0$	0,95	6,6	4150

Хотя, как видно,  $t$  изменяется в широком диапазоне, произведение  $tf(w)$  весьма замечательным образом остается постоянным. Значения величин, приведенных в табл. 7, учитывают

электростатическое взаимодействие между ядром и электроном. Что касается нейтрона, то давно уже ожидалось, что он, будучи тяжелее протона, окажется радиоактивным. Однако время жизни нейтрона удалось определить только недавно, оно хорошо согласуется с временем жизни других  $\beta$ -активных ядер. Более подробное рассмотрение матричного элемента  $M_{if}$ , опирающееся на релятивистские трансформационные свойства волновых функций легких частиц, приводит к правилам отбора, которые напоминают правила отбора для излучения света атомными электронами. Величина  $M_{if}$  зависит от изменения момента ядра таким образом, что значительные изменения момента оказываются маловероятными. Тем не менее они все-таки возможны, поскольку, как мы помним, волновые функции легких частиц лишь приблизительно постоянны внутри ядра. Разлагая эти функции в ряд по степеням  $kr$  [ $k = (2\pi/h)(p_e + p_\nu)$ ], мы получаем совокупность новых матричных элементов

$$M_{if} = M_{if}^{(0)}, M_{if}^{(1)}, M_{if}^{(2)}, \dots,$$

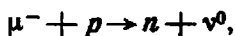
где отношение  $M_{if}^{(n)}/M_{if}^{(n-1)}$  есть величина порядка  $kR$  ( $R$  — радиус ядра). Так как для всех известных  $\beta$ -активных веществ  $kR$  мало (порядка от  $1/10$  до  $1/100$ ), то «запрещенный» переход (т. е. переход, для которого  $M_{if}^{(0)} = 0$ ) оказывается в  $k^2R^2$  раз менее вероятным, чем «разрешенный». Вообще говоря,  $\beta$ -спектр, отвечающий «запрещенным» переходам, отличается от спектра разрешенных переходов, поскольку множитель  $k^2R^2$  зависит от распределения энергии между электроном и нейтрино. Самый общий вариант теории Ферми, удовлетворяющий требованиям релятивистской инвариантности, содержит четыре численных параметра. Если бы удалось определить эти параметры, то мы однозначно получили бы все правила отбора при  $\beta$ -распаде. Наоборот, изучая «запрещенные» переходы, можно найти упомянутые параметры. Хотя такого рода исследования пока еще не завершены, кажется совершенно бесспорным, что момент ядра не может изменяться больше чем на единицу ( $h/2\pi$ )<sup>1)</sup>.

Из равенства  $C^{-2} = ft$  нетрудно определить постоянную  $g$ . Оказывается, что она чрезвычайно мала:  $g \approx 10^{-49}$  эрг·см<sup>3</sup>. Здесь нужно отметить замечательное численное совпадение. Именно, если распад  $\mu$ -мезона (табл. 3, стр. 68)

$$\mu^\pm \rightarrow e^\pm + \nu^0 + \bar{\nu}^0$$

<sup>1)</sup> В результате экспериментов последних лет восторжествовала та точка зрения, что в  $\beta$ -распаде из возможных четырех (строго говоря, даже пяти) вариантов осуществляется один определенный, так называемый  $V-A$ -вариант. — *Прим. ред.*

обусловлен взаимодействием того же типа, что и  $\beta$ -распад, то константу связи для такого взаимодействия снова следует положить равной  $g \approx 10^{-49}$  эрг  $\cdot$  см<sup>3</sup>. Далее, вероятность  $\mu$ -захвата, т. е. поглощения  $\mu$ -мезона протоном



имеет разумную величину опять-таки лишь при том же значении константы связи:  $g \approx 10^{-49}$  эрг  $\cdot$  см<sup>3</sup>. Это равенство констант связи свидетельствует о том, что взаимодействие, ответственное за  $\beta$ -распад,  $\mu$ -распад и  $\mu$ -захват, есть универсальное взаимодействие между различными группами фермионов. Можно надеяться также, что эта универсальность имеет более общий характер, так что описанная схема включает также и гипероны. Распады гиперонов на нуклон, электрон и нейтрино действительно наблюдались в одном-двух случаях, но константа связи при этом, как будто, оказалась в три раза меньше, чем  $10^{-49}$  эрг  $\cdot$  см<sup>3</sup>.

Другая замечательная особенность четырехфермионных слабых взаимодействий состоит в несохранении четности (гл. V, § 6). Впервые предположение о том, что в природе существуют процессы, в которых четность не сохраняется, выдвинули Ли и Янг (1957 г.), пытаясь найти объяснение различным схемам распада  $\theta$ - и  $\tau$ -мезонов, тождественных во всех других отношениях (табл. 3, стр. 68). Ли и Янг предположили, что слабые процессы распадного типа как раз и могут оказаться процессами, не сохраняющими четность<sup>1)</sup>. Это проявится, например, в  $\beta$ -распаде следующим образом: спины испущенных электронов будут ориентированы преимущественно вдоль направления движения, или появится асимметрия относительно направления «вперед—назад» в распределении электронов, излучаемых поляризованными ядрами (т. е. ядрами, спины которых направлены более или менее одинаково). Очень скоро было обнаружено, что это действительно так в случаях  $\beta$ -распада,  $\mu$ -распада и многих других слабых распадов. Однако до сих пор не существует каких-либо указаний на несохранение четности в более интенсивных взаимодействиях, таких, как взаимодействия, отвечающие за ядерные силы, или относительно слабые электромагнитные взаимодействия.

Обсуждаемая теория способна также объяснить и явление  $K$ -захвата, о котором говорилось в гл. III, § 4. Как мы помним, по теории Дирака излучение позитрона оказывается эквивалентным поглощению электрона. Так, ядро, энергетически способное

<sup>1)</sup> Идея о сохранении только комбинированной, а не пространственной четности в слабых взаимодействиях была независимо выдвинута Л. Д. Ландау (1957 г.). — *Прим. ред.*

испустить позитрон, должно быть также способно поглотить электрон. Вспомним теперь, что каждое ядро окружено атомными электронами и что наиболее глубоко в ядро проникают волновые функции  $K$ -электронов. Поэтому скорее всего поглощенным окажется  $K$ -электрон. Чтобы найти время относительно  $K$ -захвата

$$(A, Z) + \beta_+ \rightarrow (A, Z - 1) + \nu,$$

в результате которого получается ядро  $(A, Z - 1)$  с дыркой в  $K$ -оболочке, нужно воспользоваться исходной формулой для  $P_{if}$  (стр. 263), поскольку теперь только одна испущенная частица обладает непрерывным спектром в конечном состоянии. Напомним, что множитель  $V^{-1/2}$  в выражении для  $H'_{if}$  описывал значение электронной волновой функции внутри ядра. Для  $K$ -электрона это значение равно  $Z^{1/2} a_1^{-3/2} \pi^{-1/2}$  (приложение 18), где  $a_1 = \hbar^2 / 4\pi^2 m e^2$  — радиус первой боровской орбиты. Следовательно, в случае  $K$ -захвата

$$H'_{if} = g Z^{1/2} a_1^{-3/2} \pi^{-1/2} V^{-1/2} M_{if},$$

а  $\rho_f(W)$  представляет теперь плотность состояний одной свободной конечной частицы — нейтрино. Поэтому

$$\rho_f(W) = \frac{4\pi V}{h^3} p_\nu^2 \frac{dp_\nu}{dE_\nu} = V \frac{4\pi m^2 c}{h^3} \varepsilon^2,$$

где  $\varepsilon = E_\nu / mc^2$ . Энергия нейтрино определяется законом сохранения энергии. Если  $w$  есть изменение энергии ядерной системы (в единицах  $mc^2$ ), а  $K$  — энергия ионизации  $K$ -уровня (эта величина, выраженная в тех же единицах, варьируется от 0 до приблизительно 0,2), то  $\varepsilon = w + 1 - K$ . Подставляя это в выражение для вероятности перехода, получаем

$$P_{if}^{(K)} = \left(\frac{C}{2\pi}\right)^2 \left(\frac{2\pi Z}{137}\right)^3 (w - 1 + K)^2,$$

имея в виду, что  $\hbar c / 2\pi e^2 = 137$ . Следовательно,  $K$ -захват конкурирует с  $\beta$ -распадом, причем отношение вероятностей равно

$$\frac{P_{if}^{(\beta^+)}}{P_{if}^{(K)}} = 4\pi^2 \left(\frac{137}{2\pi Z}\right)^3 \frac{f(w)}{(w - 1 + K)^2}.$$

Поскольку при больших значениях  $w$  функция  $f \rightarrow w^5/30$ ,  $\beta^+$ -распад должен доминировать при достаточно высоких энергиях. Теория проверялась для  $^{107}\text{Cd}$  (Шеррер, 1945 г.). Экспериментальное значение указанного отношения составляет  $320 \pm 20$ , в то время как теория предсказывает величину 340.

Во многих случаях  $\beta^+$ -распад может оказаться энергетически запрещенным из-за того, что энергии, освобождающейся при ядерном превращении, может не хватить на энергию покоя позитрона:  $\omega < 1$ . В этих случаях  $K$ -захват будет все еще возможным, если только  $K - 1 < \omega$ . Отсюда следует, что в интервале энергий

$$K - 1 < \omega < 1$$

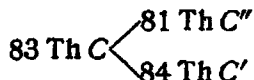
$K$ -захват оказывается единственной энергетически возможной формой  $\beta$ -активности. Проверка теории в этом интервале энергий затруднительна, так как в отсутствие конкурирующих процессов энергия нейтрино неизвестна. Тем не менее теоретические предсказания общего характера, такие, например, как быстрое уменьшение времени жизни с ростом атомного номера, хорошо подтверждаются.

### § 8. Дискретный $\beta$ -спектр и ядерные возбуждения

Мы уже упоминали (гл. II, § 4), что существует и дискретный спектр  $\beta$ -частиц, который обычно накладывается на непрерывный спектр, подробно охарактеризованный в предыдущем параграфе. Можно показать, что дискретный спектр представляет собой вторичный эффект, связанный с излучением  $\gamma$ -квантов. Чтобы понять это, нужно рассмотреть электромагнитное излучение, возникающее при переходе ядра из одного стационарного состояния в другое. Электромагнитное излучение может возникнуть в случае дипольного перехода (т. е. когда матричный элемент дипольного момента не равен нулю). Существование  $\gamma$ -лучей с точно определенными частотами свидетельствует о том, что возбужденные состояния ядер действительно возможны, причем энергии этих состояний, как и в случае внешних электронов, следуют из соотношения Бора  $E_1 - E_2 = h\nu$ . Возбуждения ядер можно достичь различными способами. Иногда с целью вызвать  $\gamma$ -излучение из ядер их бомбардируют  $\alpha$ -частицами. Более интенсивны излучения из радиоактивных ядер, которые испускают  $\gamma$ -лучи самопроизвольно. Провести непосредственное измерение соответствующих частот трудно из-за малости длины волны  $\gamma$ -квантов. Однако имеется косвенный способ, связанный с упоминавшимся выше дискретным  $\beta$ -спектром. Может случиться так, что испущенный  $\gamma$ -квант поглотится внешним электронным облаком того же атома, выбив из него электрон и образовав, следовательно, наблюдаемое  $\beta$ -излучение.

В пользу этого предположения говорит следующее. Если какое-то вещество обладает одновременно и  $\alpha$ - и  $\beta$ -активностью, то в результате образуются два продукта реакции (их можно

идентифицировать по постоянным распада). Такая «вилка» осуществляется, например, для изотопа висмута  $\text{ThC}$ : 65 процентов его превращается в результате испускания  $\beta$ -частицы в изотоп полония  $\text{ThC}'$ , а 35 процентов — благодаря  $\alpha$ -распаду в изотоп таллия  $\text{ThC}''$ . Это иллюстрируется схемой



Однако в случае других веществ, например радия и актиния, которые тоже излучают и  $\alpha$ - и  $\beta$ -частицы, был обнаружен, несмотря на самые скрупулезные поиски, только один продукт реакции, именно соответствующий излучению  $\alpha$ -частицы. Следовательно,  $\beta$ -лучи не могут исходить из ядер. Далее, в некоторых веществах такого рода наблюдается  $\gamma$ -излучение, доступное измерениям. Это наводит на мысль о вторичной природе таких  $\beta$ -лучей: очевидно, они состоят из электронов, выбитых из электронного облака атома  $\gamma$ -излучением.

Правильность этого предположения доказывается фактом существования простых соотношений между энергией  $\beta$ -лучей и электронными энергетическими уровнями атома. В первую очередь, имеется равенство

$$E_{\gamma} = E_{\beta} + A,$$

где  $E_{\gamma} = h\nu_{\gamma}$  — энергия  $\gamma$ -кванта,  $E_{\beta}$  — энергия  $\beta$ -частицы, а  $A$  — работа выхода электрона. Далее, один и тот же  $\gamma$ -луч может выбить электрон или с  $K$ -, или с  $L$ -, или с  $M$ -уровня; энергии соответствующих электронов связаны друг с другом следующими соотношениями:

$$E_{\beta_1} + K = E_{\beta_2} + L = E_{\beta_3} + M = E_{\gamma}.$$

Оказалось, что наблюдаемые  $\beta$ -спектры действительно поддаются систематизации на основе этих соотношений (Эллис, 1921 г., Мейнер). Более того, можно провести прямую проверку указанного предположения, облучая свинец  $\gamma$ -квантами, исходящими из изотопа свинца  $\text{ThB}$ . Обнаружено, что при этом электроны, возникающие в результате фотоэффекта, обладают теми же скоростями, что и электроны, излученные непосредственно изотопом  $\text{ThB}$ . Далее, измерения показали, что электроны, выбитые теми же  $\gamma$ -лучами из платины, имеют большую скорость, причем разность скоростей соответствует как раз разности работ выхода для свинца и платины. Измеряя энергии  $\beta$ -лучей, можно определить по написанному выше уравнению и энергии  $\gamma$ -лучей. Таким путем удалось получить довольно подробные схемы ядерных уровней для различных радиоактивных веществ.

В связи с этим можно построить следующую картину радиоактивного распада (Мейтнер, 1925 г.). Распад начинается с  $\alpha$ -излучения; образовавшееся ядро оказывается в возбужденном состоянии; совершая затем переход в основное состояние, оно испускает  $\gamma$ -лучи. Доказательство правильности такой картины базируется на очень точных измерениях энергетического спектра, которые и позволяют утверждать, что обсуждаемое  $\beta$ -излучение берет начало в электронном облаке образовавшихся атомов, а не в ядрах первоначального нестабильного вещества.

Современная теория в состоянии провести далеко идущий анализ этого явления внутренней конверсии световой энергии в энергию частиц; при этом объектом анализа служит процесс поглощения сферической световой волны, центром которой служит ядро, внешними электронами атома. Квантовомеханическое рассмотрение (Хьюлме, Тэйлор, Мотт, 1932 г.) приводит к определенным выводам об относительных интенсивностях  $\beta$ -лучей, отвечающих соответственно  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -уровням. Обнаружено сверх того, что, кроме внутреннего поглощения  $\gamma$ -волны, возможен еще и процесс, обусловленный электромагнитным взаимодействием, который состоит в прямой передаче энергии возбуждения ядра одному из внешних электронов без посредства реальных  $\gamma$ -лучей (Смекал, 1922 г.). Включая в рассмотрение и этот процесс конверсии ядерной энергии в энергию внешнего электрона (Фаулер, 1930 г.), можно добиться лучшего согласия между расчетными и наблюдаемыми интенсивностями. Другой круг явлений, из которых можно извлечь сведения об энергетических уровнях ядра, связан с тонкой структурой  $\alpha$ -лучей (Розенблум, 1931 г.) и с существованием групп  $\alpha$ -лучей небольшой интенсивности, но аномально большой энергии (Резерфорд, 1933 г.). Не нужно долго ломать голову, чтобы объяснить эти факты. Достаточно вспомнить, что  $\alpha$ -излучение в таких случаях сопровождается  $\gamma$ -излучением. Образовавшееся в результате  $\alpha$ -распада ядро может оказаться на различных коротко живущих энергетических уровнях. Поэтому энергия  $\alpha$ -частиц имеет не единственное значение, но может принимать ряд значений, соответствующих разным уровням возбуждения остаточного ядра. Само же дочернее ядро последовательно возвращается в свое основное состояние, испуская  $\gamma$ -лучи. Таково объяснение тонкой структуры, обнаруженной с помощью мощных магнитов. Но может также случиться, что в результате  $\alpha$ - или  $\beta$ -распада дочернее ядро окажется на одном из сравнительно долго живущих возбужденных уровней. Тогда ядро может либо вернуться в свое основное состояние, излучив  $\gamma$ -квант, и лишь затем испустить  $\alpha$ -частицу, либо же испустить  $\alpha$ -частицу сразу, причем в этом случае энергия последней возрастет на энергию возбуж-



денного уровня. Для того чтобы такой процесс происходил сравнительно часто и был доступен наблюдениям, необходимо, чтобы период полураспада возбужденного ядра был достаточно мал.

Но, как мы знаем (§ 1 этой главы), большая  $\alpha$ -энергия всегда ведет к уменьшению времени жизни. Таким образом, можно понять, почему изредка встречаются  $\alpha$ -частицы с очень длинным пробегом.

### § 9. Капельная модель ядра и деление ядер

В предварительном обзоре ядерных явлений (гл. III, § 8) мы уже говорили, что нормально стабильные ядра можно преобразовать, бомбардируя их различными частицами (протонами, нейтронами, дейтронами, особенно эффективны нейтроны). Для объяснения таких процессов лучше всего предположить, что ядро сначала поглощает налетающую частицу, становясь при этом нестабильным, а затем распадается, испуская один или два нуклона, или  $\alpha$ -частицу. Новое ядро, образовавшееся в результате распада, также может оказаться не вполне стабильным и соответственно может через некоторое время испустить другую частицу (искусственная радиоактивность). Как следует понимать такие процессы?

Их можно уподобить ионизации атома при столкновении с электронами; в этом случае также имеется частица (электрон), выбитая из электронного облака, и образуется вторичная система — ион. Однако это довольно поверхностное сравнение. Механические или, лучше сказать, квантовомеханические черты явления в этих двух случаях существенно различны. Действительно, электронная ионизация атома — мгновенный элементарный процесс, описываемый квантовомеханической вероятностью перехода: налетающий электрон взаимодействует с одним из связанных электронов, и оба покидают атом одновременно. С другой стороны, в ядерном превращении положение вещей совсем иное, на что особенно настоятельно указывал Нильс Бор (1936 г.). Благодаря чрезвычайно плотной «упаковке» быстро движущихся нуклонов в ядре едва ли можно считать, что налетающая частица взаимодействует с каким-то одним нуклоном. Даже если бы это было так, то нуклон, испытавший столкновение, не смог бы сохранить полученные добавочные энергию и импульс и должен был бы разделить их со своими соседями (если вообще правомерно подобное представление). Поэтому приобретенная энергия все равно распределялась бы по всему ядру. Накопленная таким образом энергия и вызывает последующее излучение другой ядерной частицы.

Возникает вопрос, можно ли превратить эту качественную картину в количественную теорию и использовать ее для подробного описания ядерных реакций.

Мы уже видели, что плотность ядерного вещества почти постоянна (§ 1 этой главы) и что энергия связи, грубо говоря, пропорциональна числу нуклонов (§ 3 этой главы); эти факты мы объяснили очень малым радиусом действия ядерных сил. Состояние ядра можно поэтому сравнить с твердым или жидким состояниями вещества, для которых справедливы те же правила. Однако, как отметил Бор, для сравнения больше подходит жидкость, чем твердое тело (или очень большая молекула), поскольку никак нельзя считать, что частицы в ядре образуют какую-либо упорядоченную структуру, подобную кристаллической решетке. И в самом деле, нулевая энергия частиц (см. гл. V, § 4, а также приложения 15 и 39) слишком велика по сравнению с потенциальной энергией ядерных сил, что и приводит к беспорядочному движению этих частиц. Поэтому можно уподобить ядро жидкой капле, не забывая, разумеется, о том, что в жидкости хаотичность есть следствие теплового движения, тогда как ядро находится в основном состоянии (с наименьшей энергией) и должно считаться «холодным». Кстати, реально существует одно обычное вещество с такими же свойствами. Это — гелий, который остается жидким вплоть до нулевой температуры и, возможно, по той же самой причине: слабость сил связи между частицами, вес которых очень мал, приводит к большому значению нулевой энергии, что и делает затвердевание невозможным.

Эта идея капельной структуры ядра немедленно приведет нас к важным следствиям, если мы вспомним, что у капли есть поверхность и что она электрически заряжена. Оба эти обстоятельства влияют на полную энергию, т. е. на массу. Используем хорошо известные элементарные законы для оценки средней энергии связи  $\epsilon$ , т. е. работы, необходимой для удаления из ядра одной частицы.

Если  $a$  — средняя энергия связи одной частицы внутри ядра, обусловленная неэлектрическими (а скажем, мезонными) силами, то в пренебрежении поверхностными эффектами полная энергия связи окажется равной  $aA$ , где  $A$  — массовое число (число нуклонов). На самом деле, имеется еще и поверхностная энергия, обладающая противоположным знаком, поскольку у частицы на поверхности меньше соседей, чем внутри, и поэтому ее легко удалить из ядра. Так как все нуклоны занимают приблизительно одинаковые объемы (плотность постоянна), то площадь поверхности, грубо говоря, пропорциональна  $A^{2/3}$  и поверхностную энергию можно поэтому записать в виде  $-bA^{2/3}$ .

Наконец, электромагнитную энергию, которая благодаря кулоновскому отталкиванию тоже уменьшает общую энергию связи, можно представить формулой  $-cZ^2A^{-1/2}$ , где  $Z$  — число протонов (атомный номер), а среднее расстояние между протонами считается пропорциональным  $A^{1/2}$ .

Сложив все три части и разделив сумму на  $A$ , получим для энергии связи одной частицы

$$\varepsilon = a - bA^{-1/2} - cZ^2A^{-1/2},$$

или, если грубо приближенно положить  $Z = 1/2A$ ,

$$\varepsilon = a - bA^{-1/2} - \frac{1}{4}cA^{1/2}.$$

Таким образом, нужно ожидать, что средняя энергия связи мало меняется при переходе от одного элемента периодической системы к другому, причем где-то в середине должен лежать максимум  $\varepsilon$ , так как один из переменных членов в формуле для  $\varepsilon$  растет с увеличением  $A$ , а другой убывает. Именно так в действительности и обстоит дело. Чтобы сравнить теоретическую формулу с экспериментом, введем вместо массы  $M$  (в атомных единицах, так что масса кислорода равна 16) так называемый упаковочный коэффициент

$$f = \frac{M - A}{A},$$

который, как видно, служит мерой средней энергии связи. Действительно, если  $m_n$  и  $m_p$  — массы нейтрона и протона, то полная масса равна

$$M = m_n(A - Z) + m_pZ - \varepsilon A$$

и в приближении  $Z = 1/2A$  имеем

$$M = A \left[ \frac{1}{2}(m_n + m_p) - \varepsilon \right].$$

Следовательно,

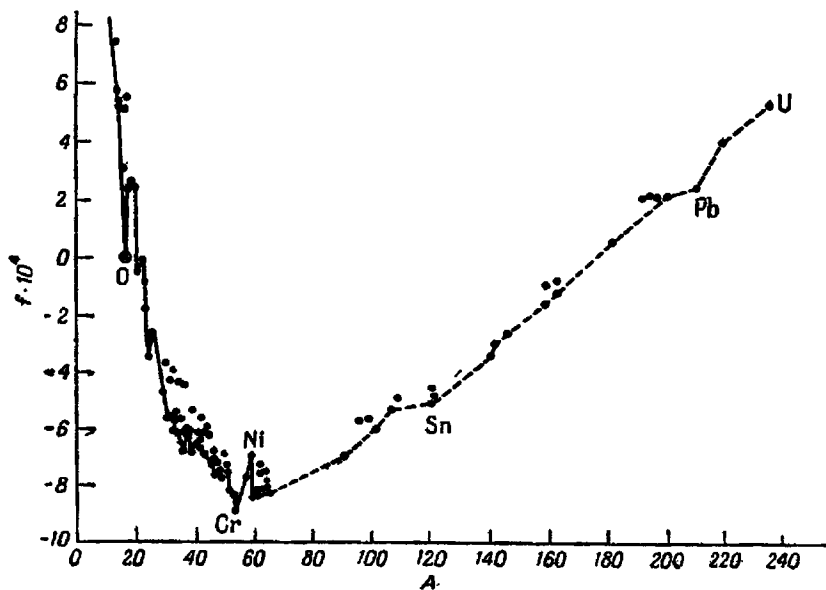
$$f = \frac{M}{A} - 1 = \left[ \frac{1}{2}(m_n + m_p) - \varepsilon \right] - 1,$$

где  $m_n = 1,00898$ , а  $m_p = 1,00813$ . Поэтому коэффициент  $f$  должен зависеть от  $A$  таким же образом, что и  $-\varepsilon$ .

На фиг. 80 представлен график зависимости  $f$  от  $A$  (по данным Астона, Демпстера, Маттауха и др.). На самом деле,  $f$  зависит не только от  $A$ , но и от  $Z$ ; существуют ядра с одинаковыми  $A$ , но различными  $Z$  (изобары) и наоборот (изотопы). На чертеже изображена кривая, дающая наименьшее значение  $f$

в группе изобаров; она имеет минимум приблизительно при  $A=50$ .

Подбирая значения постоянных  $a$ ,  $b$  и  $c$ , можно довольно хорошо согласовать теоретическую кривую с экспериментальными данными, но это и все, на что можно было надеяться. Существует более изощренная теория (Вайцзеккер, 1953 г.), из



Ф и г. 80. График упаковочного коэффициента.

которой следует зависимость  $f$  как от  $A$ , так и от  $Z$ ; эта теория способна в какой-то мере объяснить значения энергии связи для всех стабильных ядер, кроме самых легких; последние требуют более индивидуального подхода (подобного теории дейтрона, § 3 этой главы).

Наличие минимума у кривой  $-\varepsilon(A)$  означает, что в принципе все ядра, кроме лежащих вблизи минимума (кстати, последний реализуется около очень распространенного изотопа железа  ${}_{26}Fe^{56}$ ), более или менее нестабильны. При этом ядра, лежащие ниже минимума, имеют тенденцию к слиянию друг с другом, а ядра, лежащие выше минимума, — к распаду. В связи с этим существование материи в ее разнообразных формах может показаться явлением случайным и ненадежным. На самом же деле, скорость реакций ядерных превращений

настолько незначительна, что ими можно полностью пренебречь для любых практических целей. Известны только два исключения из правила. Первое — это слияние нуклонов с образованием ядра гелия; предполагается, что такой процесс происходит внутри звезд и имеет характер цепной реакции, в которой ядра углерода играют роль катализатора (Бете, Вайцзеккер, 1938 г.). Другое исключение — это деление некоторых очень тяжелых ядер (урана, плутония), вызванное нейтронами; об этом процессе мы и поведем речь.

Итак, мы возвращаемся к проблеме ядерных превращений, обусловленных столкновениями с другими частицами, главным образом с нейтронами, для которых не существует барьера кулоновых сил (в противоположность, например, протонам и дейтронам) и которые поэтому могут с легкостью проникать внутрь ядра.

Допустим, это случилось. Тогда энергия захваченного ядром нейтрона очень скоро распределится по всему ядру.

Можно сказать, что ядро окажется в «подогретом» состоянии. Пройдет немало времени (по сравнению с временем элементарного столкновения, определяемым отношением диаметра ядра к скорости налетевшей частицы), прежде чем достаточная часть избыточной энергии сконцентрируется в результате случайной флуктуации на одной из частиц, которая тем самым получит возможность покиннуть ядро. Все это напоминает низкотемпературное испарение из маленькой жидкой капли — очень медленный процесс, даже если полное теплосодержание капли намного превосходит энергию, необходимую для освобождения одной молекулы. Таким образом можно понять, почему ядро, образованное в результате столкновения и захвата нейтрона или протона, существует значительное время, не распадаясь, и во многих отношениях ведет себя как стабильное ядро, обладающее довольно резкими энергетическими уровнями. Рассматривая распределение и энергии возбужденных состояний первоначального и вторичного ядра точно таким же образом, как и в случае атомов, поглощающих, а затем испускающих фотоны, можно объяснить специфику поведения различных ядер при облучении их нейтронами. Можно также вывести формулу, определяющую вероятность поглощения или испускания нейтрона, аналогичную соответствующей оптической формуле («дисперсионной формуле»). Если энергетические уровни отстоят друг от друга достаточно далеко, то можно ожидать эффектов, имеющих избирательный характер. И действительно, такие эффекты наблюдаются (нейтроны могут оказаться эффективными лишь в узком диапазоне скоростей). Однако в большей части энергетического спектра уровни расположены очень близко друг к

другу. Энергия связи одного нейтрона составляет по порядку величины  $7 \text{ Мэв}$ , что соответствует очень сильно возбужденному состоянию, хотя соответствующая «температура» значительно ниже «точки кипения». Тем не менее, поскольку ядро состоит из большого числа частиц, для возбуждения возможны бесчисленные комбинации, и расстояния между соседними уровнями имеют порядок только  $100 \text{ эв}$ . Отсюда понятно, почему поведение многих ядер не обнаруживает особой специфики в широком диапазоне нейтронных скоростей.

В сказанном выше содержится основа для создания нового экспериментального метода ядерной спектроскопии, использующего нейтроны вместо фотонов. К сожалению, для нейтронов, если не говорить об очень медленных «тепловых» нейтронах (гл. III, § 6), не существует ни спектроскопа, ни монохроматора (приспособлений, позволяющих получать частицы заданной скорости и измерять эту скорость). Поэтому положение вещей таково, как если бы нам пришлось создавать оптику во всем диапазоне от  $\gamma$ -лучей до инфракрасного света, не имея под рукой никаких приборов, кроме фильтров с неизвестными характеристиками по поглощению. Естественно, что достигнутые успехи пока невелики.

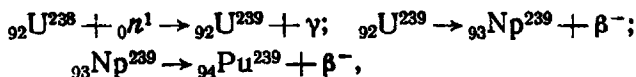
Открытие искусственной радиоактивности вызвало особый интерес к двум самым тяжелым элементам — торию и урану — в связи с надеждой, бомбардируя эти элементы нейтронами, превратить их в элементы с атомным номером большим, чем 92. Поиски таких трансурановых элементов привели, однако, к открытию более странного явления — развала или *деления* тяжелых ядер на две части сравнимых размеров (Ган и Штрассман, 1938 г.), сопровождающегося выделением огромной энергии; например,  ${}_{92}\text{U} \rightarrow {}_{56}\text{Ba} + {}_{36}\text{Kr}$ . Мейтнер и Фриш (1939 г.) предложили простое объяснение этого эффекта, основанное на боровской капельной модели, которую мы уже обсуждали и которая указывает, что в принципе нестабильны все ядра, а те, которые находятся, как Th и U, в конце периодической таблицы, особенно нестабильны. Если к тому же ядро поглотит нейтрон, то время жизни сократится настолько, что произойдет распад на отдельные части, разлетающиеся с выделением избытка энергии порядка  $200 \text{ Мэв}$  (ср. с энергией, выделяющейся при обычных ядерных реакциях, достигающей лишь  $27 \text{ Мэв}$ ). Вслед за тем Бор и Уилер (1939 г.) выступили с определенными предсказаниями относительно эффективных сечений такой реакции для нейтронов с различными скоростями. Одно из этих предсказаний открывает неопределимые возможности не только для физика, но и для будущего всего человечества.

Процесс деления сопровождается на самом деле испусканием нейтронов (либо одновременным, либо запаздывающим за счет распада продуктов реакции). Эти нейтроны могут быть затем поглощены соседними ядрами и вызвать в свою очередь новое деление, при котором снова высвобождаются нейтроны и т. д.; таким образом, возникает лавинообразный процесс. Если бы удалось осуществить такую цепную реакцию, то чрезвычайно концентрированную ядерную энергию можно было бы использовать в практике — как горючее для двигателей или взрывчатку для сверхбомб.

Основные выводы, которые привели к воплощению этих идей в так называемой «атомной бомбе», базируются на следующем рассуждении. При облучении быстрыми нейтронами обычный торий  ${}_{90}\text{Th}$ , уран  ${}_{92}\text{U}$ , а также протоактиний  ${}_{91}\text{Pa}$  ведут себя одинаковым образом. Но в случае медленных нейтронов эффективное сечение (т. е. вероятность деления) для урана оказывается гораздо большим, чем для тория. Обычный  $\text{U}^{238}$  не может служить причиной такого отличия; поэтому Бор предположил, что это происходит из-за присутствия в уране небольшой примеси (0,7%) изотопа  ${}_{92}\text{U}^{235}$ . Это предположение было полностью подтверждено в 1941 г. Нирсом, Хейденбургом и Лоуренсом.

Однако получение редкого изотопа в количествах, достаточных для эксперимента, и в количествах, достаточных для промышленного производства взрывчатого вещества, — разные вещи. Действительно, все известные процессы, позволяющие разделять химически идентичные ядра с почти одинаковой массой, медленны и чрезвычайно малоэффективны (гл. II, § 5). Тем не менее для получения достаточного количества  $\text{U}^{235}$  удалось использовать методы диффузии и магнитного разделения.

Другая возможность состоит в получении *трансурановых элементов*. Кажется вероятным, что ядро  ${}_{92}\text{U}^{239}$ , образованное в результате захвата нейтрона ядром обычного урана  ${}_{92}\text{U}^{238}$ , будет нестабильным и превратится, последовательно излучая электроны, в новые элементы в соответствии с формулами



где Np — химический символ нового элемента с номером 93 — *нептуния*, Pu — символ следующего элемента с номером 94 — *плутония*. Вероятно также, что захват нейтрона плутонием 239 приведет к делению. Все эти предсказания были подтверждены экспериментально. В определенном диапазоне скоростей нейтроны вызывают превращение  $\text{U}^{238}$  в плутоний, в то время как

те же нейтроны, замедленные до тепловых скоростей, поддерживают цепную реакцию в результате деления  $U^{235}$ .

Метод, примененный в этих экспериментах, а также и в промышленном процессе получения плутония, предполагает сооружение «реактора» или «котла» — упорядоченной совокупности (решетки) из кусков урана (металлического или окиси), отделенных друг от друга легким веществом (графитом, тяжелой водой и т. д.), которое играет роль «замедлителя», уменьшающего скорость испущенных нейтронов.

Чтобы избежать утечки большей части нейтронов через поверхность котла, он должен иметь значительные размеры. Используются также кадмиевые стержни, которые можно вынимать или погружать в котел и которые позволяют держать цепную реакцию под контролем, — по отношению к медленным нейтронам кадмий обладает высокой поглощающей способностью, что дает возможность довольно тонко регулировать развиваемую мощность. Может показаться странным ввиду взрывного (как и в бомбе) характера реакции, что скорость процесса все-таки поддается управлению. Причина состоит в том, что небольшая часть освобождающихся при делении нейтронов вылетает не мгновенно, а с некоторым запаздыванием (*запаздывающих* нейтронов около 1%; их периоды доходят до минуты). Этого как раз достаточно, чтобы с помощью кадмиевых стержней осуществлять контроль за цепной реакцией на грани критического режима.

Первый котел, проект которого был составлен под руководством Ферми, вступил в строй в Чикаго второго декабря 1942 года. Оказалось, что полученный плутоний действительно обладает ожидаемыми свойствами. Его можно выделить химическими методами, которые проще, более эффективны и требуют меньше времени, чем методы разделения изотопов (см. гл. II, § 5).

Оба процесса — и извлечение редкого изотопа урана  $U^{235}$ , и синтез плутония — были в промышленных масштабах осуществлены в США в последний период войны 1939—1945 годов с целью создания сверхмощного взрывчатого вещества. Характерная особенность ядерной взрывчатки заключается в том, что для взрыва необходимо достаточное количество — большее «критической массы» — делящегося вещества: для массы меньше критической число нейтронов, уходящих с поверхности, будет настолько велико, что цепная реакция не сможет начаться. Поэтому бомба состоит по крайней мере из двух частей с массами меньше критической, которые в нужный момент чрезвычайно быстро соединяются друг с другом. Собственно детонация в момент соприкосновения частей происходит за счет всегда



присутствующих случайных нейтронов. Вот как практически удается осуществить это мгновенное совмещение различных частей бомбы, — это одна из главных технических тайн, плотно окутывающих всю область ядерных реакций. Большое политическое значение нового оружия самым фатальным образом повлияло на свободу научных исследований и научного обмена. Еще более огорчительное следствие открытий, предназначавшихся исключительно для расширения и углубления человеческих знаний, — это использование бомбы для массового разрушения городов и уничтожения гражданского населения. Потребуется большое усилие, чтобы восстановить интернациональную структуру свободной науки, не скованной политическими и военными ограничениями и служащей прогрессу, а не разрушению.

Создание ядерного реактора открывает новые пути развития науки и техники. Самая очевидная возможность — использование реактора как источника энергии. Но это довольно ограниченная возможность — если даже отвлечься от технических трудностей — ввиду малой распространенности веществ, могущих служить ядерным топливом. Однако можно наладить превращение обычного урана в плутоний 239 (который тоже годится как топливо) в самом котле и рассматривать этот процесс как способ получения ядерного горючего. Это будет означать увеличение ресурсов сырья более чем в 100 раз и заметно изменит ситуацию в пользу ядерной энергетики. В этом случае можно также использовать в качестве топлива сравнительно более распространенный элемент — торий.

Другой способ мирного использования реактора — это получение изотопов всех элементов в заметном количестве. Мы уже упоминали (гл. II, § 5) об открытии трансурановых элементов вплоть до nobelium 102. Были накоплены также изотопы  $H^3$  и  $He^3$  в количестве, достаточном для изучения их физических свойств. Полученные радиоактивные изотопы многих элементов используются как «меченые» атомы в химических и биологических исследованиях. Благодаря новым методам изменился и сам облик этих наук. Однако все это уже лежит за пределами тематики нашей книги.

# VIII

## КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА

### § 1. Тепловое излучение и закон Планка

Мы уже несколько раз отмечали, что квантовая теория имеет статистическое происхождение — впервые к ней обратился Планк, пытаясь вывести закон теплового излучения (1900 г.).

Если все же, вопреки исторической последовательности, мы изложили квантовую теорию атома до квантовой статистики, то у нас есть на это причины. Во-первых, крах классической теории в механике атома — например, при рассмотрении линейчатых спектров или дифракции электронов — обнаруживает себя даже более очевидным образом, чем при попытках приспособить классическую теорию для объяснения закона излучения. Во-вторых, целесообразней разобратся сначала в свойствах отдельных частиц и механизме элементарных процессов и лишь затем приступить к изучению основанной на квантовых идеях статистики.

В этой главе мы должны заполнить пробелы в нашем изложении. Начнем с вывода закона теплового излучения, следуя Планку. Представим себе замкнутый сосуд, например ящик, стенки которого каким-то образом поддерживаются при определенной температуре  $T$ . Нагретые стенки будут обмениваться энергией в форме теплового излучения, так что внутри ящика возникнет поле излучения. Это электромагнитное поле можно характеризовать, измеряя плотность его энергии  $u$ , которая в случае равновесия одинакова для всех внутренних точек ящика. Разложив излучение на его спектральные компоненты, обозначим через  $u_\nu d\nu$  плотность энергии тех спектральных компонент, частота которых лежит в интервале от  $\nu$  до  $\nu + d\nu$ . Таким образом, функция  $u_\nu$  распространена на всю область изменения частот от 0 до  $\infty$  и описывает непрерывный спектр излучения. До сих пор мы занимались в основном линейчатыми спектрами, связанными с излучением отдельных атомов в разреженном газе. Однако в спектрах молекул, состоящих даже из

сравнительно небольшого числа атомов, наблюдаются не изолированные линии, характерные для излучения одного атома, а целые совокупности линий, почти сливающиеся, а часто и сливающиеся в непрерывные узкие полосы. Чем больше атомов окажется в молекуле и чем плотнее они будут упакованы в ней, тем больше сближаются друг с другом спектральные линии, образуя в конце концов сплошную полосу. Что касается твердого тела, то оно соответствует бесконечному числу систем, колеблющихся с самыми разнообразными частотами, поэтому оно излучает непрерывный спектр.

Существует теорема Кирхгофа (1859 г.), утверждающая, что отношение поглощательной способности тела к его излучательной способности зависит только от температуры тела, но не от его природы; в противном случае равновесное излучение не могло бы существовать там, где есть различные вещества. (Под поглощательной способностью мы понимаем ту долю энергии падающего на тело излучения, которую тело поглощает; под излучательной способностью разумеется энергия, излучаемая телом в единицу времени.) Тело, поглощательная способность которого равна единице, т. е. которое поглощает целиком всю энергию падающего на него излучения, мы будем называть *черным телом*. Излучение такого тела — так называемое «черное излучение» — зависит поэтому только от температуры; важно знать спектральное распределение интенсивности такого излучения. Следующие страницы как раз и посвящены выводу закона этого распределения. Что касается способа экспериментального получения черного излучения, то еще Кирхгоф доказал, что замкнутая полость, в стенке которой имеется небольшое отверстие и которая поддерживается при постоянной температуре (духовка), ведет себя как черное тело. В самом деле, излучение, попадающее через отверстие в полость извне, после многократного отражения от стенок в конце концов полностью поглощается ими. Поэтому излучение внутри полости, а стало быть, и излучение, выходящее сквозь отверстие наружу, должно обладать в точности тем же спектральным распределением интенсивности, что и излучение черного тела.

Не выходя за пределы термодинамики и электромагнитной теории света, можно вывести два закона касательно зависимости черного излучения (или, как его иногда называют, излучения из полости) от температуры. Закон Стефана (1879 г.) утверждает, что полная энергия излучения пропорциональна четвертой степени температуры излучающего тела — чем более нагрет источник, тем интенсивнее излучение. Следующий шаг сделал Вин (1893 г.), сформулировав закон смещения, который носит его имя и утверждает следующее. Спектральное распре-

деление плотности энергии подчиняется уравнению вида

$$u_\nu = \nu^3 F\left(\frac{\nu}{T}\right),$$

где  $F$  — функция, зависящая только от отношения частоты к температуре, конкретный вид которой нельзя установить термодинамическими методами. Эти две теоремы можно доказать (как это сделано в приложении 33), рассматривая излучение как своего рода термодинамическую машину. Благодаря наличию светового давления эта машина может в принципе производить работу с помощью гипотетических подвижных зеркал, так что в силу эффекта Допплера, возникающего из-за движения зеркал, частота излучения, а вместе с ней и его полная энергия будет изменяться. Можно отметить, что закон Вина включает и закон Стефана; чтобы получить его, остается только проинтегрировать формулу Вина по всему спектру:

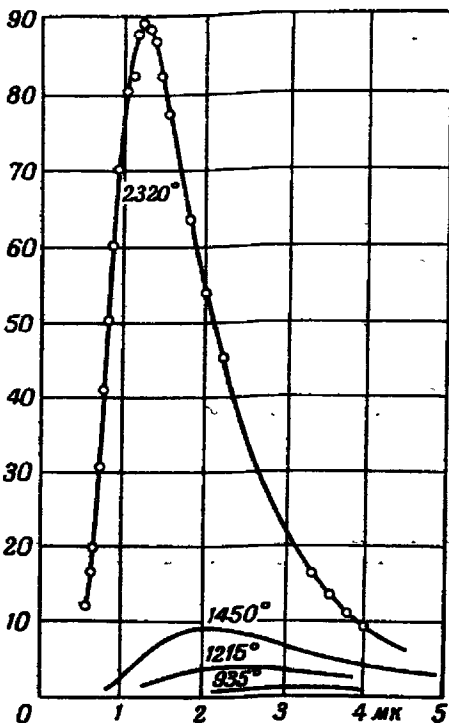
$$\int u_\nu d\nu = \int \nu^3 F\left(\frac{\nu}{T}\right) d\nu.$$

Полагая  $x = \nu/T$  и выбирая  $x$  в качестве новой переменной интегрирования, получаем

$$\int u_\nu d\nu = T^4 \int x^3 F(x) dx,$$

так что полная энергия излучения оказывается пропорциональной четвертой степени  $T$ , поскольку интеграл по  $x$ , будучи константой, от  $T$  не зависит.

Причина, по которой закон Вина называют «законом смещения», такова. Экспериментально было обнаружено, что интенсивность излучения раскаленного тела, которое поддерживается при постоянной температуре, как функция длины волны изображается графически кривой, показанной на фиг. 81. В области



Фиг. 81. Распределение интенсивности теплового излучения в зависимости от длины волны по данным Люммера и Прингсгейма.

очень коротких, так же как и в области очень длинных волн интенсивность исчезающе мала, следовательно, при некоторой длине волны  $\lambda_{\text{макс}}$  должен наблюдаться максимум. Если теперь изменить температуру источника излучения, график интенсивности также изменится. В частности, сместится и максимум. Соответствующие измерения показали, что при этом произведение температуры на длину волны, отвечающую максимуму, остается постоянным. Иначе говоря,

$$\lambda_{\text{макс}} T = \text{const.}$$

Это соотношение сразу же следует из закона Вина. До сих пор мы рассматривали распределение энергии как функцию частоты  $\nu$ , так что  $u_\nu$  представляла собой энергию излучения в интервале частот  $d\nu$ . Правило смещения относится, однако, к графику зависимости интенсивности от  $\lambda$ , поэтому теперь  $u_\lambda$  будет представлять энергию в интервале длин волн  $d\lambda$ . Переход от  $u_\nu$  к  $u_\lambda$  несложен: очевидно, должно иметь место равенство  $u_\nu d\nu = u_\lambda d\lambda$ , а так как  $\lambda\nu = c$ , мы получаем соотношение между  $d\nu$  и  $d\lambda$ :  $|d\nu|/\nu = |d\lambda|/\lambda$ . Следовательно, спектральное распределение энергии как функция длины волны будет иметь вид

$$u_\lambda = \frac{c^4}{\lambda^5} F\left(\frac{c}{\lambda T}\right).$$

Теперь можно без труда доказать закон смещения, рассчитав длину волны, при которой значение  $u_\lambda$  максимально. Условие максимума есть равенство  $du_\lambda/d\lambda = 0$ , или

$$-\frac{c^4}{\lambda^5} \left\{ -\frac{5}{\lambda} F\left(\frac{c}{\lambda T}\right) - \frac{c}{\lambda^2 T} F'\left(\frac{c}{\lambda T}\right) \right\} = 0,$$

откуда следует, что

$$\frac{c}{\lambda T} F'\left(\frac{c}{\lambda T}\right) + 5F\left(\frac{c}{\lambda T}\right) = 0.$$

Это уравнение содержит всего одну неизвестную величину  $c/\lambda T$ , и его решение, если оно существует, должно, разумеется, иметь форму  $\lambda T = \text{const.}$  Таким образом, теорема о смещении максимума интенсивности при изменении температуры немедленно следует из закона Вина. Значение постоянной, естественно, нельзя определить, если функция  $F$  неизвестна.

Однако об этой функции термодинамика сама по себе не может сказать ничего; чтобы найти  $F$ , нужно обратиться к какой-то конкретной модели. Но из термодинамических соображений ясно, что форма закона, определенного той или иной функцией  $F$ , не должна зависеть от конкретного механизма излучения. Поэтому в качестве простейшей модели излучающего тела Планк выбрал линейный гармонический осциллятор с соб-

ственной частотой  $\nu$ . Для такого осциллятора мы можем, с одной стороны, рассчитать энергию, излучаемую за секунду. Она будет равна просто энергии излучения колеблющегося диполя (гл. V, § 7)

$$\delta e = \frac{2e^2 \overline{\dot{r}}^2}{3c^3} = \frac{2e^2}{3mc^3} (2\pi\nu)^2 \bar{e},$$

где  $e$  — энергия осциллятора, а черта сверху означает усреднение по некоторому промежутку времени, который хотя и велик по сравнению с периодом колебаний, но все же настолько мал, что излучением за это время можно пренебречь. В согласии с уравнением движения мы имеем  $\ddot{r} = -(2\pi\nu)^2 r$ , а

$$\bar{e}_{\text{кин}} = \frac{1}{2} m \overline{\dot{r}^2} = \frac{1}{2} m \overline{(2\pi\nu r)^2} = \bar{e}_{\text{пот}} = \frac{1}{2} \bar{e}.$$

С другой стороны, работа, произведенная над осциллятором полем излучения, спектральная плотность которого есть  $u_\nu$ , за одну секунду, равна

$$\delta W = \frac{\pi e^2}{3m} u_\nu,$$

как это следует из уравнений движения осциллятора во внешнем поле (это доказано в приложении 34). В случае равновесия эти две величины должны совпадать друг с другом. Поэтому

$$u_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \bar{e}.$$

Таким образом, если мы знаем среднюю энергию осциллятора, то мы знаем также и распределение интенсивности черного излучения.

Значение  $\bar{e}$ , определенное методами классической статистики (гл. I, § 5), оказывается равным

$$\bar{e} = kT,$$

где  $k$  — постоянная Больцмана; это частный случай весьма общего результата статистической механики — закона равнораспределения. В соответствии с этим законом каждый член в гамильтониане, пропорциональный квадрату координаты или импульса, дает один и тот же вклад в среднюю энергию, а именно  $\frac{1}{2}kT$ . В гамильтониане осциллятора имеются два таких члена, следовательно, его энергия есть  $kT$ . Это можно доказать и непосредственно, несложным вычислением. Согласно теореме Больцмана (доказанной в гл. I, § 6), при равновесии состояние осциллятора, характеризуемое энергией  $e$ , встречается с относительной вероятностью  $e^{-e/kT}$ , так что  $\bar{e}$  получается в результате

усреднения по всем состояниям с этим весовым множителем. Полагая для краткости  $\beta = 1/kT$ , находим

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\int_0^{\infty} \varepsilon e^{-\beta \varepsilon} d\varepsilon}{\int_0^{\infty} e^{-\beta \varepsilon} d\varepsilon} = -\frac{d}{d\beta} \ln \int_0^{\infty} e^{-\beta \varepsilon} d\varepsilon = -\frac{d}{d\beta} \ln \frac{1}{\beta} = \frac{1}{\beta} = kT.$$

Если так определенное классическое значение энергии осциллятора подставить в формулу излучения, то она дает

$$u_{\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT.$$

Это — закон излучения Релея — Джинса (1900, 1909 гг.). В первую очередь заметим, что этот закон согласуется, чего и следовало ожидать, с законом смещения Вина, который как непосредственное следствие термодинамики должен выполняться во всех случаях. В длинноволновой области излучения, т. е. при малых значениях  $\nu$ , закон Релея — Джинса также очень хорошо согласуется с экспериментальной кривой распределения интенсивности; в этой области интенсивность излучения возрастает пропорционально квадрату частоты. Но для больших частот формула уже неверна. Из эксперимента известно, что интенсивность достигает максимума при некоторой частоте, а затем снова падает. Однако записанная выше формула не дает совершенно никаких указаний на этот максимум; наоборот, по формуле Релея — Джинса спектральная интенсивность возрастает как квадрат частоты и в пределе очень больших частот, т. е. очень малых длин волн, становится бесконечной. То же самое справедливо и по отношению к полной энергии излучения

$u = \int_0^{\infty} u_{\nu} d\nu$  — соответствующий интеграл расходится. Имеет место, как говорят, «ультрафиолетовая катастрофа».

Предпринимались попытки устранить эту явную несуразность в теории с помощью следующей гипотезы. Предположим, что в нашем случае, как и в химии, для достижения равновесия требуется определенное время релаксации. Допустим также, что для черного излучения скорость релаксации чрезвычайно мала, так что проходит очень много времени, прежде чем устанавливается равновесие. Но за это время, как нетрудно представить, свойства системы, вообще говоря, полностью изменяются в результате внешних воздействий. Однако эти рассуждения никоим образом не затрагивают существа дела. Действительно,

мы всегда можем, по крайней мере теоретически, как угодно долго поддерживать внешние условия, в частности температуру, неизменными. Тогда рано или поздно равновесие все же неизбежно установится.

В такой ситуации Планк выдвинул смелую мысль, что все эти трудности можно устранить, допустив существование *конечных дискретных квантов энергии*  $\epsilon_0$ , таких, что энергия осциллятора может оказаться равной (помимо  $\epsilon=0$ ) лишь  $\epsilon_0, 2\epsilon_0, 3\epsilon_0$  и т. д. Именно таким способом мы фактически и получим закон излучения Планка, который блестяще подтверждается экспериментом. Самое важное для этого — суметь найти среднюю энергию  $\bar{\epsilon}$ ; формально вычисление  $\bar{\epsilon}$  отличается от проведенного выше только заменой интегралов на суммы. По-прежнему состояния с тем или иным значением энергии встречаются с относительной вероятностью, определяемой фактором Больцмана, но теперь в расчетах фигурируют уже не все энергии, как это было раньше, а лишь энергии вида  $n\epsilon_0$  ( $n=0, 1, 2, 3, \dots$ ). Поэтому среднее значение равно

$$\begin{aligned} \bar{\epsilon} &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\epsilon_0 e^{-\beta n\epsilon_0}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n\epsilon_0}} = -\frac{d}{d\beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n\epsilon_0} = \\ &= -\frac{d}{d\beta} \ln \frac{1}{1 - e^{-\beta\epsilon_0}} = \frac{\epsilon_0 e^{-\beta\epsilon_0}}{1 - e^{-\beta\epsilon_0}} = \frac{\epsilon_0}{e^{\beta\epsilon_0} - 1}, \quad \left(\beta = \frac{1}{kT}\right). \end{aligned}$$

Подставляя это выражение в соответствующую формулу, получаем

$$u_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{\epsilon_0}{e^{\epsilon_0/kT} - 1}.$$

Чтобы это выражение не противоречило закону Вина, который, будучи прямым следствием термодинамики, справедлив при всех обстоятельствах, необходимо принять, что

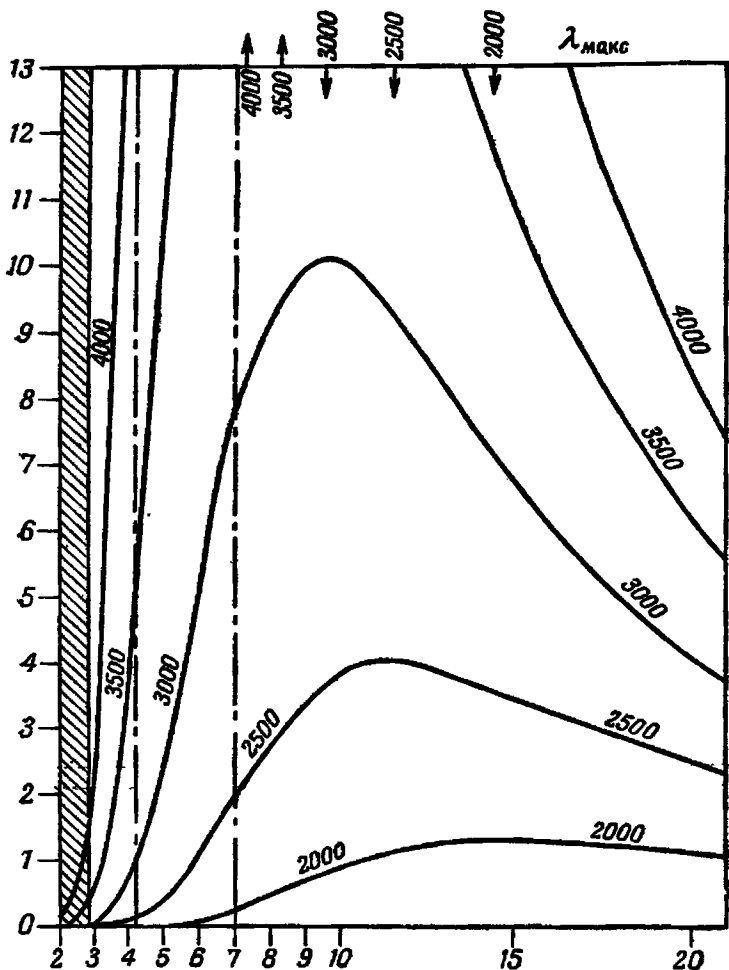
$$\epsilon_0 = h\nu,$$

где  $h$  есть универсальная постоянная — постоянная Планка (ибо температура может входить в формулу лишь в комбинации  $\nu/T$ ). Отсюда прямо следует закон излучения Планка

$$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Как мы уже отмечали, эта формула излучения прекрасно согласуется с опытом. Распределения интенсивности при различных температурах графически изображены на фиг. 82. При





Фиг. 82. Кривые спектрального распределения интенсивности теплового излучения по Планку для температур от 2000 до 4000°.

Единицей масштаба по оси абсцисс служит 0,1 мк. Заштрихованная область соответствует ультрафиолетовому излучению (вплоть до 0,28 мк). Область видимого излучения ограничена двумя пунктирными линиями. Цифры на кривых представляют собой абсолютные температуры. Следует отметить хорошее согласие с экспериментальными данными, приведенными на фиг. 81 (стр. 285).

малых частотах спектральная плотность возрастает приблизительно как квадрат частоты  $\nu$ : если  $h\nu/kT \ll 1$ , то экспоненту в знаменателе можно разложить в ряд по степеням  $h\nu/kT$ , причем первый член разложения в точности соответствует закону Релея — Джинса:

$$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{(1 + h\nu/kT + \dots) - 1} = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} kT + \dots$$

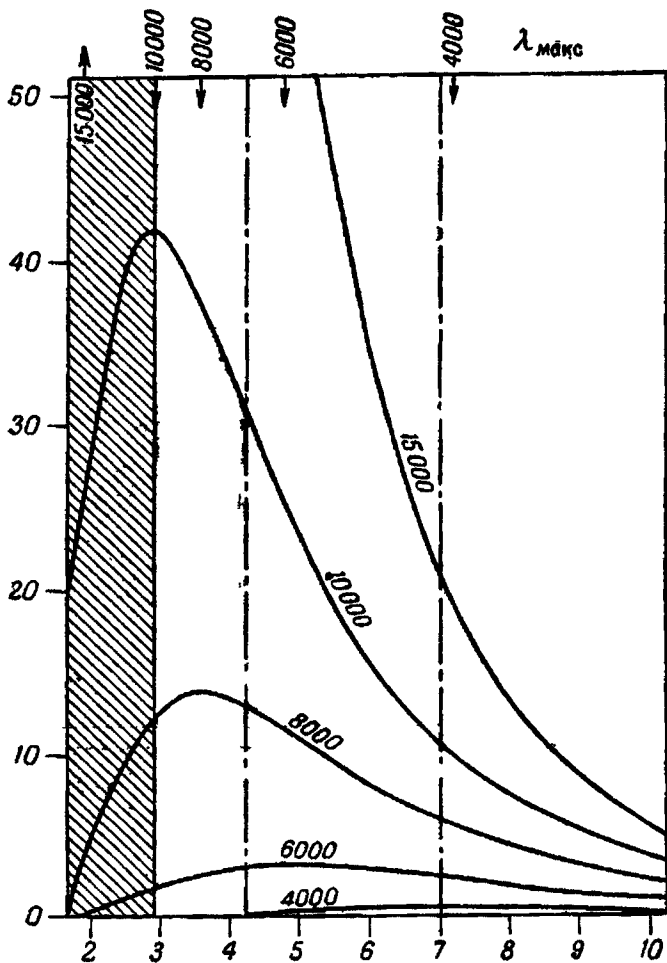
Таким образом, в длинноволновой части спектра закон Планка согласуется с классическими формулами. Иначе обстоит дело в области коротких волн. Если  $h\nu/kT \gg 1$ , то экспонента в знаменателе гораздо больше единицы. В этом случае мы можем просто вычеркнуть из знаменателя единицу и получить тем самым приближенный закон излучения для коротких волн

$$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} e^{-h\nu/kT}.$$

Закон излучения в такой форме был предложен ранее Вином (1896 г.), который пытался феноменологически описать результаты своих измерений в этой части спектра (фиг. 83). Между областями применимости этих двух предельных законов излучения лежит обширный переходный район, в котором и лежит максимум кривой распределения. При повышении температуры этот максимум, в согласии с законом Вина, сдвигается в сторону коротких волн. Аналогичное проведенному раньше вычисление максимума интенсивности приводит к соотношению

$$\frac{kT}{h\nu_{\max}} = \frac{k}{hc} \lambda_{\max} T = C,$$

где  $C$  — постоянная, которую можно найти, решая трансцендентное уравнение, и которая оказывается равной 0,2014. Выше мы упоминали (гл. I, § 8), что атомные постоянные  $k$  и  $h$  можно определить с помощью спектрального распределения энергии в излучении черного тела. Константа  $h$  была впервые определена фактически Планком с помощью закона Стефана и закона смещения Вина. Согласно первому закону, полная энергия, излучаемая за секунду с одного квадратного сантиметра поверхности нагретого до температуры  $T$  тела, есть  $J = \sigma T^4$ , где  $\sigma$  — постоянная, называемая коэффициентом излучения и равная  $\sigma = 5,67 \times 10^{-5}$  эрг/см<sup>2</sup>·сек·град<sup>4</sup>. Эту постоянную можно получить и теоретически, интегрируя по всему спектру функцию распределения Планка. В результате получается равенство  $\sigma = 2\pi^5 k^4 / 15c^2 h^3$ . С другой стороны, измерения показывают, что постоянная в законе Вина  $[\lambda_{\max} T = C(hc/k) = 0,2014 hc/k]$  равна 0,290 см·град. (Чтобы найти порядок этой величины,



Фиг. 83. Кривые спектрального распределения, аналогичные приведенным на фиг. 82, но для более высоких температур.

Здесь единица масштаба по оси ординат меньше, чем на фиг. 82.

достаточно заметить, что максимум интенсивности в излучении Солнца, которое излучает как черное тело при температуре  $T=6000^\circ$ , лежит в зеленой части спектра, т. е. приблизительно при  $\lambda=4500 \text{ \AA}$ .) Зная эти две эмпирически определенные константы, можно рассчитать  $h$  и  $k$ ; найденные при этом значения хорошо согласуются с оценками, полученными другими методами.

Сделаем еще одно короткое замечание. Из общего вида кривых распределения явствует, что коэффициент полезного действия, скажем, ламп накаливания и других осветительных приспособлений, основанных на излучении раскаленных тел, совершенно ничтожен. Действительно, область видимого света соответствует лишь узкой полосе в спектре теплового излучения; вся остальная энергия излучения пропадает даром, по крайней мере в смысле освещения.

Вернемся еще к истории открытия Планка. Нет нужды говорить, что гипотеза Планка встречала вначале самое яростное сопротивление физиков. Никто не хотел верить, что непременным условием вывода закона излучения является обращение к гипотезе квантов. Считалось, что эти новые идеи представляют собой не более чем искусственный математический прием, который рано или поздно найдет ту или иную интерпретацию в рамках классической физики. Однако все попытки такого рода потерпели полный провал.

Заслуга серьезного отношения к новым идеям принадлежит Эйнштейну. Он первый указал на то, что, помимо теплового излучения, существуют и другие явления, которые можно объяснить на основе квантовой гипотезы и которые необъяснимы с классической точки зрения. В 1905 г. Эйнштейн выдвинул гипотезу световых квантов и показал, что законы фотоэлектрического эффекта свидетельствуют в ее пользу. Мы уже обсуждали это (гл. IV, § 2).

## § 2. Теплоемкость твердых тел и многоатомных газов

Годом или двумя позднее (1907 г.) Эйнштейн показал, что формула Планка для средней энергии осциллятора

$$\bar{\epsilon} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

непосредственно подтверждается тепловыми свойствами твердых тел. Из опыта известно, что при высоких температурах справедлив закон, называемый *законом Дюлонга и Пти*, который утверждает, что теплоемкость одной грамм-молекулы любого твердого вещества (гл. I, § 4) составляет примерно

6 кал/град. С классической точки зрения этот закон вполне понятен. В твердом теле каждый атом можно рассматривать как трехмерный гармонический осциллятор, поскольку, согласно нашим представлениям, атом удерживается в определенном положении равновесия некоторой квазиупругой силой. Поэтому по правилам классической статистики ему следует приписать в среднем полную энергию  $3kT$ , так что моль вещества будет обладать энергией  $U = 3N_0kT = 3RT$ , где  $R$  — универсальная газовая постоянная, равная приблизительно 2 кал/град. Отсюда легко найти теплоемкость как приращение энергии, соответствующее повышению температуры на 1 град. Итак,

$$c_v = \frac{\partial U}{\partial T} = 3R \sim 6 \text{ кал/град.}$$

Однако на опыте наблюдаются отклонения от этого правила: чем тверже тело, т. е. чем крепче «привязаны» атомы к положению равновесия, тем заметнее эти отклонения. Так, например, для алмаза теплоемкость одной грамм-молекулы составляет при комнатной температуре всего лишь примерно 1 кал/град.

Эйнштейн объяснил эти отклонения тем обстоятельством, что в этом случае нельзя пользоваться классическим выражением для средней энергии: необходимо обратиться к формуле Планка для средней энергии квантового осциллятора. Тогда энергия одного моля вещества будет равна

$$U = \frac{3N_0 h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = 3RT \frac{h\nu/kT}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

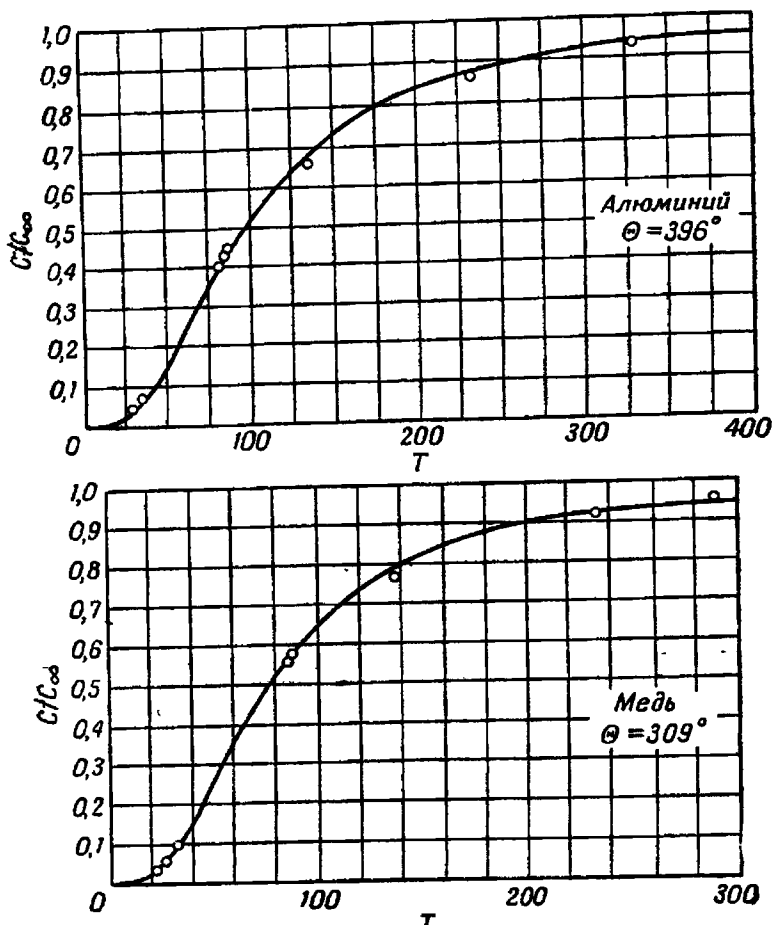
В этой формуле  $h\nu$  есть элементарный квант колебательной энергии осциллятора; он тем больше, чем прочнее удерживается атом в положении равновесия, так что слабая связь эквивалентна малой колебательной энергии, а стало быть, малой частоте. Важный вопрос состоит в том, какая из величин больше,  $h\nu$  или  $kT$ . Обычно при комнатных температурах  $h\nu/kT \ll 1$ , так что формулу для средней энергии осциллятора можно упростить разложив в ряд. В этом случае она переходит в классическую формулу

$$U = 3RT \frac{h\nu/kT}{(1 + h\nu/kT + \dots) - 1} = 3RT + \dots$$

и, таким образом, приводит к закону Дюлонга и Пти.

Если же атомы жестко связаны с положением равновесия (как, например, в алмазе) или теплоемкость измеряется при очень низких температурах, то  $h\nu/kT$  становится сравнимой и даже превышает единицу; тогда появляются отклонения от

закона Дюлонга и Пти. Для теплоемкости получается кривая, форма которой показана на фиг. 84. При больших значениях  $T$



Фиг. 84. График низкотемпературной зависимости теплоемкости по Дебаю. Маленькие кружки обозначают экспериментальные точки, сплошная кривая соответствует дебаевской теории;  $\Theta$  — характеристическая температура вещества (так, что  $C (=C_{\infty})$  есть функции от  $T/\Theta$ ).

кривая асимптотически приближается к классическому пределу  $6 \text{ кал/град}$ , а при малых  $T$  убывает, проходя при  $T=0$  через начало координат. Экспериментальные исследования, имеющие целью проверку предсказаний теории и проведенные в основном

Нернстом и его сотрудниками, показали, что имеет место приблизительное согласие между экспериментом и теорией, особенно в связи с тем фактом, что теплоемкость стремится к нулю по мере приближения к нулю температуры. Тем не менее были обнаружены и расхождения, свидетельствующие о том, что теория в той форме, в какой она тогда существовала, нуждалась еще в некоторых уточнениях.

Эти уточнения были сделаны Дебаем и независимо Борном и Карманом (1912 г.). Они основываются на следующих соображениях. До сих пор мы считали, что каждый отдельно взятый атом в твердом теле (кристалле) совершает гармонические колебания совершенно независимо от других атомов. Однако на самом деле это вовсе не так, поскольку атомы кристаллической решетки, вне сомнения, очень сильно связаны друг с другом. Поэтому не следует думать, что  $N_0$  атомов кристалла колеблются с одной и той же частотой. Скорее нужно рассматривать связанную систему  $3N_0$  различных колебаний (соответственно  $3N_0$  степеням свободы  $N_0$  атомов, находящихся в одном моле). Энергия системы поэтому будет иметь вид

$$U = \sum_{r=1}^{3N_0} \frac{h\nu_r}{e^{h\nu_r/kT} - 1},$$

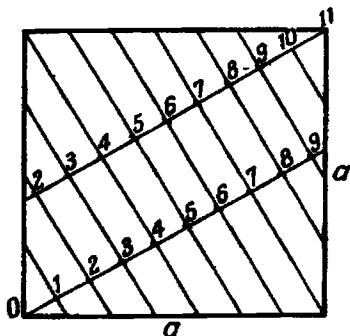
где  $\nu_r$  — частота  $r$ -го колебания.

Разумеется, чрезвычайно трудоемкой задачей было бы непосредственное вычисление этой суммы на основе какой-либо конкретной модели. Но приближенную формулу, как оказалось, получить вполне можно. Простейший метод, пригодный для описания кристаллов, решетка которых составлена из атомов одного сорта, предложен Дебаем и заключается в следующем. Нормальные колебания атомов кристаллической решетки в обычной теории упругости рассматриваются как колебания кристалла в целом, хотя реальному наблюдению доступны, естественно, лишь колебания, длина волны которых значительно превышает межатомные расстояния (звуковые волны). Поэтому для приближенного вычисления энергетической суммы можно заменить спектр нормальных колебаний атомов кристаллической решетки спектром упругих колебаний кристалла в целом. Следовательно, необходимо решить проблему определения спектра упругих колебаний твердого тела, которое в согласии с подходом теории упругости считается непрерывным. Аналогичные проблемы (*подсчет числа собственных колебаний*) уже встречались нам в различных областях квантовой теории (световое излучение,  $\beta$ -распад и пр.), и результат, простой вывод которого мы сейчас дадим, разумеется, не будет неожиданным.

Рассмотрим для простоты тело, имеющее форму куба с ребром  $a$ , и попытаемся найти его собственные колебания, иначе говоря, стоячие волны, которые могут возникнуть в этом кубе. Это та же самая задача, которую мы уже решали в одномерном случае колеблющейся струны и в двумерном случае колеблющейся круговой мембраны (гл. V, § 9). Для любого собственного колебания необходимо, чтобы вдоль каждого ребра куба укладывалось в точности целое число полуволи (фиг. 85). Поэтому если в кубе распространяется плоская волна, направление которой задается тремя направляющими косинусами  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  (так что  $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$ ), то проекция любого ребра на это

Фиг. 85. Пример собственных колебаний кубической полости.

Вдоль каждого ребра должно укладываться целое число полуволи (в нашем примере  $k_1=7$ ,  $k_2=4$ ).



направление должна равняться целому числу полуволи  $\lambda/2$ . Обозначив три соответствующих целых числа через  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$ , получим три уравнения:

$$n_1 \frac{\lambda}{2} = a\alpha, \quad n_2 \frac{\lambda}{2} = a\beta, \quad n_3 \frac{\lambda}{2} = a\gamma.$$

Случай  $\alpha=1$ ,  $\beta=\gamma=0$  тривиален; волна при этом движется параллельно первому ребру, а колебания совпадают с собственными колебаниями закрепленной с обоих концов струны. Но упомянутые условия, естественно, должны выполняться и для трехмерных колебаний.

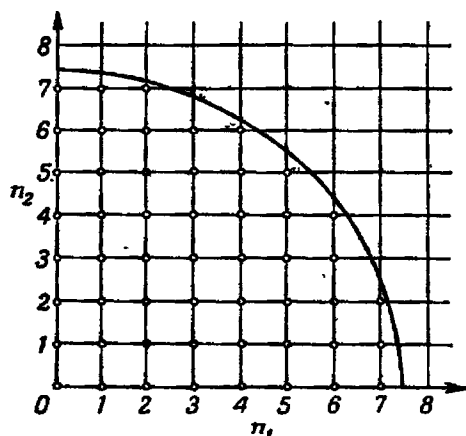
Теперь мы уже можем найти спектр собственных колебаний. Во-первых, возводя полученные уравнения в квадрат и складывая их, мы приходим к равенству

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \frac{4a^2}{\lambda^2},$$

так что длина волны собственного колебания определяется суммой квадратов трех целых чисел  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$ . То или иное собственное колебание удобно поэтому изобразить точкой в трехмерном пространстве; целочисленные координаты точки  $n_1$ ,  $n_2$



и  $n_3$  характеризуют данное колебание в соответствии с тремя приведенными выше уравнениями. Теперь ясно, что число собственных колебаний с длиной волны больше  $\lambda$  в точности совпадает с числом целых точек ( $n_1, n_2, n_3$ ), лежащих внутри сферы радиуса  $2a/\lambda$  в первом октанте  $n$ -пространства (поскольку равенство  $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 4a^2/\lambda^2$  представляет собой уравнение сферы, радиус которой есть  $2a/\lambda$ , а центр находится в начале координат  $n$ -пространства). Все собственные колебания с длиной волны больше  $\lambda$  изображаются поэтому теми точками



Фиг. 86. Подсчет числа собственных колебаний.

Число колебаний с длиной волны  $> \lambda$  равно числу узлов решетки внутри изображенного кругового квадранта. Последнее же примерно равно площади квадранта.

$n$ -пространства, которые заключены внутри этой сферы. Ограничение первым октантом сферы тоже вполне понятно, так как все  $n$ , естественно, положительны.

Искомое число внутренних целых точек шарового сегмента приблизительно равно его объему. В этом легко убедиться с помощью фиг. 86 (хотя чертеж, разумеется, имеет лишь два измерения). Поскольку координаты узлов изображенной на рисунке решетки целочисленны, небольшие квадратики, образованные линиями решетки, обладают единичной площадью. Относительная ошибка, возникающая при замене числа внутренних целых точек круга (сферы) на его площадь (объем), мала, если круг (сфера) содержит много таких точек. Количество собственных колебаний, длина волны которых больше  $\lambda$ , равно, таким образом, объему сферического октанта:

$$Z = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2a}{\lambda}\right)^3 = \frac{4\pi}{3} \frac{V}{c^3} v^3,$$

где  $c$  — скорость распространения волны. Однако в кристалле могут возникать как поперечные, так и продольные волны, при-

чем поперечные волны имеют две степени свободы соответственно двум возможным взаимно перпендикулярным направлениям поляризации. Учитывая этот факт, мы должны написать

$$Z = \frac{4\pi V}{c^3} \nu^3, \quad \text{где} \quad \frac{1}{c^3} = \left[ \frac{2}{c_t^3} + \frac{1}{c_l^3} \right].$$

Здесь  $c_t$  — скорость поперечных волн, а  $c_l$  — скорость продольных (т. е. звуковых) волн. Отсюда мы сразу же получаем число собственных колебаний в интервале частот от  $\nu$  до  $\nu + d\nu$ :

$$dZ = \frac{4\pi V}{c^3} \nu^3 d\nu.$$

Мы еще вернемся к этой формуле. Ее можно доказать, исходя из самых общих предположений, не ограничиваясь случаем упругих собственных колебаний. Более того, как показал Вейль, она остается справедливой при любых конкретных геометрических очертаниях объема  $V$ .

Вернемся теперь к вычислению средней энергии атомов в твердом теле. Полученное несколько раньше выражение

$$U = \sum_{r=1}^{3L} \frac{h\nu_r}{e^{h\nu_r/kT} - 1}$$

можно теперь преобразовать только что описанным методом, т. е. относя частоты  $\nu$ , уже не к собственным колебаниям атомов, а к упругим волнам, возникающим в твердом теле. Поскольку число колебаний в частотном интервале от  $\nu$  до  $\nu + d\nu$  уже известно, суммирование можно заменить интегрированием, причем весовая функция в подынтегральном выражении будет определяться как раз числом колебаний. Таким образом,

$$U = \int \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \frac{4\pi V}{c^3} \nu^3 d\nu.$$

Не нужно забывать, однако, что число собственных колебаний кристалла ограничено, а именно равно  $3N_0$ . Поэтому существует максимальная частота  $\nu_m$ , которая находится из уравнения

$$3N_0 = Z = \frac{4\pi V}{3c^3} \nu_m^3, \quad \text{или} \quad \nu_m = c \sqrt[3]{\frac{9N_0}{4\pi V}}.$$

Следовательно, интегрировать следует не до бесконечности, а лишь до этой максимальной частоты, служащей, таким образом, верхним пределом записанного нами интеграла. Итак, мы

получаем для энергии  $U$  выражение

$$U = \frac{4\pi V}{c^3} \int_0^{\nu_m} \frac{h\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = \frac{4\pi V}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 h \int_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 3RT \frac{3}{x_m^3} \int_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{e^x - 1},$$

где для краткости положено  $x_m = h\nu_m/kT = \Theta/T$ , причем  $\Theta = h\nu_m/k$  называется *дебаевской характеристической температурой*. Формула Дебая дает более точное приближение к действительности, чем эйнштейновская модель не связанных друг с другом осцилляторов с одной и той же частотой (фиг. 84, стр. 295). Борн и Карман получили независимо еще более точную формулу, принимающую в учет структуру кристаллической решетки, которая в предшествующих вычислениях не учитывалась вовсе. Для различных типов кристаллической решетки при этом получаются различные выражения, которые переходят, однако, в области не очень низких температур в сумму определенного числа дебаевских функций с разными значениями  $\Theta$ .

Эта теория во всех своих пунктах была подтверждена экспериментально. Например, при чрезвычайно низких температурах на опыте мы наблюдаем пропорциональность теплоемкости третьей степени  $T$ , в то время как эйнштейновская модель приводит к экспоненциальному закону падения теплоемкости по мере понижения температуры. Теория Дебая дает уже правильную температурную зависимость теплоемкости. В самом деле, при низких температурах  $x_m$  стремится к бесконечности, так что интеграл в определяющей энергию  $U$  формуле становится практически постоянным. Так как множитель перед интегралом включает четвертую степень  $T$ , а теплоемкость получается из энергии дифференцированием по  $T$ , экспериментальный закон  $T^3$  немедленно следует из дебаевской формулы. Исследования Блэкмана (1935 г.) показали, что на самом деле в некоторых случаях теплоемкость, по-видимому, подчиняется закону  $T^3$  и в области таких температур, которые недостаточно малы, чтобы оправдать вышеприведенное теоретическое объяснение. Блэкман показал, что уточненная теория Борна и Кармана, учитывающая структуру кристаллической решетки, способна объяснить эти случаи: можно утверждать в качестве причины, что дебаевская характеристическая температура  $\Theta$  перестает быть константой и увеличивается с понижением температуры. Следует ожидать, что чистый закон  $T^3$  будет выполняться лишь в области самых низких температур. Соответствующее падение теплоемкости действительно наблюдается. В классическом случае алмаза оказалось возможным извлечь определенные сведения о силах, действующих внутри кристаллической решетки, из измерений коэффициента упругости (Ба-

гавантам и Бнмасенакар, 1944 г.) и объяснить на этой основе поведение теплоемкости вплоть до самых низких температур (Смнт, 1946 г.). Можно сказать, что к настоящему времени экспериментальные факты, касающиеся теплоемкости твердых тел, нашли полное объяснение.

Точно таким же образом можно применить квантовую теорию осциллятора к *многоатомным газам*. В этом случае экспериментально определенная теплоемкость увеличивается с температурой в согласии с формулой Планка, примененной к молекулярным колебаниям. В гл. I, § 5 мы уже говорили, что классическая теория теплоемкости вынуждена считать, что движение электронов в атоме не дает вклада в энергию и что теплоемкость газа определяется только движением его молекул, которые рассматриваются как твердые образования. При этом одноатомные молекулы, как предполагается, обладают лишь поступательными степенями свободы, тогда как у двухатомных молекул есть еще две вращательные степени свободы (отвечающие вращениям вокруг двух осей, перпендикулярных оси молекулы). Объяснение этого факта, совершенно непонятного с точки зрения до-квантовой физики, состоит, разумеется, в том, что энергия связи электронов значительно больше средней энергии теплового движения  $kT$ . Если мысленно заменить электроны осцилляторами с частотой  $\nu$ , соответствующей линиям наблюдаемых спектров, то энергия  $h\nu$  окажется очень большой по сравнению с  $kT$ . При обычных и даже очень высоких температурах ни один из этих осцилляторов не может возбудиться. Это сразу же объясняет, почему внутриатомное движение не дает вклада в теплоемкость.

Аналогичные рассуждения справедливы и для вращения молекул, состоящих из легких атомов. Как мы видели, в квантовой теории Бора (гл. V, § 1) вращательная энергия задается формулой

$$E = \frac{j^2 h^2}{8\pi^2 A} \quad (j = 0, 1, 2, \dots);$$

новая квантовая механика заменяет  $j^2$  на  $j(j+1)$ . И в том, и в другом случае расстояние между двумя соседними уровнями равно  $\epsilon = h^2/4\pi^2 A$ . Здесь  $A$  обозначает момент инерции молекулы, так что  $\epsilon$  оказывается наибольшим, когда  $A$  достигает минимального значения, т. е. для молекулы  $H_2$ . Нужно ожидать поэтому, что при температурах, определенных неравенством  $kT < \epsilon$ , вращательная энергия  $H_2$  не будет играть заметной роли. Так и обстоит дело в действительности, что было впервые замечено Эйкеном (1912 г.). Он обнаружил, что около  $40^\circ K$  теплоемкость  $H_2$  понижается до значения, характерного для

одноатомного газа. Для других газов критическая температура слишком мала, что не позволяет непосредственно наблюдать этот эффект полного «вымораживания» молекулярных вращений. Но начало процесса — падение теплоемкости — доступно наблюдениям. Это дает возможность рассчитать момент инерции молекул. Результаты хорошо согласуются с другими измерениями, например с данными по полосатым спектрам (гл. IX, § 3) и с расчетами, основанными на теоретических моделях.

### § 3. Квантование черного излучения

Вернемся теперь к закону черного излучения. В предыдущем параграфе мы видели, что гипотеза Планка блестяще подтвердилась не только для черного излучения, но и в теории теплоемкости. Последнее еще раз красноречиво свидетельствует в пользу справедливости квантовой теории.

С другой стороны, вывод закона излучения методом Планка в какой-то степени неудовлетворителен, поскольку он во многом основан на законах классической физики и лишь частично использует квантовые представления. Действительно, формула, связывающая среднюю энергию осциллятора с полем черного излучения  $u_\nu = (8\pi\nu^2/c^3)\bar{\epsilon}$ , получается чисто классическим путем; при выводе этой формулы применяются классические законы поглощения и излучения осциллятора.

Можно ли найти другой путь, не использующий свойства классического осциллятора? Сама собой напрашивается мысль попытаться, имея в виду методы Релея — Джинса и Дебая, описать электромагнитное поле в кубической полости с отражающими стенками при помощи точно таких же статистических приемов, какие применяются при описании собственных колебаний кристалла в теории теплоемкости. Полость с зеркальными стенками обладает в точности таким же спектром собственных колебаний, как кристалл. Поэтому число собственных колебаний в интервале частот от  $\nu$  до  $\nu + d\nu$  можно считать тем же способом, что и раньше:

$$dz = 2 \frac{4\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu.$$

Однако здесь появляется добавочный множитель 2, поскольку каждой частоте и каждому направлению соответствуют две волны с различными поляризациями.

Разумно предположить теперь, что каждое собственное колебание ведет себя подобно планковскому осциллятору со средней энергией

$$\frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

(Здесь ход мысли и метод рассуждений последнего параграфа автоматически перенесен со случая собственных колебаний кристаллической решетки на случай собственных колебаний электромагнитного поля.) Таким образом, мы снова получили формулу Планка

$$u_\nu d\nu = \frac{1}{V} dz \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu.$$

Хотя этот метод и отличается простотой, он все же не свободен от серьезных принципиальных трудностей. В самом деле, формула для средней энергии осциллятора получена в предположении, что осциллятор с частотой  $\nu$  может находиться в различных энергетических состояниях: его энергия может оказаться равной не только  $h\nu$ , но и любому целому числу элементарных квантов, причем вероятность состояния с энергией  $nh\nu$  пропорциональна  $e^{-nh\nu/kT}$ . Именно так, проводя соответствующее усреднение, мы получаем известное выражение для средней энергии осциллятора

$$\frac{\sum_0^{\infty} nh\nu e^{-nh\nu/kT}}{\sum_0^{\infty} e^{-nh\nu/kT}} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Но если мы перенесли эти представления на случай собственных колебаний электромагнитного поля и считаем теперь каждое колебание осциллятором, то мы должны признать, что собственное колебание с частотой  $\nu$  может обладать энергией  $nh\nu$ . Как нужно интерпретировать  $n$  в терминах гипотезы световых квантов? Предположение, что энергия одного кванта света может быть равна  $nh\nu$ , противоречит опыту (фотоэффект). Поэтому нужно считать  $n$  числом световых квантов с энергией  $h\nu$ . Но предполагается, что световые кванты движутся совершенно хаотически, подобно свободным частицам в газе. Из этих представлений не удается получить формулу излучения Планка. В следующем параграфе мы рассмотрим этот вопрос подробнее и покажем, что трудности можно устранить, усовершенствовав методы статистической физики.

#### § 4. Статистика Бозе — Эйнштейна для световых квантов

Попытаемся теперь вывести формулу излучения в предположении, что оно представляет собой корпускулярную систему. Первое, что приходит в голову, — это применить методы классической статистики Больцмана по аналогии с кинетической

теорией газов. При этом квантовая гипотеза, примененная Планком для волнового рассмотрения черного излучения, автоматически учитывается с самого начала тем фактом, что мы оперируем со световыми квантами, т. е. с частицами (фотонами), энергия которых равна  $h\nu$ , а импульс  $h\nu/c$ . Оказалось, однако, что и эта попытка вывести закон излучения Планка терпит неудачу, и вот по какой причине.

В этом случае мы характеризуем отдельные компоненты поля излучения не длиной волны и направляющими косинусами, как это делалось раньше, а проекциями импульса, который ассоциирован с распространяющейся волной в теории Де-Бройля. Именно,

$$p_x = \frac{h}{\lambda} \alpha, \quad p_y = \frac{h}{\lambda} \beta, \quad p_z = \frac{h}{\lambda} \gamma.$$

Однако, как мы знаем (§ 2 этой главы), в кубической полости (с ребром  $a$ ) возможны лишь такие стоячие волны, которые удовлетворяют условиям

$$n_1 = \frac{2a}{\lambda} \alpha, \quad n_2 = \frac{2a}{\lambda} \beta, \quad n_3 = \frac{2a}{\lambda} \gamma,$$

где  $n_1$ ,  $n_2$  и  $n_3$  — целые числа. Отсюда следует, что *пространство импульсов* световых квантов тоже *дискретно*. Действительно, предыдущие уравнения можно переписать так:

$$p_x = \frac{h}{2a} n_1, \quad p_y = \frac{h}{2a} n_2, \quad p_z = \frac{h}{2a} n_3,$$

откуда видно, что проекции импульса могут быть только целыми кратными  $h/2a$ . Абсолютная величина импульса при этом равна

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{2a} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}.$$

В классической статистике (гл. I, § 6) мы разбивали импульсное пространство на ячейки произвольной формы с объемами  $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots$ . Отношение объема отдельной ячейки к полному объему  $\omega$  импульсного пространства, т. е. величину  $g_s = \omega_s/\omega$ , мы называли статистическим весом ячейки. В нашем случае допустимые импульсы принимают лишь дискретные значения. Поэтому статистический вес ячейки  $\omega_s$  определяется просто числом целых точек  $(n_1, n_2, n_3)$ , лежащих внутри ячейки. Это следует из принципа соответствия, поскольку необходимо, чтобы квантовая теория непрерывно переходила в классическую. Очевидно, среди всех ячеек, содержащих хотя бы одну целую точку, найдется наименьшая. Обычно в квантовой статистике слово «ячейка» употребляют для обозначения именно

этой минимальной ячейки, т. е. фактически для обозначения некоторой тройки чисел  $n_1, n_2, n_3$ . Поэтому мы должны найти какое-то другое наименование для статистически элементарной области импульсного пространства  $\omega_s$ . Назовем  $\omega_s$  «слоем». Число ячеек  $(n_1, n_2, n_3)$  в слое  $\omega_s$  мы будем называть его статистическим весом  $g_s$ . Выберем теперь в качестве слоя область, заключенную между двумя сферами радиусов  $p$  и  $p + \Delta p$ . Вообще говоря, разделение импульсного пространства на слои может быть совершенно произвольным; конкретный выбор диктуется лишь соображениями формального удобства. Число ячеек (т. е. число допустимых состояний), содержащихся в шаровом слое, определяется полученной ранее формулой для числа собственных колебаний электромагнитного поля в частотном интервале от  $\nu$  до  $\nu + \Delta\nu$  (§ 2 этой главы). Вспоминая соотношение  $p = h\nu/c$ , получаем

$$g_s = 2 \frac{4\pi V}{c^3} \nu^2 \Delta\nu = 2 \frac{4\pi V}{h^3} p^2 \Delta p.$$

Из этого выражения видно, что тот же самый результат мы получили бы, разделив все фазовое пространство, т. е. пространство координат и пространство импульсов вместе, на наименьшие ячейки объемом  $h^3$  и подсчитав затем число ячеек, попавших в объем  $V$  координатного пространства и в шаровой слой от  $p$  до  $p + \Delta p$  импульсного пространства. Принимая во внимание удвоение числа состояний за счет поляризации, находим таким образом

$$g_s = 2 \frac{4\pi p^2 \Delta p V}{h^3},$$

что совпадает с полученным ранее выражением. Новый метод счета отличается от обычной Больцмановской статистики только тем, что в согласии с требованиями квантовой теории наименьшей из ячеек, на которые разбивается фазовое пространство, приписан определенный объем. В обычной кинетической теории газов, за исключением случая вырождения, который мы рассмотрим позднее, размер ячейки не играет никакой роли и выпадает из дальнейших вычислений. Однако в нашем случае статистики световых квантов (как и в случае вырожденных газов, см. § 5 этой главы) размер ячейки очень важен. Можно отметить также, что найденный нами конечный размер ячейки  $h^3$  точно согласуется с принципом неопределенности Гейзенберга. В соответствии с этим принципом координата частицы и ее импульс не могут быть одновременно измерены с более высокой точностью, чем та, которую допускает соотношение  $\Delta p \Delta q \sim h$ . Поэтому более мелкое дробление фазового пространства совер-



шенно бессмысленно: в этом случае все равно нельзя было бы проверить на опыте, в какой именно ячейке находится частица.

Но вернемся к статистике световых квантов. Докажем, во-первых, сделанное выше утверждение о том, что идея световых квантов (вместе с квантовомеханическим определением размеров ячейки) окажется *недостаточной* для вывода формулы Планка, если мы сохраним верность статистике Больцмана. Действительно, в соответствии с результатами Больцмана число квантов в заданном слое, который мы будем характеризовать средним значением частоты квантов  $\nu_s$ , определяется произведением количества ячеек в слое  $g_s$  на больцмановский множитель  $Ae^{-\epsilon_s/kT}$ , так что

$$n_s = Ag_s e^{-h\nu_s/kT} \quad (\epsilon_s = h\nu_s).$$

Напомним, что распределение Больцмана (гл. I, § 6) есть просто наиболее вероятное распределение частиц газа (в нашем случае газа световых квантов) по различным слоям (которые мы раньше называли ячейками), удовлетворяющее, если число частиц  $n$  и полная энергия заданы, двум дополнительным условиям  $\sum n_s = n$  и  $\sum n_s \epsilon_s = E$ . Поэтому распределение энергии для нашего газа световых квантов будет иметь вид

$$h\nu_s n_s = Ag_s h\nu_s e^{-h\nu_s/kT},$$

или

$$u_\nu d\nu = \frac{h\nu n}{V} = H \frac{8\pi h\nu^3 d\nu}{c^3} e^{-h\nu/kT},$$

что с точностью до множителя  $A$  совпадает с результатом Вина, а не с формулой Планка

$$u_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3 d\nu}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Возникает естественный вопрос, каким образом следует изменить классическую статистику, чтобы закон излучения Планка вытекал из чисто статистических рассуждений, минуя окольный путь рассмотрения поглощения и излучения осцилляторами.

В первую очередь видно, что при малых  $T$ , когда  $e^{h\nu/kT} \gg 1$ , наша формула согласуется с виновским приближением (в этом случае справедливым) к закону Планка, если положить  $A=1$ . Что означает условие  $A=1$ ? Если мы вспомним вывод распределения Больцмана, то будет ясно, что значение коэффициента  $A$  определяется первым дополнительным условием (фиксированное число частиц). Если же отбросить это дополнительное условие, то  $A$  было бы равно единице. Формула излучения, которую мы только что вывели, асимптотически совпадала бы при этом с правильной формулой. Но для газа, состоящего из

световых квантов, есть все основания отбросить первое дополнительное условие (фиксированное число частиц), так как, разумеется, в каждом процессе излучения порождаются новые кванты света, а процессы поглощения сопровождаются исчезновением световых квантов и переходом их в другие формы энергии.

Но даже это допущение само по себе еще недостаточно для получения формулы Планка на чисто статистической основе. Фактически мы должны перестроить фундамент самой статистической физики и перейти к новой «квантовой статистике». Способ, позволяющий это сделать, был указан Бозе (1924 г.) и усовершенствован Эйнштейном. Они постулировали абсолютную неразличимость световых квантов. Эта гипотеза чрезвычайно правдоподобна. Действительно, предположим, что кванты света каким-то образом перенумерованы. Когда световой квант 1 находится в ячейке  $z_1$ , а световой квант 2 — в ячейке  $z_2$ , соответствующее распределение отвечает, очевидно, тому же самому состоянию, что и распределение, в котором квант 1 находится уже в ячейке  $z_2$ , квант 2 — в ячейке  $z_1$ , а остальные кванты остаются на своих старых местах. В самом деле, единственное различие между квантами состоит в том, что один из них находится в первой ячейке, а другой — во второй. Какая-либо нумерация или индивидуализация световых квантов абсолютно лишена смысла, поскольку состояние системы однозначно определяется простым указанием, сколько квантов содержит ячейка  $z_1$ , сколько ячейка  $z_2$  и т. д. Такая ситуация, однако, принципиально отличается от положения вещей в классической статистике. В последней любые два состояния, которые получаются друг из друга простой перестановкой световых квантов, считаются различными и каждое из них фигурирует в расчетах. Теперь же оба варианта размещения квантов отвечают одному и тому же состоянию и при подсчете числа состояний должны учитываться только один раз.

Рассмотрим теперь проблему с математической точки зрения. Мы будем говорить о частицах вообще, а не обязательно о световых квантах. Знакомясь с принципом Паули (гл. VI, § 5), мы уже видели, что не имеет значения, каким именно электроном занято то или иное место. Вторая часть принципа Паули утверждает, что перестановка двух электронов не изменяет состояние системы в целом, так что два распределения, которые отличаются друг от друга лишь переменной мест двух электронов, представляют одно и то же состояние.

В волновой механике состояние каждой частицы, в том числе и светового кванта, описывается волновой функцией. Пусть волновая функция одной частицы (первой) есть  $\psi_1^{(1)}$ , волновая

функция второй частицы —  $\psi_l^{(2)}$ , третьей —  $\psi_m^{(3)}$  и т. д., где индексы  $k, l, m, \dots$  относятся к состояниям соответствующей частицы (в случае световых квантов, например, индекс  $k$  обозначает три квантовых числа  $k_1, k_2, k_3$ ). Состояние системы в целом описывается при этом (по крайней мере в первом приближении, не учитывающем взаимодействия между частицами) произведением этих волновых функций, т. е. волновой функцией

$$\Psi_{klm\dots} = \psi_k^{(1)}\psi_l^{(2)}\psi_m^{(3)} \dots$$

Если теперь переставить какие-либо две частицы, например частицу 1 и частицу 2, то получится другая волновая функция

$$\Psi'_{klm\dots} = \psi_k^{(2)}\psi_l^{(1)}\psi_m^{(3)} \dots,$$

которая, очевидно, соответствует той же самой полной энергии всей системы

$$\varepsilon_{klm\dots} = \varepsilon_k + \varepsilon_l + \varepsilon_m + \dots$$

Для этого значения энергии мы можем получить и другие волновые функции, конструируя всевозможные линейные комбинации различных функций, которые возникают из исходной в результате разнообразных перестановок отдельных частиц, т. е. в результате перемены мест аргументов одночастичных волновых функций

$$\Psi_{klm\dots} = \sum_P a_{123\dots} \psi_k^{(1)}\psi_l^{(2)}\psi_m^{(3)} \dots$$

Здесь сумма берется по всем перестановкам  $P$  аргументов, а множители  $a_{123\dots}$  есть просто произвольные постоянные коэффициенты.

С точки зрения классической статистики каждая новая линейная комбинация соответствовала новому состоянию системы, так что число различных состояний совпадает с числом различных комбинаций. Новая статистика считает, однако, все состояния, которые получаются друг из друга простой перестановкой частиц, одинаковыми. Поэтому волновая функция какого-либо состояния не должна изменяться при перестановке частиц или в крайнем случае может измениться только ее знак, поскольку лишь квадрат модуля волновой функции допускает непосредственную физическую интерпретацию. Легко видеть теперь, что единственная линейная комбинация из числа фигурирующих в записанной выше формуле, которая не меняется при перестановке частиц, есть комбинация, в которой все коэффициенты равны единице, т. е. *симметричная волновая*

функция

$$\Psi_s = \sum_P \psi_k^{(1)} \psi_l^{(2)} \psi_m^{(3)} \dots$$

Другая комбинация, которая при перестановке частиц меняет знак, но квадрат которой остается неизменным, представляет собой *кососимметричную*, или *антисимметричную*, форму

$$\Psi_a = \sum_P \pm \psi_k^{(1)} \psi_l^{(2)} \psi_m^{(3)} \dots,$$

где знак «+» берется для четной, а знак «-» — для нечетной перестановки частиц. Антисимметричная форма хорошо известна из теории определителей: она получается при раскрытии детерминанта

$$\Psi_a = \begin{vmatrix} \psi_k^{(1)} & \psi_l^{(2)} & \psi_m^{(3)} & \dots \\ \psi_l^{(1)} & \psi_k^{(2)} & \psi_m^{(3)} & \dots \\ \psi_m^{(1)} & \psi_m^{(2)} & \psi_k^{(3)} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}.$$

Других волновых функций, удовлетворяющих требованиям неразличимости частиц, не существует. Отметим, далее, любопытное свойство антисимметричных функций. Известно, что детерминант равен нулю, если две строки или два его столбца совпадают. Следовательно, если две функции  $\psi_k$  и  $\psi_l$  равны друг другу, то определитель, а вместе с ним и волновая функция системы исчезают. Иначе говоря, состояния системы, в которых  $\psi_k = \psi_l$ , невозможны. Мы пришли к принципу Паули, который утверждает, что два электрона не могут находиться в одинаковых состояниях (т. е. не могут обладать одинаковыми  $\psi_k$ ).

Таким образом, имеются только две возможности описать состояние системы частиц с помощью волновой функции — нужно пользоваться либо симметричной, либо антисимметричной формой. Вторая возможность соответствует принципу Паули, с первой же возможностью дело обстоит совсем иначе. Если подсчитывать число возможных состояний, рассматривая соответствующие волновые функции (т. е. если подсчитывать число линейно независимых волновых функций), то сразу же возникают два различных вида статистики. Если мы ограничимся симметричными волновыми функциями (не подчиняющимися принципу Паули), то мы получим так называемую *статистику Бозе — Эйнштейна*. Если же мы будем пользоваться антисимметричными волновыми функциями (подчиняющимися принципу Паули), то получится *статистика Ферми — Дирака* (1926 г.). Какой из двух видов статистики следует применять

в каждом конкретном случае, зависит в конечном счете от указаний эксперимента. Электроны, как мы уже знаем, подчиняются принципу Паули, поэтому к ним нужно применять статистику Ферми — Дирака. Напротив, как оказалось, световые кванты (Бозе) и некоторые газовые молекулы (Эйнштейн) подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна.

Продолжим рассмотрение статистики Бозе — Эйнштейна. В первую очередь нужно рассчитать число различных состояний (т. е. число линейно независимых волновых функций). Перечисляя состояния, мы пользуемся, однако, не волновой, а корпускулярной картиной: требуется найти число отличимых друг от друга размещений частиц, подчиняющихся статистике Бозе — Эйнштейна, по ячейкам слоя. С этой целью обозначим ячейки через  $z_1, z_2, \dots, z_{g_s}$  соответственно; при этом количество ячеек по определению задается весовым фактором  $g_s$  слоя. Пусть этот слой содержит, с другой стороны,  $n_s$  частиц, которые мы обозначим через  $a_1, a_2, \dots, a_{n_s}$ . Теперь нам нужно разместить все частицы в ячейках слоя и найти число различных вариантов размещения. Каждое конкретное размещение мы будем фиксировать следующим образом. Выпишем формально последовательность элементов  $z$  и  $a$  в произвольном порядке, например

$$z_1 a_1 a_2 z_2 a_3 z_3 a_4 a_5 a_6 z_4 z_5 a_7 \dots$$

Будем считать, что частицы, попавшие между парой элементов  $z$ , находятся реально в той ячейке  $z_i$ , которая стоит слева от них. Так, например, порядок членов в записанной нами последовательности таков, что частицы  $a_1$  и  $a_2$  содержатся в ячейке  $z_1$ , частица  $a_3$  — в ячейке  $z_2$ , частицы  $a_4, a_5, a_6$  — в ячейке  $z_3$ , в ячейке  $z_4$  вообще нет частиц и т. д. Если это так, то первой буквой символического ряда, очевидно, всегда будет  $z$ , а не  $a$ . Таким образом, мы получим все возможные последовательности, помещая на первое место какой-либо из символов  $z$  — а это можно сделать  $g_s$  способами — и затем располагая  $g_s - 1 + n_s$  оставшихся символов в произвольном порядке. Поэтому полное число различных последовательностей равно

$$g_s (g_s + n_s - 1)!$$

Однако все последовательности, которые можно получить друг из друга простой перестановкой ячеек или простой перестановкой частиц, соответствуют не различным, а одному и тому же состоянию системы. Число таких перестановок есть  $g_s! n_s!$ . Следовательно, в статистике Бозе — Эйнштейна число различных вариантов распределения частиц по ячейкам слоя, охарактере-

ризованного индексом  $s$ , дается формулой

$$\frac{g_s (g_s + n_s - 1)!}{g_s! n_s!} = \frac{(g_s + n_s - 1)!}{(g_s - 1)! n_s!}.$$

Отсюда ясно, что число различных распределений в случае, когда первый слой содержит  $n_1$  частиц, второй  $n_2$  частиц и т. д., представляет собой произведение такого сорта членов по всем слоям фазового пространства:

$$W = \prod_s \frac{(g_s + n_s - 1)!}{(g_s - 1)! n_s!}.$$

Назовем это выражение «вероятностью» заданного (т. е. определенного числами заполнения  $n_1, n_2, \dots$ ) распределения частиц по слоям. В нашем случае оно играет ту же роль, что и найденное ранее (гл. I, § 6) выражение

$$W = \frac{n!}{n_1! n_2! \dots} g_1^{n_1} g_2^{n_2} \dots$$

для вероятности в статистике Больцмана. Последующие вычисления проводятся точно так же, как и раньше. Для того чтобы найти наиболее вероятное распределение, используем формулу Стирлинга. Пренебрегая единицей по сравнению с большими числами  $n_s$  и  $g_s$ , получаем

$$\ln W = \sum_s \{(g_s + n_s) \ln (g_s + n_s) - g_s \ln g_s - n_s \ln n_s\}.$$

Теперь необходимо вычислить максимум  $\ln W$  при изменении  $n_s$ , принимая в расчет дополнительное условие

$$\sum_s n_s \varepsilon_s = E \quad (\varepsilon_s = h\nu_s).$$

Для световых квантов, как было показано раньше (§ 4 этой главы), второе дополнительное условие (постоянство числа частиц) учитывать не нужно. Поэтому обычная процедура приводит к уравнению

$$\frac{\partial \ln W}{\partial n_s} = \ln (g_s + n_s) + 1 - \ln n_s - 1 = \ln \frac{g_s + n_s}{n_s} = \beta \varepsilon_s,$$

или

$$\frac{g_s + n_s}{n_s} = e^{\beta \varepsilon_s}.$$

Таким образом, по Бозе — Эйнштейну распределение световых квантов имеет вид (если опустить индекс  $s$ )

$$n = \frac{g}{e^{\beta \varepsilon} - 1},$$

что для плотности энергии дает выражение

$$u_\nu d\nu = \frac{nh\nu}{V} = \frac{1}{c^3} \frac{8\pi h\nu^3 d\nu}{e^{\beta h\nu} - 1}.$$

Это как раз и есть формула излучения Планка, если считать, что  $\beta = 1/kT$ . Последнее допущение оправдывается термодинамическими соображениями. Действительно, согласно Больцману  $S = k \ln W$  следует рассматривать как энтропию. Можно показать теперь (см. приложение 35), что из уравнения  $TdS = dQ$  следует, что  $\beta = 1/kT$  (здесь  $dQ$  — теплота, переданная системе; при постоянном объеме она совпадает с приращением энергии газа световых квантов). Итак, закон излучения Планка можно вывести из статистики Бозе — Эйнштейна с помощью рассуждений, которые совершенно свободны от возражений.

### § 5. Эйнштейнова теория вырождения газа

После блестящего успеха статистики Бозе — Эйнштейна в описании газа световых квантов естественно было испытать ее и в кинетической теории газов как альтернативу статистике Больцмана. Исследование, предпринятое Эйнштейном (1925 г.), основано на гипотезе, что молекулы газа, подобно световым квантам, неотличимы друг от друга.

Вычисления идут точно так же, как и в случае световых квантов, но с той разницей, что появляется второе дополнительное условие, учитывающее сохранение числа частиц:

$$\sum_s n_s = N.$$

Вероятность определенного распределения  $n_1, n_2, \dots$  находится здесь так же, как и выше. Вычисление наиболее вероятного распределения приводит теперь благодаря второму дополнительному условию к уравнению

$$\frac{\partial \ln W}{\partial n_s} = \ln \frac{g_s + n_s}{n_s} = \alpha + \beta \epsilon_s,$$

или, если опустить индекс  $s$ ,

$$n = \frac{g}{e^{\alpha + \beta \epsilon} - 1},$$

где снова  $\beta = 1/kT$  (см. приложение 35). Здесь число  $g$  ячеек в слое можно выразить через соответствующую энергию; действительно,

$$\epsilon = \frac{1}{2m} p^2 \quad \text{и} \quad d\epsilon = \frac{1}{m} p dp,$$

где  $p$  — импульс частиц; поэтому полученное выше выражение для  $g$  принимает вид

$$g = \frac{4\pi V}{h^3} p^2 dp = \frac{4\pi V}{h^3} \sqrt{2m^3 \epsilon} d\epsilon.$$

Таким образом, мы находим закон распределения атомов в статистике Бозе — Эйнштейна

$$dN = F(\epsilon) \sqrt{\epsilon} d\epsilon = \frac{4\pi V}{h^3} \frac{\sqrt{2m^3} \sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{\alpha + \beta\epsilon} - 1}, \quad \left(\beta = \frac{1}{kT}\right),$$

в то время как закон распределения в статистике Больцмана имел вид (гл. I, § 6)

$$\begin{aligned} dN &= V dn = 4\pi V n \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2} \frac{v^2}{kT}} v^2 dv = \\ &= 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{2}{m^3}} e^{-\epsilon/kT} \sqrt{\epsilon} d\epsilon. \end{aligned}$$

Здесь  $N$  обозначает число частиц в объеме  $V$ , а  $n$  — число частиц в единице объема.)

Величина  $\alpha$  определяется, очевидно, из дополнительного условия

$$\int_0^{\infty} dN = \int_0^{\infty} F(\epsilon) \sqrt{\epsilon} d\epsilon = N = nV.$$

Константу  $\alpha$ , или, чаще, величину  $A = e^{-\alpha}$ , называют *параметром вырождения*, и по следующей причине. Если  $\alpha$  очень велика, а следовательно,  $A$  очень мала (по сравнению с единицей), то мы можем пренебречь 1 в знаменателе по сравнению с  $e^{\alpha + \beta\epsilon} = e^{\beta\epsilon}/A$  (ибо  $\beta\epsilon$ , конечно, всегда положительно); следовательно, в этом случае мы получаем

$$dN = \frac{4\pi V}{h^3} \sqrt{2m^3} \sqrt{\epsilon} d\epsilon A e^{-\beta\epsilon},$$

т. е. классический закон распределения Максвелла; здесь  $A = e^{-\alpha}$  сразу находится из добавочного условия постоянства числа частиц. Итак, мы находим (гл. I, § 6; приложение 1)

$$A = \frac{nh^3}{(2\pi mkT)^{3/2}}.$$

Таким образом, если  $A$  очень мало по сравнению с 1, то формула распределения Бозе — Эйнштейна переходит в классическую. По-другому обстоит дело, когда  $A$  становится сравнимой с 1 (случай  $A > 1$ , т. е.  $\alpha < 0$ , не может осуществиться, поскольку знаменатель тогда обращается в нуль при энергии  $\epsilon = -\alpha/\beta$ , а для меньших значений  $\epsilon$  становится отрицательным, так что



вся теория теряет смысл). Если  $A \sim 1$ , то появляются отклонения от классических свойств; тогда мы говорим, что газ *вырожден*. В этом случае дополнительное условие приводит к трансцендентному уравнению для  $A$ , которое можно решить с помощью разложения в ряд по степеням  $nh^3/(2\pi mkT)^{3/2}$ , причем первый член разложения совпадает с выражением, полученным для  $A$  в предельном случае  $A \ll 1$ :

$$A = \frac{nh^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} \left( 1 - \frac{3}{4} \frac{nh^3}{(4\pi mkT)^{3/2}} + \dots \right).$$

Подставляя частные значения постоянных  $m$ ,  $n$  и  $T$ , мы можем выяснить из этого уравнения, вырожден газ при таких условиях или нет. Прежде всего мы видим, что в самом общем случае  $A$  увеличивается, а вырождение становится соответственно больше, когда увеличивается  $n$ , т. е. плотность; с другой стороны,  $A$  уменьшается с увеличением температуры и атомного веса. Возьмем пример: для водорода при нормальных условиях (для  $T=300^\circ\text{K}$ ,  $n \sim 3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ) получается  $A \sim 3 \cdot 10^{-5} \ll 1$ , а для тяжелых газов  $A$  становится еще меньше; следовательно, при нормальных температурах и давлениях газы никогда не бывают вырождены и ведут себя согласно классическим законам. Вырождение стало бы заметным лишь при недостижимо низких температурах или исключительно высоких давлениях, т. е. в областях, где, даже согласно классической статистике, газы больше не ведут себя как идеальные (влияние конечного размера частиц, конденсация газа и т. д.). Итак, статистика Бозе — Эйнштейна в применении к газам в той области, где справедлива кинетическая теория газов, практически не обнаруживает отличий по сравнению с классической статистикой Больцмана. Было, однако, предположено (Тисса, 1935 г.; Ф. Лондон, 1939 г.), что теорию Эйнштейна можно применить к аномальному поведению жидкого гелия при очень низких температурах. Детальное изучение уравнения состояния вырожденного газа показывает, что при очень низких температурах имеется скачок, когда происходит нечто вроде конденсации газа, при которой огромное большинство молекул переходит в основное состояние. Вычисленная температура перехода достаточно хорошо совпадает с экспериментальной точкой ( $T=2,4^\circ\text{K}$ ), при которой наступает аномальное, так называемое сверхтекучее состояние гелия. Однако все еще сомнительно, может ли эта модель учесть странные свойства гелия в этой области, и были предложены другие объяснения (Грин, 1948 г.)<sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> Как выяснилось, для применения модели вырожденного бозе-газа к описанию сверхтекучести жидкого гелия существенно необходимо учитывать взаимодействие молекул (Боголюбов, 1947 г.). — *Прим. ред.*

## § 6. Статистика Ферми — Дирака

Мы показали в § 4 этой главы, что введение в статистику принципа неразличимости приводит к двум, и только двум, новым системам статистики. Одну из них, статистику Бозе — Эйнштейна, мы подробно обсуждали в последних двух параграфах (световые кванты, молекулы газа). Теперь обратимся ко второй возможной статистике, основанной на принципе Паули и предложенной Ферми и Дираком. Как мы видели в § 4, эта статистика тесно связана с использованием принципа Паули: мы отмечали, что собственная функция состояния, в котором два электрона имеют одинаковые индивидуальные собственные функции (учитывая четыре квантовых числа, в том числе квантовое число спина), автоматически обращается в нуль.

Чтобы разобраться в природе этой статистики, мы воспользуемся моделью газа, состоящего из электронов, подчиняющихся, как экспериментально свидетельствует спектроскопия, принципу Паули. В этом случае наша первая цель опять состоит в нахождении распределения электронов по отдельным ячейкам. Однако теперь мы должны иметь в виду, что ячеек вдвое больше, чем в предыдущем случае, когда рассматривались атомы газа, вследствие того что возможны два направления спина; с другой стороны, ни одна ячейка не может быть занята более чем одним электроном, или, другими словами, «числа заполнения» ячеек в этом случае могут равняться либо 0, либо 1. (Мы можем, конечно, принять другое предположение, а именно, что число ячеек в каждом слое то же, что и раньше, но в качестве компенсации отвести электронам два возможных места в каждой ячейке соответственно двум направлениям спина.)

Как и раньше, мы начнем с перечисления различных распределений. Пусть в  $s$ -м слое находится  $n_s$  электронов, распределенных по  $g_s$  ячейкам этого слоя, поэтому из  $g_s$  таких ячеек  $n_s$  будут заняты одним электроном (1), а  $g_s - n_s$  будут пустыми (0). Мы характеризуем такое распределение, задавая каждой ячейке ее число заполнения

$$\begin{array}{cccccccccccc} z_1 & z_2 & z_3 & z_4 & z_5 & z_6 & z_7 & z_8 & z_9 & z_{10} & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \end{array}$$

или указывая незанятые ячейки и те, которые заняты одной частицей,

$$\begin{array}{cccccccc|cccc} 0 & & & & & & & & & & & 1 \\ z_2 & z_3 & z_7 & z_9 & z_{10} & \dots & z_1 & z_4 & z_5 & z_6 & z_8 & \dots \end{array}$$

Ясно, что имеется  $g_s!$  таких распределений соответственно числу перестановок  $g_s$  ячеек  $z$  в этой схеме. Но среди этих распре-

делений одинаковым состояниям (в омысле заполнения) соответствуют все те, которые отличаются друг от друга только перестановками  $n_s$  заполненных ячеек или перестановками  $g_s - n_s$  пустых ячеек. Поэтому «вероятность» распределения, характеризующегося числами заполнения  $n_1, n_2, n_3, \dots$  отдельных ячеек, равна

$$W = \prod_s \frac{g_s!}{n_s! (g_s - n_s)!},$$

или по формуле Стирлинга

$$\ln W = \sum_s \{g_s \ln g_s - n_s \ln n_s - (g_s - n_s) \ln (g_s - n_s)\}.$$

Как и раньше, мы хотим найти наиболее вероятное распределение, подчиняющееся двум дополнительным условиям:

$$\sum_s n_s = N, \quad \sum_s n_s \varepsilon_s = E.$$

Мы получим его обычным образом:

$$\frac{\partial \ln W}{\partial n_s} = -\ln n_s + \ln (g_s - n_s) = \ln \frac{g_s - n_s}{n_s} = \alpha + \beta \varepsilon_s,$$

или

$$n_s = \frac{g_s}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_s} + 1},$$

т. е. за исключением знака «+» в знаменателе, формула та же, что и в случае статистики Бозе — Эйнштейна. Однако эта разница в знаке несет с собой существенное различие между рассматриваемым случаем и случаем статистики Бозе — Эйнштейна. Дело в том, что  $\alpha$  теперь может принимать все значения от  $-\infty$  до  $+\infty$ , а параметр вырождения  $A = e^{-\alpha}$  — все значения от 0 до  $+\infty$ ; при этом знаменатель функции распределения всегда больше 1. Подставляя теперь значение  $g_s$  (с множителем 2 для учета двух направлений спина), мы находим, так же, как и выше (§ 5 этой главы), закон распределения Ферми — Дирака

$$dN = F(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = \frac{8\pi V}{h^3} \frac{\sqrt{2m^3} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\alpha + \beta \varepsilon} + 1} \quad \left(\beta = \frac{1}{kT}\right).$$

Как и выше, параметр вырождения определяется из первого дополнительного условия

$$\int dN = \int_0^{\infty} F(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = N = nV.$$

Это трансцендентное уравнение для  $A$  можно решить, как и выше, при  $A \ll 1$  с помощью разложения в ряд

$$A = \frac{nh^3}{2} (2\pi mkT)^{-3/2} + \dots \quad (A \ll 1).$$

Легко видеть, что при чрезвычайно малых  $A$  эта статистика переходит в классическую. В случае, когда  $A \gg 1$ , мы находим приближенное разложение вида (приводим его без доказательства)

$$\ln A = -\alpha = \frac{h^3}{2mkT} \left( \frac{3n}{8\pi} \right)^{1/3} + \dots \quad (A \gg 1);$$

это — случай *вырождения* электронного газа. Более подробное обсуждение этих формул содержится в следующем параграфе, где вместе с тем будет идти речь о наиболее важном применении статистики Ферми — Дирака.

### § 7. Электронная теория металлов. Распределение по энергии

В предыдущем параграфе мы говорили об «электронном газе» и представляли себе его как определенное число электронов ( $n$  на  $см^3$ ), движущихся свободно, без взаимного возмущения. Конечно, такой случай не может иметь места реально, так как, обладая электрическими зарядами, электроны всегда будут действовать друг на друга; однако в первом приближении мы можем пренебречь этим возмущающим действием благодаря нейтрализующему эффекту положительных ионов.

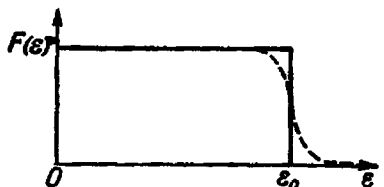
Далее, такой газ приблизительно свободных электронов существует внутри металлов. В доказательство этого утверждения мы можем сослаться на высокую проводимость металлов — а металлическая проводимость связана только с электронами, поскольку в отличие от электролитической проводимости она, как можно показать, не сопровождается переносом вещества. Чтобы обеспечить электронам возможность так реагировать на внешнее электрическое поле, чтобы результирующая проводимость стала столь высока, как она оказывается в действительности, электроны должны хотя бы приближенно иметь возможность свободно двигаться в металле в отличие от непроводников, в которых электроны крепко связаны с атомами. Даже старые теории проводимости металлов (Рикке, Друде, Лоренц, с 1900 г.) смогли, основываясь на этих идеях, дать удовлетворительное объяснение закону Видемана — Франца, который устанавливает, что электрическая и тепловая проводимости пропорциональны друг другу, а их отношение обратно пропорционально

абсолютной температуре. Однако старые теории неизменно приводили к трудностям в объяснении теплоемкости металлов. Экспериментально установлено, что металлы подчиняются закону Дюлонга и Пти, т. е. их теплоемкость, отнесенная к 1 молю, равна 6 кал/град. Это можно было бы сразу объяснить, если температура металла определялась бы только энергией колебаний атомов в решетке, так как на один узел решетки приходится в среднем энергия  $3kT$ . Но для объяснения процесса проводимости и других связанных с ним явлений необходимо предположить, что каждому атому (иону) соответствует приблизительно один свободный электрон. Свободные электроны принимают участие в тепловом движении в металле; в действительности (как показывает закон Видемана — Франца), в основном они и ответственны за высокую тепловую проводимость металлов. Поэтому, согласно классической статистике, каждый свободный электрон в металле будет обладать средней кинетической энергией  $\frac{3}{2}kT$ , а тогда теплоемкость металла на один атом равнялась бы не  $3k$ , а около  $(3 + \frac{3}{2})k$ , т. е. молярная теплоемкость равнялась бы 9 кал/град, что противоречит опытным фактам. Эту трудность преодолели Паули и Зоммерфельд (1927 г.), которые отметили, что законы классической статистики нельзя применять к электронному газу внутри металла, ибо он обязан вести себя как *вырожденный газ*. Действительно, масса электрона в 1840 раз меньше массы атома водорода, поэтому при комнатной температуре ( $T = 300^\circ \text{K}$ ) и плотности электронов  $n \sim 3 \cdot 10^{19}$ , соответствующей плотности газа при давлении в 1 атм, величина параметра вырождения  $A_E$  для электронов равна

$$A_E = A_H \cdot \frac{1}{2} (1840)^{3/2} = A_H \times 4 \cdot 10^4 \sim 1, 2,$$

где  $A_H$  обозначает параметр вырождения для водорода при тех же условиях; следовательно, даже в этом случае  $A$  — величина порядка 1. Для электронного газа в металлах значения  $A$  оказываются даже гораздо большими. Число атомов в 1 см<sup>3</sup> серебра равно  $n = 5,9 \cdot 10^{22}$ . Как уже отмечалось, мы должны предполагать, что имеется, грубо говоря, один свободный электрон на каждый атом; поэтому для таких величин  $n$  первая приближенная формула дает для  $A$  значение около 2300; следовательно, в этом случае газ вырожден в высокой степени. Правда, при столь высоких значениях  $A$  нельзя применять первую приближенную формулу и следует использовать вторую, но даже она дает все еще высокое значение:  $A \sim 210$ . Таким образом, электронный газ в металлах во всяком случае сильно вырожден — его свойства существенно отличаются от свойств обычного газа.

Наиболее важные особенности функции распределения Ферми — Дирака состоят в слабой зависимости распределения от температуры и в появлении нулевой энергии. Последнее свойство тесно связано с принципом Паули. В классической теории газов абсолютный нуль характерен тем, что при этой температуре обращается в нуль средняя кинетическая энергия частиц газа, а вместе с ней и энергия каждой отдельной частицы; следовательно, с классической точки зрения при абсолютном нуле частицы газа покоятся. По-иному обстоит дело в статистике Ферми — Дирака: здесь каждая ячейка может быть занята только одним электроном; в состоянии с наименьшей энергией заняты все ячейки с маленькой энергией, и граница «заполнения» системы ячеек определяется числом электронов. Мы



Фиг. 87. Кривая распределения Ферми.

Непрерывная кривая с острыми углами соответствует абсолютному нулю ( $T=0$ ), а пунктирная кривая — отличной от нуля температуре.

характеризуем эту границу импульсом  $p_0$  той ячейки, на которой заканчивается заполнение; он находится из выведенной выше формулы для числа ячеек:

$$2 \frac{4\pi V}{3h^3} p_0^3 = N,$$

или

$$p_0 = h \sqrt[3]{\frac{3N}{8\pi V}} = h \sqrt[3]{\frac{3n}{8\pi}}.$$

Тогда граничная энергия  $\epsilon_0$  равна

$$\epsilon_0 = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{2/3} = 5,77 \cdot 10^{-27} n^{2/3} \text{ эрг} = 3,63 \cdot 10^{-16} n^{2/3} \text{ эв.}$$

Следовательно, мы получаем кривую распределения электронов при абсолютном нуле, показанную на фиг. 87. Взяв в качестве абсциссы энергию электронов  $\epsilon$ , а в качестве ординаты определенную выше (§ 6 этой главы) функцию распределения  $F(\epsilon)$ , произведение которой на  $\sqrt{\epsilon} d\epsilon$  дает число электронов со значениями энергии между  $\epsilon$  и  $\epsilon + d\epsilon$ , мы получаем на графике прямоугольник; вплоть до энергии  $\epsilon_0$  ячейки полностью заняты, а ячейки с большей энергией пусты. (Такое же точно распределение использовалось в модели Томаса — Ферми электронного облака в атоме, см. гл. VI, § 9.) Как показывает приближенная

формула, в этом случае параметр вырождения  $A$  становится бесконечно большим. При конечных, но малых  $T$  параметр  $A$  ведет себя как  $1/T$ ; сравнение с предыдущей формулой для граничной энергии показывает, что мы можем приближенно положить

$$\alpha = - \frac{h^2}{2mkT} \left( \frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3} = - \frac{\varepsilon_0}{kT}.$$

Приближенная функция распределения, справедливая для больших значений  $A$ , т. е. для низких температур, имеет тогда вид

$$F(\varepsilon) = \frac{8\pi V}{h^3} \frac{\sqrt{2m^3}}{e^{(\varepsilon - \varepsilon_0)/kT} + 1}$$

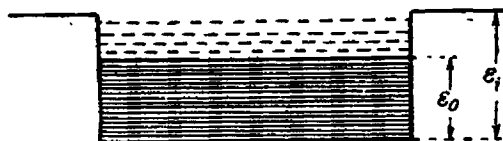
и в пределе  $T \rightarrow 0$  дает график, изображенный на фиг. 87. При  $\varepsilon < \varepsilon_0$  экспонента в знаменателе обращается в нуль, когда  $T \rightarrow 0$ , и мы имеем  $F(\varepsilon) = 8\pi V \sqrt{2m^3}/h^3$ ; но при  $\varepsilon > \varepsilon_0$  экспонента в знаменателе становится бесконечной, и  $F(\varepsilon)$  обращается в нуль.

При повышении температуры электроны постепенно переходят на более высокие состояния, но вначале изменение электронного распределения будет происходить только в месте, где функция Ферми спадает и при этом, как показано на фиг. 87, углы кривой распределения медленно скругляются. Повышение температуры не затрагивает основной массы электронов. Следовательно, при не слишком высоких температурах в тепловом движении принимает участие лишь исчезающе малая часть электронов, так что теплоемкость электронов очень мала. Только когда температура достигает очень высоких значений (порядка  $10^4$  °C), намного превышающих комнатную, плотная упаковка электронов в глубоких состояниях разрежается, и мы получаем заметный вклад электронов в теплоемкость металлов.

### § 8. Термоэффект и фотоэффект в металлах

Следующее доказательство правильности представления о свободных электронах в металлах мы обнаруживаем в явлении термоэлектронной эмиссии. Известно (Ричардсон, 1903 г.), что электроны самопроизвольно выделяются из раскаленных металлов (например, подогретых катодов) и что в отсутствие приложенного потенциала они образуют электронное облако, или «атмосферу», вокруг раскаленного тела. Число электронов можно определить, измерив ток, возникающий, если приложить внешнюю э. д. с. Теоретически явление термоэлектронной эмиссии следует представить себе следующим образом (фиг. 88). Ясно, что внутри металла электроны могут двигаться свободно,

но их выходу из металла препятствует, вообще говоря, потенциальный барьер — внутренний потенциал  $\epsilon_i$ . Однако при высоких температурах может оказаться, что энергия отдельного электрона станет больше  $\epsilon_i$ , так что он сможет вырваться из металла. Используя формулы статистики Ферми — Дирака, мы



Фиг. 88. Потенциал внутри металла.

Потенциальная яма частично «заполнена» электронами.

можем определить число электронов, покидающих таким образом металл за единицу времени: ток оказывается равным

$$i = \frac{4\pi em}{h^3} (kT)^2 e^{-(\epsilon_i - \epsilon_0)/kT},$$

в то время как классическая статистика дает для него выражение (Ричардсон, 1902 г.)

$$i = en \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} e^{-\epsilon_i/kT},$$

которое по своей температурной зависимости несколько отличается от выражения, даваемого новой теорией (см. приложение 36). Две формулы отличаются друг от друга как степенью  $T$  в предэкспоненциальном множителе, так и значением постоянной в экспоненте. Для проверки этого факта обычно строят кривую зависимости  $y = \ln i$  от  $x = 1/T$ , т. е. функцию

#### Статистика

$$y = A - a \ln x - bx \begin{cases} \text{классическая} & \text{Ферми} \\ A = \ln \left( \frac{en}{\sqrt{k/2\pi m}} \right) & \ln \frac{4\pi em k^2}{h^3} \\ b = \frac{\epsilon_i}{k} & \frac{\epsilon_i - \epsilon_0}{k} \\ a = \frac{1}{2} & 2. \end{cases}$$

При этом член  $a \ln x$  обычно столь мал по сравнению с двумя другими, что до сих пор не удалось решить, какая из двух формул предпочтительнее: квантовая с  $a=2$  или классическая с



$a=1/2$ . С другой стороны, постоянную  $b$  найти легко: в пренебрежении членом  $a \ln x$  уравнение  $y=A - bx$  представляет собой прямую, а  $b$  определяет ее наклон. Поэтому, определив экспериментально для различных металлов разность  $kb = \varepsilon_i - \varepsilon_0$ , называемую *работой выхода*, мы можем вычислить  $\varepsilon_i$ , подставляя для  $\varepsilon_0$  ее теоретическое значение, а именно 0 по классической и  $3,63 \cdot 10^{-15} \text{ эв}$  электрон-вольт по квантовой теории.

Сравнение получающихся таким образом величин  $\varepsilon_i$  с другими измерениями с определенностью показало, что правильна формула квантовой теории, а не классическая.

Действительно, внутренний потенциал  $\varepsilon_i$  мы можем найти другим, совершенно независимым способом, а именно с помощью *опытов по дифракции медленных электронов*. Когда на кристаллическую решетку падают катодные лучи, на решетке, как мы знаем, происходит дифракция электронов, причем положение дифракционных максимумов зависит от длины волны де-Бройля  $\lambda = h/p$  для электрона. Однако, проникая в кристалл, катодный луч испытывает преломление на поверхности, так как кинетическая энергия электронов в твердом теле больше, а поэтому длина их волны меньше, чем вне тела. Здесь, как и в оптике, мы можем говорить о коэффициенте преломления кристалла по отношению к электронам; как и в оптическом случае, этот коэффициент равен отношению длин волн внутри и вне кристалла. Если отсчитывать энергию от дна потенциальной ямы, то мы имеем

$$\lambda_{\text{внешн}} = \frac{h}{p_0} = \frac{h}{\sqrt{2m(\varepsilon - \varepsilon_i)}},$$

$$\lambda_{\text{внутр}} = \frac{h}{p_1} = \frac{h}{\sqrt{2m\varepsilon}},$$

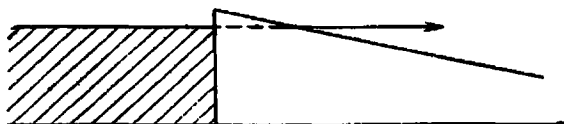
так что для показателя преломления получается выражение

$$\mu = \frac{\lambda_{\text{внешн}}}{\lambda_{\text{внутр}}} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon - \varepsilon_i}}.$$

Измеряя положение дифракционных максимумов, мы можем теперь определить показатель преломления, после чего, зная  $\varepsilon$ , вычислить потенциал  $\varepsilon_i$ . Для большей точности мы должны выбрать  $\varepsilon$  очень малым, т. е. использовать медленные электроны.

Тщательные измерения такого рода, проведенные Дэвиссоном и Джермером на монокристаллах никеля, дают  $\varepsilon_i \approx 17 \text{ эв}$  (электрон-вольт; см. гл. III, § 4). С другой стороны, измерения термоэффекта дали значения  $hk$  порядка  $5 \text{ эв}$  в противоречии с классической формулой, согласно которой должно быть  $hk = \varepsilon_i$ . В то же время квантовая теория дает  $\varepsilon_0 = 11,7 \text{ эв}$ , если

предположить, что в никеле два электрона на атом свободны, в соответствии с фактом, что у никеля два валентных электрона. Это даст  $v_i - v_0 = 5,3 \text{ эв}$  в хорошем согласии с результатами измерения термоэлектронной эмиссии. Надежных измерений на других металлах весьма мало. Из дифракционных измерений



Фиг. 89. Потенциальный барьер у поверхности металла.

для Zп обнаружено, что  $v_i = 15,4 \text{ эв}$ , а из фотоэффекта (см. ниже)  $v_i - v_0 = 3,8 \text{ эв}$ ; следовательно,  $v_0 = 11,6 \text{ эв}$ . Отсюда можно найти эффективное число свободных электронов; оно оказывается равным 2,7. Табл. 5 (стр. 206) показывает, что число электронов во внешней оболочке Zп 30 равно 2. Ввиду приближенного характера теории (в действительности электроны не совсем свободны, а потенциал внутри металла не в точности постоянен) трудно было бы ожидать лучшего согласия. Блэкман (1950 г.) обнаружил большие расхождения для золота и серебра, однако едва ли уточненная теория не сумеет устранить их.

Те же постоянные, какие появляются в теории термоэлектронной эмиссии, определяют и *фотоэффект*, наступающий при частоте, удовлетворяющей уравнению  $h\nu = v_i - v_0$ ; при этом энергия падающего светового кванта как раз достаточна для того, чтобы поднять электрон с границы  $v_0$  распределения Ферми на высоту потенциального барьера. Те же постоянные определяют и закон *холодного разряда*, при котором происходит следующее. Если на поверхности металла создать с помощью острого поля с очень большой напряженностью ( $\sim 10^6 \text{ в/см}$ ), то, хотя температуру металла и не повышали, электроны начинают вырываться из него. Объяснение этого явления опирается на тот же принцип, какой применялся в теории радиоактивного распада ядер (гл. VII, § 1; приложение 30). Внешнее поле приводит к такому распределению потенциала, что вне поверхности он падает линейно. Поэтому на поверхности металла получается потенциальный барьер (фиг. 89), а мы знаем, что согласно волновой механике электрон может проникать сквозь такой барьер. Чем больше внешнее поле, тем более узким становится барьер и тем большее число электронов выходит из металла за секунду. Ясно, что это число зависит от высоты первоначального

потенциала над уровнем нулевой энергии  $\varepsilon_1 - \varepsilon_0$ , так что, найденное экспериментально, оно позволило бы определить величину  $\varepsilon_1 - \varepsilon_0$ . Однако практически такой эксперимент неосуществим из-за мельчайших неоднородностей и примесей на поверхности, меняющих величину поля неконтролируемым образом: вблизи каждого крошечного выступа поле больше, чем средний градиент потенциала. Фактически электроны начинают вырываться при заметно меньших напряженностях поля, чем ожидалось бы при идеально гладкой поверхности.

### § 9. Магнетизм электронного газа

Еще одно обстоятельство, подтверждающее правильность наших представлений об электронах в металле, было отмечено Паули (1927 г.). При учете спина электроны обладают собственным магнитным моментом, равным магнетону Бора. Так как, согласно нашим современным представлениям, электроны в металлах ведут себя практически как свободные частицы, можно было бы ожидать, что они должны придавать металлу очень сильные парамагнитные свойства. Однако эксперимент показывает, что простые металлы (например, Li, Na) либо вообще не парамагнитны, либо парамагнитны в очень слабой степени. Паули объяснил это следующим образом. Валентные электроны в металле мы можем считать свободными; оставшиеся ионы не магнитны, поскольку конфигурация электронов у них такая же, как у инертных газов. Что касается свободных электронов (при  $T=0$ ), то в каждой ячейке помещаются два электрона, спины которых противоположно направлены, так что их магнитные моменты в точности компенсируют друг друга. Если приложить внешнее поле  $H$ , то спины электронов будут стремиться сорентироваться параллельно полю, что нельзя сделать, если электроны не покинут дважды заполненные ячейки и не перейдут в высшие состояния. Такое увеличение кинетической энергии происходит до тех пор, пока оно не компенсируется уменьшением потенциальной энергии, сопровождающим ориентацию в поле. Поскольку лишь небольшая часть электронов перескакивает в высшие состояния, парамагнетизм гораздо слабее, чем у систем, не подчиняющихся принципу запрета Паули. Как мы показали в § 7 этой главы, при повышении температуры самые верхние слои распределения Ферми начинают «разрезаться», а отдельные электроны при этом поднимаются из дважды заполненных ячеек, так что теперь появляются однократно заполненные ячейки. Но, как можно показать, это дает лишь эффект второго порядка. Следовательно, парамагнетизм электронного газа почти не зависит от темпера-

туры. Это находится в согласии с опытом. Но орбитальное движение электронов также приводит к магнитному эффекту — на этот раз, как сразу видно, диамагнитному. Теория этого явления не проста и была предметом многочисленных дискуссий. Однако квантовая теория приводит к определенной формуле для величины диамагнитного момента. Вычитая его из парамагнитного момента, мы получаем следующую таблицу.

Таблица 8

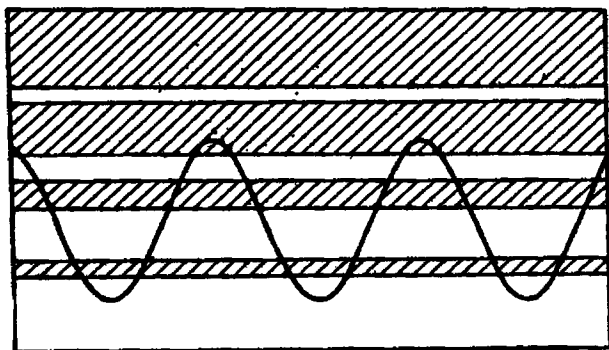
	Na	K	Rb	Cs
$\chi \cdot 10^7$ , Теория	4,38	3,40	3,26	3,02
$\chi \cdot 10^7$ , Эксперимент	5,8	5,1	0,6	-0,5

Согласие в порядке величин хорошее. Различия, особенно у Rb, а также у Cs (где не согласуется даже знак), можно объяснить тем, что не учтены факты, которые явно необходимо принимать во внимание. Так, в тяжелых элементах внутренние электронные оболочки дают заметный вклад в диамагнетизм; кроме того, для всех металлов предположение о полностью свободных электронах некорректно, к более подробному объяснению чего мы и переходим.

## § 10. Электропроводность и теплопроводность. Термоэлектричество

Для объяснения электропроводности мы должны предположить, что электроны в металле имеют конечную «длину свободного пробега». Действительно, если бы при рассмотрении проблемы электропроводности мы придерживались представления о совершенно свободных электронах (что является лишь первым приближением, как мы уже подчеркивали выше), то результатом была бы бесконечно большая проводимость. Следовательно, чтобы объяснить конечность сопротивления, мы должны учесть тот факт, что, двигаясь сквозь металл, электроны время от времени сталкиваются с ионами решетки и при этом отклоняются от своего пути, либо же замедляются. По аналогии со сходной ситуацией в кинетической теории газов среднее расстояние, которое проходит электрон между двумя столкновениями с ионами решетки, называют средней длиной свободного пробега.

Как показал Зоммерфельд (1928 г.), общее поведение электрической и тепловой проводимостей можно вычислить и не принимая специальных гипотез, таких, как длина свободного пробега. Из этой теории следует закон Видемана — Франца; таким же образом мы можем объяснить джоулево тепло, термоэлектрические эффекты Пельтье и Томсона, а также другие явления.



Фиг. 90. Потенциал внутри кристаллической решетки как периодическая функция пространственной координаты.

Уточнения теории, разработанные, в частности, Хаустоном, Блохом, Пайерлсом, Нордгеймом, Фаулером и Бриллюэном, идут по двум основным направлениям.

Прежде всего представление о совершенно свободных электронах в постоянном потенциале, конечно, слишком грубо. Несомненно, будут присутствовать силы связи между оставшимися ионами и электронами проводимости; мы должны настолько усовершенствовать теорию, чтобы оказалось возможным найти число электронов, принимающих участие в процессе проводимости, а также зависимость этого числа от температуры, от свойства атомов вещества. В принципе это составляет очень сложную квантовомеханическую задачу, так как в этом случае электрон связан не с определенным атомом, а с совокупностью оставшихся атомов, образующей регулярную решетку кристалла. Потенциал этой совокупности представляет собой периодическую в пространстве функцию (фиг. 90), и возникает задача решения волнового уравнения Шредингера для потенциала периодического поля такого типа. Это можно сделать различными приближенными методами. Ясно одно: если электрон обладает небольшой энергией и поэтому лежит глубоко во

впадине, то вероятность его перехода в другую впадину мала; каждая впадина изолирована от остальных. Это приводит к дискретным уровням энергии. С другой стороны, если электрон имеет большую энергию и поэтому помещается высоко над уровнем всех впадин, то он практически свободен, и связанный с ним спектр непрерывен. Фактически речь идет о полосах разрешенной энергии, узких на дне впадины и становящихся постепенно шире к ее вершине; в конце концов мы можем говорить о континууме с пробелами, становящимися все уже. Однако мы должны вспомнить, что решетка трехмерна; поэтому может случиться, что две соседние полосы энергии полностью отделены в одном направлении, но пересекаются в другом. Когда это случается и случается ли вообще, зависит от расположения потенциальных впадин; если они мелки, то даже самые глубокие полосы энергии будут широкими и переходящими друг в друга по многим направлениям.

Эти возможные уровни энергии заполняются электронами, и с учетом спина на каждое состояние всегда приходится по два электрона. Оказывается, что такая полоса содержит в точности  $2N$  электронных состояний, если число электронов равно  $N$ . Поэтому если, как у щелочных металлов, на каждый атом приходится один свободный электрон (а всего их  $N$ ), то самая глубокая полоса все еще будет не совсем заполнена. Следовательно, электроны будут способны двигаться свободно, и мы получим хороший проводник. В щелочноземельных металлах, где на каждый атом приходится по два слабо связанных электрона, первая зона заполнена до конца. Тогда в случае глубоких потенциальных ям, где следующая энергетическая полоса полностью отделена от самой глубокой, мы имеем изолятор, а когда ямы так мелки, что первые две полосы перекрываются, — проводник; в таком случае эти полосы частично пусты, и, следовательно, электроны могут двигаться свободно. Таким образом можно качественно объяснить все градиции проводимости и ее зависимость от температуры; в настоящее время существует удовлетворительная теория полупроводников (Фаулер, Уилсон).

Можно упомянуть об еще одном явлении в металлах, эффекте Холла. Когда ток течет по проволоке, помещенной в поперечное магнитное поле, то в направлении, перпендикулярном полю и проволоке, возникает разность потенциалов. Само по себе это не трудно объяснить; мы, конечно, знаем, что магнитное поле действует на движущийся электрон с силой, перпендикулярной полю и скорости (сила Лоренца, гл. II, § 1). Но замечательно то, что в некоторых металлах эта разность потенциалов имеет противоположный знак, как если бы мы имели

дело с положительными электронами. Конечно, уже открыты позитроны, но к этому они не могут иметь отношения: в присутствии столь большого количества отрицательных электронов время их жизни очень мало. Однако такой аномальный эффект Холла можно понять, если мы предположим, что одна из возмущенных полос энергии заполнена не до конца (отрицательными) электронами. Тогда теория показывает, что остающиеся «дырки» ведут себя в точности, как свободные положительные электроны.

Перейдем теперь ко второй основной проблеме, связанной с определением длины свободного пробега электронов по волновой механике, — проблеме, которая не может быть решена классической теорией. Эта задача о рассеянии проходящих сквозь решетку металла электронных волн на ионах, расположенных в узлах решетки, и о передаче энергии электронов ионной решетке. Вычисление дает полностью удовлетворительные результаты, например получается правильная зависимость электрического сопротивления от температуры. Особенно заслуживает упоминания вычисление проводимости сплавов, проведенное Нордгеймом (1931 г.). Экспериментально установлено, что сопротивление сплава не всегда монотонно зависит от отношения, в котором смешиваются две компоненты, но, вообще говоря, больше для смеси, чем для любого из чистых металлов; анализ методами волновой механики показывает, что существенную роль в этом играет интерференция электронных волн.

Однако в заключение упомянем также, что до сих пор теория еще неудовлетворительна в отношении *сверхпроводимости*, т. е. эффекта, состоящего в том, что при очень низких температурах (лишь на несколько градусов выше абсолютного нуля) у многих металлов внезапно почти полностью пропадает сопротивление (Камерлинг-Оннес, 1911 г.). Например, если возбудить электрический ток в проволочном кольце из сверхпроводящего материала при достаточно низкой температуре, то в отсутствие внешних возмущений ток будет течь целый день, не меняя силы. С точки зрения теории это явление и по сей день вызывает некоторое недоумение<sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> Последовательная микроскопическая теория сверхпроводимости была построена Бардином, Купером и Шриффером и независимо Боголюбовым в 1957 году. — *Прим. ред.*

## СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ

**§ 1. Свойства молекул как отражение распределения заряда в электронном облаке**

Эта последняя глава будет посвящена вопросам строения молекул. Наша первая цель — добиться ясности в двух пунктах, именно: какими свойствами с физической точки зрения наиболее удобно характеризовать и описывать молекулу и как эти свойства можно экспериментально определять. Лишь после достижения этой цели мы перейдем к вопросу, как можно понять и объяснить физически явление химической связи.

Молекула состоит из нескольких тяжелых центров — ядер атомов или ионов; вокруг этих центров обращаются электроны. Здесь, так же как и в случае атомов, мы можем говорить об электронном облаке. Вследствие огромной разницы между массами электронов и ядер электроны движутся намного быстрее, чем ядра, — это обстоятельство значительно упрощает обсуждение. Например, исследуя движение электронов, мы можем в первом приближении считать ядра покоящимися; так как за период обращения электрона они перемещаются на весьма небольшое расстояние. С другой стороны, исследуя движение молекулы как целого (вращения) или относительное движение атомов в молекуле (колебания), мы сможем получить хорошее приближение, заменив все свойства движения электронов средними величинами; за время, которое должно пройти, чтобы ядра претерпели сколько-нибудь значительное смещение из первоначальных положений, электроны совершат огромное число полных обращений.

Что же касается специфических свойств молекулы, то самым важным из них представляется нам *распределение заряда* в ней. В отношении полного заряда здесь, как и в случае атомов, мы должны различать нейтральные молекулы и положительные или отрицательные ионы. Само распределение заряда полностью характеризуется заданием, с одной стороны, *межъядерных расстояний*, а с другой — плотности электронного заряда  $\rho$ . Последнюю можно рассматривать либо классически



как средний заряд в единице объема, получаемый усреднением по вращательному движению электронов, либо с точки зрения квантовой механики как плотность заряда, создаваемую волнами вероятности, как и в случае атомов. Плотность заряда в свою очередь, с одной стороны, определяет в случае равновесия, обусловленного действием электрических сил, межъядерные расстояния; с другой стороны, ее внешняя граница дает *молекулярный объем*  $v$  (в случае нейтральной молекулы, так же как и для нейтрального атома, распределение заряда согласно волновой механике экспоненциально спадает за определенной границей, так что протяжение заряженного облака может быть указано сравнительно точно).

Теперь мы можем рассмотреть вопрос об «электрических центрах тяжести» положительных и отрицательных зарядов в отдельности, т. е. о таком центре зарядов только ядер и центре зарядов только электронного облака. Может случиться, что две эти точки совпадут, как это всегда происходит у отдельных атомов, где центр положительных зарядов — это само ядро, а центр отрицательно заряженного облака, ввиду центральной симметрии распределения заряда в нем, также всегда совпадает с ядром. Однако в молекуле обычно эти два центра разделены; поэтому с внешним полем молекула взаимодействует как электрический диполь. В этом случае мы говорим о *постоянном электрическом дипольном моменте* и обозначаем его вектором

$$p_0 = \sum \overline{er},$$

где радиус-векторы  $r$  представляют собой векторы положения ядер и электронов; черта означает усреднение по движению электронов, а сумма берется по всем ядрам и электронам. Если  $p_0 = 0$ , то электрическое поведение молекулы в первом приближении определяется *квадрупольным моментом*, описываемым его компонентами

$$\theta_{xx} = \sum \overline{ex^2}, \dots, \theta_{xy} = \sum \overline{exy}, \dots;$$

его вид в точности аналогичен механическому моменту инерции, поэтому мы можем также говорить об *электрическом моменте инерции*. Он является тензором, и как таковой может быть представлен эллипсоидом (эллипсоидом инерции).

Попадая в электрическое поле, молекула деформируется, причем положительные ядра сдвигаются в направлении силовых линий, а отрицательные электроны — в противоположном направлении. Следовательно, даже когда молекула не имеет постоянного дипольного момента, он индуцируется; в первом приближении величина индуцированного момента линейно воз-

растает с увеличением напряженности поля, и ее можно представить соотношением

$$p = \alpha E,$$

где  $\alpha$  называется деформируемостью, или *поляризуемостью* молекулы и, как легко видеть, имеет размерность объема. Для сферически симметричных молекул  $\alpha$ , конечно, скаляр, т. е. постоянная, не зависящая от направления. Однако вообще  $\alpha$  зависит от направления, и тогда ее можно рассматривать как тензор и представлять эллипсоидом — *эллипсоидом поляризации*. Можно также упомянуть случай, когда молекулы могут свободно вращаться (газы). В этом случае эллипсоиды поляризации, соответствующие отдельным молекулам, могут принимать все возможные положения в пространстве, так что во внешнем поле возникает средняя поляризация газа в соответствии с формулой  $\bar{p} = \bar{\alpha} E$ . При этом фактическую роль играет лишь среднее значение  $\bar{\alpha}$  по всем направлениям.

Следовательно, в качестве определяющих молекулу характеристик мы должны иметь в виду, кроме полного заряда  $e$ , межъядерных расстояний и молекулярного объема, еще и дипольный и квадрупольный моменты, а также поляризуемость молекулы. Однако все эти величины (исключая  $e$ ) в большей или меньшей мере зависят еще и от *состояния возбуждения* молекулы. Точно так же, как у атомов, у молекул существуют различные электронные состояния, характеризующиеся квантовыми числами, которые в следующих параграфах мы будем все вместе обозначать индексом  $n$ . Кроме того, движение ядер дает эффект, состоящий с одной стороны во вращении всей молекулы, определяемом вращательным квантовым числом  $j$ , а с другой стороны — в колебаниях ядер друг относительно друга, описываемых колебательным квантовым числом  $s$ . Этими различными состояниями движения мы займемся подробно на следующих страницах.

## § 2. Экспериментальное определение молекулярных постоянных

Теперь мы переходим к подробному выяснению того, как можно экспериментально определить молекулярные постоянные, перечисленные в предыдущем параграфе. Рассмотрим прежде всего *молекулярный объем*, определить который в случае нейтральных молекул можно методами кинетической теории газов, уже рассмотренных в гл. I (вязкость, длина свободного пробега, диффузия и прямые измерения с помощью молекулярных

пучков). В табл. 9 приведены определенные таким образом некоторые молекулярные диаметры <sup>1)</sup> ( $1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ см}$ ).

Таблица 9

## Диаметры некоторых молекул (Å)

He	1,9	H <sub>2</sub>	2,3	H <sub>2</sub> O	2,6
Ne	2,3	O <sub>2</sub>	2,9	CO	3,2
Ar	2,8	N <sub>2</sub>	3,1	CO <sub>2</sub>	3,2
Kr	3,2	Cl <sub>2</sub>	3,6	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	4,1
Xe	3,5			(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub> O	4,8

Поскольку ионы заряжены, их объемы нужно определять другими способами. Использовались два основных метода (Вазастерна, 1923 г.; Гольшмидт, 1926 г.; Полинг, 1927 г.). Первый метод оперирует с постоянными ионных решеток, таких, например, как решетка каменной соли. В предположении, что в кристаллических решетках молекулы упакованы максимально плотно, постоянная решетки равна просто сумме радиусов двух ионов, например в кубической решетке каменной соли —  $r_{\text{Na}^+} + r_{\text{Cl}^-}$ . В ионных решетках ионы расположены таким образом, что положительный ион всегда окружен только отрицательными, и наоборот, так что постоянная решетки действительно равна сумме радиусов двух ионов. Таким способом мы всегда получаем только суммы двух радиусов, а не сами радиусы; зная один из них, мы смогли бы вычислить все остальные. Для этого измеряется постоянная решетки в кристаллах, по поводу которых мы имеем основания считать один из их ионов очень маленьким, как, например, Li<sup>+</sup>; обладая только двумя электронами (в K-оболочке), этот ион будет значительно меньше, чем, например, ион Cl<sup>-</sup> с полностью заполненными K- и L-оболочками и полным подуровнем (из 8 электронов) M-оболочки. Поэтому постоянная решетки Li<sup>+</sup>Cl<sup>-</sup> будет приближенно равна радиусу иона Cl<sup>-</sup>.

Второй метод определения ионных радиусов состоит в изменении подвижности ионов в электролитах: маленькие ионы прокладывают свой путь сквозь жидкость легче, чем большие. Однако в этом методе возникает та трудность, что к ионам прилипают молекулы воды (гидратация), приводя к обманчивому впечатлению, что ионные радиусы существенно больше, чем на самом деле. Здесь мы приведем другую таблицу, показывающую

<sup>1)</sup> В кинетической теории газов понятие «молекула» включает одноатомные молекулы (ср. с понятием «моля», стр. 11).

диаметры атомных ионов, а для сравнения — диаметры инертных газов; атомы и ионы с похожими электронными конфигурациями помещены в одинаковые строки или столбцы (табл. 10).

Таблица 10

Диаметры некоторых атомных ионов (Å)

		O <sup>2-</sup> 2,6	S <sup>2-</sup> 3,5	Se <sup>2-</sup> 3,8
H <sup>-</sup> 2,5		F <sup>-</sup> 2,7	Cl <sup>-</sup> 3,6	Br <sup>-</sup> 3,9
He 1,9		Ne 2,3	Ar 2,8	Kr 3,2
Li <sup>+</sup> 1,6		Na <sup>+</sup> 2,0	K <sup>+</sup> 2,7	Rb <sup>+</sup> 3,0
Be <sup>2+</sup> 0,7		Mg <sup>2+</sup> 1,6	Ca <sup>2+</sup> 2,1	Sr <sup>2+</sup> 2,5
B <sup>3+</sup> —		Al <sup>3+</sup> 1,2	Sc <sup>3+</sup> 1,7	Y <sup>3+</sup> 2,1
C <sup>4+</sup> 0,4		Si <sup>4+</sup> 0,8	Ti <sup>4+</sup> 1,3	Zr <sup>4+</sup> 1,7
N <sup>5+</sup> 0,3		P <sup>5+</sup> 0,7		

Мы видим, что отрицательные ионы, имеющие конфигурацию инертного газа, но меньший ядерный заряд, больше атомов соответствующего инертного газа, так как электроны в отрицательных ионах связаны с ядрами слабее и радиусы электронных орбит в них больше. Соответственно закономерность продолжает действовать и при переходе от атомов инертных газов к положительным ионам (их радиусы еще меньше).

Рассмотрим теперь вторую величину, *среднюю поляризуемость*  $\bar{\alpha}$ . Здесь мы сначала ограничимся молекулами, не имеющими постоянного дипольного момента. По определению,  $\bar{\alpha}$  представляет собой средний дипольный момент, индуцированный в молекуле электрическим полем единичной напряженности (по крайней мере в случае молекул, которые могут свободно вращаться); полная поляризация  $P$  единицы объема (содержащего  $N$  молекул) во внешнем поле  $E$  равна  $P = \bar{\alpha}NE$ . Но, согласно законам электродинамики, поляризация  $P$  связана с максвелловским вектором смещения  $D$  соотношением  $D = E + 4\pi P$ ; с другой стороны, по определению  $D = \epsilon E$ , где  $\epsilon$  обозначает *диэлектрическую постоянную*. В случае газов, взаимодействием молекул которых можно пренебречь, эти соотношения приводят к следующему уравнению, связывающему диэлектрическую постоянную и среднюю поляризуемость:

$$\epsilon = 1 + 4\pi N\bar{\alpha}.$$

Для жидкостей, где индуцированные моменты молекул влияют друг на друга, соотношение несколько сложнее.

Диэлектрическую постоянную легко измерить хорошо известными методами, например определяя показатель преломления  $n$  вещества для данных (инфракрасных) волн; как известно из теории Максвелла, в этом предельном случае  $n$  связано с  $\epsilon$  соотношением  $n \rightarrow \sqrt{\epsilon}$ . Как уже отмечалось, все эти аргументы справедливы только для веществ, не имеющих постоянного дипольного момента. Мы приводим краткую таблицу средних поляризуемостей для инертных газов и атомных ионов, причем образования с похожей структурой помещены в одинаковые строки или столбцы (табл. 11). Здесь нетрудно заметить тот же порядок в последовательности величин, что и в предыдущем случае диаметров, как и следовало ожидать, поскольку большему диаметру соответствует меньшая сила связи, действующая на внешние электроны, и соответственно большая поляризуемость. Особо отметим, что  $\alpha$  имеет размерность объема; фактически она всегда того же порядка, что и молекулярный объем.

Таблица 11

Средние поляризуемости для инертных газов и атомных ионов ( $\alpha \cdot 10^{24}$  см<sup>3</sup>)

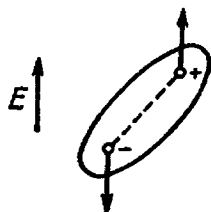
		F <sup>-</sup>	0,99	Cl <sup>-</sup>	3,05	Br <sup>-</sup>	4,17	I <sup>-</sup>	6,28
He	0,202	Ne	0,392	Ar	1,629	Kr	2,46	Xe	4,00
Li <sup>+</sup>	0,075	Na <sup>+</sup>	0,21	K <sup>+</sup>	0,87	Rb <sup>+</sup>	1,81	Cs <sup>+</sup>	2,79
		Mg <sup>2+</sup>	0,12			Sr <sup>2+</sup>	1,42		
		Al <sup>3+</sup>	0,065						
		Si <sup>4+</sup>	0,043						

Поляризуемость некоторых нейтральных атомов (H, Li, K, Cs) можно также определить методом, сходным с примененным в опытах Штерна и Герлаха (гл. VI, § 7), а именно, измеряя отклонение пучка атомов в неоднородном электрическом поле (Штарк, 1936 г.). Результаты не особенно хорошо согласуются с теоретическими подсчетами на основе атомных моделей.

Перейдем теперь к рассмотрению молекул с *постоянным дипольным моментом*  $p_0$ . Здесь, вдобавок к уже рассмотренному эффекту поляризации, мы встречаемся с влиянием электрического поля на постоянный момент. В отсутствие внешнего поля моменты отдельных молекул будут принимать все возможные направления, так что газ окажется неполяризованным. Внешнее поле стремится повернуть отдельные диполи в направлении поля (фиг. 91), однако этому стремлению противодействует тепловое движение, которое, как уже не раз упоминалось, всегда

действует сглаживающим образом — в данном случае в сторону более равномерного распределения ориентаций диполей по направлениям. Здесь действуют те же факторы, что и в случае парамагнетизма, в котором, как мы знаем, суть дела сводится к повороту элементарных магнетиков в направлении магнитного поля. Рассматривая парамагнетизм (см. приложение 37), мы вывели формулу для среднего момента единицы объема, предположив, что напряженность поля не слишком велика; мы можем здесь прямо применить эту формулу: тогда поляризация

Фиг. 91. Влияние внешнего электрического поля на молекулу, обладающую постоянным дипольным моментом.



единицы объема, обусловленная постоянными диполями, выразится как

$$P = \frac{Np_0^2}{3kT} E.$$

Она добавляется к поляризации, определяемой поляризуемостью молекул, поэтому для диэлектрической постоянной мы получаем формулу

$$\epsilon = 1 + 4\pi N \left( \bar{\alpha} + \frac{p_0^2}{3kT} \right) = \epsilon_0 + \frac{4\pi N p_0^2}{3kT},$$

где  $\epsilon_0$  означает диэлектрическую постоянную для того случая, когда постоянные дипольные моменты обращаются в нуль. Таким образом, на величину диэлектрической постоянной влияют одновременно два эффекта; один из них чисто электростатический, и поэтому не зависит от температуры, а другой — динамический (ориентация дипольных моментов), являющийся функцией температуры [закон Дебая (1912 г.), аналогичный закону Кюри для парамагнетиков]. Тщательно определив зависимость от температуры, можно разделить эти два эффекта и таким путем, проведя серию измерений диэлектрической постоянной, найти поляризуемость и величину постоянного дипольного момента. При этом, однако, подразумевается, что измерения  $\epsilon$  выполняются электростатическими методами. Ибо если, как было описано раньше, начать с определения показателя преломления (для инфракрасных волн), то мы всегда будем

измерять только первый эффект, т. е. зависящий от поляризуемости. Это происходит потому, что процесс ориентации дипольных моментов не может поспевать за быстрыми колебаниями электрического вектора в световой волне. В самом деле, ориентация сопряжена с вращением всей молекулы, и, следовательно, с движением атомных ядер, которое из-за большой массы ядер происходит слишком медленно, чтобы в заметной мере отзываться на воздействие быстро меняющихся электрических сил световой волны. Поэтому мы опять получаем

$$n \rightarrow \sqrt{\epsilon_0} = \sqrt{1 + 4\pi N\alpha}.$$

Таким образом, измеряя показатель преломления, мы всегда исследуем только поляризационные эффекты. Это дает возможность особенно просто определить  $\rho_0$ : оптическими методами измеряется  $n$ , откуда находят  $\epsilon_0$ , а затем определяют в статических измерениях при известной температуре (Дебай),

$$\epsilon - \epsilon_0 = \frac{4\pi N\rho_0^2}{3kT}.$$

Отметим далее, что при определении показателя преломления необходимо ограничиваться длинными волнами, чтобы не попасть в область «аномальной дисперсии». Грубо говоря, эта дисперсия появляется при таких условиях, когда оптические частоты по порядку величины совпадают с классическими частотами орбитального движения электронов. Если же речь идет о длинноволновой области, то здесь частоты движения электронов гораздо больше, чем частоты длинноволновых световых колебаний, поэтому действие света на электроны определяется в этой области только средним распределением электронного заряда, или поляризуемостью.

Полученные таким путем результаты с успехом проверялись на некоторых веществах при помощи метода прямого отклонения молекулярных пучков (гл. I, § 7) в неоднородном электрическом поле (Эстерманн, 1928 г.).

В табл. 12 приведено несколько измеренных значений моментов из огромного числа опубликованных данных.

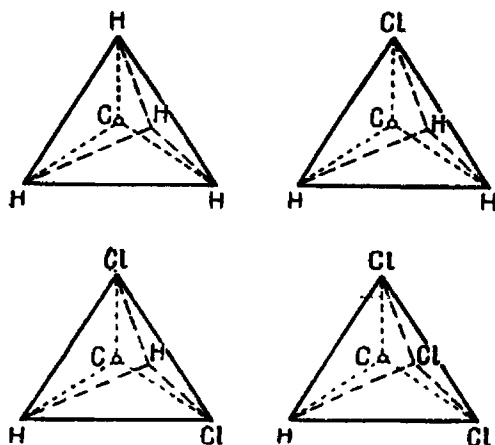
Сделаем несколько замечаний в связи с этой таблицей. Вообще говоря, молекулы с симметричной структурой, такие, как  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CCl}_4$  и т. д., не обладают дипольным моментом. Так как молекула  $\text{H}_2\text{O}$  имеет дипольный момент, ее структура не может быть симметричной. В настоящее время полагают, что она имеет форму равнобедренного треугольника (см. § 6 этой главы). Молекула  $\text{CO}$ , будучи асимметричной, конечно, имеет дипольный момент. Интересна последовательность соединений

Таблица 12

Дипольные моменты молекул ( $10^{-18}$  ед. CGSE)

Оксид углерода	CO	0,12
Двуокись углерода	CO <sub>2</sub>	0,0
Вода	H <sub>2</sub> O	1,8
Метан	CH <sub>4</sub>	0,0
Хлористый метил	CH <sub>3</sub> Cl	1,9
Хлористый метилен	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	1,6
Хлороформ	CHCl <sub>3</sub>	1,0
Четыреххлористый углерод	CCl <sub>4</sub>	0,0

хлора, расположенных в таблице между метаном и четыреххлористым углеродом (их структурные формулы изображены на фиг. 92). Мы видим, что в высокой степени симметричные

Фиг. 92. Структурные формулы молекул CH<sub>4</sub>, CH<sub>3</sub>Cl, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> и CHCl<sub>3</sub>.

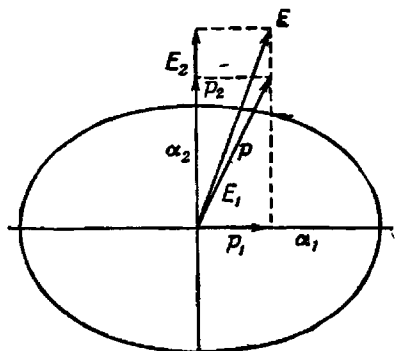
Метан симметричен, в силу чего его дипольный момент равен нулю, остальные три молекулы асимметричны, и в той или иной степени электрически поляризованы.

формы CH<sub>4</sub> и CCl<sub>4</sub>, расположенные на концах последовательности, не обладают дипольными моментами, а у промежуточных соединений имеются диполи, взаимоотношения между которыми можно грубо оценить при помощи «векторного сложения» элементарных диполей.

Мы уже говорили, что в случае газов, молекулы которых не имеют дипольного момента ( $p_0=0$ ), электрическое поле молекулы, а следовательно, и связанное с ним взаимодействие



молекул определяется *квадрупольным моментом* (электрическим «моментом инерции»). Следовательно, этот момент дает вклад в *силы сцепления*, действующие между молекулами, что отражается на значениях постоянных в уравнении состояния (скажем, в уравнении Ван-дер-Ваальса, гл. I, § 8). Силы сцепления можно измерить либо через эти постоянные, либо через скрытую теплоту испарения и т. д. Мы не будем дальше задерживаться на этом и сошлемся просто на § 7 этой главы, где мы вновь вернемся к этим вопросам.

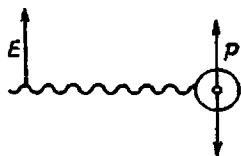


Фиг. 93. Схема, иллюстрирующая относительные ориентации векторов напряженности поля и дипольного момента для анизотропной молекулы.

Нужно добавить несколько слов о поляризуемости. Выше мы рассматривали только среднее значение  $\alpha$  по всем направлениям. В случае газа, молекулы которого могут свободно вращаться, это вполне допустимо как первое приближение. Но с помощью соответствующих опытов можно определить и анизотропию поляризуемости, и таким путем получить представление о *пространственном распределении электронного облака*. Мы уже говорили (§ 1 этой главы), что поляризуемость описывается тензором, который можно представить в виде так называемого эллипсоида поляризации (фиг. 93). Отметим следующие его свойства. Три главные оси эллипсоида  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  и  $\alpha_3$  лежат в направлениях соответственно наименьшей и наибольшей поляризации и в направлении, перпендикулярном этим двум. Если вдоль каждого из этих трех направлений последовательно приложить электрическое поле единичной напряженности, то длины осей дадут величины соответственных дипольных моментов. Если же приложить электрическое поле единичной напряженности под произвольным углом к трем выделенным нами направлениям, то поляризацию молекулы можно определить, разложив поле на компоненты в этих трех направлениях и определив поляризацию, отвечающую каждому из них в отдельности. Пол-

ный момент получается отсюда как результат векторного сложения. Ясно, что в общем случае направление действующего поля и направление индуцированного дипольного момента не будут совпадать.

В случае *рассеяния света* это заметно влияет на поляризацию. Рассмотрим сначала (фиг. 94) изотропную молекулу или атом (атомы в этом смысле всегда изотропны). Когда световая волна падает на такую молекулу, электрический вектор волны  $E$  создает в молекуле электрический момент  $p$ , параллельный



Фиг. 94. Деполяризация, обусловленная анизотропией поляризуемости.

В изотропной молекуле индуцированный дипольный момент колеблется в том же направлении, что и электрический вектор световой волны (верхний рисунок).

В анизотропной молекуле индуцированный дипольный момент колеблется в направлении, образующем некоторый угол с направлением электрического вектора  $E$ , вызывая тем самым деполяризацию рассеянного света (нижний рисунок).



напряженности возбуждающего поля и находящийся в фазе с ней. Поэтому рассеянная волна излучается с той же частотой, какую имела падающая. Наблюдая рассеянный свет в направлении, перпендикулярном падающему лучу, мы обнаружим, что он полностью поляризован. Это легко понять, поскольку электрический вектор рассеянного света, определяемый моментом  $p$ , всегда параллелен вектору  $E$  первоначального луча. Такое положение вещей не сохранится в случае анизотропной молекулы, у которой, как мы только что видели, направление индуцированного дипольного момента не совпадает с направлением индуцирующего электрического вектора. Наблюдая теперь рассеянный свет в направлении, перпендикулярном падающему лучу, мы обнаружим, что он поляризован уже не полностью, а лишь частично. В рассеянном свете появляется компонента электрического вектора, перпендикулярная вектору  $E$  падающего света. Проводя опыт с поляризационным прибором, мы уже не отыщем, как раньше, такого положения николя, при котором поле зрения будет полностью затемнено. В этом случае мы говорим о *деполяризации* рассеянного света (Ганс, 1912 г.; Борн, 1917 г.). Измеряя степень деполяризации, мы можем получить сведения об анизотропии поляризуемости. Например, в случае

осесимметричных молекул (у них длины двух осей эллипсоида поляризации одинаковы,  $\alpha_1 = \alpha_2$ ) можно определить, как показывает точный анализ, величину  $\alpha_3 - \alpha_1$ . Поскольку среднюю поляризуемость можно определить из других измерений, то этим способом мы получим полную информацию о величинах осей эллипсоида поляризации (Раман, Даур, Кабаннес, 1928 г.).

Тот же результат можно получить, изучая эффект Керра (1875 г.). В статическом поле  $E$  даже в отсутствие постоянного дипольного момента ( $p_0 = 0$ ) между анизотропными молекулами возникает связь, так как направление индуцированного дипольного момента не совпадает с направлением поля. И опять этой связи противодействует тепловое движение, стремящееся воссоздать однородное распределение по направлениям. Поэтому молекулы частично, в степени, зависящей от температуры, ориентируются вдоль направления поля (Ланжевен, 1905 г.; Борн, 1916 г.). Но можно показать, что такие вещества ведут себя по отношению к свету, проходящему через них, в точности как двоякопреломляющие одноосные кристаллы. И в этом случае измерения двойного преломления дают для осесимметричных молекул величину  $\alpha_3 - \alpha_1$  (Ганс, 1921 г.; Кабаннес, Раман, Стюарт). Заметим еще, что рассматриваемый эффект часто применяется в современной технике: на нем основано действие ячейки Керра (Каролюс), широко используемой в приборах дальней связи как световое реле.

Теперь мы займемся определением межъядерных расстояний, частот колебаний ядер, а также другими свойствами молекул, связанными с ядрами. В этой области применяются специальные оптические методы, которые будут рассмотрены в следующем параграфе.

### § 3. Полосатые спектры и эффект Рамана

Будем пока пренебрегать относительным движением ядер. Если нас интересует только распределение масс, то двухатомную молекулу можно представить себе как почти жесткую гантель, поскольку электроны, с их сравнительно ничтожной массой, не смогут существенно повлиять на это распределение. Такая гантель может вращаться вокруг какой-либо фиксированной в пространстве оси. Поэтому она обладает механическим моментом, который, по Бору, должен быть квантованным. Если этому моменту соответствует квантовое число  $j$ , то теория Бора (гл. V, § 1) дает для энергии вращающейся гантели выражение

$$E_j = \frac{h^2}{8\pi^2 A} j^2 \quad (j = 0, 1, 2, \dots),$$

а квантовая механика (гл. V, § 5) — выражение

$$E_j = \frac{h^2}{8\pi^2 A} j(j+1).$$

Мы назвали такую систему уровней энергии термами Деландра (в отличие от термов Бальмера). Здесь  $A$  — момент инерций гантели относительно оси, проходящей через центр тяжести перпендикулярно линии, соединяющей ядра; этот момент легко выражается если расстояние между ядрами и массы обоих атомов. Так, если атомы с массами  $m_1$  и  $m_2$  находятся на расстояниях  $r_1$  и  $r_2$  от центра тяжести, то момент инерции, по определению, будет равен  $A = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$ . Кроме того,  $m_1 r_1 = m_2 r_2$  и  $r_1 + r_2 = r$ , где  $r$  — искомое расстояние между ядрами. Если, далее, обозначить через  $m$  приведенную массу, т. е. взять

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad \text{или} \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2},$$

то для момента инерции получается выражение

$$A = m r^2.$$

Поэтому расстояние между ядрами можно определить, если известны величины термов Деландра, а их можно найти из *вращательных полосатых спектров* излучения. Мы уже указывали (гл. V, § 1), что спектр, испускаемый ротатором, состоит из ряда равноотстоящих одна от другой линий. Действительно, как неоднократно упоминалось, для простых периодических движений выполняется правило отбора  $\Delta j = \pm 1$ , поэтому частота излучаемого света выражается через разность двух последовательных энергетических термов:

$$\nu = \frac{E_j - E_{j-1}}{h} = \frac{h}{8\pi^2 A} \{j(j+1) - (j-1)j\} = \frac{h}{4\pi^2 A} j.$$

Измеряя расстояние между линиями  $h/4\pi^2 A$ , мы получим отсюда  $A$  и, следовательно,  $r$ . При этом предполагается, однако, что начальное и конечное состояния электронной системы одинаковы, так как различие в них должно приводить к изменению межъядерных расстояний, а ведь мы пренебрегаем всеми возможными колебаниями ядер относительно друг друга. Однако на практике *чисто вращательные полосы* не очень удобны для определения межъядерных расстояний, так как они лежат в далекой инфракрасной области. Нетрудно приближенно оценить их положение. Действительно, массы атомов по порядку величин составляют от  $10^{-21}$  до  $10^{-23}$  г, а расстояния между ядрами — около  $10^{-8}$  см, что дает моменты инерции приблизительно в пределах от  $10^{-37}$  до  $10^{-39}$  г·см<sup>2</sup>. Таким образом, для

частот получаем значения от  $10^9$  до  $10^{11}$  сек<sup>-1</sup>, а для длин волн — доли сантиметра.

Значения некоторых межъядерных расстояний и моментов инерции, найденных из изучения инфракрасных полос, приведены в табл. 13.

Таблица 13

Межъядерные расстояния и моменты инерции галогеноводородов

	$r \cdot 10^8$ см	$A \cdot 10^{30}$ г·см <sup>2</sup>
HF	0,93	1,35
HCl	1,28	2,66
HBr	1,42	3,31
HI	1,62	4,31

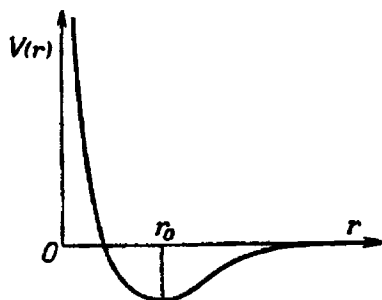
Многоатомные молекулы имеют различные моменты инерции относительно различных осей, и их надо определять по отдельности.

Значительно проще обстоит дело, если принять во внимание еще и *колебания ядер*. Вначале мы говорили о равновесии сил между ядрами и о среднем распределении электронных зарядов. Между тем ядра могут колебаться около положения равновесия, которое, конечно, должно быть устойчивым, а вместе с ядром будет пульсировать все электронное облако. Полную энергию молекулы после исключения из нее кинетической энергии ядер следует рассматривать как *потенциальную энергию  $V(r)$  движения ядер*; в нее входит, таким образом, наряду с чисто кулоновской энергией (положительно заряженных) ядер, также и средняя электронная энергия, или, более точно, усредненная энергия электронного движения, вычисленная в предположении, что ядра неподвижны. Вращением молекулы как целого мы в первом приближении пренебрегаем. Положение равновесия ядра определяется минимумом  $V(r)$ , т. е. равновесное межъядерное расстояние  $r_0$  получается из уравнения  $(dV/dr)_{r_0} = 0$ . Этот минимум обязательно существует, так как иначе вообще не смогла бы образоваться молекула с конечным расстоянием между ядрами. На фиг. 95 схематически изображен график потенциала рассматриваемого типа. При движении от минимального значения  $r_0$  в сторону уменьшения  $r$  потенциал очень быстро возрастает. В этой области доминирует кулоново отталкивание двух ядер. При увеличении расстояния между ядрами кривая потенциала идет более полого и асимптотически

приближается к некоторому предельному уровню, который на нашем графике произвольно принят за нуль, — это соответствует настолько большому расстоянию между ядрами, что молекула практически совсем распадается на составные части. В этом крайнем случае потенциальная энергия  $V(r)$  движения ядер просто равна постоянной электронной энергии двух отдельных атомов и поэтому может быть принята за нуль. При этом ядра (а вместе с ними и атомы в целом) движутся как свободные частицы.

В потенциальной яме  $V(r)$  ядра могут колебаться как *квантовые осцилляторы*. Вблизи положения равновесия  $r_0$  форма

Фиг. 95. График зависимости потенциала от расстояния между двумя атомами, образующими молекулу (положение равновесия обозначено через  $r_0$ ).



кривой потенциала близка к параболе, как это видно из разложения  $V(r)$  в ряд Тейлора вблизи  $r=r_0$ :

$$V(r) = V(r_0) + \frac{(r-r_0)^2}{2} \left( \frac{d^2V}{dr^2} \right)_{r_0} + \dots$$

Очевидно, что при не слишком больших амплитудах возвращающая сила пропорциональна расстоянию. В таком случае ядра колеблются как гармонические осцилляторы, и мы можем пользоваться соответствующими формулами. Полуклассическая теория (Бор) ведет тогда к энергетическим уровням

$$E_s = h\nu_0 s \quad (s=0, 1, 2, \dots),$$

а волновая механика — к уровням

$$E_s = h\nu_0 \left( s + \frac{1}{2} \right).$$

Первая формула была выведена в гл. V, § 2, а вторая получена из решения волнового уравнения для гармонического осциллятора (гл. V, § 4; приложение 16). Собственная частота  $\nu_0$  определяется величиной возвращающей силы. Легко вывести для

нее уравнение

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{1}{m} \left( \frac{d^2V}{dr^2} \right)_{r_0}}$$

Из дифференциальной геометрии известно, что  $(d^2V/dr^2)_{r_0}$  пропорциональна кривизне потенциальной кривой в точке  $r=r_0$ , и поэтому наш результат можно выразить в следующей форме: чем больше (вычисленная в точке равновесия) кривизна потенциальной кривой, определяющей движение ядер, тем больше собственная частота и тем выше соответствующие уровни энергии.



Фиг. 96. Схема термов колебательной полосы.

Дискретные уровни энергии сходятся к пределу, соответствующему энергии диссоциации молекулы. Сразу за этой границей начинается область непрерывного спектра; ясно, что после диссоциации составные части молекулы приобретают кинетическую энергию и разлетаются.

Приведенные формулы, как уже отмечалось, справедливы только для малых амплитуд колебаний, или, что то же самое, для малых квантовых чисел. Для более высоких возбужденных состояний отклонение формы потенциальной кривой от параболы приводит к тому, что колебания уже нельзя более считать гармоническими. В формулы, выведенные выше, необходимо внести поправки, которые меняют величины термов. При увеличении квантового номера  $s$  уровни все более и более сгущаются, пока не будет достигнута так называемая *граница схождения* (фиг. 96). Эта граница соответствует *диссоциации* молекулы, причем необходимая для нее энергия равна глубине потенциальной ямы, отсчитываемой от асимптотического предельного значения потенциала. Эта энергия равна  $V(\infty) - V(r_0)$ , и если сообщить молекуле такую, или большую энергию, то она распадается на атомы, или ионы, причем они разлетятся с определенными скоростями, определяемыми избытком сообщенной энергии по сравнению с энергией диссоциации. Спектр

отражает эту ситуацию тем, что в нем появляется полоса с границей схождения, сразу же за которой идет непрерывный спектр (Фраик). Зная положение границы, можно определить энергию диссоциации, причем гораздо точнее, чем с помощью калориметрических измерений, которые применяются в химии. В настоящее время благодаря этому подходу мы хорошо знаем работу разделения для большого числа молекул, например

$H_2$	$N_2$	$O_2$	
101	210	117,3	ккал/моль.

Чтобы дать представление о порядке колебательных частот, приведем волновые числа, соответствующие некоторым основным частотам  $\nu_{\text{юл}}$  (по Черни):

HF	HCl	HBr	
4003	2907	2575	см <sup>-1</sup> .

Для сравнения выпишем волновые числа, соответствующие основным вращательным частотам  $\nu_{\text{вращ}}$ :

HF	HCl	HBr	
41,1	20,8	16,7	см <sup>-1</sup> .

Мы видим, что колебательные кванты значительно больше вращательных.

До сих пор, изучая колебания, мы пренебрегали возможностью вращения молекул. На деле при поглощении могут одновременно возбуждаться и колебательные, и вращательные степени свободы. В таком случае энергия приближенно дается выражением

$$E_{s,j} = E_s + E_j = h\nu_0 \left( s + \frac{1}{2} \right) + \frac{h^2}{8\pi^2 A_s} j(j+1).$$

В первом приближении кванты энергии вращательного движения просто прибавляются к колебательным энергетическим термам. Частоты, соответствующие разностям этих термов (здесь выполняются правила отбора  $\Delta j = 0, \pm 1$ ;  $\Delta s = \pm 1, \pm 2 \dots$ ), т. е., например, для основного колебания частоты

$$\nu = \frac{E_{s,j} - E_{s-1,j-1}}{h} = \nu_0 + \frac{h}{8\pi^2} \left\{ \frac{j(j+1)}{A_s} - \frac{j(j-1)}{A_{s-1}} \right\}$$

дают колебательно-вращательные полосы. В связи с большой величиной собственной частоты  $\nu_0$  они лежат в близкой инфракрасной части спектра. Значит, добавление колебательного кванта  $h\nu_0$  смещает весь спектр в сторону более коротких волн, т. е. в область, гораздо более доступную для эксперимента. Однако здесь закон, дающий последовательность вращательных линий, гораздо более сложен, чем в случае чистых вращений,



так как моменты инерции, которые определяют расстояния между линиями, зависят от мгновенных значений межъядерных расстояний, и могут быть различными для начального и конечного состояний.

Выписанные выше энергетические термы  $E_{n,j}$  не исчерпывают полной схемы уровней, поскольку мы ввели условие, что электронное состояние молекул не меняется при вращательных и колебательных переходах. Но само электронное состояние тоже может меняться при поглощении или излучении света. У молекулы, точно так же как у атома, имеются возбужденные состояния, отличающиеся квантовыми числами  $n=1, 2, \dots$ . Каждому такому состоянию соответствует своя потенциальная энергия ядерного движения  $V_n(r)$ , которая получается в результате усреднения. Поэтому для разных возбужденных уровней электронного движения мы получаем различные кривые ядерного потенциала. Горизонтальные асимптоты кривых ( $r \rightarrow \infty$ ) дают набор энергий для конечных продуктов диссоциации. Например, молекула водорода  $H_2$ , диссоциируя, расщепляется в зависимости от электронного состояния молекулы либо на два водородных атома в основном состоянии, либо на один возбужденный и один невозбужденный атомы, либо на два возбужденных атома водорода. Различным энергиям продуктов диссоциации соответствуют при этом различные горизонтальные асимптоты кривых потенциала ядерных колебаний. На фиг. 97 представлены две потенциальные кривые, причем одна из них,  $E_1$ , имеет минимум и поэтому для нее возможна устойчивая химическая связь. В то же время другая,  $E_2$ , монотонно убывает, что, конечно, соответствует вовсе не химической связи, а отталкиванию атомов, так как наименьшей энергией обладает в этом случае состояние бесконечно удаленных атомов. Такая двойная возможность появляется уже для молекулы водорода (см. § 6 этой главы).

При одновременном возбуждении высших электронных уровней, вращений и колебаний полная энергия приближенно выражается формулой

$$E = E_n + E_v + E_j,$$

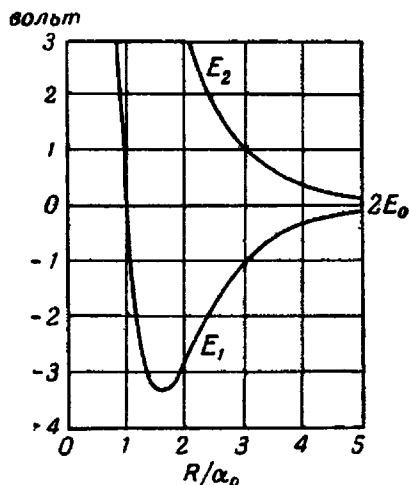
где  $E_n$  означает чисто электронную энергию (она определяется разностью минимумов различных потенциальных кривых). Наличие  $E_n$  приводит к смещению полос в видимую или ультрафиолетовую области, так как частоты переходов из одного электронного состояния молекулы в другое по порядку величины — те же, что и частоты электронных переходов в атомах. Комбинация электронного скачка с переходами между колебательными и вращательными состояниями ведет к излучению вра-

щательно-колебательной полосы в области длин волн, соответствующей электронному переходу. Эти полосы по виду аналогичны чисто вращательно-колебательным полосам, с той разницей, что в них появляются малые «возмущения», связанные с взаимодействием электронного и ядерного движений (например, изменение собственной частоты ядерных колебаний из-за электронного скачка, см. фото 19 и 20).

Электронные термы  $E_n$  двухатомной молекулы допускают классификацию, сходную с классификацией термов атомов.

Фиг. 97. Потенциальные кривые для гомеоплярной связи (в качестве примера взяты  $H_2$ ).

Одна кривая имеет минимум (притяжение), другая соответствует чистому отталкиванию.



Однако здесь уже нельзя, как в случае атомов, пользоваться орбитальным моментом ( $l=0, 1, 2, \dots$  дает  $S$ -,  $P$ -,  $D$ -, ... термы), ввиду того, что электронное облако не обладает больше определенным полиым моментом, как в случае атомов; причина заключается в том, что линия, соединяющая ядра, выделяет особое направление в молекуле, а кроме того, молекула вращается в пространстве (вращательные термы), увлекая, конечно, за собой и электроны. Однако компонента электронного момента вдоль этого направления квантуется, так как на нее не влияет вращение молекулы как целого. Квантовое число этой компоненты обозначается через  $\lambda$ , и по аналогии с атомной классификацией для обозначения термов применяются заглавные греческие буквы соответственно значениям  $\lambda$ :

$$\lambda = 0, 1, 2, \dots,$$

$$\Sigma, \Pi, \Delta, \dots \text{ термы.}$$

Можно отметить также, что если молекула образована двумя одинаковыми ядрами, то в схеме термов могут появиться особенности: в этом случае возникает вырождение, проявляющееся в определенных специфических изменениях спектров (выпадение некоторых линий).

Наконец, следует сказать, как усложняется эта картина из-за того, что на самом деле ядра не являются точечными рядами, но имеют внутреннюю структуру. Важнейшее проявление этого — наличие ядерного спина. Внутренний механический момент ядер складывается по правилам векторного сложения с моментом остальной системы, обусловленным орбитальным вращением ядра и электронов, а также со спинами электронов. В случае двух одинаковых ядер это вызывает очень сильные эффекты, связанные с вырождением. Простейшим примером тому может служить молекула  $H_2$ . Здесь ядра представляют собой два протона, каждый со спином  $1/2$ . Векторное сложение дает либо  $1/2 - 1/2 = 0$ , либо  $1/2 + 1/2 = 1$ . В этом втором варианте результирующий ядерный момент, равный единице, может иметь три различные ориентации по отношению к моменту, связанному с остальными степенями свободы, что обусловлено наличием трех возможных компонент  $-1, 0, +1$  у вектора длины 1. Все эти состояния имеют одинаковые вероятности. Значит, молекулы с ядерным моментом 1 должны встречаться втрое чаще, чем молекулы с ядерным моментом 0. Далее, оказалось, что самопроизвольные переходы одного сорта молекул в другой практически не имеют места (Гейзенберг, Хунд). Оба сорта молекул существуют почти независимо друг от друга, что побудило и назвать их по-разному. Молекулы с моментом 0 названы *пара-водородом*, а молекулы с моментом 1 — *орто-водородом*. Обычный водород является их смесью в пропорции 1:3. Этот факт подтверждается многими свойствами, особенно величиной удельной теплоемкости (Дениссон, 1927 г.). Однако орто-водород, обладающий большей энергией, может превращаться в пара-водород под влиянием каталитических явлений, таких, как, например, адсорбция на поверхности (Бонхоффер и Хартек, Ойкен и Хиллер, 1929 г.). Разница в энергиях является следствием того факта, что для пара-молекул со спином 0 возможны только четные значения вращательного квантового числа, а для орто-молекул со спином 1 — только нечетные, поэтому низшее состояние с квантовым числом 0 принадлежит пара-водороду. Так как обычно газообразный водород содержит пара-атомы и орто-атомы в пропорции 1:3, то и интенсивности полос находятся в том же отношении. Такое изменение интенсивности полос, связанное со спином, характерно для всех молекул, образованных двумя одинаковыми атомами, что по-

зволяет определить ядерный спин. Об этом методе мы уже говорили (гл. VII, § 2).

Исследование полосатых спектров уже стало самостоятельным научным направлением. Анализ и изучение полос дает очень много детальной информации о структуре молекул. Для интерпретации обширного экспериментального материала, который уже собран, приходится использовать изощренные математические методы, такие, как теория групп, анализ свойств симметрии и т. д.

Заканчивая этот параграф, мы обсудим еще одно явление — эффект Рамана<sup>1)</sup>. Правда, следует сразу предупредить, что это открытие не произвело такой революции, как, например, открытие волновой природы электрона, а даже было наперед предсказано квантовой теорией (Смекал, 1923 г.; Крамерс и Гейзенберг) за несколько лет до его экспериментального обнаружения; более того, его можно объяснить с позиций классической физики (Кабаннес, 1928 г.; Рокард, Плачек). Огромная важность этого явления определяется скорее тем, что его легко применить к изучению молекул, и тем, что очень быстро было накоплено колоссальное количество фактов, связанных с ним. Эффект был одновременно (1928 г.) обнаружен Раманом в Индии и Маидельштамом и Ландсбергом в Советском Союзе. Они обнаружили, что в рассеянном свете, кроме частоты падающего света, присутствует набор других частот.

Классическое объяснение этого явления состоит в следующем. Если на молекулу падает световая волна  $E = E_0 \cos 2\pi\nu t$ , то у молекулы возникает дипольный момент

$$p = \alpha E_0 \cos 2\pi\nu t,$$

где  $\alpha$  означает тензор поляризуемости. Как уже отмечалось, направление индуцированной поляризации, вообще говоря, не совпадает с направлением возбуждающего поля. В таком случае мы должны учесть влияние, оказываемое на индуцированную поляризацию состоянием молекулы, ее вращением и колебаниями. Дело в том, что при вращении молекул вместе с ними вращается эллипсоид поляризации, и поэтому индуцированный дипольный момент колеблется в том же ритме. Подобно этому, при колебаниях ядер также колеблется и вся электронная система, что снова приводит к колебаниям поляризуемости в том же ритме. В действительности, скорость движения электронов вокруг ядер гораздо больше скорости колебаний самих ядер. Поэтому, изучая влияние ядерных колебаний на

<sup>1)</sup> Это явление чаще называют комбинационным рассеянием света. — Прим. ред.

поляризуемость, мы можем пользоваться усредненным электронным распределением. Из разложения в ряд Фурье, которое описывает влияние вращений и колебаний на поляризуемость, мы выберем один член  $v_s$  и запишем  $\alpha$  в форме

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 \cos(2\pi\nu_s t + \delta),$$

где  $\delta$  означает неопределенную фазу, меняющуюся от молекулы к молекуле. Подставив это выражение в формулу для дипольного момента, получим

$$\begin{aligned} p &= \alpha_0 E_0 \cos 2\pi\nu t + \alpha_1 E_0 \cos 2\pi\nu t \cos(2\pi\nu_s t + \delta) = \\ &= \alpha_0 E_0 \cos 2\pi\nu t + \frac{1}{2} \alpha_1 E_0 \{ \cos [2\pi(\nu + \nu_s) t + \delta] + \\ &\quad + \cos [2\pi(\nu - \nu_s) t - \delta] \} \end{aligned}$$

Это значит, что колебания дипольного момента можно считать суперпозицией трех колебаний с частотами  $\nu$ ,  $\nu + \nu_s$  и  $\nu - \nu_s$ . Так как именно дипольный момент создает рассеяние света, то, кроме частоты  $\nu$  падающего света, в рассеянном луче присутствуют частоты  $\nu + \nu_s$  и  $\nu - \nu_s$ ; более того, ввиду произвольности фазы  $\delta$  эти три колебания некогерентны. В точности то же самое выполняется для всех вращательных и колебательных частот молекулы.

В связи с этим в спектре рассеянного света появляется нечто вроде полос вблизи линии падающего света, по которым можно определить вращательные и колебательные частоты, точно так же, как для полос излучения и поглощения. Важность этого метода состоит в том, что все полосы расположены в той области *видимого спектра*, которую мы сами можем выбирать, так как местоположение полос зависит только от выбора частоты падающего света. Так, например, можно определить константы основного состояния для электронной системы по разделению линий в полосах, причем наблюдения проводятся в видимой области спектра, тогда как соответствующие полосы излучения находятся в далекой инфракрасной области. Следует отметить, что перенесение полос в видимую область при наблюдениях вращательно-колебательных полос в тех случаях, когда одновременно происходит электронный скачок, дает не молекулярные константы невозбужденного «естественного» состояния, а лишь константы некоторого возбужденного состояния, которые, вообще говоря, для химиков не представляют интереса.

Однако при изучении интенсивностей рамановских линий обнаруживаются особенности, которые не поддаются классическому объяснению. Например, оказалось, что компоненты рас-

сеяниого света, имеющие частоту  $\nu - \nu_0$ , гораздо интенсивнее компонент с частотой  $\nu + \nu_0$ . Это явление можно объяснить сразу же с помощью следующего простого квантового рассуждения. Когда падающий световой квант сталкивается с молекулой, то, во-первых, может случиться, что он будет рассеян без потери энергии. С другой стороны, он может возбудить молекулу и передать ей колебательную энергию  $h\nu_0$ ; тогда в рассеянном свете появляется световой квант с энергией  $h(\nu - \nu_0)$ . Очень редко встречаются случаи, когда световой квант сталкивается с уже возбужденной молекулой. При этом он может отобрать у нее энергию, так что сама молекула перейдет в низшее состояние, а вылетевший квант унесет энергию  $h(\nu + \nu_0)$ . Поэтому в длинноволновой области интенсивность рамановских линий велика, а в коротковолновой присутствуют лишь несколько слабых линий.

Эффект Рамана имеет огромное значение для исследования молекул, поскольку наблюдать его сравнительно легко, а также потому, что во многих случаях точные результаты, относящиеся к структуре молекул, вытекают лишь из наличия или отсутствия определенных линий. Это можно проиллюстрировать на следующем примере.

Молекула  $N_2O$ , в предположении, что атомы расположены вдоль одной прямой, может иметь форму  $NON$  или  $NNO$ . Спрашивается, как различить эти две возможности? Но ведь первая форма явно симметрична, а вторая нет. Те из сказывающихся в эффекте Рамана колебаний, которые возникают в симметричной молекулярной структуре, существенно отличаются (числом и поляризацией линий) от колебаний несимметричных структур. Поэтому мы и можем сделать из эксперимента однозначный вывод, что осуществляется несимметричная форма  $NNO$ . Подобные же рассуждения можно провести и для более сложных молекул (например, для симметричной структуры метановой молекулы  $CH_4$ , или для четыреххлористого углерода  $CCl_4$ ). Однако здесь не стоит глубже вдаваться в эти вопросы.

#### § 4. Химическая связь. Классификация типов связей

До сих пор мы рассматривали электронную систему молекулы в целом и ограничивали свое внимание в основном теми свойствами и эффектами, по отношению к которым молекулу можно считать единым образованием с определенной структурой. Сейчас мы должны обратиться к вопросам, которые особенно интересуют химиков, а именно, как вообще возникает молекулярная связь, иначе говоря, как из отдельно взятых атомов образуется молекулярная система.

Мы будем различать несколько разных видов химической связи, но возможны все промежуточные ступени между основными типами. В нашей классификации мы будем следовать системе, предложенной Фрайком, по которой основным критерием является то, будет ли молекула при диссоциации стремиться к расщеплению на ионы или на нейтральные атомы. Правда, тип диссоциации иногда зависит и от уровня возбуждения молекулы. Тем не менее критерий Фрайка дает во многих случаях удобную основу для классификации связи. Итак, будем различать следующие случаи:

I. *Молекула расщепляется на ионы* при термической диссоциации или из-за поглощения света. Этот вид связи называется *ионной связью*<sup>1)</sup>. В предельном случае этого типа связи атом заряжен, даже когда он находится в молекуле, т. е. атомы существуют в виде ионов, и связь при этом объясняется их кулоновским притяжением. Тогда мы говорим о *полярной* (или *гетерополярной*) связи и об *электровалентности*. Типичный пример такого рода связи — молекула NaCl. Около ста лет тому назад Берцеллиус высказал предположение, что все химические силы в действительности имеют электростатическую природу. Однако эту гипотезу пришлось отвергнуть из-за трудностей, связанных с объяснением связи атомов одинакового сорта (например, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>), которая не может быть полярной. И только после того, как наблюдения электролитических процессов, дипольных моментов и т. д. до некоторой степени выделили полярные молекулы среди остальных, появилась возможность вернуться к гипотезе Берцеллиуса. Хотя она хорошо подтверждается только для ограниченного класса соединений, но для этого класса, как показали Льюис и Коссель (1916 г.), она способна привести к важным результатам.

II. *Молекула распадается на атомы*, например, при тепловом возбуждении или при поглощении света; в этом случае мы говорим об *атомной связи*. Здесь различаются несколько подклассов:

1. Атомная связь с насыщенной валентностью: *ковалентное соединение* (также называемое *гомеополярной связью*). К этому типу принадлежат прежде всего двухатомные газы, такие, как H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, а также большинство органических соединений, например CH<sub>4</sub>.

<sup>1)</sup> Терминология еще не совсем установилась, но та, которую мы употребляем здесь, кажется, постепенно стабилизируется. Обращаясь к истории, заметим, что различие между гетерополярной и гомеополярной связями было впервые предложено Абегом; деление на ионную и атомную связи по продуктам диссоциации введено Фрайком.

2. Слабая связь без насыщения валентности, создаваемая силами Ван-дер-Ваальса: *связь сцепления*.

3. Связи, эффективные, например, для образования металлической решетки; мы объединим их под общим названием *металлических связей*.

4. Группа связей, которые не могут быть точно классифицированы по нашей схеме, например *бензольная связь и другие подобные виды связи*.

Между этими различными группами имеются, конечно, серии промежуточных ступеней, которые мы, однако, не будем здесь рассматривать, посвятив следующие разделы обсуждению наиболее важных типов связи, отмеченных выше.

## § 5. Теория гетерополярной ионной связи

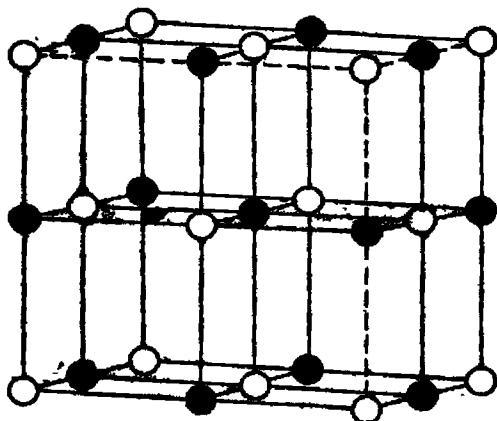
О том, как возникает эта связь, мы уже говорили. Теперь мы рассмотрим этот вопрос несколько подробнее (Коссель, Борн и Ланде, 1918 г.). Атомные конфигурации, близкие к инертным газам, всегда стремятся перейти в конфигурацию инертного газа, что достигается отдачей или захватом электронов. В атомах щелочных металлов валентный электрон находится вне заполненной оболочки и связан относительно слабо. Поэтому щелочные металлы имеют очень малую *энергию ионизации I* (значения ионизационных потенциалов см. в табл. 5, стр. 206). Напротив, у галогенов не хватает одного электрона до полного заполнения оболочки, которая, как известно, представляет собой очень устойчивую электронную конфигурацию. Поэтому галогены всегда готовы захватить электрон, заполняя тем самым оболочку. В такой ситуации мы говорим о *сродстве к электрону E*, т. е. об энергии, освобождаемой при захвате электрона. С этими понятиями очень тесно связана *электровалентность*; положительная электровалентность — это число слабо связанных электронов, находящихся вне заполненной оболочки атома, а отрицательная электровалентность равна числу электронов, необходимых для достижения конфигурации инертного газа.

Возникновение ионной связи можно обрисовать как процесс, проходящий в два этапа. Сначала два взаимодействующих атома получают заряды противоположных знаков, например  $\text{Na} + \text{Cl} = \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$ . Второй этап — это притяжение двух ионов по закону Кулона; энергия притяжения равна  $-e^2/r$ . Само по себе это привело бы к полному слиянию двух ионов, но на малых расстояниях в соответствии с квантовой механикой возникают силы отталкивания. Для их описания предлагался потенциал вида  $b/r^n$ , приводящий к хорошим результатам. Сама



квантовая механика выводит экспоненциальный закон  $be^{-r/a}$ , и это даже несколько лучше отвечает опыту. Положение равновесия определяется теперь значением  $r$ , при котором сумма этой энергии и кулоновской энергии имеет минимум.

В молекуле газа на каждый из атомов действуют электрические силы только с одной стороны. Поэтому электронные облака ионов, конечно, очень сильно деформированы, что в высшей



Фиг. 98. Гранецентрированная кубическая решетка.

степени затрудняет анализ ионной связи. Проще картина в кристаллах, особенно в высокосимметричной каменной соли (гранецентрированная кубическая решетка, фиг. 98) и в кристаллах подобных типов. Деформации в них исчезают из-за симметрии. Ведь в решетке каменной соли на ион хлора с одинаковой силой действуют со всех сторон соседние ионы натрия, и то же самое относится к более далеким ионам. Поэтому оказывается возможным вычислить энергию решетки, т. е. энергию  $U$ , которую необходимо приложить для полного разрушения решетки. Она выражается суммой вида

$$U = \sum \left( \pm \frac{e^2}{r} + \frac{b}{r^n} \right).$$

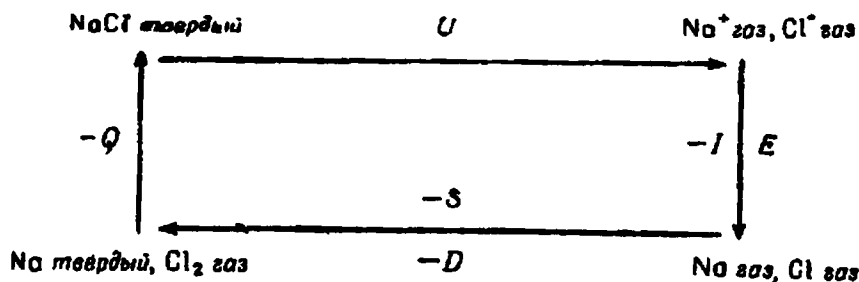
Суммирование проводится по всем узлам решетки; силы отталкивания мы считаем столь же симметричными, как и кулоновские. Вычисление этой суммы весьма сложно, так как первая кулоновская часть сходится очень медленно. Действующие силы, конечно, уменьшаются при увеличении расстояния. Но в то же время число ионов, взаимодействующих с данным на определенном расстоянии от него, возрастает как квадрат этого

расстояния. Удобные методы для вычисления таких сумм были даны Маделунгом и Эвальдом (1918 г.). Для  $U$  было найдено выражение

$$U = -\frac{e^2\alpha}{\delta} + \frac{\beta}{\delta^n}.$$

где  $\delta$  — постоянная решетки, т. е. расстояние от натриевого иона до ближайшего иона хлора; величина  $\alpha$ , названная постоянной Маделунга, зависит от типа решетки и для NaCl равна 1,75. Для вычисления других постоянных,  $\beta$  и  $n$ , первоначально неизвестных, можно получить два уравнения. Первое из них — это уравнение равновесия  $dU/d\delta=0$ , определяющее минимум энергии решетки. Далее, сила, необходимая для сжатия кристалла на определенную величину, равна  $d^2U/d\delta^2$  и может быть найдена экспериментально. Этим способом для щелочных солей галогенов получаем значения  $n$  в пределах от 6 до 10. При использовании квантовомеханического экспоненциального закона для отталкивающей силы  $be^{-r/a}$  получаются более точные результаты. Постоянная  $\rho$  оказывается приблизительно одинаковой для всех щелочных солей галогеноводородных кислот, именно  $\rho \sim 0,35\text{A}$  (Борн и Майер, 1932 г.).

Результаты, предсказанные теорией, можно проверить непосредственно. Так, Майер экспериментально определил энергию решетки через термическую диссоциацию и получил хорошее совпадение для некоторых солей. Возможна также и косвенная проверка теории, для чего вычисляют *сродство к электрону* для галогенов в различных солях (скажем, для Cl берем соли LiCl, NaCl и т. д.) с помощью следующего циклического процесса (Борн, 1919 г.; Хабер):



Начнем с твердой каменной соли (кристалл). Приложив энергию, равную энергии решетки  $U$  (приложенная энергия считается положительной), разбиваем кристалл на ионы. Дальнейшим добавлением энергии  $E$ , соответствующей электронному

средству Cl, можно отобрать лишний электрон у Cl<sup>-</sup> и передать этот электрон иону Na<sup>+</sup>, освободив в то же время энергию ионизации *I*, в результате чего образуется нейтральный газ Na. Затем выделяется теплота сублимации *S* металлического Na, и газ переходит в твердый натрий, в то время как атомарный Cl выделяет энергию диссоциации *D* и превращается в молекулярный газ Cl<sub>2</sub>. Взаимодействие этого газа с металлическим Na дает кристаллическую каменную соль, причем выделяется теплота образования *Q*, и этим заканчивается цикл. Энергия, конечно, должна быть сбалансирована, поэтому должно быть

$$U - I + E - S - D - Q = 0.$$

Здесь нам известны все величины, за исключением сродства к электрону *E*: *I*, *D*, *S*, *Q* получаются из тепловых и электрических измерений, а *U* — из теории кристаллической решетки; значит, уравнение позволяет вычислить *E*. В результате должно получиться одинаковое значение для всех солей одного и того же галогена; это с большой точностью и подтвердилось. Например, величины сродства к электрону для Cl, вычисленные для различных солей, приведены в табл. 14. Средние значения для различных галогенов даны в табл. 15.

Таблица 14

Сродство к электрону *E* для хлора из различных щелочных солей (ккал/моль)

SiCl	NaCl	KCl	RbCl	CsCl	Среднее
85,7	86,5	87,1	85,7	87,3	86,5

Таблица 15

Сродство к электрону для галогенов (ккал/моль)

F <sup>-</sup>	Cl	Br	I
95,3	86,5	81,5	74,2

Майеру удалось подтвердить эти результаты прямыми измерениями с помощью молекулярных пучков. Кроме того, отметим, что ионы в растворах солей дают спектр поглощения, связанный как раз с этим процессом освобождения электрона из галогенного иона, и, приняв во внимание воздействие окружающей среды (воды), можно в грубом приближении получить величину сродства к электрону (Франк и Шайбе).

Описанная здесь теория является полуэмпирической. С точки зрения квантовой механики мы имеем гораздо более трудную задачу, заключающуюся в определении структуры и свойств кристаллов, исходя только из величины заряда ядра. Это можно сделать, обобщая на случай кристаллов приближен-

ные методы, разработанные Хартри, Фоком и др. в области исследования электронных облаков атомов (гл. VI, § 9). Этим способом можно вычислить абсолютные значения постоянных решеток, сжимаемостей и других величин; полученные данные находятся в хорошем согласии с наблюдениями (Хиллераас, 1930 г.; Ландсхоф, 1936 г.; Ловдин, 1948 г.).

### § 6. Теория ковалентной связи

Перейдем к изучению так называемой ковалентной связи. В этом случае опытные факты (следуя толкованию Льюиса, 1923 г.) указывают, что такая связь часто сопутствует существованию *электронной пары*, такой, что каждый электрон пары принадлежит обоим атомам, соединяющимся друг с другом. В качестве простейшего примера можно рассмотреть молекулу водорода, образованную двумя одинаковыми ядрами и двумя электронами.

Лондон и Гайтлер (1927 г.) указали квантовомеханический подход к проблеме молекулы водорода. Чтобы проще было разобраться в общем случае, обратимся к следующему примеру из электротехники, который полностью аналогичен нашей задаче. Если сблизить два одинаковых электрических колебательных контура, собственная частота каждого из которых равна  $\nu_0$ , то их взаимная связь приведет к тому, что они расстроятся и частота  $\nu_0$  расщепится на две различные частоты, из которых одна больше, а другая меньше  $\nu_0$ , так что между этими частотами возникнут биения. Положение в молекуле водорода аналогично: роль двух колебательных контуров играют здесь электроны, обращающиеся вокруг ядер (в разделенных атомах). Взаимодействие приводит к небольшой расстройке, и мы получаем две частоты — несколько большую и несколько меньшую  $\nu_0$ . Но, как мы знаем, каждой частоте  $\nu_0$  соответствует энергия  $h\nu_0$ ; значит, из невозмущенной энергии  $2E_0$  двух отдельных атомов водорода получаются несколько большая и несколько меньшая энергии связанной системы

$$E_1' = 2E_0 - W_1(R), \quad E_2 = 2E_0 + W_2(R),$$

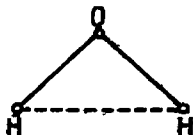
где  $W_1(R)$  и  $W_2(R)$  практически означают энергии взаимодействия, зависящие от расстояния  $R$  между двумя атомами, т. е. от межъядерного расстояния (приложение 38). Энергия  $E_1$  первого состояния меньше, чем у диссоциированной молекулы (разделенные атомы водорода), и поэтому атомы в нем связаны. Состояние же с энергией  $E_2$  соответствует отталкиванию двух атомов (см. фиг. 97, стр. 347). Энергия  $W_1(R)$  определяет

частоту, с которой изменение волновых функций, вызванное взаимодействием, осциллирует от атома к атому. Так как квадрат амплитуды волновой функции дает вероятность нахождения частицы в данной точке, эти колебания можно рассматривать как «обмен» двух электронов. Поэтому  $W_1(R)$  называется «обменной энергией».

Факт насыщения валентности объясняется принципом запрета Паули. В соответствии с этим принципом электроны в молекулах точно так же, как и в атомах, образуют оболочки вокруг двух ядер. В молекуле водорода два электрона находятся в основном состоянии в самой внутренней «оболочке», и поэтому должны, подобно двум электронам на  $K$ -оболочке, иметь противоположные спины. Так, в случае притяжения в состоянии  $E_1$  спины двух электронов антипараллельны, и, наоборот, можно показать, что в состоянии  $E_2$  спины должны быть параллельны. При этом «заполненные оболочки» снова являются особо устойчивыми состояниями, и химическая связь возникает очень легко, когда в молекуле достигается насыщение спинов внешних электронов, или, другими словами, образуется заполненная оболочка. В общем случае в первом приближении (большие атомные расстояния  $R$ ) в связи могут участвовать только те электроны атома, которые еще не образовали антипараллельных пар с другими электронами. Число некомпенсированных спинов равно числу свободных валентностей молекулы (атома). Поэтому истинная (гомеополярная) валентность равна числу электронов с ненасыщенным спином. В качестве примера рассмотрим первые два ряда периодической таблицы. В первом ряду находятся Н и He. Об одновалентном водороде мы уже говорили. Гелий имеет два уже насыщенных спина, образующих заполненную оболочку; значит, он химически нейтрален. Первый элемент второго ряда, Li, как и водород, одновалентен; у него один валентный электрон вне заполненной оболочки. У Be появляется еще один электрон, и его спин насыщается спином первого  $L$ -электрона. Поэтому казалось бы, что Be, как и He, должен был бы иметь валентность 0. В действительности его валентность равна двум; возможно, это объясняется тем, что, вступая в связь, атом сначала возбуждается, и направления спинов обоих электронов становятся одинаковыми. Затем идут три элемента B, C, N соответственно с 1, 2 и 3 электронами в самой внешней оболочке (2  $p$ -электроны). Если добавить четвертый  $p$ -электрон, т. е. перейти к O, то его спин обязательно должен скомпенсироваться одним из уже имеющихся электронов, так как, выбрав определенное направление спина, мы получим только три возможности для ориентации орбитального момента. Поэтому по-

следний появившийся электрон должен, по принципу Паули, иметь противоположное направление спина, т. е. компенсировать один из трех свободных спинов азотной электронной конфигурации. Значит, кислород двухвалентен. Обращаясь к фтору, мы видим новый электрон, который опять насытит один из двух оставшихся спинов, сделав фтор одновалентным. Неон с его заполненной оболочкой, конечно, химически нейтрален — его химическая валентность 0. Эти общие соображения хорошо подтверждаются на опыте. О трудности, связанной с Ве, мы уже говорили. Необходимо также упомянуть, что соединения бериллия большей частью гетерополярны. Более серьезно то возражение, что по теории углерод должен быть двухвалентным, в то время как хорошо известно, что он четырехвалентен. Эту трудность также легко объяснить. У атома углерода рядом с

Фиг. 99. Модель молекулы воды.



основным состоянием имеется возбужденный уровень, в котором он четырехвалентен, и обычная углеродная химическая связь осуществляется с первого возбужденного уровня атома углерода.

Для краткости мы не будем вдаваться в математическое исследование ковалентной связи (приложение 38). Отметим только, как особый успех теории, возможность количественного определения ядерных расстояний, теплот диссоциации и ядерных колебательных частот для молекулярного водорода. Теория смогла дать качественные и количественные результаты, находящиеся в хорошем согласии с экспериментом и для других двухатомных молекул.

Применение этих методов к объяснению многоатомных соединений математически очень запутано. Как типичный пример явлений, требующих объяснения, приведем тот давно известный физикам факт, что три атома молекулы воды не лежат на одной прямой, как можно было бы ожидать с первого взгляда, а образуют равнобедренный треугольник (фиг. 99). Подобно этому молекула аммония  $\text{NH}_3$  имеет вид пирамиды. Многочисленные проблемы такого рода (стереохимия), а также проблемы величины или направления валентных связей возникают в органической химии. После нескольких попыток развить удовлетворительные методы их решения на основе

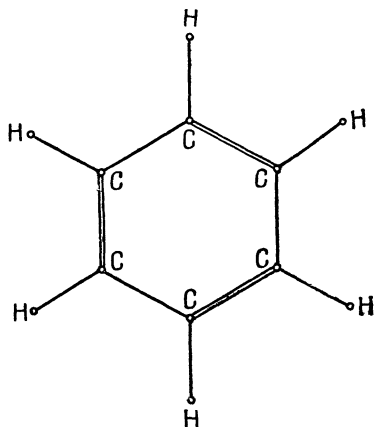
представления о насыщении спинов (Слэтер, Вейль, Борн) оказалось более полезным обратиться к полуэмпирическим методам (Герцберг, Хунд, Милликен, Ван-Флек, Паулинг, Пенни, Коулсон и др.).

### **§ 7. Теория сил Ван-дер-Ваальса и других видов связи**

Мы дадим лишь очень краткий обзор этих вопросов. Силы сцепления Ван-дер-Ваальса возникают вследствие взаимной деформации атомов, причем эта зависимость осуществляется двумя различными способами. Во-первых, действие поля, создаваемого молекулой с постоянным дипольным или квадрупольным моментом, на диполь, индуцированный этим полем в другой молекуле, ведет в среднем к притяжению; этот результат еще до создания квантовой теории был получен Дебаем и Кеезомом (1921 г.) на основе классических представлений. Однако из них вытекало, что у сферически симметричных атомов (например, у инертных газов) или молекул не должно было бы быть сцепления в противоречии с тем экспериментальным фактом, что все газы поддаются сжижению. Лондон (1930 г.) предложил способ преодоления этой трудности, показав, что деформация приводит к еще одному эффекту, характерному для квантовой теории. Согласно этой теории, реально существуют «нулевые колебания»; иначе говоря, атом или молекула даже в низшем энергетическом состоянии ведет себя как система движущихся зарядов (электронов) и поэтому является диполем, колеблющимся с электронной частотой. Если сблизить такие системы, то из-за нулевых колебаний диполей в среднем возникает притяжение. Вычисления показывают, что энергия такого взаимодействия обратно пропорциональна шестой степени межъядерного расстояния, т. е.  $W \sim 1/R^6$ . Многие атомы или молекулы без свободных валентностей (спинов) еще до конденсации образуют нечто вроде пар, связанных вандерваальсовыми силами притяжения. При этом получается молекула с относительно слабой связью и малой энергией диссоциации. Примером такого рода связи могут служить молекулы металлов, таких, как Hg<sub>2</sub> и др. При достаточно низких температурах и достаточно больших давлениях все газы поддаются сжижению и затем отверждению. С помощью своей теории сцепления Лондон (приложение 39) сумел из атомных свойств (энергия ионизации, собственная частота) вычислить в некотором приближении теплоты испарения молекулярных решеток.

Существование металлов нельзя объяснить, используя те типы связи, с которыми мы уже имели дело; для объяснения

их структуры необходимо принять, что атомные остатки, имеющие положительный заряд, удерживаются вместе свободными электронами металлов. В некоторых случаях, например, для лития и натрия получаются хорошие результаты (Слетер, Вигнер, Фукс). Особые трудности возникают в случае таких решеток (решетка алмаза), в которых связь, очевидно, зависит от насыщения (четырёх) валентностей. Среди кристаллов этого типа встречаются и металлы (Ge, Sn), и непроводники, в том числе и чрезвычайно твердый алмаз (а также SiC, AgI и др.).



Фиг. 100. Бензольное кольцо.

Химики предполагают существование в этой молекуле двойных связей для согласования с фактом четырехвалентности углерода.

Эти запутанные вопросы были выяснены Хундом с помощью квантовой механики.

С другими случаями, каждый из которых требует особого рассмотрения, мы встречаемся в органической химии, при изучении кольцевых структур, таких, как бензольное кольцо. Согласно химическим представлениям, 6 атомов углерода располагаются в вершинах шестиугольника, а атомы водорода находятся снаружи (фиг. 100). Если считать, что углерод в структурной диаграмме четырехвалентен, то химикам приходится вводить двойные связи, как это показано на диаграмме. Различные способы, разработанные квантовой механикой, позволяют обойти это нежелательное нарушение симметрии связей. По Хюккелю, связь создается электронами, вращающимися в шестиугольнике атомов углерода. Паулинг, будучи химиком, рассматривает и одинарные и двойные связи, различая их в соответствии с тем, что либо одна, либо две электронные пары принадлежат одновременно двум соседним атомам. Однако он вводит в рассмотрение все возможные расположения одинарных и двойных связей и описывает реальное состояние



молекулы как суперпозицию волновых функций этих расположений. Оба метода приводят к очень сходным результатам, которые хорошо согласуются с наблюдениями.

## § 8. Заключение

Мы заканчиваем последний этап нашего изложения. В этой книге мы останавливались главным образом на *законченных результатах исследований*, не вдаваясь детально в те вопросы, суть которых полностью еще не выяснена. В связи с этим могло создаться впечатление, что физика достигла определенной степени завершенности. В действительности же это ни в коей мере не так. Все еще остается много запутанных загадок, тесно связанных между собой, и все они в конце концов упрутся в вопрос о природе и взаимодействиях элементарных частиц. Классифицировать эти частицы можно различными способами. Один из них основан на стабильности частиц: нуклоны и электроны образуют атом, т. е. обычную материю, в то время как другие частицы, такие, как фотоны и мезоны, имеют малое время жизни, и кажется вероятным, что они служат носителями сил, действующих между частицами первого типа. Но эта классификация не является строгой, так как электроны могут рождаться и уничтожаться в паре с позитронами, или как-либо иначе. Другой способ классификации основан на значении массы покоя частиц. Тогда фотоны, нейтрино и электроны образуют одну группу, члены которой имеют нулевую или очень малую массу, мезоны образуют вторую группу, а нуклоны — третью. Но почему возможны только такие значения массы и никаких других? И существует ли связь между стабильностью частицы и ее массой? Стабильность определяется взаимодействием, следовательно, это означало бы зависимость массы частицы от всех возможных взаимодействий с другими частицами. Это с очевидностью показывает, что, стремясь к более глубокому пониманию, мы не должны рассматривать различные сорта частиц по отдельности. Будущая теория должна быть в очень широком смысле слова единой: она должна объединять все существующие теории частиц и их взаимодействий в простую рациональную систему. Без сомнения, эта система должна удовлетворять принципу относительности и являться обобщением современной квантовой механики, с ее индетерминизмом и статистическим характером.

От физики будущего мы ждем решения загадки неорганической материи. Но принципиальные результаты современной физики выходят далеко за пределы той области, в которой они были установлены. Как первым отметил Нильс Бор, новые

взгляды на причинность и детерминизм, возникшие в результате развития квантовой теории, имеют огромное значение и для биологических наук и психологии. Если даже в неживой природе физик сталкивается с абсолютными пределами, за которыми точные причинные связи исчезают и заменяются статистическими, то мы должны быть готовыми к тому, что в сфере живой материи, и, тем более, в процессах, связанных с сознанием и волей, встретятся непреодолимые барьеры, за которыми механистическое объяснение, бывшее целью старой натурфилософии, станет совершенно бессмысленным. Но это имеет следствием совершенное изменение философского значения исследований. Современные физики узнали, что не на каждый вопрос о движении электрона или кванта света можно ответить, но что имеют смысл только те вопросы, которые совместимы с принципом неопределенности Гейзенберга. Здесь содержится указание биологам и психологам: следовало бы поискать естественные пределы причинного объяснения и в их областях и очертить эти пределы с той же степенью точности, как то можно сделать в квантовой механике при помощи постоянной Планка  $\hbar$ .

Это программа умеренности, но вместе с тем и программа глубоких надежд. Ибо то, что лежит внутри этих пределов — познаваемо, и будет познано. Перед нами обширный мир опыта, достаточно богатый красками и оттенками, чтобы мы посвятили себя его всестороннему исследованию. Все, что лежит вне — в бесплодных пустынях метафизики — мы охотно оставляем спекулятивной философии.

# ПРИЛОЖЕНИЯ

## 1. Вычисление некоторых интегралов, встречающихся в кинетической теории газов

В кинетической теории газов часто появляются интегралы вида

$$I_\nu = \int_0^\infty v^\nu e^{-\lambda v^2} dv,$$

где

$$\lambda = \frac{m\beta}{2} = \frac{m}{2kT}.$$

Интегралы общего вида можно сразу получить из частных интегралов  $I_0$  и  $I_1$ , проводя дифференцирование по  $\lambda$ . Так, например,

$$I_2 = -\frac{dI_0}{d\lambda}, \quad I_3 = -\frac{dI_1}{d\lambda},$$

$$I_4 = +\frac{d^2I_0}{d\lambda^2}, \quad I_5 = +\frac{d^2I_1}{d\lambda^2}.$$

Второй из основных интегралов  $I_1$  вычисляется элементарными методами:

$$I_1 = \int_0^\infty v e^{-\lambda v^2} dv = \frac{1}{2\lambda}.$$

Первый же интеграл  $I_0$  — это хорошо известный интеграл ошибок Гаусса:

$$I_0 = \int_0^\infty e^{-\lambda v^2} dv = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}.$$

Выполняя, как сказано выше, дифференцирование, получаем для последующих интегралов значения

$$I_2 = \int_0^{\infty} v^2 e^{-\lambda v^2} dv = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}},$$

$$I_3 = \int_0^{\infty} v^3 e^{-\lambda v^2} dv = \frac{1}{2\lambda^2},$$

$$I_4 = \int_0^{\infty} v^4 e^{-\lambda v^2} dv = \frac{3}{8} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}}$$

и т. д.

Применение к интегралам, появляющимся в кинетической теории газов. Для  $n$  — полного числа молекул имеем

$$n = 4\pi A \int_0^{\infty} v^2 e^{-\frac{1}{2}\beta m v^2} dv = 4\pi A I_2 = A \sqrt{\frac{\pi^3}{\lambda^3}}.$$

Аналогично полная энергия  $E$  равна

$$4\pi A \int_0^{\infty} \frac{1}{2} m v^4 e^{-\frac{1}{2}\beta m v^2} dv = 2\pi A m I_4 = \frac{3}{4} m A \sqrt{\frac{\pi^3}{\lambda^3}}.$$

Из этих двух формул получаем выражения для  $A$  и  $\beta$ , приведенные в тексте.

Интегралы этого типа появляются также при вычислении средних значений. По Максвеллу число молекул, имеющих скорости в пределах от  $v$  до  $v+dv$ , равно

$$n_v dv = 4\pi n \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v^2 e^{-\lambda v^2} dv;$$

„средняя скорость“  $\bar{v}$  дается выражением

$$\bar{v} = \frac{\int_0^{\infty} n_v v dv}{\int_0^{\infty} n_v dv} = \frac{I_3}{I_2} = \frac{2}{\sqrt{\pi\lambda}}.$$

Далее, „средняя квадратичная скорость“  $\sqrt{v^2}$  — величина, которой часто пользуются в кинетической теории газов, —

находится из соотношения

$$\bar{v}^2 = \frac{\int_0^{\infty} n_v v^2 dv}{\int_0^{\infty} n_v dv} = \frac{I_4}{I_2} = \frac{3}{2\lambda}.$$

Средняя квадратичная скорость  $\sqrt{\bar{v}^2}$  несколько больше  $\bar{v}$ ; их отношение равно  $\sqrt{3\pi/8} = 1,085$ . Полезно сравнить с этими величинами „наиболее вероятную скорость“  $v_p$ , которая соответствует максимуму кривой распределения Максвелла. Она определяется из уравнения

$$\frac{dn_v}{dv} = 0,$$

или

$$\frac{d}{dv} (e^{-\lambda v^2} v^2) = 2v e^{-\lambda v^2} (1 - \lambda v^2) = 0,$$

откуда

$$v_p = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}.$$

На кривой распределения Максвелла, приведенной в тексте (фиг. 5, стр. 24), показано, как примерно располагаются значения всех трех величин  $v_p$ ,  $\bar{v}$  и  $\sqrt{\bar{v}^2}$ .

Умножая в выражении для  $v_p$  числитель и знаменатель на квадратный корень из числа Авогадро  $N$  и вспоминая, что  $N_0 k = R$  и  $N_0 m = \mu$ , получаем

$$v_p = \sqrt{\frac{2kT}{m}} = \sqrt{\frac{2RT}{\mu}}, \quad \bar{v} = \frac{2v_p}{\sqrt{\pi}} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi\mu}},$$

$$\sqrt{\bar{v}^2} = v_p \sqrt{\frac{3}{2}} = \sqrt{\frac{3RT}{\mu}}.$$

## 2. Теплопроводность, вязкость и диффузия

В этом приложении мы будем рассматривать одновременно три явления, позволяющие экспериментально определить среднюю длину свободного пробега в газе. Это — *теплопроводность*, *вязкость* и *диффузия*. Все эти явления характеризуются тем, что из-за движения молекул любая пространственная неоднородность некоторого физического свойства газа стремится к выравниванию.

*Теплопроводность* проявляется, когда по каким-либо внешним причинам в газе возникает градиент температуры, т. е.

когда в разных точках пространства средние кинетические энергии молекул газа оказываются различными. Тепло переносится быстрыми молекулами, которые, переходя из более теплых областей в более холодные, и отдают там свой избыток энергии, в то время как медленные молекулы, переходя в более теплые области, отбирают там избыток кинетической энергии у более быстрых молекул.

То же самое происходит в случае *вязкости*. Она проявляется в сопротивлении, которое при движении газа испытывают те его части, которые движутся быстрее других. Согласно кинетической теории, причиной этого сопротивления являются молекулы, перешедшие из областей медленного движения в области быстрого. Так как средняя скорость таких молекул (в направлении движения потока) ниже, чем скорость окружающего газа, то в результате столкновений они будут ускоряться, а окружающие молекулы замедляться, т. е. испытывать сопротивление своему движению. Мы не будем вдаваться в подробности экспериментальных методов определения вязкости, отметим только результат (установленный Максвеллом), который с первого взгляда кажется удивительным: вязкость, как и теплопроводность, в широких пределах не зависит от давления газа.

Третье явление, которое мы рассмотрим, — *диффузия*. Пусть в смеси двух газов концентрация одного из них меняется от точки к точке, т. е. отношение концентраций двух газов неодинаково в различных точках пространства, занятого смесью (предполагается, что давление везде одинаково, т. е. что полное число молекул одно и то же). Тогда ясно, что молекулы одного газа будут постепенно двигаться из области, где его концентрация больше, в область меньшей концентрации; соответствующим образом ведут себя и молекулы второго газа.

Эти три явления легко поддаются математическому истолкованию, правда, если ограничиться качественной картиной. В целях их совместного изучения примем, что физическая величина  $A$  меняется от точки к точке, т. е. имеет исчезающую производную  $dA/dz$  вдоль оси  $z$ . Для теплопроводности  $A$  будет средней кинетической энергией одной газовой молекулы, для вязкости — средней скоростью поступательного движения в направлении течения, а для диффузии — числом молекул одного сорта в одном кубическом сантиметре газовой смеси. Итак, изменение величины  $A$  в пространстве приводит к переносу этой величины; за единицу времени определенное число молекул пересекает в обоих направлениях единичную площадку, перпендикулярную оси  $z$ , и это число, по крайней мере приближенно, дается произведением  $n\bar{v}$ , где  $n$  — число молекул в кубическом сантиметре, а  $\bar{v}$  — их средняя скорость. Но молекулы,

пересекающие площадку в одном направлении, обладают свойством  $A$  либо в большей, либо в меньшей степени, чем молекулы, пересекающие ее в противоположном направлении. Поэтому и возникает перенос величины  $A$  через эту площадку. Количество  $M(A)$ , переносимое за секунду, можно легко подсчитать, заметив, что для всякой молекулы длина свободного пробега между двумя последовательными соударениями равна  $l$ , т. е. за время между соударениями она проходит расстояние порядка  $l$ . Так как задача решается приближенно, мы не будем уточнять численное значение множителя. Для  $M(A)$  легко находим следующее выражение:

$$M(A) \sim n\bar{v} [A(z_0 - l) - A(z_0 + l)],$$

где  $z_0$  — координата элемента рассматриваемой поверхности. Раскрывая это выражение, получаем (без численных множителей)

$$M(A) \sim -n\bar{v}l \left( \frac{dA}{dz} \right)_{z_0}.$$

Таким образом, перенесенное количество величины  $A$  пропорционально «градиенту  $A$ », а также числу молекул в кубическом сантиметре, их средней скорости и средней длине свободного пробега. Это уравнение называется *уравнением переноса*.

Отметим, что если  $A$  является свойством молекул газа, не зависящим от давления, то и  $M(A)$  не зависит от давления (Максвелл). Дело в том, что давление газа  $p = nkT$ , т. е. при постоянной температуре зависит только от числа молекул в кубическом сантиметре. И хотя  $n$  входит как множитель в уравнение переноса, его влияние компенсируется присутствием в формуле средней длины свободного пробега, которая обратно пропорциональна числу  $n$  и эффективному сечению молекулы. Независимость от давления можно объяснить также тем, что хотя при большем давлении в переносе  $A$  и участвует больше молекул, но в среднем они перемещаются на меньшее расстояние.

Теперь применим уравнение переноса специально к тем трем явлениям, о которых мы говорили выше. Начнем с *теплопроводности*. Здесь  $A$  означает кинетическую энергию молекулы, т. е.  $E_k = \text{const} + c_v mT$ , где  $c_v m$  — удельная теплоемкость газа при постоянном объеме, рассчитанная на одну молекулу ( $c_v$  — удельная теплоемкость, отнесенная к одному молю). Количество тепла  $Q$ , переносимое через единичную площадку за секунду, дается выражением

$$Q \sim -n\bar{v}l c_v m \frac{dT}{dz}.$$

Мы видим, что  $Q$  пропорционально градиенту температуры; коэффициент пропорциональности  $\kappa = n\bar{v}l c_v$  называется *коэффициентом теплопроводности*.

В случае *вязкости*, как мы видели,  $A$  есть средний импульс *ти* молекулы, движущейся в потоке газа. Тогда импульс, переносимый за секунду (через единицу поверхности раздела между быстро и медленно движущимися частями газа), т. е. сопротивление  $R$ , дается выражением

$$R \sim -n\bar{v}l m \frac{du}{dz};$$

величина  $\eta = n\bar{v}l m$  называется *коэффициентом внутреннего трения*. Заметим, что дробь  $\kappa/\eta c_v$  — постоянная порядка единицы. Теоретически она должна быть одной и той же для всех молекул одинаковой структуры, т. е. эта дробь должна иметь некоторое единое значение для всех одноатомных газов, какое-то другое — для всех двухатомных газов и т. д. Конечно, наш качественный подход не дает возможности определить численные значения этих констант.

Как мы уже подчеркнули, изложенные рассуждения грубы и неполны. Уточнение и развитие теории обязано Больцману, Максвеллу и др., которые более тщательно изучали механизм столкновений и распределение скоростей. Эти улучшения, однако, не несут ничего принципиально нового, имея целью только гораздо точнее определить численные коэффициенты. Мы не будем вдаваться в подробности таких расчетов. Остается еще отметить, что вся теория справедлива лишь постольку, поскольку средний свободный пробег молекул мал по сравнению с размерами сосуда с газом. В случаях, когда это не так (при атмосферном давлении  $l$  — порядка  $10^{-6}$  см, но становится равной примерно 10 см внутри рентгеновской трубки, где давление  $10^{-4}$  мм рт. ст.), начинают действовать совершенно другие законы. Молекулы летят практически по прямым, без столкновений друг с другом, от одной стенки сосуда до другой.

Если, например, в таких условиях между двумя противоположными стенками имеется разность температур, то тепловая энергия переносится молекулами непосредственно с одной стенки на другую. Количество перенесенного тепла при этом пропорционально числу молекул, и  $n$  уже не исчезает из уравнения переноса, так как средний свободный пробег теперь не входит в уравнение. Законы теплопроводности, вязкости и т. д. при низких давлениях изучал главным образом Кнудсен. Они имеют огромное практическое значение, например, при работе с вакуумными насосами (такими, как ротационный молекулярный насос Геде, диффузионный насос).



Теперь кратко рассмотрим *диффузию*. Представим себе смесь двух газов в динамическом равновесии. Это значит, что температура и давление, а следовательно, и полное число молекул в кубическом сантиметре везде одинаковы. Здесь в качестве  $A$  выступает  $n_1/n$  — концентрация молекул первого газа или  $n_2/n$  — концентрация молекул второго газа. Тогда уравнение переноса дает  $Z_1$  — число молекул первого газа или  $Z_2$  — число молекул второго газа, диффундирующих через единичную площадку за единицу времени:

$$Z_1 \sim -\bar{v}l \frac{d(n_1/n)}{dz} = -\bar{v}l \frac{dn_1}{dz}, \quad Z_2 \sim -\bar{v}l \frac{dn_2}{dz}.$$

Если процесс стационарен, то  $n_1 + n_2$  должно равняться постоянному  $n$ , т. е.

$$\frac{dn_1}{dz} = -\frac{dn_2}{dz}.$$

И тогда полный поток  $Z_1 + Z_2$  равен нулю. Оба сорта молекул имеют одинаковый коэффициент диффузии  $\delta = -\bar{v}l$ , который из-за множителя  $l$  обратно пропорционален  $n$  — полному числу молекул.

Существование другого вида диффузии, названного *термодиффузией*, теоретически предсказали Энског (1912 г.) и Чепмен (1916 г.), а экспериментально обнаружили на смеси  $\text{CO}_2$  и  $\text{H}_2$  Чепмен и Дутсон (1917 г.). Термодиффузия возникает, когда начальная концентрация однородна, давление постоянно, но температура меняется от точки к точке. В этом случае средняя скорость молекул  $\bar{v}$ , пропорциональная  $\sqrt{T}$ , зависит от местоположения молекулы, в связи с чем надо изменить уравнение переноса. Полная и точная теория явления была разработана Чепменом (1939 г.), а элементарный подход развил Фюрт (1942 г.). Результат этих исследований сводится к тому, что в уравнении диффузии появляется член, пропорциональный градиенту температуры. Коэффициент термодиффузии сложным образом зависит от масс и диаметров участвующих в процессе молекул.

### 3. Уравнение состояния Ван-дер-Ваальса

По сравнению с уравнением состояния идеального газа уравнение состояния реального газа, предложенное Ван-дер-Ваальсом и приведенное нами в тексте на стр. 30, содержит две поправки — к объему и к давлению. Попытаемся показать, хотя бы качественно, откуда появляются эти члены.

1) Тот факт, что в уравнении состояния из полного объема газа надо вычитать именно учетверенный собственный объем молекул, можно объяснить следующим образом. В § 6 гл. I мы получили вероятность того, что  $n$  молекул определенным образом распределятся по ячейкам  $\omega_1, \omega_2, \dots$ . Оказалось, что она равна произведению числа способов, которыми может осуществиться выбранное распределение, заданное числами  $n_1, n_2, \dots$  молекул в отдельных ячейках, на вероятность реализации самого этого распределения. Рассмотрим эту последнюю вероятность. При вычислении вероятности того, что  $n$  молекул находятся в определенном элементе объема  $v$ , начнем, как и в § 6 гл. I, с предположения, что она пропорциональна  $v^n$ . Это, конечно, справедливо только до тех пор, пока можно пренебрегать размерами частиц, как, например, в случае разреженных газов. Ситуация меняется в случае больших давлений, когда молекулы газа так плотно упакованы, что их собственный объем становится сравним с объемом, занятым газом. Искомый результат получают следующим способом. Пусть  $v_m$  — объем молекулы (например, для сферической молекулы

$$v_m = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{1}{2} \sigma\right)^3,$$

где  $\sigma$  — диаметр молекулы). Но поскольку центры двух молекул не могут сблизиться на расстояние, меньшее диаметра молекулы, эффективный объем каждой молекулы имеет величину

$$\frac{4}{3} \pi \sigma^3 = 8v_m$$

независимо от того, какую форму имеет каждая отдельная молекула.

Вероятность нахождения молекулы в определенном элементе объема  $v$ , конечно, пропорциональна  $v$ , как и раньше. Если в тот же элемент объема поместить вторую молекулу, то в ее распоряжении будет объем, равный лишь  $v - 8v_m$ ; объем для третьей молекулы будет  $v - 2 \cdot 8v_m$  и т. д. Значит, вероятность  $P_n$  нахождения  $n$  молекул в объеме  $v$  пропорциональна не  $v^n$ , а произведению

$$v(v - 8v_m)(v - 2 \cdot 8v_m) \dots [v - (n - 1)8v_m];$$

соответственно  $v$  следует заменить на  $\sqrt[n]{P_n}$ . Приближенное выражение для  $P_n$  можно получить, вычисляя

$$\begin{aligned} \ln P_n &= \ln v^n (1 - \gamma)(1 - 2\gamma) \dots [1 - (n - 1)\gamma] = \\ &= n \ln v + \sum_{k=1}^{n-1} \ln(1 - k\gamma), \end{aligned}$$

где  $\gamma = 8v_m/v$ . Теперь предположим, что полный объем всех молекул  $nv_m$  мал по сравнению с объемом  $v$  сосуда; тогда  $n\gamma \ll 1$ , и во всех членах суммы  $k\gamma \ll 1$ . Поэтому  $\ln(1 - k\gamma) \sim -k\gamma$ , и

$$\ln P_n = n \ln v - \gamma \sum_{k=1}^{n-1} k = n \ln v - \gamma \frac{(n-1)n}{2}.$$

Здесь  $n-1$  можно заменить на  $n$  и мы получим

$$\ln P_n = n \ln v - \frac{1}{2} \gamma n^2$$

или

$$P_n = v^n e^{-\gamma n^2/2} = (v e^{-\gamma/2})^n.$$

Извлекая корень  $n$ -й степени из этой величины, мы увидим, что  $v$  нужно заменить на  $v e^{-\gamma/2}$ , или, поскольку  $n\gamma \ll 1$ , на

$$v \left(1 - \frac{1}{2} n\gamma\right) = v \left(1 - n \frac{4v_m}{v}\right) = v - b,$$

где  $b$  означает  $4nv_m$  — учетверенный собственный объем молекул, заключенных в объеме  $v$ .

2) Происхождение поправки к давлению, равной  $a/v^2$ , можно объяснить следующим образом. Если между молекулами действуют силы сцепления, то всякий элемент объема действует на всякий другой такой же элемент с силой, пропорциональной  $n^2$ , где  $n$  — число молекул в кубическом сантиметре. Поэтому давление газа на внешнее тело становится меньше, чем было бы в отсутствие сил сцепления. Соответственно в уравнении состояния величину  $p$  надо заменить на  $p + An^2$ . Пусть  $nV = N$  есть полное число молекул газа в объеме  $V$ . Конечно,  $N$  не меняется при изменении объема, и добавочный член  $An^2$  можно записать в виде  $A(N/V)^2 = a/V^2$ . Отсюда видно, что постоянная  $a$  тесно связана с энергией сцепления в газе; отметим, что величины скрытых теплот парообразования жидкостей также зависят от нее.

Уравнение Ван-дер-Ваальса выведено только для случая малых плотностей, но если тем не менее применять его в случае более высоких давлений, то можно формально описать явление конденсации и даже грубо оценить свойства жидкостей. Строгое исследование уравнения состояния жидкостей и самого процесса сжижения является очень трудной задачей, так как необходимо учитывать взаимодействие более чем двух молекул. Урселл (1927 г.) нашел путь решения этой задачи; следуя по

этому пути, Майер (1937 г.) получил решение, которое затем было математически обосновано другими исследователями (Уленбек и Кан, 1938 г.; Борн и Фукс, 1933 г.).

#### 4. Среднее квадратичное отклонение

Для всех явлений, связанных с отклонением величин от среднего значения, характерно соотношение

$$\overline{\Delta n^2} = \bar{n}.$$

Здесь  $n$  может означать, например, число частиц в определенной фиксированной части объема газа. Рассматривая далее этот пример, заметим, что число  $n$  не совсем постоянно, но меняется со временем. Однако имеется среднее по времени значение величины  $n$  — число  $\bar{n}$ , около которого колеблется число частиц  $n$ . Если бы можно было замечать мгновенные значения числа  $n$  (нечто вроде моментальной фотографии), мы получили бы ряд различных значений  $n_1, n_2, \dots$ , отклоняющихся от среднего значения  $\bar{n}$  на величины  $\Delta n_1 = n_1 - \bar{n}$ ,  $\Delta n_2 = n_2 - \bar{n}$ ,  $\dots$ . Сумма отклонений для большого числа наблюдений, деленная на это число, должна, конечно, обратиться в нуль, но если усреднять квадраты этих отклонений, то результат будет отличен от нуля. Так получается среднее квадратичное отклонение  $\overline{\Delta n^2}$ , которое, как мы утверждаем, равно среднему значению  $\bar{n}$ .

Доказательство этого мы начнем с основной формулы кинетической теории газов, согласно которой для объема  $V$ , содержащего  $N$  молекул, вероятность обнаружения некоторой части молекул  $n$  в элементе объема  $v$  равна

$$W_n = \frac{N!}{n!(N-n)!} \left(\frac{v}{V}\right)^n \left(\frac{V-v}{V}\right)^{N-n}$$

(ср. стр. 21; вместо распределения по ячейкам  $\omega_1, \omega_2, \dots$  здесь мы имеем распределение по двум областям  $v$  и  $V-v$  с «числами заполнения»  $n_1 = n$  и  $n_2 = N - n$ ). Сумма всех вероятностей различных распределений равна

$$\sum_{n=0}^N W_n = 1$$

(по формуле бинома Ньютона). Среднее число молекул  $\bar{n}$  в элементе объема  $v$  мы получим, вычислив сумму

$$\bar{n} = \sum_{n=0}^N n W_n.$$

Если положить  $v/V = x$ , то эта сумма примет вид

$$\begin{aligned} \bar{n} &= \sum_{n=0}^N \frac{nN!}{n!(N-n)!} x^n (1-x)^{N-n} = \\ &= Nx \sum_{n=1}^N \frac{(N-1)!}{(n-1)! [(N-1)-(n-1)]!} x^{n-1} (1-x)^{(N-1)-(n-1)}. \end{aligned}$$

По формуле бинома сумма здесь тоже равна 1, так что для  $\bar{n}$  — среднего числа частиц — получаем, как и следовало ждать, выражение

$$\bar{n} = Nx = \frac{Nv}{V}.$$

Для вычисления  $\overline{n^2}$  заметим, что среднее значение  $\overline{n(n-1)}$  вычисляется точно таким же способом, как и  $\bar{n}$ . Действительно,

$$\begin{aligned} \overline{n(n-1)} &= \sum_{n=0}^N n(n-1) W_n = \\ &= N(N-1) x^2 \sum_{n=2}^N \frac{(N-2)!}{(n-2)! [(N-2)-(n-2)]!} x^{n-2} (1-x)^{(N-2)-(n-2)}. \end{aligned}$$

откуда

$$\overline{n(n-1)} = N(N-1) x^2.$$

Это сразу же дает

$$\overline{n^2} = \overline{n(n-1)} + \bar{n} = N(N-1) x^2 + Nx,$$

так что

$$\Delta n^2 = \overline{(n - \bar{n})^2} = \overline{n^2} - \bar{n}^2 = Nx - Nx^2 = N \frac{v}{V} \left(1 - \frac{v}{V}\right).$$

Если ограничиться малыми значениями  $x$ , т. е. относительно малыми объемами  $v$ , мы прямо придем к написанной выше формуле для отклонений

$$\Delta n^2 = \bar{n}.$$

Средние значения многих других физических величин вычисляются точно так же, как  $\bar{n}$  и  $\overline{n^2}$ .

Эти формулы применяются следующим образом. Самопроизвольные отклонения плотности молекул от среднего значения вызывают изменение почти всех физических свойств газа. Например, в результате вариаций плотности изменяется величина показателя преломления. По вариациям измеряемых величин

можно определить среднее квадратичное отклонение. Так, вариации показателя преломления приводят к рассеянию проходящего света, которое пропорционально среднему квадратичному отклонению (именно этим, согласно лорду Рэлею, обусловлен голубой цвет неба). Аналогично в броуновском движении взвешенные частицы приходят в движение из-за вариаций плотности окружающей среды, что дает возможность измерить среднее квадратичное отклонение плотности среды. Если известна связь рассматриваемых явлений с плотностью, то среднее число частиц  $\bar{n}$  можно определить, измерив отклонения и вычислив среднее квадратичное отклонение.

Важной областью применения теории отклонений является физика радиоактивности. Здесь это вопрос подсчета числа частиц, излученных радиоактивным препаратом за секунду (для этого пользуются, например, счетчиком Гейгера, см. гл. II, § 4). Когда мы работаем с медленно распадающимися веществами, для которых среднее число  $\bar{n}$  частиц, излученных за секунду, можно считать постоянным, в отдельные периоды мгновенные значения числа частиц  $n$  оказываются отличными от  $\bar{n}$ . Тот факт, что отклонения *действительно* подчиняются установленному выше закону  $\Delta n^2 = \bar{n}$ , служит убедительным доказательством статистической природы процессов распада. Соответствующие формулы можно вывести и для быстро распадающихся радиоактивных веществ.

Предыдущие выводы основывались на допущении, что частицы независимы. Это допущение неверно в случае вырожденного газа (гл. VII, § 4—5), когда действует либо статистика Бозе—Эйнштейна, либо статистика Ферми—Дирака. В этом случае формулу для отклонений необходимо изменить (Фюрт, 1928 г.).

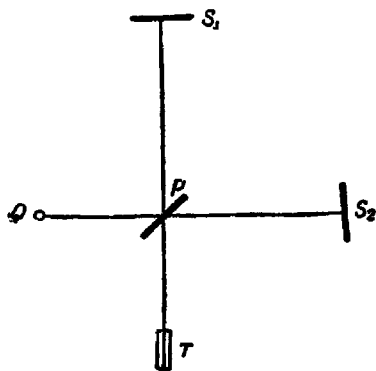
## 5. Теория относительности

В классической механике доказано, что наблюдатель, экспериментирующий, не выходя за пределы замкнутой системы, не может определить, покоится ли его система или находится в состоянии равномерного движения. Действительно ньютоновы уравнения движения

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F$$

(где  $m$  — масса частицы,  $F$  — действующая на нее сила,  $x$  — ее координата, а  $t$  — время) остаются неизменными при переходе к движущейся системе отсчета посредством преобразования  $x' = x - vt$ , коль скоро силы зависят только от положения частицы по отношению к системе координат (так как  $x'_1 - x'_2 = x_1 - x_2$ ).

При учете электромагнитных явлений, например световых волн, этот механический принцип относительности надо изменить. Поскольку световые волны распространяются в вакууме, казалось естественным полагать, что существует среда, переносящая их, так называемый эфир. Земля движется сквозь него, следовательно, наблюдатель на Земле должен был бы ощущать «эфирный ветер», тормозящий или ускоряющий световые волны соответственно их направлению. Эксперимент, преследовавший цель проверить эту идею, был поставлен с помощью интерферометра Майкельсона (фиг. 101). В этом приборе луч света из источника  $Q$ , частично отражаясь от посеребренной пластинки  $P$ ,



Фиг. 101. Схема интерферометра Майкельсона.

$Q$  — источник света,  $P$  — посеребренная полупрозрачная стеклянная пластинка,  $S_1$ ,  $S_2$  — зеркала,  $T$  — телескоп.

разделяется на две части; затем два разделенных луча отражаются от зеркал  $S_1$  и  $S_2$  и снова совмещаются на пластинке  $P$ . Интерференционная картина наблюдается через телескопический окуляр  $T$ . Если аппарат располагать так, чтобы в одном случае  $PS_1$ , а в другом  $PS_2$  были направлены вдоль направления эфирного ветра, то интерференционные полосы должны сдвигаться. Эксперимент дал отрицательный результат: эфирного ветра в действительности не существует.

Для объяснения этого факта Эйнштейн создал свою теорию относительности. Отправной идеей ему служило убеждение в ошибочности обычной кинематической комбинации пространства и времени. Абсолютного времени не существует; напротив, точно так же как всякая движущаяся система отсчета имеет свои «собственные» координаты  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , она должна иметь и собственное время  $t$ , которое при переходе к другой системе отсчета должно преобразовываться вместе с координатами. Уравнения, определяющие такие преобразования, называемые преобразованиями Лоренца в случае двух систем, одна из которых движется в направлении оси  $x$  с относительной ско-

ростью  $v$ , имеют вид

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = \frac{t - \frac{vx}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

где  $c$  — скорость света. Легко проверить, что, согласно этим уравнениям,

$$x'^2 - c^2 t'^2 = x^2 - c^2 t^2.$$

Это означает, что  $x, y, z, ict$  (где  $i = \sqrt{-1}$ ) можно понимать (Минковский) как координаты в четырехмерном пространстве, в котором форма  $x^2 + y^2 + z^2 + (ict)^2$  есть квадрат расстояния до начала координат. При этом преобразования Лоренца сводятся к поворотам в таком четырехмерном пространстве вокруг начала системы координат. Идея Минковского дала жизнь геометрической формулировке основных законов физики, достигшей вершины в разработанной Эйнштейном теории тяготения — так называемой общей теории относительности.

Физически написанное нами равенство выражает тот факт, что если  $x = ct$ , то и  $x' = ct'$ ; иначе говоря, величина скорости света не зависит от состояния движения наблюдателя. Тем самым получает объяснение отрицательный результат опыта Майкельсона.

Далее мы видим, что если в одной системе отсчета  $(x, t)$  расстояние между двумя точками в определенный момент времени  $t$  равно  $x_1 - x_2$ , то в другой системе  $(x', t')$  оно будет равным

$$x'_1 - x'_2 = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

откуда

$$x_1 - x_2 = (x'_1 - x'_2) \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}.$$

Значит, длина отрезка во второй системе по сравнению с его длиной в первой, оказывается уменьшенной (сокращение Фитцджеральда — Лоренца). С другой стороны, пусть  $t_1$  и  $t_2$  — моменты времени, когда в одной и той же точке  $x$  относительно первой системы произошли два события; тогда

$$t'_1 - t'_2 = \frac{t_1 - t_2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

так что с точки зрения второй системы между этими событиями проходит большее время (ср. стр. 378).



Мы должны принять, что движение не может совершаться со скоростью, превышающей скорость света, иначе теория становится бессмысленной. Поэтому основные представления механики необходимо изменить так, чтобы они исключали возможность ускорения тел до скоростей, превышающих скорость света.

Этот результат можно получить из того наблюдения, что скорость, определяемая компонентами

$$\frac{dx}{dt}, \quad \frac{dy}{dt}, \quad \frac{dz}{dt},$$

(или импульс, получаемый из скорости умножением на массу), нельзя с точки зрения преобразований Лоренца рассматривать как вектор, ибо дифференциал  $dt$  в знаменателе также подвергается преобразованию. Удобное «ковариантное» определение мы получим, заменив  $dt$  на  $dt_0$ , где  $dt_0$  — элемент «собственного» времени частицы, т. е. времени, измеряемого в той системе, где частица покоится. Соотношение между  $dt$  и  $dt_0$  можно найти, взяв производную от  $t'$ ,

$$\frac{dt'}{dt} = \frac{1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

и положив  $dx/dt = v$ . Тогда  $dt'$  переходит в  $dt_0$ , и мы получаем

$$dt_0 = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} dt.$$

Компоненты импульса при этом определяются так:

$$m_0 \frac{dx}{dt_0} = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \frac{dx}{dt} = m \frac{dx}{dt},$$

где  $m_0$  — постоянная, называемая массой покоя. Отсюда следует, что масса  $m$  выражается формулой, приведенной в тексте, а именно  $m = m_0 / \sqrt{1 - (v^2/c^2)}$ . Правильность этого вывода подтверждают не только эксперименты с катодными лучами, о чем мы уже говорили (гл. II, § 1), но и некоторые особенности спектральных линий, в частности линий водорода. В самом деле, такие линии создаются излучением быстро движущихся электронов, и в них находят свое отражение механические свойства этих электронов (гл. V, § 2). Энергия равна

$$E = mc^2 = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

а импульс —

$$p = mv = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

Из этих двух выражений получаем

$$m_0 = \frac{1}{c^2} \sqrt{E^2 - p^2 c^2}.$$

(Это соотношение часто использовалось в тексте, например, в теории  $\beta$ -распада ядер, гл. VII, § 7). Таким образом, величины  $E$  и  $p$  определяют массу покоя. Если она обращается в нуль (как, например, у кванта света — фотона, гл. IV, § 2), то  $E$  и  $p$  связаны соотношением

$$cp = E.$$

## б. Теория электрона

Для изотропной среды уравнения Максвелла имеют вид

$$\frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t} - \text{rot } H = -\frac{4\pi}{c} i, \quad \text{div } D = 4\pi\rho, \quad D = \epsilon E,$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial B}{\partial t} + \text{rot } E = 0, \quad \text{div } B = 0, \quad B = \mu H.$$

Предполагается, что читатель знаком с векторными обозначениями, со смыслом векторов  $E$ ,  $H$ ,  $D$ ,  $B$ ,  $i$ , так же как и с теоремой энергии

$$-\frac{dW}{dt} = \int S_n d\sigma + A,$$

где

$$W = \frac{1}{8\pi} \int \int \int (\epsilon E^2 + \mu H^2) dx dy dz$$

— электромагнитная энергия,

$$A = \int \int \int i \cdot E dx dy dz$$

— объемный интеграл работы электрических сил, а

$$S = \frac{c}{4\pi} E \times H$$

— вектор Пойнтинга, с которым мы еще встретимся в приложении 8 ( $\times$  означает векторное умножение).

Лоренцева теория электрона имеет дело только с полями в вакууме, поэтому мы примем  $\epsilon = \mu = 1$ ; предположим также, что все токи чисто конвекционные,  $i = \rho v$ , а заряд жестко связан

с электроном. В дальнейшем, чтобы связать теорию с механикой, необходимо будет предположить, что поле действует на электрон с механической силой

$$F = \iiint \rho \left\{ E + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right\} dx dy dz.$$

Ми (1912 г.) предложил обобщение теории Лоренца, в котором уравнения Максвелла для поля остаются неизменными, а вместо простых соотношений  $D = \epsilon E$ ,  $B = \mu H$  берутся весьма общие нелинейные выражения (в которые входят также плотности тока и заряда, векторный и скалярный потенциалы). Опираясь на этот формализм, автор настоящей книги развил «единую» теорию, которая позволяла описывать электрон как точечный заряд в поле, обладающий конечной полной энергией. Предположим, что  $\epsilon$  и  $\mu$  являются простыми функциями<sup>1)</sup> полей  $B$  и  $E$

$$\mu = \frac{1}{\epsilon} = \sqrt{1 + \frac{1}{b^2} (B^2 - E^2)}$$

(в тексте вместо  $B$  писалось  $H$ ). Энергия будет тогда равна

$$W = \frac{1}{4\pi} \iiint (\epsilon E^2 + b^2(\mu - 1)) dx dy dz,$$

а вектор Пойнтинга —

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} \mathbf{D} \times \mathbf{B} = \frac{c}{4\pi} \mathbf{E} \times \mathbf{H}.$$

В статическом случае  $\mathbf{H} = \mathbf{B} = 0$ , поэтому

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} = \frac{\mathbf{E}}{\sqrt{1 - \frac{1}{b^2} E^2}}.$$

Для особой точки, как явствует из уравнения  $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$ , имеем

$$D = \frac{e}{r^2},$$

откуда

$$E = \frac{e}{\sqrt{r^2 + a^2}}, \quad a^2 = \frac{e}{b}.$$

Поэтому поле  $E$  остается конечным даже в центре электрона, где оно равно

$$E_0 = \frac{e}{a^2} = b.$$

<sup>1)</sup> Мы рассматриваем теорию в ее первоначальной формулировке; в дальнейшем она была модифицирована и под знаком квадратного корня появился член  $1/b^4(E \cdot B)^2$ ; это, однако, не влияет на статические решения.

Из уравнений поля имеем, что  $\text{rot } E = 0$ ; следовательно, существует потенциал  $\varphi$ . Его находят из уравнения  $E = -\partial\varphi/\partial r$  в виде

$$\varphi = \frac{e}{a} \int_{r/a}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{1+x^2}}.$$

Легко видеть, что при  $r \gg a$   $\varphi$  переходит в кулоновский потенциал  $e/r$ , но при  $r=0$  потенциал  $\varphi$  конечен:

$$\varphi(0) = 1,8541 \frac{e}{a}.$$

Если подставить выражение для  $E$  в формулу энергии

$$W = \frac{1}{4\pi} \iiint \left\{ \frac{E^2}{\sqrt{1 - \frac{E^2}{b^2}}} + b^2 \left( \sqrt{1 - \frac{E^2}{b^2}} - 1 \right) \right\} dx dy dz,$$

то получается, что

$$W = \frac{2}{3} e\varphi(0) = 1,2361 \frac{e^2}{a}.$$

Теорема Эйнштейна  $W = mc^2$  остается здесь полностью справедливой, но доказательство завело бы нас слишком далеко. Если в приведенном выше уравнении подставить  $mc^2$  вместо  $W$ , то мы получим

$$a = 1,2361 \frac{e^2}{mc^2};$$

вводя сюда эмпирические значения заряда и массы электрона найдем

$$a = 3,50 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

Абсолютное поле равно  $b = e/a^2 = 9,18 \cdot 10^{15}$  ед. CGSE. Можно показать, что уравнения движения, выведенные Лоренцем в рамках классической теории,

$$\frac{d}{dt}(m\mathbf{v}) = e \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right)$$

здесь выполняются строго для постоянного внешнего электромагнитного поля и приближенно для полей, не сильно меняющихся на протяжении «диаметра электрона»  $2a$ . Шредингер показал (1942 г.), что в случае быстро меняющихся полей возникает радиационная сила, которая в точности согласуется с классической формулой, следующей из теории Герца (см. приложение 8).

Однако попытки согласовать эти идеи с принципами квантовой механики и теорией спина не имели успеха.

### 7. Теорема инертности энергии

Здесь мы дадим математическое обоснование мысленного эксперимента, описанного в тексте (гл. 3, § 2). Классическая электродинамика утверждает в согласии с экспериментом, что импульс, передаваемый световым лучом, несущим энергию  $E$ , поглощающей поверхности, равен  $E/c$  (ср. приложение 33). Поэтому импульс отдачи, полученный ящиком при излучении, будет иметь ту же величину. Если полная масса ящика равна  $M$  (см. фиг. 22, стр. 73), то скорость его движения влево в результате отдачи равна  $v$ , как следует из закона сохранения импульса  $Mv = E/c$ . Ящик продолжает двигаться все то время, пока свет проходит расстояние  $l$  от источника (I) до приемника (II). Если пренебречь членами высших порядков, то это время  $t$  будет равно  $l/c$ ; за это время ящик переместится влево на расстояние

$$x = vt = \frac{El}{Mc^2}.$$

Чтобы не вступать в противоречие с законом движения центра тяжести, мы должны, как указывалось в тексте, предположить, что перенос энергии от прибора I к прибору II сопровождается одновременным переносом массы в том же направлении. Если обозначить эту пока что неизвестную массу через  $m$ , то изменение полного момента при таком перераспределении масс будет равно  $Mx - ml$ . По закону движения центра тяжести эта разность должна быть нулем. Подставляя для  $x$  значение, найденное выше, получаем формулу Эйнштейна для  $m$ :

$$m = M \frac{x}{l} = \frac{E}{c^2}.$$

### 8. Вычисление коэффициента рассеяния света на свободных частицах

Вычисление коэффициента рассеяния мы начнем с известной формулы для излучения дипольной антенны. Согласно Герцу, поле диполя с моментом  $p$  равно

$$|E| = |H| = \frac{|\ddot{p}|}{c^2 r} \sin \chi.$$

Электрический вектор перпендикулярен магнитному, причем они лежат в плоскости, перпендикулярной к направлению распространения света;  $\chi$  — угол между этим направлением и направлением колебаний диполя, а  $r$  — расстояние до диполя. Необходимым условием применимости этой формулы является требование, чтобы  $r$  было гораздо больше длины волны излучаемого

света, или, другими словами, формула справедлива только в так называемой волновой зоне.

Чтобы применить эту формулу к нашему случаю колеблющейся частицы, заметим, что она представляет собой переменный электрический диполь с моментом  $p = es$ , где  $s$  — отклонение электрона от положения равновесия в данный момент времени. Тогда энергия, излучаемая в единицу времени в определенном направлении, выражается через вектор Пойнтинга, который ортогонален к  $E$  и  $H$ , и имеет величину

$$I_f(\chi) = |S| = \frac{c}{4\pi} |E||H| = \frac{e^2 \dot{s}^2}{4\pi c^3 r^2} \sin^2 \chi.$$

Сюда все еще входит отклонение от положения равновесия, точнее, его вторая производная по времени. Ее можно определить из уравнения, описывающего движение электрона под действием падающего света, т. е. в отсутствие других сил:

$$m\ddot{s} = eE_0.$$

Отсюда видно, что  $\ddot{s}$  перпендикулярно падающему лучу. Если полярную ось выбрать вдоль этого направления, а азимут отсчитывать от плоскости, проходящей через точку наблюдения, то мы получим

$$\cos \chi = \cos \alpha \sin \theta,$$

где  $\alpha$  — азимут направления  $s$ , а  $\theta$  — полярный угол линии наблюдения. Таким образом,

$$\sin^2 \chi = 1 - \cos^2 \alpha \sin^2 \theta.$$

Если падающий свет неполяризован, то необходимо усреднить это равенство по  $\alpha$ : это сведется к замене  $\cos^2 \alpha \rightarrow 1/2$ , а  $\sin^2 \chi$  при этом перейдет в  $1 - 1/2 \sin^2 \theta$ .

Далее,  $E_0$  — электрический вектор исходной волны — связан с интенсивностью падающего света следующим соотношением

$$I_0 = \frac{c}{4\pi} |E_0||H_0| = \frac{c}{4\pi} E_0^2.$$

После подстановки этих величин в уравнение движения формула для  $I_f(\chi)$  приводится к виду (Дж. Дж. Томсон)

$$I_f(\theta) = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta}{r^2} I_0.$$

Интегрируя по поверхности сферы радиуса  $r$  и используя формулу

$$\int \sin^2 \theta d\sigma = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta r^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 2\pi r^2 \int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta = \frac{8}{3} \pi r^2,$$

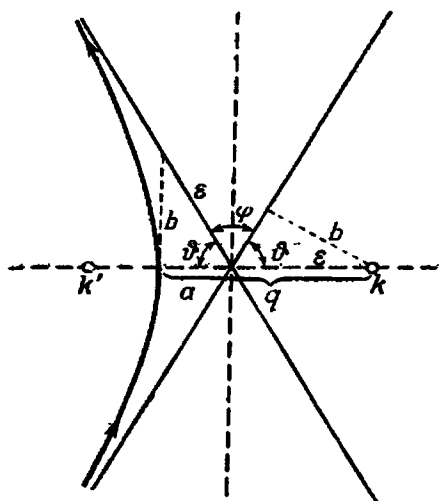
получим полную энергию, рассеянную свободной частицей,

$$I_f = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} |\ddot{\mathbf{s}}|^2 = \frac{8\pi}{3} \left( \frac{e^2}{mc^3} \right)^2 I_0.$$

Поскольку квадрат массы рассеивающей частицы входит здесь в знаменатель, протон и атомные ядра рассеивают свет в несколько миллионов раз слабее, чем электрон.

### 9. Формула Резерфорда для рассеяния $\alpha$ -частиц

Согласно Резерфорду, ядро атома (несущее заряд  $Ze$ ) и  $\alpha$ -частица (имеющая заряд  $E$  и массу  $M$ ) отталкиваются с ку-



Фиг. 102. Гиперболическая траектория рассеяния  $\alpha$ -частицы на ядре.

$a$  и  $b$  — полуоси гиперболы,  $\epsilon$  — расстояние между ее фокусом и центром рассеяния. Угол отклонения  $\varphi = \pi - 2\theta$ .

лоновской силой  $ZeE/r^2$ . Если считать тяжелое ядро покоящимся, то траектория  $\alpha$ -частицы будет ветвью гиперболы, один из фокусов которой совпадает с ядром  $K$  (фиг. 102). Пусть  $b$  — расстояние ядра от асимптоты гиперболы. В отсутствие отталкивания эта асимптота и была бы траекторией  $\alpha$ -частицы. Далее, обозначим расстояние ядра  $K$  от вершины гиперболы через  $q$ ; тогда

$$q = \epsilon(1 + \cos \theta),$$

где  $\varepsilon$  — линейный эксцентриситет (т. е. расстояние от центра  $O$  до фокуса  $K$ ),  $\theta$  — угол между асимптотой и осью координат. Из фиг. 102 легко усмотреть, что

$$\varepsilon = \frac{b}{\sin \theta}$$

и поэтому

$$q = \frac{b(1 + \cos \theta)}{\sin \theta} = b \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2};$$

$b$ , очевидно, равно длине меньшей полуоси гиперболы.

Найдем сначала связь между «прицельным параметром удара»  $b$  и углом отклонения  $\varphi$ , который, как видно из чертежа, равен  $\pi - 2\theta$ . Для этого рассмотрим законы движения  $\alpha$ -частицы. Прежде всего воспользуемся законом сохранения энергии: сумма кинетической и потенциальной энергии постоянна. Пусть  $v$  — скорость  $\alpha$ -частицы на очень больших расстояниях от ядра, где полная энергия состоит только из кинетической. Приравняв эту энергию к полной энергии  $\alpha$ -частицы в момент прохождения через вершину гиперболы, мы получим

$$\frac{1}{2} Mv^2 = \frac{1}{2} Mv_0^2 + \frac{ZeE}{q};$$

разделив это равенство на  $\frac{1}{2}Mv^2$  и положив для краткости

$$k = \frac{ZeE}{Mv^2},$$

запишем его в виде

$$\frac{v_0^2}{v^2} = 1 - \frac{2k}{b} \frac{\sin \theta}{1 + \cos \theta}.$$

Далее, из закона сохранения момента следует, что

$$Mvb = Mv_0q,$$

или

$$\frac{v_0}{v} = \frac{b}{q} = \frac{\sin \theta}{1 + \cos \theta},$$

$$\left(\frac{v_0}{v}\right)^2 = \frac{\sin^2 \theta}{(1 + \cos \theta)^2} = \frac{1 - \cos \theta}{1 + \cos \theta}.$$

Подставив эти величины в предыдущее уравнение, получим после небольших преобразований

$$\frac{b}{k} = \frac{\sin \theta}{\cos \theta} = \operatorname{tg} \theta,$$

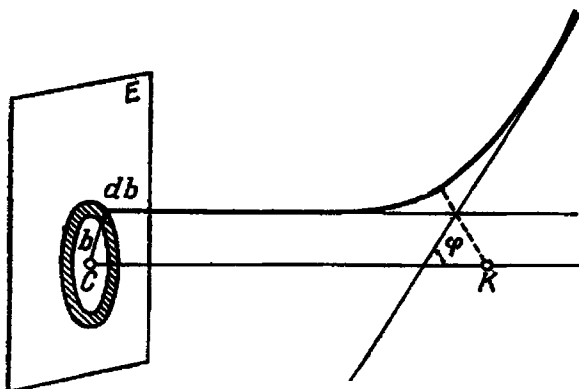
или, так как  $\varphi = \pi - 2\theta$ ,

$$b = k \operatorname{ctg} \frac{\varphi}{2}.$$



Это уравнение связывает отклонение  $\alpha$ -частицы с величиной  $b$  — расстоянием от прямой, касательной к траектории  $\alpha$ -частицы в бесконечности (асимптоты) до ядра.

Теперь легко найти число  $\alpha$ -частиц из падающего параллельного пучка, отклоняющихся на определенный угол. Представим себе плоскость  $E$ , находящуюся на большом расстоянии



Фиг. 103. Относительная частота рассеяния  $\alpha$ -частиц ядрами в некоторой определенной области углов.

от  $K$  и перпендикулярную падающему пучку; пусть  $C$  — основание перпендикуляра, опущенного из  $K$  на  $E$  (фиг. 103). Очевидно, все  $\alpha$ -частицы, которые, пересекая  $E$ , проходят через кольцо, образованное двумя окружностями с радиусами  $b$  и  $b+db$ , будут отклоняться на углы, лежащие в интервале между  $\varphi$  и  $\varphi+d\varphi$ . Если через квадратный сантиметр плоскости  $E$  проходит одна частица в секунду, то число частиц, прошедших через рассматриваемое кольцо, равно

$$dn = 2\pi b db,$$

где

$$db = kd \left( \operatorname{ctg} \frac{\varphi}{2} \right) = - \frac{k d\varphi}{2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}}.$$

Отсюда

$$|dn| = \pi k^2 \frac{\cos(\varphi/2)}{\sin^3(\varphi/2)} |d\varphi|.$$

Это и есть число частиц, угол отклонения которых заключен в интервале между  $\varphi$  и  $\varphi+d\varphi$ ; частицы однородно распределены по поверхности пояса на единичной сфере, площадь которого равна  $2\pi \sin \varphi d\varphi$ . Поэтому  $W(\varphi)$  — число частиц, которые после

отклонения пересекут единицу поверхности этой единичной сферы, составит  $dn/2\pi \sin \varphi d\varphi$ , так что вероятность отклонения в единицу телесного угла будет равна

$$W(\varphi) = \frac{1}{4} k^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\varphi}{2}} = \left( \frac{ZeE}{2Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\varphi}{2}}.$$

Это и есть формула рассеяния Резерфорда. Любую устанавливаемую ею взаимосвязь (между  $Z$ ,  $M$ ,  $v$ ,  $\varphi$ ) можно проверить экспериментально, подсчитывая рассеянные  $\alpha$ -частицы. Правда, зависимость от  $v$  можно экспериментально проверить только в малой области, так как  $\alpha$ -частицы, получаемые из естественных источников, имеют почти одинаковые скорости. В общем экспериментальные результаты чрезвычайно точно согласуются с формулой Резерфорда. Конечно, для легких атомов нужно учитывать отдачу ядра  $K$  при столкновении с  $\alpha$ -частицей. Это легко сделать. Заметное несоответствие было обнаружено только при почти центральных столкновениях (отклонение почти на  $180^\circ$ ) с легкими атомами (заряды этих ядер малы, поэтому падающая  $\alpha$ -частица очень близко подходит к ядру). Однако мы не будем вдаваться здесь в эти детали.

Поскольку заряд и масса  $\alpha$ -частиц известны (это ионы  $\text{He}^{2+}$ ; для них  $M=4M_{\text{H}}$ ,  $E=2e$ ), а их скорости можно определить из опытов по отклонению в полях, то формулу Резерфорда можно использовать для определения зарядов ядер  $Z$ . При этом требуется знать лишь количество рассеивающих атомов в единице объема и подсчитать число  $\alpha$ -частиц в пучке до рассеивающего елоя и за ним. Например, точные опыты Чедвика дают следующие значения  $Z$ :

платина	серебро	медь
77,4	46,3	29,3,

в то время как из периодической таблицы следовали бы числа

78	47	29.
----	----	-----

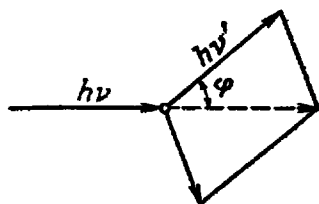
Превосходное согласие между двумя столбцами цифр подтверждает фундаментальное предположение об идентичности заряда ядра и атомного номера.

## 10. Комpton-эффект

Здесь столкновения квантов света с электронами мы будем рассматривать в рамках специальной теории относительности. Для нас это представляет большой интерес, так как вычисления не слишком сложны, а получаемый результат тем не менее

оказывается применимым к рассеянию очень жесткого излучения.

Вычисления опираются на законы сохранения энергии и импульса. Энергия кванта света до столкновения равна  $h\nu$ , а его импульс  $h\nu/c$ . Соответствующие величины после столкновения обозначим через  $h\nu'$  и  $h\nu'/c$ . Для простоты будем считать, что электрон до столкновения покоится. Тогда в формулу Эйнштейна надо подставить массу покоя  $m_0$ , и энергия электрона будет



Фиг. 104. Диаграмма импульсов в эффекте Комптона.

равной энергии покоя  $m_0c^2$ , а импульс — равным нулю. Пусть скорость электрона после столкновения равна  $v$ . Тогда его масса будет равна

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

энергия

$$mc^2 = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

а импульс

$$mv = \frac{m_0v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

Таким образом, можно утверждать, что после столкновения электрон обладает «кинетической энергией»

$$(m - m_0)c^2 = m_0c^2 \left( \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right)$$

(разлагая в ряд по степеням  $v/c$ , легко убедиться, что эта формула согласуется с нерелятивистской величиной  $\frac{1}{2}m_0v^2$  для малых скоростей). До столкновения же эта «кинетическая энергия» была равна нулю.

Если  $\varphi$  — угол отклонения кванта света, а  $\psi$  — угол отклонения электрона, то законы сохранения энергии и импульса при-

мут следующий вид (см. фиг. 104):

$$\text{Закон сохранения энергии: } h\nu + m_0c^2 = h\nu' + mc^2;$$

$$\text{Закон сохранения импульса: } \begin{cases} \frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos \varphi + mv \cos \varphi, \\ 0 = \frac{h\nu'}{c} \sin \varphi - mv \sin \varphi. \end{cases}$$

Исключая  $\varphi$  из двух последних уравнений, получаем

$$m^2v^2c^2 = h^2 \{(\nu - \nu' \cos \varphi)^2 + (\nu' \sin \varphi)^2\} = h^2(\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \varphi).$$

Далее, из закона сохранения энергии найдем, что

$$m^2c^4 = \{h(\nu - \nu') + m_0c^2\}^2 = h^2(\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu') + 2m_0c^2h(\nu - \nu') + m_0^2c^4.$$

Так как по определению

$$m^2 = \frac{m_0^2}{1 - \frac{v^2}{c^2}}, \quad \text{т. е. } m^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = m_0^2,$$

то, вычитая первое уравнение из второго, получаем

$$m_0^2c^4 = -2h^2\nu\nu'(1 - \cos \varphi) + 2m_0c^2h(\nu - \nu') + m_0^2c^4,$$

или

$$(1 - \cos \varphi) = \frac{m_0c^2}{h} \frac{\nu - \nu'}{\nu\nu'} = \frac{m_0c^2}{h} \left(\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu}\right).$$

Для удобства обозначим величину

$$\frac{h}{m_0c} = 0,0242 \text{ \AA}$$

(обычно ее называют комптоновской длиной волны) через  $\lambda_0$ . Тогда окончательное выражение можно переписать в виде

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = c \left(\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu}\right) = (1 - \cos \varphi) \frac{h}{m_0c} = 2\lambda_0 \sin^2 \frac{\varphi}{2},$$

как оно и использовалось в тексте.

## 11. Фазовая и групповая скорость

Чтобы получить точное доказательство соотношения

$$U = \frac{\partial \nu}{\partial \tau},$$

приведенного в тексте, мы должны прежде всего рассмотреть наиболее общий вид формулы, описывающей группу волн;

представим ее как интеграл Фурье

$$u(x, t) = \int a(\tau) e^{2\pi i (\nu t - \tau x)} d\tau,$$

где  $\nu = \nu(\tau)$  считается функцией волнового числа  $\tau$ .

Предположим теперь, что группа очень узкая, так что в интеграле конечную амплитуду имеют только те волны, волновые числа которых отклоняются от среднего значения  $\tau_0$  на очень малую величину. Положим  $\tau = \tau_0 + \tau_1$ ,  $\nu(\tau) = \nu_0 + \nu_1(\tau_1)$  и  $a(\tau_0 + \tau_1) = b(\tau_1)$ . Тогда интеграл можно переписать в виде

$$u(x, t) = A(x, t) e^{2\pi i (\nu_0 t - \tau_0 x)},$$

где

$$A(x, t) = \int b(\tau_1) e^{2\pi i (\nu_1 t - \tau_1 x)} d\tau_1.$$

Итак, волновой пакет можно считать простой волной с частотой  $\nu_0$ , волновым числом  $\tau_0$  изменяющейся в пространстве и времени амплитудой  $A(x, t)$ . Это предположение оправдано, так как мы считаем  $A(x, t)$  функцией, меняющейся очень медленно по сравнению с экспонентой  $e^{2\pi i (\nu_0 t - \tau_0 x)}$ . В первом приближении она меняется в среднем с частотой биений  $\nu_1$ , которая очень мала по сравнению с  $\nu_0$ .

Скорость совместного с волной движения определенного значения амплитуды  $A(x, t)$ , например ее максимума, называется *групповой скоростью*. В соответствии с этим она определяется из соотношения

$$\frac{\partial A}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial A}{\partial t} = 0,$$

полученного дифференцированием уравнения

$$A(x, t) = \text{const}$$

по времени. Если групповую скорость в отличие от фазовой обозначить через  $U$ , то можно написать

$$U = \left( \frac{dx}{dt} \right)_{A=\text{const}} = - \frac{\partial A / \partial t}{\partial A / \partial x}.$$

Далее, очевидно, что

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 2\pi i \int b(\tau_1) \nu_1 e^{2\pi i (\nu_1 t - \tau_1 x)} d\tau_1,$$

$$\frac{\partial A}{\partial x} = -2\pi i \int b(\tau_1) \tau_1 e^{2\pi i (\nu_1 t - \tau_1 x)} d\tau_1.$$

Поскольку мы предполагаем, что группа ограничена очень узким интервалом длин волн, можно разложить  $\nu_1(\tau_1)$  по сте-

пеням  $\tau_1$ :

$$v_1(\tau_1) = v(\tau) - v_0 = \left(\frac{dv}{d\tau}\right)_0 \tau_1 + \dots$$

Отсюда

$$\frac{\partial A}{\partial t} = - \left(\frac{dv}{d\tau}\right)_0 \frac{\partial A}{\partial x},$$

и в соответствии с этим для групповой скорости имеем

$$U = \frac{dv}{d\tau},$$

тогда как для фазовой скорости справедлива формула

$$u = \frac{v}{\tau}.$$

## 12. Элементарный вывод соотношения неопределенностей Гейзенберга

Рассмотрим волновой пакет конечной ширины. Для простоты возьмем его амплитуду в произвольный момент времени в виде функции ошибок Гаусса (это действительно так для основного состояния гармонического осциллятора, см. приложения 16 и 39):

$$f(x) = Ae^{-x^2/a^2}.$$

Тогда полуширина  $\Delta x$  будет равна

$$\Delta x = \sqrt{x^2} = \sqrt{\frac{\int x^2 f^2(x) dx}{\int f^2(x) dx}} = \frac{1}{2} a.$$

Выпишем фурье-преобразование для  $f(x)$ :

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\tau) e^{2\pi i \tau x} d\tau.$$

Здесь

$$\varphi(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-2\pi i \tau x} dx$$

— амплитуда гармоники с волновым числом  $\tau$ . Подставляя сюда интеграл для  $f(x)$ , получаем

$$\varphi(\tau) = A \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^2/a^2) - 2\pi i \tau x} dx = Ae^{-(\pi a \tau)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x/a + \pi i \tau a)^2} dx.$$

Простая подстановка  $x/a + \pi i a y = u$  позволяет свести этот интеграл Гаусса:

$$a \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy = a \sqrt{\pi}.$$

Поэтому

$$\varphi(\tau) = Aa \sqrt{\pi} e^{-(\pi i a)^2} = Aa \sqrt{\pi} e^{-\tau^2/b^2},$$

где

$$b = \frac{1}{\pi a}.$$

Распределение парциальных волн, образующих волновой пакет  $f(x)$ , дается той же функцией Гаусса с полушириной  $\Delta x = 1/2b$ . Отсюда получаем

$$\Delta x \Delta \tau = \frac{1}{4} ab = \frac{1}{4\pi}.$$

Подставляя сюда выражение для импульса волны  $p = \hbar \tau$  (гл. IV, § 5), приходим к формуле

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{4\pi}.$$

Эта формула и есть точное выражение соотношения неопределенностей Гейзенберга для специального вида волнового пакета (см. приложение 39). Очевидно, по порядку величин соотношение  $\Delta x \Delta p \sim \hbar$  выполняется для волнового пакета любой формы. Позже мы получим неравенство с точным численным коэффициентом (приложение 26).

### 13. Теория Гамильтона и переменные действия

Здесь мы кратко рассмотрим механику кратнопериодических движений (см. гл. V, § 2) и соответствующие квантовые условия. По Гамильтону, движение системы полностью описывается так называемой функцией Гамильтона  $H(q_1, q_2, \dots, p_1, p_2, \dots)$ , задающей энергию системы в зависимости от координат  $q_k$  и импульсов  $p_k$  составляющих ее частиц. (Для обычных декартовых координат импульс  $p_k$  равен  $m_k \dot{q}_k$ ; здесь, как и в дальнейшем, точка над символом означает дифференцирование по времени.) Уравнения движения имеют вид

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}.$$

Отсюда сразу же следует закон сохранения энергии; действительно, образуя полный дифференциал  $H$  относительно времени

и используя уравнения движения, получаем

$$\frac{dH}{dt} = \sum_k \left\{ \frac{\partial H}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial H}{\partial p_k} \dot{p}_k \right\} = 0,$$

т. е. энергия системы  $H(q_k, p_k) = E$  постоянна.

В общем случае можно заменять пару переменных  $(p_k, q_k)$  любой парой канонически сопряженных переменных — канонические переменные определяются тем свойством, что они удовлетворяют уравнениям типа приведенных выше уравнений движения. Исследование таких канонических преобразований ведет к математической задаче (так называемому дифференциальному уравнению Гамильтона — Якоби), которая во многих случаях разрешима. Здесь мы будем считать, что нужное нам решение существует. Тогда задачу интегрирования уравнений движения можно сформулировать следующим образом: найти новые канонические переменные  $J_k, \omega_k$ , такие, в которых энергия зависит только от величин  $J_k$  и не зависит от величин  $\omega_k$ . Тогда уравнения движения примут вид

$$J_k = - \frac{\partial H}{\partial \omega_k} = 0,$$

и  $J_k$  при движении будет оставаться постоянным. С другой стороны, постоянство величин  $J_k$  приводит к тому, что величины

$$\dot{\omega}_k = \nu_k = \frac{\partial H}{\partial J_k}$$

также не зависят от времени, а  $\omega_k$  линейно возрастают со временем:

$$\omega_k = \nu_k t.$$

Таким образом, в новых координатах задача интегрирования решена; остается только проделать обратное преобразование.

Система называется просто или кратно периодической, если можно найти эти новые переменные в такой форме, что каждая декартова координата  $x$  оказывается периодической функцией величин  $\omega_k$ , или, другими словами, может быть представлена в виде ряда Фурье по переменным  $\omega_1, \dots, \omega_k$ , так что

$$\begin{aligned} x &= \sum_{\tau_1, \tau_2, \dots} a_{\tau_1, \tau_2, \dots} e^{2\pi i (\omega_1 \tau_1 + \omega_2 \tau_2 + \dots)} = \\ &= \sum_{\tau_1, \tau_2, \dots} a_{\tau_1, \tau_2, \dots} e^{2\pi i (\tau_1 \nu_1 + \tau_2 \nu_2 + \dots) t}, \end{aligned}$$

где  $\tau_1, \tau_2, \dots$  — положительные или отрицательные целые числа. Коэффициенты  $a_{\tau_1, \tau_2, \dots}$  зависят от величин  $J_k$ . Если движение периодическое, то величины  $J_k$  называются *переменными*



действия, а величины  $w_k$  — угловыми переменными. Мы уже встречались с такими величинами на примере ротатора, где каноническими координатами служили азимут  $\varphi$  и момент  $p$ . Функция Гамильтона в этом случае имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2A},$$

откуда следуют уравнения движения

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{A} = \omega, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0.$$

Их решения есть  $\dot{p} = \text{const}$  и  $\dot{\varphi} = \omega t$ . Прямоугольная координата определяется соотношением

$$x = ae^{i\varphi} = ae^{i\omega t}.$$

Эренфест доказал, что переменные действия  $J_k$  являются адиабатическими инвариантами, т. е. что величины  $J_k$  можно квантовать. Поэтому постулируем *квантовые условия*

$$J_k = hn_k \quad (n_k — \text{целое}).$$

Но таких условий можно выбрать лишь столько, сколько неизмеримых частот имеет рассматриваемое движение. Поясним это, рассмотрев в качестве примера случай двух степеней свободы. Тогда в показателях степени у членов ряда Фурье стоит сумма  $v_1\tau_1 + v_2\tau_2$ , где  $\tau_1$  и  $\tau_2$  — целые. Если, например,  $v_1 = k v_2$ , где  $k$  — целое, то

$$v_1\tau_1 + v_2\tau_2 = v_2(k\tau_1 + \tau_2).$$

Поскольку  $\tau_1$  и  $\tau_2$  — целые, величина  $k\tau_1 + \tau_2$  будет принимать любое целое значение. Значит, в действительности здесь существует лишь просто периодическое движение и ряд Фурье состоит из одного члена. Поэтому, очевидно, на движение можно наложить только одно квантовое условие. Здесь мы встречаемся с *вырождением*.

Канонический набор  $J_k$  и  $w_k$  легко найти, если описывающие систему переменные разделяются, т. е. если в решениях уравнений движения каждое  $p_k$  зависит только от соответствующего  $q_k$ :

$$p_k = p_k(q_k).$$

Можно показать, что в таком случае переменная действия  $J_k$ , соответствующая  $k$ -й частоте, имеет вид

$$J_k = \oint p_k dq_k.$$

где интеграл берется по всему периоду. Таким образом, в случае разделяющихся переменных квантовые условия можно наложить сразу в форме.

$$\oint p_k dq_k = hn_k.$$

Вопрос о возможном вырождении требует особого исследования этих условий. Поэтому, прежде чем применять взятые условия, необходимо точно выяснить истинное число несоизмеримых периодов системы. Однако часто удобно не обращать на это внимания (Зоммерфельд) и попросту записывать лишние квантовые условия. Если окажется, что физические наблюдаемые, такие, как энергия, импульс и т. д., зависят только от определенных комбинаций квантовых чисел  $n_1, n_2, \dots$ , то их можно выразить через меньший набор целых чисел, и, таким образом, противоречия не возникнет. Этот способ имеет еще одно дополнительное преимущество: когда на вырожденную систему действует возмущение, скажем внешнее электрическое или магнитное поле, то вырождение, вообще говоря, снимается и появляются новые фундаментальные частоты, несоизмеримые с прежними. Если для описания невозмущенной системы использовались соответствующие переменные, включающие излишние частоты, и если возмущение мало, то квантовые условия можно получить непосредственно из невозмущенной задачи. С примером этой ситуации мы встретимся в связи с задачей Кеплера.

#### 14. Квантование эллиптических орбит в теории Бора

Квантование эллиптических орбит в случае атома Бора мы проведем методом, описанным в предыдущем пункте. При квантовании системы используется больше частот, чем их в действительности содержит движение.

Запишем сначала классические законы движения для двух частиц с массами  $m$  и  $M$  и зарядами  $-e$  и  $Ze$ , притягивающими друг друга с кулоновской силой. (Мы получим полное соответствие с законами движения в астрономии, за исключением того, что роль притягивающей силы там будет играть сила тяготения.) Пусть  $x_1, y_1, z_1$  и  $x_2, y_2, z_2$  — координаты соответственно электрона и ядра. Тогда  $W$ , энергия движения, имеет вид

$$W = \frac{1}{2} m (\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{z}_1^2) + \frac{1}{2} M (\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2 + \dot{z}_2^2) - \frac{Ze^2}{r}.$$

Если считать, что центр тяжести покоится, то  $mx_1 + Mx_2$  обратится в нуль. Вводя в качестве новых переменных относитель-

ные координаты  $x, y, z$ , где  $x = x_2 - x_1$  и т. д., получим

$$x_1 = -\frac{M}{M+m} x, \quad x_2 = \frac{m}{M+m} x.$$

Аналогичные формулы справедливы для компонент относительной скорости. Тогда соответствующий член в кинетической энергии станет равным

$$\frac{1}{2} m \dot{x}_1^2 + \frac{1}{2} M \dot{x}_2^2 = \frac{1}{2} \mu \dot{x}^2,$$

где  $\mu$  — так называемая приведенная масса,

$$\mu = \frac{mM}{m+M}$$

(ср. гл. IV, § 1, где исследовалось движение ядра). Итак, задача свелась к задаче Кеплера для относительного движения вокруг центра тяжести, причем эффективная масса равна  $\mu$ , а движение описывается координатами  $x, y, z$ .

Помимо закона сохранения энергии, для таких движений вокруг фиксированного центра выполняется также закон сохранения момента (теорема площадей). Это означает прежде всего, что движение происходит целиком в одной плоскости. Выберем ее в качестве плоскости  $xy$  и перейдем в ней к полярным координатам посредством преобразования  $x = r \cos \varphi$ ,  $y = r \sin \varphi$ . Закон сохранения момента дает

$$\mu r^2 \dot{\varphi} = p_{\varphi} = \text{const.}$$

Энергия в полярных координатах равна

$$W = \frac{1}{2} \mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - \frac{Ze^2}{r} = \text{const.}$$

Исключив  $\dot{\varphi}$  из этих двух уравнений и заметив, что

$$\dot{r} = \dot{\varphi} \frac{dr}{d\varphi} = \frac{p_{\varphi}}{\mu r^2} \frac{dr}{d\varphi},$$

получим

$$W = \frac{1}{2} \frac{p_{\varphi}^2}{\mu} \left\{ \frac{1}{r^4} \left( \frac{dr}{d\varphi} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \right\} - \frac{Ze^2}{r}.$$

Здесь удобно ввести новую переменную  $\rho = 1/r$ . Тогда для  $\rho$  мы получим дифференциальное уравнение

$$W = \frac{1}{2} \frac{p_{\varphi}^2}{\mu} \left\{ \left( \frac{d\rho}{d\varphi} \right)^2 + \rho^2 \right\} - Ze^2 \rho.$$

Его решения легко получить, продифференцировав уравнение по  $\varphi$  еще раз. Сокращая общий множитель  $d\rho/d\varphi$ , мы полу-

чим тогда дифференциальное уравнение второго порядка

$$\frac{d^2\rho}{d\varphi^2} + \rho - \frac{Ze^2\mu}{p_\varphi^2} = 0.$$

Хорошо известно, что его общее решение имеет вид

$$\rho = \frac{Ze^2\mu}{p_\varphi^2} + C \cos(\varphi - \varphi_0).$$

Оно содержит две постоянные  $C$  и  $\varphi_0$ ; подходящим выбором  $\varphi$  вторую из них всегда можно обратить в нуль. Положив для краткости

$$q = \frac{p_\varphi^2}{e^2 Z \mu}, \quad \varepsilon = Cq = \frac{C p_\varphi^2}{e^2 Z \mu}.$$

мы получим

$$r = \frac{1}{\rho} = \frac{q}{1 + \varepsilon \cos \varphi}.$$

Как известно, это уравнение описывает конические сечения. Чтобы движение было периодическим, т. е. чтобы коническое сечение не становилось бесконечным, знаменатель в приведенном полярном уравнении не должен обращаться в нуль. Иначе говоря,  $|\varepsilon|$  обязан быть меньшим единицы. Перигелий, т. е. минимальное значение  $r$ , соответствует азимуту  $\varphi=0$ ; при этом  $r_1 = q/(1+\varepsilon)$ . Афелию соответствует  $\varphi=\pi$ ; при этом  $r_2 = q/(1-\varepsilon)$ . Отсюда получаем следующее выражение для главной полуоси  $a$ :

$$a = \frac{1}{2}(r_1 + r_2) = \frac{q}{1-\varepsilon^2}.$$

Для  $\varphi = \pm\pi/2$   $r$  равен фокальному полупараметру эллипса (см. фиг. 43, стр. 146). Далее, легко видеть, что  $\varepsilon$  — это эксцентриситет эллипса, а малая полуось его равна  $b = q/\sqrt{1-\varepsilon^2}$ . Используя уравнение эллипса, преобразуем выражение для энергии  $\mathcal{W}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{W} &= \frac{1}{2} \frac{p_\varphi^2}{\mu} \left\{ \left( \frac{d\rho}{d\varphi} \right)^2 + \rho^2 \right\} - Ze^2\rho = \\ &= \frac{1}{2} \frac{p_\varphi^2}{\mu} \left\{ C^2 + \left( \frac{Ze^2\mu}{p_\varphi^2} \right)^2 \right\} - \frac{Ze^2\mu}{p_\varphi^2} = -\frac{e^2Z}{2a}. \end{aligned}$$

Мы пришли к тому же результату, что и в случае круговых орбит (гл. V, § 1), с тем только изменением, что вместо радиуса стоит большая полуось.

Теперь, хотя имеется только один период, мы предпишем два квантовых условия:

$$\oint p_r dr = n'h, \quad \oint p_\varphi d\varphi = kh.$$

Ввиду постоянства  $p_\varphi$  второе условие сразу же дает

$$p_\varphi = \frac{h}{2\pi} k.$$

Однако первый интеграл вычисляется не так легко; здесь мы имеем

$$n'h = \oint p_r dr = \oint \mu \dot{r} dr = \oint \mu \frac{dr}{d\varphi} \dot{\varphi} \frac{dr}{d\varphi} d\varphi = p_\varphi \oint \frac{1}{r^2} \left( \frac{dr}{d\varphi} \right)^2 d\varphi.$$

Таким образом, необходимо вычислить интеграл

$$I = \int_0^{2\pi} \frac{1}{r^2} \left( \frac{dr}{d\varphi} \right)^2 d\varphi = \int_0^{2\pi} \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{d\rho}{d\varphi} \right)^2 d\varphi = \int_0^{2\pi} \frac{\varepsilon^2 \sin^2 \varphi}{(1 + \varepsilon \cos \varphi)^2} d\varphi,$$

взятый по полному периоду обращения, т. е. когда  $\varphi$  пробегает в нем значения от 0 до  $2\pi$ . Интегрирование по частям дает

$$I = \left[ \frac{\varepsilon \sin \varphi}{1 + \varepsilon \cos \varphi} \right]_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} \frac{\varepsilon \cos \varphi}{1 + \varepsilon \cos \varphi} d\varphi = - \int_0^{2\pi} \frac{\varepsilon \cos \varphi}{1 + \varepsilon \cos \varphi} d\varphi.$$

Умножая второе выражение на  $+2$ , а первое на  $-1$  и складывая полученные равенства, находим

$$\begin{aligned} I &= - \int_0^{2\pi} \frac{\varepsilon^2 \sin^2 \varphi + 2\varepsilon \cos \varphi (1 + \varepsilon \cos \varphi)}{(1 + \varepsilon \cos \varphi)^2} d\varphi = \\ &= - \int_0^{2\pi} \frac{1 + 2\varepsilon \cos \varphi + \varepsilon^2 \cos^2 \varphi}{(1 + \varepsilon \cos \varphi)^2} d\varphi + \int_0^{2\pi} \frac{1 - \varepsilon^2}{(1 + \varepsilon \cos \varphi)^2} d\varphi. \end{aligned}$$

Первый из этих интегралов вычисляется непосредственно и дает  $-2\pi$ , а второй с учетом уравнения эллипса можно преобразовать:

$$\int_0^{2\pi} \frac{1 - \varepsilon^2}{(1 + \varepsilon \cos \varphi)^2} d\varphi = \frac{1 - \varepsilon^2}{a^2} \int_0^{2\pi} r^2 d\varphi.$$

По форме этого выражения видно, что интеграл только множителем  $1 - \varepsilon^2/a^2$  отличается от удвоенной площади эллипса, равной, как известно,  $\pi ab$ , где  $a$  и  $b$  — полуоси эллипса. Под-

ставив в нашу формулу уже найденные их значения и сгруппировав члены, запишем первое квантовое условие в виде

$$n'h = -2\pi p_{\varphi} + p_{\varphi} \frac{1-\varepsilon^2}{a^2} 2\pi \frac{a^2}{(1-\varepsilon^2)^{1/2}} = -hk + \frac{2\pi p_{\varphi}}{\sqrt{1-\varepsilon^2}},$$

или

$$\frac{4\pi^2 p_{\varphi}^2}{1-\varepsilon^2} = 4\pi^2 e^2 Z \mu a = h^2 (n' + k)^2.$$

Если здесь положить

$$n' + k = n,$$

то формулу можно переписать в виде

$$a = \frac{h^2 n^2}{4\pi^2 e^2 \mu Z};$$

соответственно энергия будет равна

$$E = -\frac{e^2 Z}{2a} = -\frac{2\pi^2 e^4 \mu Z^2}{h^2 n^2} = -\frac{R h}{n^2}.$$

Таким образом, из теории Бора получены бальмеровские термы с правильным коэффициентом.

Начиная расчет, мы ввели два квантовых условия; соответственно получилось два квантовых числа — радиальное квантовое число  $n'$  и азимутальное квантовое число  $k$ . Однако орбита имеет только один период. Поэтому для нахождения уровней энергии нет необходимости в двух квантовых числах: значения уровней зависят лишь от их суммы. Эта сумма называется *главным квантовым числом*, так как именно им определяется расположение термов в невозмущенном движении.

Роль двух других квантовых чисел выясняется только тогда, когда какое-либо возмущение (отклонение поля от кулоновского, учет релятивистского изменения массы, наложение внешнего поля или какая-либо другая причина) снимает вырождение. Однако можно составить представление о смысле квантовых чисел и с чисто геометрической точки зрения, исследуя эллиптические орбиты. Если, как в § 1 гл. V, обозначить радиус первой круговой боровской орбиты для  $Z=1$  через

$$a_1 = \frac{h^2}{4\pi^2 \mu e^2},$$

то главная полуось эллипса будет равна

$$a = \frac{a_1}{Z} n^2.$$

Применяя прежние формулы, подобным же образом получим для малой полуоси и для фокального полупараметра следующие выражения:

$$b = \frac{a_1}{2} nk, \quad q = \frac{a_1}{2} k^2.$$

Как мы видим, отношение осей  $b/a$  равно  $k/n$ . При  $n=k$  получаются круговые орбиты атома Бора. Для  $k=0$  получаем так называемые маятникообразные орбиты (прямые линии, проходящие через ядро), но, как подчеркивалось в тексте, эти последние должны быть исключены.

### 15. Осциллятор в матричной механике

Проиллюстрируем основные идеи матричной механики на конкретном примере, а именно рассмотрим линейный гармонический осциллятор. Начнем с классического выражения для энергии

$$W = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} + \frac{1}{2} f q^2,$$

приводящего к следующим уравнениям движения:

$$\dot{p} = -fq, \quad \dot{q} = \frac{p}{m} \quad \text{или} \quad \ddot{q} = -\frac{f}{m}q = -\omega_0^2 q \quad \left( \omega_0 = \sqrt{\frac{f}{m}} \right).$$

В тексте мы выяснили, что квантовая механика отличается от классической тем, что величины  $p$  и  $q$  нужно считать не обычными функциями времени, а матрицами; элемент  $q_{nm}$  означает квантовую амплитуду, соответствующую переходу с одного энергетического уровня  $E_n$  на другой уровень  $E_m$ . Квадрат матричного элемента, подобно квадрату амплитуды в классической механике  $q^2$ , определяет интенсивность спектральной линии излучаемого при таком переходе света. Введя матрицы в классические уравнения движения, мы должны принять в качестве квантового условия перестановочное соотношение

$$pq - qp = \frac{1}{2\pi i}.$$

Получившиеся уравнения легко решить. Если матрица  $(q_{nm})$  удовлетворяет уравнению движения  $\ddot{q} + \omega_0^2 q = 0$ , то ему должен удовлетворять и каждый элемент матрицы в отдельности:

$$\ddot{q}_{nm} + \omega_0^2 q_{nm} = 0.$$

Поэтому, опираясь на естественное предположение, что

$$q_{nm} = q_{nm}^{(0)} e^{i\omega_{nm}t},$$

мы должны получить

$$(\omega_0^2 - \omega_{nm}^2) q_{nm} = 0,$$

т. е. либо  $q_{nm} = 0$ , либо  $\omega_{nm} = \pm \omega_0$ . Значит, все величины  $q_{nm}$  обращаются в нуль, за исключением тех, для которых  $\omega_{nm} = +\omega_0$  или  $\omega_{nm} = -\omega_0$ . Так как мы еще не устанавливали нумерацию матричных элементов и можем сделать это произвольным способом, то введем следующее правило: частота  $\omega_{nm} = +\omega_0$  соответствует переходу из  $n$ -го состояния в  $(n-1)$ -е (испускание кванта), а  $\omega_{nm} = -\omega_0$  — переходу из  $n$ -го состояния в  $(n+1)$ -е (поглощение кванта), так что

$$q_{nm} = 0, \quad \text{если } m \neq n \pm 1,$$

$$q_{nm} \neq 0, \quad \text{если } m = n \pm 1.$$

Позже мы убедимся, что такой порядок удобен, так как отдельным строкам (или столбцам) с большими индексами соответствуют состояния с большей энергией. Мы должны, однако, настоятельно подчеркнуть, что выбор нумерации никоим образом не ограничивает общности решения.

Итак матрица координаты имеет вид

$$(q_{nm}) = \begin{bmatrix} 0 & q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ q_{10} & 0 & q_{12} & 0 & \dots \\ 0 & q_{21} & 0 & q_{23} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Матрица импульса имеет аналогичную форму; из уравнения  $p = m\dot{q}$  следует, что

$$p_{nm} = im\omega_{nm}q_{nm},$$

поэтому

$$p_{nm} = im \begin{bmatrix} 0 & \omega_{01}q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ \omega_{10}q_{10} & 0 & \omega_{12}q_{12} & 0 & \dots \\ 0 & \omega_{21}q_{21} & 0 & \omega_{23}q_{23} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} =$$

$$= im\omega_0 \begin{bmatrix} 0 & -q_{01} & 0 & \dots \\ q_{10} & 0 & -q_{12} & 0 & \dots \\ 0 & q_{21} & 0 & -q_{23} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

с учетом установленного выше правила для величин  $\omega_{nm}$ .



Нас особенно интересует вопрос об уровнях энергии. Поэтому, исходя из классической функции энергии

$$W = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} + \frac{1}{2} f q^2 = \frac{1}{2m} (p^2 + m^2 \omega_0^2 q^2),$$

вычислим матрицу энергии, используя для этого приведенные выше матрицы координаты и импульса. Нам понадобятся квадраты  $q^2$  и  $p^2$ . Их получают по правилу умножения матриц, приведенному в тексте (гл. V, § 3). Если  $a$  и  $b$  — две матрицы, то элемент их произведения  $c = ab$  определяется как

$$c_{nm} = \sum_k a_{nk} b_{km}.$$

Применяя это правило, легко получаем два выражения:

$$q^2 = \begin{bmatrix} q_{01}q_{10} & 0 & q_{01}q_{12} & \dots \\ 0 & q_{10}q_{01} + q_{12}q_{21} & 0 & \dots \\ q_{21}q_{10} & 0 & q_{21}q_{12} + q_{23}q_{32} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

$$p^2 = m^2 \omega_0^2 = \begin{bmatrix} q_{01}q_{10} & 0 & -q_{01}q_{12} & \dots \\ 0 & q_{10}q_{01} + q_{12}q_{21} & 0 & \dots \\ -q_{21}q_{10} & 0 & q_{21}q_{12} + q_{23}q_{32} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Подставляя эти матрицы в выражение для энергии, получаем матрицу энергии

$$W = m\omega_0^2 \begin{bmatrix} q_{01}q_{10} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & q_{10}q_{01} + q_{12}q_{21} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & q_{21}q_{12} + q_{23}q_{32} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Прежде всего здесь бросается в глаза, что в этой матрице отличны от нуля только элементы на главной диагонали. Это, в сущности, эквивалентно закону сохранения энергии, именно тому, что энергия в данном состоянии не зависит от времени. Действительно, временные множители уничтожаются во всех диагональных членах; например, первый член должен бы иметь временной множитель  $e^{i\omega_{01}t} e^{i\omega_{01}t}$ ; но он равен единице, так как  $-\omega_{01} = \omega_{10}$ .

Отдельные члены на главной диагонали представляют энергию соответствующих индивидуальных состояний; действительно, элемент  $W_{nn}$  дает энергию  $n$ -го состояния. Однако матрица

энергии содержит элементы еще не целиком определенной матрицы координаты. Их, однако, можно найти при помощи перестановочного соотношения  $pq - qp = \hbar/2\pi i$ , после чего можно получить уровни энергии.

Если, следуя этим правилам, подставить матрицу координаты и импульса в перестановочное соотношение, то легко получается матрица

$$pq - qp = -2i\pi\omega_0 \begin{bmatrix} q_{01}q_{10} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & q_{12}q_{21} - q_{10}q_{01} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & q_{23}q_{32} - q_{21}q_{12} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Эта матрица должна быть равна  $\hbar/2\pi i$ , или, более точно, произведению  $\hbar/2\pi i$  на единичную матрицу

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Значит, соответственные элементы матриц должны быть одинаковы, откуда получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} q_{01}q_{10} &= \frac{\hbar}{4\pi\tau\omega_0}, \\ q_{12}q_{21} - q_{01}q_{10} &= \frac{\hbar}{4\pi\tau\omega_0}, \\ q_{23}q_{32} - q_{21}q_{12} &= \frac{\hbar}{4\pi\tau\omega_0}, \\ &\dots \end{aligned}$$

Решение системы дает

$$q_{n, n+1}q_{n+1, n} = |q_{n, n+1}|^2 = (n+1) \frac{\hbar}{4\pi\tau\omega_0}.$$

Подставив эти выражения в матрицу энергии, мы и получим общий вид диагонального члена

$$\begin{aligned} W_{nn} = E_n = m\omega_0^2 (q_{n, n+1}q_{n+1, n} + q_{n, n-1}q_{n-1, n}) = \\ = \frac{\hbar\omega_0}{4\pi} (2n+1) = \hbar\nu_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (n=0, 1, 2, \dots). \end{aligned}$$

Таким образом, для нашей системы термов мы снова получаем последовательность равноотстоящих энергетических уровней, как и в теории Бора. Единственное различие заключается в том,

что в квантовой механике вся система термов смещена по сравнению с боровской на половину кванта энергии. Хотя эта разница и не проявляется в спектрах, она играет определенную роль в проблемах статистики. Во всяком случае, важно иметь в виду, что линейный гармонический осциллятор в низшем состоянии обладает энергией  $\frac{1}{2}h\nu_0$ , так называемой *нулевой энергией*<sup>1)</sup>.

### 16. Осциллятор в волновой механике

Здесь мы получим решение волнового уравнения для линейного гармонического осциллятора. Уравнение выглядит как

$$\left\{ \frac{d^2}{dq^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left( E - \frac{1}{2} f q^2 \right) \right\} \psi = 0.$$

Полагая

$$\lambda = \frac{8\pi^2 m E}{h^2}, \quad \alpha = \frac{2\pi m \omega_0}{h} = \frac{4\pi^2 m \nu_0}{h} \quad \left( \omega_0 = 2\pi \nu_0 = \sqrt{\frac{f}{m}} \right),$$

приведем его к виду

$$\left\{ \frac{d^2}{dq^2} + \lambda - \alpha^2 q^2 \right\} \psi = 0.$$

Здесь  $\lambda$  — собственное значение; мы будем искать те значения  $\lambda$ , для которых во всем пространстве уравнение имеет конечные и однозначные решения.

Можно сразу же записать одно из его решений, именно, так называемую функцию ошибок Гаусса:

$$\psi = a_0 e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 q^2} = a_0 e^{-2\pi^2 m \nu_0 q^2 / h},$$

где собственное значение  $\lambda_0 = \alpha$ , что легко проверить обратной подстановкой решения в волновое уравнение. Соответствующая энергия при этом равна

$$E_0 = \frac{h^2 \alpha}{8\pi^2 m} = \frac{1}{2} h \nu_0.$$

Можно сказать наперед, что это член с низшей энергией, соответствующий основному состоянию. Итак, мы пришли к результату, полученному матричным методом, а именно к тому, что основное состояние обладает конечной энергией, равной половине планковского кванта энергии.

<sup>1)</sup> Надо заметить, что переход от классического описания некоторой системы к квантовомеханическому не совершается однозначно — мы всегда можем добавить к выражению для энергии любую добавку, пропорциональную коммутатору  $p$  и  $q$ , не изменив тем самым классической системы. Поэтому нулевую энергию квантовомеханического осциллятора следует рассматривать скорее как экспериментальный факт, чем как следствие теории: можно представить себе и осциллятор без нулевой энергии. — *Прим. ред.*

Для отыскания остальных решений волнового уравнения удобно предположить, что  $\psi$  имеет следующий вид:

$$\psi = e^{-\frac{1}{2}\alpha q^2} v(q).$$

Если подставить это выражение в дифференциальное уравнение, то несложное вычисление приводит для  $v$  к дифференциальному уравнению вида

$$\frac{d^2v}{dq^2} - 2\alpha q \frac{dv}{dq} + (\lambda - \alpha) v = 0.$$

(Множитель  $e^{-\frac{1}{2}\alpha q^2}$  исчезает вследствие однородности уравнения.) Это дифференциальное уравнение имеет следующее важное преимущество перед волновым уравнением.

Мы можем принять, что функция  $v$  разлагается по степеням  $q$  в ряд типа

$$v = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} q^{\nu}.$$

Подставляя этот ряд в дифференциальное уравнение и приравнявая к нулю сумму коэффициентов при каждой степени  $q$ , получим рекуррентное соотношение

$$(\nu + 2)(\nu + 1) a_{\nu+2} + \{\lambda - \alpha(2\nu + 1)\} a_{\nu} = 0,$$

связывающее только два коэффициента, тогда как попытка решить волновое уравнение при помощи разложения  $\psi$  привела бы к рекуррентным соотношениям, связывающим три коэффициента. Полученное нами рекуррентное соотношение дает возможность вычислить коэффициенты степенного ряда.

Однако подробное исследование показывает, что полученный этим способом ряд при  $q \rightarrow \infty$  растет быстрее, чем  $e^{\frac{1}{2}\alpha q^2}$ , так что найденные волновые функции неограниченно возрастают на бесконечности. Если степенной ряд не оборвется на каком-то члене, то волновые функции не будут сходиться: степенной ряд при  $q \rightarrow \infty$  будет расти быстрее, чем  $e^{\frac{1}{2}\alpha q^2}$ . Ряд обрывается при некоторых специальных значениях параметра  $\lambda$ ; действительно, из рекуррентного соотношения сразу видно, что это происходит на члене, для которого  $\nu = n$ , при условии, что исчезает множитель при  $a_n$ , т. е. если

$$\lambda = \lambda_n = \alpha(2n + 1).$$

Подставляя сюда значение величины  $\lambda$ , получаем выражение для энергии

$$E_n = h\nu_0 \left( n + \frac{1}{2} \right).$$

Можно строго доказать, что дифференциальное уравнение имеет решения нужного вида только при этих значениях  $E$ .

Фактически решения имеют вид произведений приведенной выше экспоненты на конечные полиномы по  $q$  порядка  $n$ ; в математической литературе их называют полиномами Эрмита. Для нас важно отметить, что и волновая механика, и матричная механика дают одинаковые уровни энергии гармонического осциллятора, именно последовательность равноотстоящих термов, причем с тем характерным отличием от теории Бора, что термы смещены от нуля на величину  $1/2 h\nu_0$ , т. е. на половину расстояния между ними.

### 17. Колебания круглой мембраны

Решение дифференциального уравнения для колебаний круглой мембраны

$$\Delta\psi + \lambda\psi = 0 \quad \left( \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$$

легко найти, перейдя к полярным координатам. В этом случае, как известно, дифференциальное уравнение принимает вид

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \lambda\psi = 0.$$

Мы видим, что решение можно искать в виде произведения функции  $R$ , зависящей только от  $r$ , на функцию  $\Phi$ , зависящую только от  $\varphi$ . Другими словами, в полярных координатах переменные разделяются. В этом случае уравнение можно расщепить на два обыкновенных дифференциальных уравнения с независимыми переменными  $r$  и  $\varphi$  соответственно. Вводимый для этого параметр разделения мы обозначим через  $m^2$ :

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \lambda R - \frac{m^2}{r^2} R = 0,$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m^2\Phi = 0.$$

Второе уравнение дает

$$\Phi = \left\{ \begin{array}{l} \cos \\ \sin \end{array} \right\} (m\varphi).$$

Существенно, что волновая функция должна быть однозначной. Но это требование выполняется только при целых  $m$ , так как в противном случае изменение величины  $\varphi$  на  $2\pi$  приводило бы к различным значениям волновой функции; отсюда следует, что  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Дифференциальное уравнение для  $r$  — это хорошо известное уравнение Бесселя, определяющее функцию Бесселя  $J_m(\sqrt{\lambda}r)$  порядка  $m$  с аргументом  $\sqrt{\lambda}r$ . Однако здесь уже необходимо учитывать граничные условия. Предположим, в частности, что мембрана закреплена по краю, так что для всех граничных точек  $R(\rho) = 0$ , где  $\rho$  — радиус мембраны. Вспомним теперь, что функция Бесселя любого порядка имеет бесконечно много нулей (действительно, при не слишком малых значениях аргумента ее график похож на синусоиду). Нули функции Бесселя  $J_m(z)$  мы будем обозначать через  $z_0, z_1, z_2, \dots$ . Чтобы удовлетворить граничным условиям, аргумент функции Бесселя при  $r = \rho$  должен совпадать с одним из этих нулей. Поэтому возможны не все значения параметра, а только те, для которых

$$\sqrt{\lambda} \rho = z_0, \text{ или } z_1, \text{ или } z_2, \dots$$

Для  $z_0$  волновая функция не имеет никаких других нулей, кроме нулей при  $r = \rho$  и (если  $m \neq 0$ ) при  $r = 0$ . При  $z_1$  появляется еще один нуль, а при  $z_2$  — еще два нуля. Итак, в общем случае для собственного значения

$$\sqrt{\lambda_n} \rho = z_n$$

имеется  $n$  дополнительных нулей (круговых узловых линий, см. фиг. 53, стр. 166).

### 18. Решение уравнения Шредингера для задачи Кеплера

Уравнение Шредингера для задачи Кеплера имеет вид

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m'}{h^2} \left( E + \frac{e^2 Z}{r} \right) \psi = 0.$$

Вводя сферические координаты  $r, \theta, \varphi$ , приведем его к виду

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\operatorname{ctg} \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \psi + \frac{8\pi^2 m'}{h^2} \left( E + \frac{e^2 Z}{r} \right) \psi = 0.$$

В этом уравнении переменные опять разделяются; если положить

$$\psi = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi),$$

то уравнение можно расщепить на три уравнения:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8\pi^2 m'}{h^2} \left( E + \frac{e^2 Z}{r} \right) - \frac{\lambda}{r^2} \right\} R = 0,$$

$$\left\{ \frac{d^2}{d\theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{d}{d\theta} + \lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right\} \Theta = 0,$$

$$\left\{ \frac{d^2}{d\varphi^2} + m^2 \right\} \Phi = 0,$$

где  $m$  (как и раньше) и  $\lambda$  — параметры разделения. Решение третьего уравнения уже известно:

$$\Phi = \begin{cases} \cos \\ \sin \end{cases} (m\varphi), \text{ или } \Phi = e^{im\varphi},$$

где  $m$  должно быть целым, иначе решение  $\Phi$  окажется неоднозначным.

Второе уравнение — это уравнение, определяющее шаровые функции  $P_l^m(\cos \theta)$ , где  $\lambda$  принимает значения  $l(l+1)$ , а  $|m| \leq l$ . Для других значений уравнение не имеет конечных однозначных решений. Докажем это в общем виде, для чего объединим зависимости от  $\theta$  и от  $\varphi$  в обобщенную шаровую функцию  $Y_l(\theta, \varphi)$ . Если для краткости ввести обозначение

$$\Delta = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2},$$

так что

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Lambda}{r^2},$$

то будет ясно, что функция  $Y_l(\theta, \varphi)$  должна удовлетворять дифференциальному уравнению

$$\Delta Y_l + \lambda Y_l = 0.$$

Общее решение этого уравнения находят следующим образом. Рассмотрим однородные полиномы  $U_l$  степени  $l$  по  $x, y, z$ , удовлетворяющие уравнению Лапласа

$$\Delta U_l = 0.$$

Определим теперь функцию  $Y_l$  отношений  $x/r, y/r, z/r$  (т. е. функцию, зависящую только от углов  $\theta$  и  $\varphi$ ) при помощи уравнения

$$U_l = r^l Y_l.$$

Затем подставим эту функцию в уравнение Лапласа  $\Delta U_l = 0$ . Выполнив дифференцирование по  $r$ , мы приходим к уравне-

нию

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right) r^l Y_l + \frac{\Lambda}{r^2} r^l Y_l \equiv r^{l-2} \{\Lambda Y_l + l(l+1) \dot{Y}_l\} = 0.$$

Таким образом, введенные выше функции являются решениями дифференциального уравнения  $\Lambda Y_l + \lambda Y_l = 0$ , только если

$$\lambda = l(l+1).$$

Можно доказать, что никакие другие значения  $\lambda$  не дают конечных, непрерывных и однозначных решений этого уравнения. В соответствии с этим собственные значения уравнения

$$\Lambda Y_l + \lambda Y_l = 0$$

равны  $l(l+1)$ . Кроме того, число произвольных параметров в любой функции степени  $l$  легко определить. Наиболее общий однородный полином степени  $l$  по  $x, y, z$  содержит  $\frac{1}{2}(l+1)(l+2)$  произвольных постоянных (он имеет один член с  $x^l$ , два члена с  $x^{l-1}$ , три с  $x^{l-2}$  и т. д. и, наконец,  $(l+1)$  членов, вообще не содержащих  $x$ ). Однако условие  $\Delta U_l = 0$  приводит к определенной зависимости между постоянными; это условие эквивалентно  $\frac{1}{2}l(l-1)$  уравнениям для определения коэффициентов, так как  $\Delta U_l$  есть однородная функция степени  $(l-2)$ , тождественно равная нулю. Поэтому  $U_l$  содержит

$$\frac{1}{2} \{(l+1)(l+2) - l(l-1)\} = 2l+1$$

независимых коэффициентов. В соответствии с этим имеется  $2l+1$  линейно независимых шаровых функций степени  $l$ . Если записать их в обычной форме

$$Y_l^{(m)} = P_l^m e^{im\varphi},$$

то они соответствуют  $2l+1$  возможному значению третьего (магнитного) квантового числа  $m$ .

Теперь перейдем к дифференциальному уравнению для радиальной функции  $R$ :

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8\pi^2 m'}{h^2} \left( E + \frac{e^2 Z}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0.$$

Его решения должны быть конечными и непрерывными при всех значениях  $r$  от нуля до бесконечности. Здесь нас главным образом интересуют величины собственных значений  $E$ , при которых это уравнение имеет решение, удовлетворяющее заданным условиям. В частности, займемся случаем  $E < 0$ . В теории Бора это соответствует эллиптическим орбитам, когда для удаления электрона на бесконечное расстояние от ядра необходимо



придать ему дополнительную энергию. Случай  $E > 0$  соответствует гиперболическим боровским орбитам.

Для простоты введем относительные единицы. За единицу радиуса примем боровский радиус  $\hbar^2/4\pi^2me^2Z$ , а за единицу энергии — энергию основного состояния атома Бора,  $-2\pi^2me^4Z^2/\hbar^2$ . Другими словами, положим (гл. V, § 1)

$$r = \rho \frac{\hbar^2}{4\pi^2me^2Z}, \quad E = \varepsilon \left( \frac{-2\pi^2me^4Z^2}{\hbar^2} \right).$$

Тогда волновое уравнение принимает более простой вид

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \varepsilon + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} R = 0.$$

Начнем с определения свойств функции  $R$  при очень больших значениях  $\rho$ . Соответственно отбросим в дифференциальном уравнении члены с  $1/\rho$  и  $1/\rho^2$ , так что поведение на бесконечности будет определяться уравнением

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - \varepsilon \right\} R_\infty = 0.$$

Оно имеет решение

$$R_\infty = e^{\pm \rho \sqrt{\varepsilon}}.$$

Однако решение со знаком «плюс» надо отбросить, так как волновая функция в этом случае неограниченно возрастала бы экспоненциальным образом при возрастании  $r$  (или  $\rho$ ) и поэтому не могла бы быть собственной функцией.

Другая особенность находится у начала координат. Пренебрегая в дифференциальном уравнении членами, которые при  $\rho \rightarrow 0$  стремятся к бесконечности медленнее, чем  $1/\rho^2$ , получим приближенное уравнение

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} R_0 = 0.$$

Решениями его будут функции  $R_0 = \rho^l$  и  $R_0 = \rho^{-l-1}$ . Вторая из них непринемлема, так как обращается в бесконечность в нуле.

Итак, мы знаем поведение искомой функции вблизи двух особых точек,  $\rho = 0$  и  $\rho = \infty$ . Разумно предположить, что вся функция  $R$  имеет вид

$$R = e^{-\rho \sqrt{\varepsilon}} \rho^l f(\rho),$$

где  $f$  — функция от  $\rho$ , которая, конечно, должна быть регулярной в обеих точках (т. е. на бесконечности не должна возрастать быстрее  $e^{+\rho \sqrt{\varepsilon}}$ ) и которая определяет поведение всей функции  $R$  в области, промежуточной между крайними интер-

валами, в которых доминирует либо степенная  $\rho^l$ , либо экспоненциальная зависимость. Подставляя функцию  $R$  в дифференциальное уравнение, легко получаем следующее дифференциальное уравнение для  $f$ :

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} + \frac{2(l+1)}{\rho} \frac{df}{d\rho} - 2\sqrt{\varepsilon} \frac{df}{d\rho} + \frac{2}{\rho}(1 - \sqrt{\varepsilon}(l+1))f = 0.$$

Попытаемся решить его, разложив  $f$  в ряд по степеням  $\rho$  (или, лучше, по степеням  $2\rho\sqrt{\varepsilon}$ ); запишем соответственно

$$f = \sum_0^{\infty} a_v (2\rho\sqrt{\varepsilon})^v.$$

Подставляя это выражение в дифференциальное уравнение и несколько иначе располагая члены, получаем

$$\begin{aligned} \sum_{v=0}^{\infty} a_v (2\rho\sqrt{\varepsilon})^{v-2} v(v+2l+1) - \\ - \sum_{v=0}^{\infty} a_v (2\rho\sqrt{\varepsilon})^{v-1} \left(v+l+1 - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right) = 0. \end{aligned}$$

Этот ряд должен тождественно обращаться в нуль; таким образом, мы приходим к рекуррентному соотношению для коэффициентов

$$a_{v+1}(v+1)(v+2l+2) = a_v \left(v+l+1 - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right).$$

Разумеется, в начале координат функция  $f$  конечна и равна первому члену  $a_0$ . С другой стороны, на бесконечности  $f$  неограниченно растет (причем, как показывает подробный анализ, быстрее, чем  $e^{+\rho\sqrt{\varepsilon}}$ ) во всех случаях, кроме того, когда ряд для  $f$  обрывается на каком-то члене, превращаясь в конечный полином. В этом последнем случае хотя  $f$  и обращается в бесконечность, но  $R$  на бесконечности исчезает благодаря экспоненциальному множителю  $e^{-\rho\sqrt{\varepsilon}}$ . Условие, при котором происходит обрыв ряда, получается из рекуррентного соотношения. Ряд обрывается на  $n_r$ -м члене, если

$$n_r + l + 1 = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}.$$

Таким образом,  $1/\sqrt{\varepsilon}$  должно быть положительным целым числом или

$$\varepsilon = \frac{1}{n^2}.$$

где  $n = n_r + l + 1$ ; число  $n$  есть главное квантовое число, а  $n_r$  — радиальное квантовое число.

Итак, мы видим, что решения дифференциального уравнения, удовлетворяющие требованиям конечности, непрерывности и однозначности, существуют только для некоторых дискретных значений параметра  $\epsilon$ , именно для значений  $\epsilon = 1/n^2$ . Значит, возможны лишь некоторые определенные энергетические уровни, именно

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m e^4 Z^2}{h^2 n^2} = -\frac{h R_0 Z^2}{n^2},$$

которые и дает теория Бора.

Для  $n=1$  имеем  $l=0$ ,  $n_r=0$  и  $f$  сводится к постоянной. Волновая функция  $\psi$  не зависит от  $\theta$  и  $\phi$ , и если принять нормировку

$$\int \psi^2 dr = 1,$$

получим просто

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_1} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_1}, \quad a_1 = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2}.$$

Можно видеть, что  $\psi$  быстро уменьшается при  $r > a_1/Z$ . Величина  $a_1/Z$  есть радиус первой боровской орбиты для атома с зарядом  $Ze$ . Он равен среднему значению (см. приложение 25)

$\bar{r} = \int \psi^2 r dr$  для электронного облака в состоянии  $n=1$ . Такие средние величины можно вычислить для всех высших состояний с  $l=0$ ; и, как оказалось, они совпадают с главными полуосями эллипсов теории Бора.

Можно добавить, что полиномы  $f$  — это известные полиномы Лагерра. Однако мы не будем вдаваться в подробности; заметим только, что нули их определяют положение узловых поверхностей  $r = \text{const}$ . Функция  $R$  имеет  $n_r$  узлов, не считая нулей при  $r=0$  (в случае  $l > 0$ ) и при  $r = \infty$ .

## 19. Полный механический момент

В тексте введены операторы

$$m_x = \frac{h}{2\pi i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right),$$

.....

соответствующие компонентам механического момента. Квадрат полного момента равен

$$m^2 = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2,$$

где выражение  $m_x^2$  означает двукратное применение оператора  $m_x$ . Иначе говоря, если  $m_x$  действует на функцию  $\psi$ , то действие  $m_x^2$  на функцию  $\psi$  означает операцию  $m_x(m_x\psi)$ .

Например, для  $x$ -компоненты имеем

$$m_x^2\psi = -\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right) \psi,$$

или, выполняя дифференцирование,

$$m_x^2\psi = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \left(-y^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + 2yz \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial z} - z^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + y \frac{\partial \psi}{\partial y} + z \frac{\partial \psi}{\partial z}\right).$$

Таким образом, оператор  $m_x^2$  идентичен оператору

$$\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \left(-y^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + 2yz \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z}\right).$$

Складывая все три компоненты, получаем

$$\begin{aligned} m^2 = & \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \left\{ -\left[(y^2 + z^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (z^2 + x^2) \frac{\partial^2}{\partial y^2} + (x^2 + y^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] + \right. \\ & + 2 \left[ xy \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} + yz \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} + zx \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} \right] + \\ & \left. + 2 \left[ x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Переставляя члены и замечая, что

$$\left(x \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = x \frac{\partial}{\partial x} x \frac{\partial}{\partial x} = x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + x \frac{\partial}{\partial x},$$

приходим к формуле

$$\begin{aligned} m^2 = & \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \left\{ -r^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z}\right)^2 + \right. \\ & \left. + \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z}\right) \right\}. \end{aligned}$$

Но известно, что

$$\frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{z}{r} \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r},$$

так что

$$m^2 = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \left\{ -r^2 \Delta + r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + r \frac{\partial}{\partial r} \right\}.$$

Если теперь перейти к полярным координатам, то выяснится (ср. приложение 18), что

$$m^2 = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \left\{ -r^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right) - \Delta + r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + r \frac{\partial}{\partial r} \right\} = -\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \Delta.$$

Это означает попросту, что для каждого состояния с азимутальным квантовым числом  $l$  оператор  $M^2$  имеет собственное значение  $(\hbar^2/4\pi^2)l(l+1)$ . Соответственно и величина полного момента имеет квантованные значения  $(\hbar/2\pi)\sqrt{l(l+1)}$ .

Далее, в полярных координатах (полярная ось  $z$ ) имеем

$$m_z = \frac{\hbar}{2\pi i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Действуя этим оператором на однозначную функцию  $e^{im\varphi}$  (где  $m=0, \pm 1, \pm 2$  и т. д.), получаем

$$m_z e^{im\varphi} = \frac{\hbar}{2\pi} m e^{im\varphi}.$$

Таким образом, компонента  $M_z$  механического момента также квантована, а ее собственные значения равны целым кратным величинам  $\hbar/2\pi$  — боровской единицы момента. Здесь мы не будем останавливаться на поведении остальных двух компонент ( $m_x$  и  $m_y$ ); отметим только, что соответствующие им матрицы можно вычислить методом, описанным в приложении 21 (стр. 418).

## 20. Вывод формулы Резерфорда в волновой механике

Рассмотрим уравнение Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta + V + \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right\} \psi = 0$$

и комплексно сопряженное ему уравнение

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta + V - \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right\} \psi^* = 0.$$

Если умножить первое из них на  $\psi^*$ , а второе — на  $\psi$  и вычесть затем одно из другого, мы получим

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) + \frac{\hbar}{2\pi i} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}) = 0$$

или

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi \psi^*) = \frac{\hbar i}{4\pi m} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}) + \dots \right\}.$$

Теперь, вводя вектор тока  $s$  (число частиц, проходящих через квадратный сантиметр за секунду) с компонентами

$$s_x = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{1}{2m} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}), \quad s_y = \dots, \quad s_z = \dots,$$

будем иметь

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\operatorname{div} s,$$



ческой волны, имеет вид

$$\psi = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \int \int \frac{e^{ikR}}{R} F(r') e^{ikz'} dx' dy' dz',$$

где  $R$  — расстояние между точками  $P(x, y, z)$  и  $P'(x', y', z')$ .

Нам достаточно знать решение на очень больших расстояниях  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$  от ядра  $K$  (фиг. 105). В этом случае приближенно

$$R = r - r' \cdot n,$$

где  $r'$  — вектор  $KP'$ , а  $n$  — единичный вектор в направлении  $KP$ . Можно также положить

$$z' = r' n_0,$$

где  $n_0$  — единичный вектор в  $z$ -направлении. Тогда

$$\psi = e^{ikz} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \int \int \int e^{ikr' \cdot (n_0 - n)} F(r') dx' dy' dz'.$$

Вводя сферические координаты  $\alpha, \beta$  с полярной осью вдоль вектора  $n_0 = n$ , получаем

$$\psi = e^{ikz} - \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta).$$

Здесь

$$f(\theta) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi \sin \alpha d\alpha \int_0^\infty r'^2 dr' e^{iKr' \cos \alpha} F(r')$$

и

$$\begin{aligned} K &= k |n_0 - n| = k \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + (1 - n_z)^2} = \\ &= k \sqrt{2(1 - n_z)} = k \sqrt{2(1 - \cos \theta)} = 2k \sin \frac{\theta}{2}, \end{aligned}$$

где  $\theta$  — угол между вектором  $n$ , т. е.  $KP$ , и осью  $z$ . Можно выполнить интегрирование по  $\alpha$  и  $\beta$ :

$$f(\theta) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} \int_0^\infty r'^2 V(r') dr' \frac{\sin Kr'}{Kr'}.$$

Интенсивность падающей волны равна

$$s_z^0 = \frac{h}{2\pi i} \left( \frac{ik}{m} \right),$$

а интенсивность рассеянной волны получается (при больших  $r$ ) из вторичной волны:

$$s_r = \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial r} \right) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\{f(\theta)\}^2}{r^2} \left( \frac{ik}{m} \right).$$

Таким образом, вероятность рассеяния в единицу телесного угла, или „дифференциальное сечение рассеяния“, оказывается равным

$$\varpi = r^2 \frac{S_r}{S_0^2} = \{f(\theta)\}^2.$$

Потенциал можно приближенно представить в виде

$$V = ZeE \frac{e^{-r/a}}{r},$$

где экспонента описывает экранирующий эффект электронного облака;  $a$  имеет величину порядка атомного радиуса  $\sim 10^{-8}$  см. Можно выполнить и интегрирование по  $r$ , что дает

$$f(\theta) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} \frac{ZeE}{K^2 + \frac{1}{a^2}}.$$

Здесь

$$K = 2k \sin \frac{\theta}{2} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2},$$

где  $\lambda$  — длина волны де-Бройля. Поэтому  $1/a^2$  всегда мало по сравнению с  $K$  для тех частиц, скорости которых велики, но за исключением проходящих в непосредственной близости от направления падающего луча ( $\theta \sim 0$ ). Если величиной  $1/a^2$  пренебречь, то эффект экранирования полностью исчезает, и мы получаем

$$f(\theta) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} \frac{ZeE}{K^2} = \frac{2\pi^2 m^2 ZeE}{h^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}},$$

или, с учетом того, что

$$k = \frac{2\pi}{h} p = \frac{2\pi}{h} mv \quad (v \text{ — скорость}),$$

$$f(\theta) = \frac{ZeE}{2mv^2} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}.$$

При возведении в квадрат это выражение дает в точности формулу рассеяния Резерфорда, гл. III, § 3 (различие только в обозначениях:  $m$  вместо  $M$  и  $\theta$  вместо  $\varphi$ ).

Каков бы ни был закон для  $V(r)$ , уточненная формула получается также легко, как и в нашем случае (Бете). Закон этот можно учесть с помощью интеграла, взятого по соответствующей плотности экранирующего заряда, т. е. в виде так называемого атомного формфактора (см. приложение 24).



## 21. Вывод правил отбора в задаче Кеплера

Как было показано в § 7 гл. V, излучение при квантовом скачке, по существу, определяется матричным элементом координаты, которая связана с квантовомеханическим средним значением электрического дипольного момента зависимостью, которую мы приводили в тексте:

$$p_x = \int x \Psi_{n'l'm'}^* \Psi_{nlm} dx dy dz,$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

Здесь мы докажем, что многие из таких интегралов обращаются в нуль и что ненулевые значения отвечают лишь определенным комбинациям квантовых чисел  $(l, m)$  и  $(l', m')$ , удовлетворяющих «правилам отбора».

Для этого исследуем собственные функции различных состояний. Мы получили их в приложении 18 и показали, что их можно записать в виде

$$\Psi_{n,l} = R_{n,l}(r) Y_l(\theta, \varphi),$$

где  $R_{n,l}(r)$  — функция только радиуса, а  $Y_l(\theta, \varphi)$  есть обобщенная шаровая функция, удовлетворяющая дифференциальному уравнению

$$\Delta Y_l + l(l+1)Y_l = 0 \quad \left( \Delta = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right).$$

Напомним, что функции  $Y_l$  получаются при выделении множителя  $r^l$  из однородного полинома  $l$ -й степени  $U_l(x, y, z)$ , который удовлетворяет уравнению Лапласа  $\Delta U_l = 0$ . Если ввести такие волновые функции в записанный выше матричный элемент, то интеграл расщепится на два множителя. Первый из них, интеграл по элементарному телесному углу  $d\omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ , имеет вид

$$J_{ll'}^{(x)} = \int \frac{x}{r} Y_l^* Y_{l'} d\omega,$$

и поэтому не зависит от  $r$ . Второй множитель — радиальный интеграл

$$\int R_{n'l'}^* R_{nl} r^3 dr$$

(поскольку  $dx dy dz = r^2 dr d\omega$ ). Нам нужно рассмотреть только первый интеграл, так как он сам по себе уже дает правила отбора; второй же определяет лишь распределение интенсивности излучения при различных переходах.

Мы утверждаем, что интеграл  $J_{ll'}^{(x)}$  равен нулю всегда, когда не выполняются правила отбора

$$l' = l \pm 1.$$

Сделаем несколько предварительных замечаний. Прежде всего легко видеть, что интеграл

$$N_{ll'} = \int Y_{l'}^* Y_l d\omega$$

равен нулю всегда, кроме случая  $l=l'$ . Для доказательства этого факта выпишем в дифференциальном уравнении

$$Y_{l'}^* \Delta Y_l - Y_l \Delta Y_{l'}^* = [l'(l'+1) - l(l+1)] Y_{l'}^* Y_l,$$

оператор  $\Delta$  в явном виде:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[ \sin \theta \left( Y_{l'}^* \frac{\partial Y_l}{\partial \theta} - Y_l \frac{\partial Y_{l'}^*}{\partial \theta} \right) \right] + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( Y_{l'}^* \frac{\partial Y_l}{\partial \varphi} - Y_l \frac{\partial Y_{l'}^*}{\partial \varphi} \right) = \\ = [l'(l'+1) - l(l+1)] Y_{l'}^* Y_l \end{aligned}$$

Теперь умножим обе части на  $d\omega = \sin \theta d\theta d\varphi$  и проинтегрируем по всей области изменения  $\theta$  и  $\varphi$ . Тогда оба члена в левой части исчезнут: первый из-за обращения в нуль  $\sin \theta$  на границах области интегрирования, а второй — вследствие периодичности по  $\varphi$ . Значит, интеграл справа тоже должен обращаться в нуль, а из того факта, что

$$[l'(l'+1) - l(l+1)] \int Y_{l'}^* Y_l d\omega = 0,$$

мы и получаем требуемый результат. Действительно, множитель  $l'(l'+1) - l(l+1)$  не равен нулю ни в коем случае, кроме  $l=l'$  ( $l$  и  $l'$  неотрицательны), а интеграл должен обращаться в нуль именно при  $l \neq l'$ .

Доказательство правил отбора сводится к следующему: как мы сейчас покажем, выражение вида  $(x/r) Y_l$  всегда можно представить в виде суммы двух обобщенных шаровых функций — порядка  $l+1$  и порядка  $l-1$ , т. е.

$$\frac{x}{r} Y_l = Y_{l+1} + Y_{l-1}.$$

Подставив это в интеграл  $J_{ll'}^{(x)}$ , из только что доказанных соотношений найдем, что интегралы тождественно обращаются в нуль всегда, кроме случаев  $l' = l \pm 1$ .

Доказательство соотношения, которым мы здесь пользовались, основано на теореме о том, что каждый однородный полином  $P(x, y, z)$  степени  $n$  можно единственным образом

преобразовать к виду

$$F = U_n + r^2 U_{n-2} + r^4 U_{n-4} + \dots + r^{2h} U_{n-2h} + \dots,$$

где функции  $U_n$  есть потенциальные функции, введенные выше. При  $n=0$  или 1 доказательство теоремы тривиально, так как любой полином нулевой или первой степени — это уже потенциальная функция. Докажем по индукции, что это справедливо и в общем случае. Если принять, что теорема справедлива для всех полиномов степени меньше  $n$ , то ясно, что лапласиан  $\Delta F$ , являющийся полиномом степени  $n-2$ , можно записать в виде

$$\Delta F = U_{n-2}^* + r^2 U_{n-4}^* + \dots + r^{2h-2} U_{n-2h}^* + \dots,$$

где  $U_n^*$  — потенциальные функции, отличные от  $U_n$ . Утверждается, что общее решение этого уравнения, при условии что степень  $F$  равна  $n$ , имеет вид

$$F = G + \frac{r^2 U_{n-2}^*}{2(2n-1)} + \frac{r^4 U_{n-4}^*}{4(2n-3)} + \dots + \frac{r^{2h} U_{n-2h}^*}{2h(2n-2h+1)} + \dots,$$

где  $G$  — произвольная функция степени  $n$ , удовлетворяющая уравнению Лапласа  $\Delta G = 0$ . Чтобы доказать это, возьмем произвольный член нашего ряда и, применяя теорему Эйлера об однородных полиномах, получим

$$\begin{aligned} \Delta(r^{2h} U_{n-2h}^*) &= r^{2h} \Delta U_{n-2h}^* + 2 \operatorname{grad} r^{2h} \operatorname{grad} U_{n-2h}^* + (\Delta r^{2h}) U_{n-2h}^* = \\ &= 0 + 2 \cdot 2hr^{2h-2} (n-2h) U_{n-2h}^* + 2h(2h+1) r^{2h-2} U_{n-2h}^* = \\ &= 2h(2n-2h+1) r^{2h-2} U_{n-2h}^*. \end{aligned}$$

откуда следует искомый результат. Полином  $F$  приводится к требуемой форме, если положить  $U_{n-2h}^* = 2h(2n-2h+1) U_{n-2h}$  и  $U_n = G$ . Отсюда сразу следует доказательство нашего соотношения:  $xU_l$  — полином степени  $l+1$ , поэтому его можно записать в установленной нами форме: так как функция  $\Delta(xU_l) = 2(\partial U_l / \partial x)$  сама является потенциальной функцией степени  $l-1$  {поскольку  $\Delta(\partial U_l / \partial x) = (\partial / \partial x) \Delta U_l$ , то ее разложение содержит только первый член ряда, именно член  $U_{l-1}$ . Поэтому  $xU_l$  включает только два первых члена ряда:

$$xU_l = U_{l+1} + r^2 U_{l-1}.$$

Воспользовавшись функциями  $Y_l$  и разделив уравнение на  $r^{l+1}$ , найдем, что

$$\frac{x}{r} Y_l = Y_{l+1} + Y_{l-1},$$

как и утверждалось выше.

Итак, мы провели полное доказательство правила отбора  $l' = l \pm 1$  для азимутального квантового числа. Теперь перейдем к случаю, когда имеется расщепление на уровни с различными магнитными квантовыми числами (например, во внешнем магнитном поле), и попытаемся найти правила отбора для переходов между различными уровнями.

Перейдем к обычным обозначениям волновых функций, в которых можно непосредственно задать величину момента относительно определенной оси. Именно заменим обобщенную шаровую функцию  $Y_l(\theta, \varphi)$  специальной функцией  $P_l^m e^{im\varphi}$ . Тогда момент относительно полярной оси будет равен  $mh/2\pi$ . Интеграл  $J_{l'm'm'}$  при этом расщепляется на два, один из которых зависит только от  $\theta$ , а другой — только от  $\varphi$ . Нас интересует лишь интеграл по  $\varphi$ , так как интеграл по  $\theta$  дает правила отбора для  $l$ , уже установленные выше.

В соответствии с этим рассмотрим три интеграла:

$$I_x = \int_0^{2\pi} x e^{i(m-m')\varphi} d\varphi,$$

$$I_y = \int_0^{2\pi} y e^{i(m-m')\varphi} d\varphi,$$

$$I_z = \int_0^{2\pi} z e^{i(m-m')\varphi} d\varphi.$$

Они легко вычисляются, если ввести полярные координаты вместо  $x$ ,  $y$  и  $z$ . Ввиду того что  $z = r \cos \theta$ , третий интеграл отличен от нуля только при  $m' = m$ . Объединим два других интеграла следующим образом:

$$\begin{aligned} I_x \pm iI_y &= \int_0^{2\pi} (x \pm iy) e^{i(m-m')\varphi} d\varphi = \\ &= r \sin \theta \int_0^{2\pi} (\cos \varphi \pm i \sin \varphi) e^{i(m-m')\varphi} d\varphi = r \sin \theta \int_0^{2\pi} e^{i(m-m' \pm 1)\varphi} d\varphi. \end{aligned}$$

Это дает правило отбора

$$m' = m \pm 1.$$

Каков же смысл этих двух различных правил отбора в применении к матричным элементам  $\bar{x}$ ,  $\bar{y}$ ,  $\bar{z}$  для излучения? Выше мы

убедились, что с точностью до множителя  $e$  (элементарный заряд) такой матричный элемент означает квантовомеханическое среднее (вероятность) электрического дипольного момента при переходах из состояния  $n, l, m$  в состояние  $n', l', m'$ . Но по принципу соответствия наличие переменного во времени дипольного момента вызывает излучение электромагнитных волн. Далее, поле излучения колеблющегося диполя обладает той особенностью, что в направлении колебаний излучение отсутствует. Поэтому, коль скоро правило отбора  $m' = m$  выполняется только для  $z$ -компоненты дипольного момента, это означает, что излучение, соответствующее переходу  $m \rightarrow m$ , появляется только тогда, когда облако электрических зарядов колеблется в специальном направлении (по оси  $z$ ). Значит, излучение можно наблюдать только под прямым углом к этому направлению. Положение меняется в случае двух переходов  $m \rightarrow m \pm 1$ , когда излучение можно наблюдать в любом направлении. Например, при наблюдении в  $x$ -направлении мы обнаружим излучение, возникшее при колебаниях диполя вдоль оси  $y$ , а это направление определяет как раз направление колебаний электрического вектора излучения. Наблюдение вдоль оси  $z$  даст  $x$ -компоненту и  $y$ -компоненту излучения, но они поляризованы по кругу. Приведенные выше рассуждения сразу указывают, что переход  $m \rightarrow m + 1$  соответствует колебанию заряженного облака с дипольным моментом  $x + iy$ , т. е. вращению электрического вектора вокруг оси  $z$  в положительном направлении; подобные же рассуждения применяются к случаю перехода  $m \rightarrow m - 1$ .

Эти утверждения теории можно непосредственно проверить в случае нормального эффекта Зеемана. Хорошо известно, что наблюдения в перпендикулярном к оси  $z$  направлении (под прямым углом к магнитному полю) дают обычный лоренцев триплет, т. е. расщепление на три компоненты. Из них центральная, соответствующая переходу  $m \rightarrow m$  (и поэтому несмещенная), поляризована в продольном относительно магнитного поля направлении, а две другие компоненты, соответствующие переходам  $m \rightarrow m \pm 1$ , поляризованы в поперечном направлении. При продольных наблюдениях несмещенная компонента исчезает, и мы видим только две смещенные компоненты; они в согласии с теорией поляризованы по кругу.

## 22. Аномальный эффект Зеемана для $D$ -линий натрия

Здесь мы получим схему расщепления  $D$ -линий натрия при аномальном эффекте Зеемана. В гл. VI, § 1 мы установили, что линия  $D_1$  соответствует переходу с  $p$ -уровня с внутренним квантовым числом  $1/2$ , т. е. с уровня  $l=1, j=1/2$ , на  $s$ -уровень ( $l=0$ ).

$j=1/2$ ), а линия  $D_2$  — переходу с  $l=1, j=3/2$  на уровень  $l=0, j=1/2$ .

Начнем с определения факторов Ланде для трех рассматриваемых термов. Так как  $s=1/2$ , формула

$$g = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

дает следующие значения:

$$l=0, \quad j=\frac{1}{2}: \quad g = \frac{3}{2} + \frac{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}}{2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} = 2,$$

$$l=1, \quad j=\frac{1}{2}: \quad g = \frac{3}{2} + \frac{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - 1 \cdot 2}{2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} = \frac{2}{3},$$

$$l=1, \quad j=\frac{3}{2}: \quad g = \frac{3}{2} + \frac{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - 1 \cdot 2}{2 \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2}} = \frac{4}{3}.$$

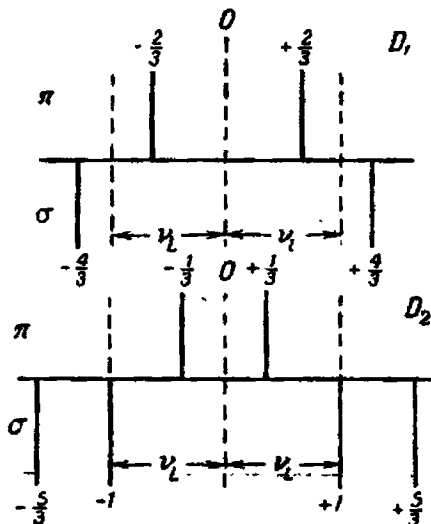
В приведенных ниже двух диаграммах даны величины расстояний между линиями, причем за единицу выбрано расстояние при нормальном эффекте Зеемана, т. е. мы приводим значения  $mg$  для высшего и низшего термов обеих линий. Значения  $m$ , как и  $j$ , должны быть полуцелыми, ибо они равны  $-j, -j+1, \dots, j$ .

$D_1$	$m =$	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$
$l=1 \quad j=\frac{1}{2}$		$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$
		$\downarrow$	$\downarrow$
$l=0 \quad j=\frac{1}{2}$		$-1$	$+1$

$D_2$	$m =$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$
$l=1 \quad j=\frac{3}{2}$		$-2$	$-\frac{2}{3}$	$+\frac{2}{3}$	$2$
		$\swarrow$	$\downarrow$	$\searrow$	$\swarrow$
$l=0 \quad j=\frac{1}{2}$		$-1$		$+1$	

Стрелки означают возможные переходы, т. е. указывают положения линий при эффекте Зеемана. Здесь надо учесть правила отбора для магнитного квантового числа  $m$ . Их можно вывести из принципа соответствия, точно так же, как в § 2 гл. V (см. также приложение 21). Так как  $m$  описывает прецессию вокруг направления поля, то переходы  $\Delta m = \pm 1$  соответствуют классическим колебаниям в направлении, перпендикулярном  $H$ . Эти компоненты излучения называют  $\sigma$ -компонентами. При наблюдениях в продольном направлении (т. е. вдоль направления поля) они оказываются поляризованными по кругу (как и

должно быть по классической теории), а при наблюдениях в поперечном направлении они поляризованы линейно, причем плоскость колебаний перпендикулярна полю. Разрешены и переходы  $\Delta m=0$ ; они соответствуют классическим колебаниям вдоль направления поля. Их называют  $\pi$ -компонентами. Поскольку  $\pi$ -компоненты представляют собой колебания, параллельные полю, они видны только при наблюдениях в поперечном направлении (в направлении же колебаний диполя, т. е. в нашем случае в направлении магнитного поля, излучение отсутствует).



Фиг. 106. Расщепление  $D$ -линий натрия в аномальном эффекте Зеемана. Величина расщепления  $\nu_L$  в нормальном эффекте Зеемана принята за единицу.  $\pi$ -компоненты, поляризованные параллельно полю, показаны наверху,  $\sigma$ -компоненты, поляризованные перпендикулярно полю, — внизу.

Эти правила отбора сразу же определяют положения компонент при зеемановском расщеплении  $D$ -линий. Чтобы оценить их смещение в обе стороны от центрального нулевого положения, примем как и раньше, что расстояние между линиями при нормальном эффекте Зеемана, т. е.  $\nu_L$  в шкале частот, равно единице. Над горизонтальной осью показаны  $\pi$ -компоненты, а  $\sigma$ -компоненты — под нею. Так получается схема расщепления, показанная на фиг. 106, и оказывается, что она полностью согласуется с экспериментальными результатами (см. фото 17 к гл. VI).

### 23. Подсчет числа уровней в случае двух $p$ -электронов

Здесь в качестве примера мы проведем подсчет числа уровней атома, имеющего два валентных электрона (Хунд). Знать это число чрезвычайно важно в связи с анализом соответ-

вующих спектров, а также в задачах статистического характера.

Предположим, например, что термы образованы двумя  $p$ -электронами, и подсчитаем число уровней. Мы должны учесть, что электроны могут быть либо эквивалентны, либо нет, т. е. их квантовые числа могут быть либо одинаковы, либо различны, при этом, конечно, оба их азимутальных квантовых числа следует полагать единицами.

Рассмотрим сначала вторую возможность как более простую. Действительно, здесь мы не связаны принципом запрета, поскольку главные квантовые числа различны. В соответствии с правилом сложения моментов в квантовой теории результирующий орбитальный момент  $l$  может иметь три значения: 0, 1, 2 ( $l_1$  и  $l_2$  могут быть параллельны — тогда  $l=2$ , или антипараллельны — тогда  $l=0$ , или, наконец, наклонены под таким углом друг к другу, что их векторная сумма равна 1). Комбинация двух спиновых моментов дает полный спин 1 при их параллельной ориентации и полный спин 0 при антипараллельной ориентации. Поэтому возможны и триплетная, и синглетная системы. Далее, трем возможным значениям  $l$  соответствуют  $S$ -,  $P$ - и  $D$ -термы. В связи с этим появляются следующие уровни:

$${}^1S, {}^1P, {}^1D; {}^3S, {}^3P, {}^3D.$$

Так как терм  ${}^3S$  есть синглет (см. обсуждение в § 1 гл. VI), то здесь возможны всего десять различных уровней.

Если же приложить внешнее поле, число уровней значительно увеличивается в связи с возможностью различных положений полного момента по отношению к выделенному направлению — терму с полным угловым моментом  $j$  соответствует  $2j+1$  возможных ориентаций момента в поле. Тогда получается приведенная выше схема (табл. 1). В соответствии с этим для двух неэквивалентных  $p$ -электронов во внешнем поле имеется всего 36 различных энергетических уровней.

Вычисление становится более сложным в случае эквивалентных электронов, так как здесь нужно учитывать принцип запрета. Поэтому нужно записать полную систему, составленную

Таблица 1

Терм	$l$	$s$	$j$	$2j+1$
${}^1S$	0	0	0	1
${}^1P_1$	1	0	1	3
${}^1D_2$	2	0	2	5
${}^3S$	0	1	1	3
${}^3P_0$	1	1	0	1
${}^3P_1$	1	1	1	3
${}^3P_2$	1	1	2	5
${}^3D_1$	2	1	1	3
${}^3D_2$	2	1	2	5
${}^3D_3$	2	1	3	7
Всего				36



из восьми квантовых чисел, и вычеркнуть все те случаи, в которых все квантовые числа двух электронов одинаковы. Сначала мы примем, что внешнее поле снимает пространственное вырождение, так что имеет смысл задавать компоненты орбитального момента относительно выделенного направления. В качестве квантовых чисел возьмем  $\mu_1$  и  $\mu_2$ , т. е. проекции орбитального момента,  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  — проекции спина на выделенное направление, а кроме того,  $n_1 = n_2$  и  $l_1 = l_2 = 1$ .

В табл. 2 приведены все возможные комбинации этих четырех квантовых чисел, за исключением тех, которые противоречат принципу запрета. Кроме того, отсутствуют комбинации, которые получаются из написанных простой перестановкой квантовых чисел двух электронов. Поскольку невозможно отличить один электрон от другого, то эти новые комбинации, конечно, идентичны старым и определяют тот же энергетический

Таблица 2

$\mu_1$	$\mu_2$	$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\mu$	$\sigma$
1	1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	0
1	0	$\pm \frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$	1	1, 0, 0, -1
1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$	0	1, 0, 0, -1
0	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0
0	-1	$\pm \frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$	-1	1, 0, 0, -1
-1	-1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-2	0

уровень. В пятой и шестой колонках приведены суммы  $\mu = \mu_1 + \mu_2$  и  $\sigma = \sigma_1 + \sigma_2$ . Видно, что в магнитном поле имеется только 15 уровней (магнитное расщепление), тогда как для неэквивалентных электронов в магнитном поле возможны 36 уровней, в чем мы убедились выше.

Однако нас интересует не столько расщепление уровней в магнитном поле, сколько значения термов невозмущенного атома. Поэтому мы должны объединить в один терм невозмущенного атома те выявляющиеся в магнитном поле уровни, которые имеют одинаковое внутреннее квантовое число  $j$  и одинаковый

орбитальный момент  $l$  (ведь мы уже выяснили, что один уровень с внутренним квантовым числом  $j$  в магнитном поле расщепляется на  $2j+1$ -уровней). Далее из табл. 2 видно, что должен существовать по крайней мере один уровень с орбитальным моментом  $l=2$  ( $D$ -терм), так как существуют компоненты этого момента со значениями 2 и  $-2$  в выделенном направлении. В то же время мы убеждаемся, что соответствующее спиновое квантовое число  $s$  должно обращаться в нуль, так как в этих термах появляется только компонента спина  $\sigma=0$ . Соответственно мы получаем  ${}^1D$  терм с внутренним квантовым числом  $j=(l+s)=2$ , который в магнитном поле расщепляется на пять уровней. Для них  $\sigma=0$ , а  $\mu=-2, -1, \dots, +2$ . Что же касается остальных десяти термов, то, как легко удостовериться, девять из них соответствуют  $P$ -термам ( $l=1$ ) со спиновым квантовым числом  $\sigma=-1, 0, 1$ , а последний терм — это  ${}^1S$ -терм. Итак, мы пришли к следующей схеме:

Мультиплет	Обозначение терма
$\left\{ \begin{array}{l} \mu = -2, -1, 0, 1, 2 \\ \sigma = 0 \end{array} \right.$ соответствует	$\left. \begin{array}{l} l = 2 \\ s = 0 \end{array} \right\} {}^1D$
$\left\{ \begin{array}{l} \mu = -1, 0, 1 \\ \sigma = -1, 0, 1 \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} l = 1 \\ s = 1 \end{array} \right\} {}^3P$
$\left\{ \begin{array}{l} \mu = 0 \\ \sigma = 0 \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} l = 0 \\ s = 0 \end{array} \right\} {}^1S$

Таким образом, в данном случае (эквивалентные  $p$ -электроны) в отсутствие магнитного поля имеется только пять термов, а не десять, как в случае неэквивалентных электронов. Выпавшими оказались термы  ${}^3S$ ,  ${}^1P$  и  ${}^3D$  (в соответствии с принципом Паули).

Аналогичное перечисление для большего числа эквивалентных  $p$ -электронов приведено в табл. 3. Что же касается энергии уровней, то квантовая механика в согласии с экспериментом дает следующий результат: уровень с наибольшей мультиплетностью, т. е. с наибольшим значением  $s$ , всегда наименее энергичный. Это означает, что для двух или четырех  $p$ -электронов основное состояние есть  ${}^3P$ -терм, а для трех  $p$ -электронов наименее энергичное состояние есть  ${}^4S$ -терм. Если же имеется несколько термов с одинаковой мультиплетностью, то наименее энергичным будет тот, у которого величина  $l$  наибольшая.

Таблица 3

Число $p$ -электронов	Термы
6	${}^1S$
1 или 5	${}^2P$
2 или 4	${}^1S, {}^3P, {}^1D$
3	${}^4S, {}^2P, {}^2D$

## 24. Атомный формфактор

Рассеяние света на свободных электронах было исследовано классически в приложении 8. Здесь та же проблема будет рассматриваться с точки зрения квантовой теории для произвольного движения (волновой функции) электрона.

С этой целью мы должны обобщить волновое уравнение для электрона на случай присутствия внешнего магнитного поля, поскольку в световых волнах электрическое и магнитное поля имеют одинаковую напряженность. Это делается способом, описанным в гл. V, § 4; сначала устанавливается классический гамильтониан  $H$ , а затем осуществляется переход к квантовой механике посредством интерпретации импульсов как дифференциальных операторов.

Удобно выразить электромагнитное поле через скалярный потенциал  $\Phi$  и вектор-потенциал  $A$ :

$$E = -\text{grad}\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}, \quad H = \text{rot } A.$$

Оказывается, что влияние электромагнитного поля можно учесть, просто заменив вектор импульса  $p$  на  $p - (e/c)A$ , так что обычный гамильтониан электрона (стр. 164) превращается в

$$H = \frac{1}{2m} \left( p - \frac{e}{c} A \right) \left( p - \frac{e}{c} A \right) + e\Phi,$$

где  $\Phi$  — полный скалярный потенциал (включающий потенциал ядра  $-e^2Z/r$  и потенциал поля световой волны).

Релятивистскими эффектами здесь пренебрегают (хотя этот же метод легко применить и к релятивистскому обобщению). Тогда, чтобы быть последовательными, мы должны пренебречь членами, в которых  $A$  и его производные появляются в степени выше первой, и написать

$$H = \frac{1}{2m} p^2 - \frac{e}{mc} p \cdot A + e\Phi.$$

Для проверки того, что это выражение для  $H$  корректно в рамках классической механики, мы должны показать, что оно приводит к известным уравнениям движения, т. е. канонические уравнения

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_x}, \dots \\ \frac{dp_x}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial x}, \dots \end{aligned}$$

должны быть идентичны уравнению

$$m \frac{dv}{dt} = e \left[ E + \frac{1}{c} (\mathbf{v} \times \mathbf{H}) \right],$$

где  $\mathbf{v}$  — вектор скорости. В правой части стоит так называемая сила Лоренца, которая действует на электрон в электромагнитном поле ( $E, H$ ).

Эту идентичность можно установить непосредственно, выполнив требуемые дифференцирования данного выражения для  $H$ . Дифференцирование по  $p_x$  дает

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m} \left( p_x - \frac{e}{c} A_x \right);$$

дифференцируя по  $x, y, z$ , следует учитывать, что от них зависят  $\Phi$  и компоненты  $A$ . Тогда мы получим

$$\frac{dp_x}{dt} = \frac{e}{mc} \left( p_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + p_y \frac{\partial A_y}{\partial x} + p_z \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) - e \frac{\partial \Phi}{\partial x}.$$

Здесь, пользуясь предыдущим уравнением, нужно подставить

$$p_x = m \frac{dx}{dt} + \frac{e}{c} A_x, \dots$$

откуда

$$\frac{dp_x}{dt} = m \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \frac{dz}{dt} \right), \dots$$

Приравняв два выражения для  $dp_x/dt$  и пренебрегая членами, квадратичными по  $A$ , получаем

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -e \left( \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} \right) + \frac{e}{c} \left[ \frac{dy}{dt} \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - \frac{dz}{dt} \left( \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right];$$

вспомнив выражения векторов поля через потенциалы, мы видим, что это уравнение совпадает с первой компонентой уравнения Лоренца

$$m \frac{dv_x}{dt} = e \left[ E_x + \frac{1}{c} \left( \frac{dy}{dt} H_z - \frac{dz}{dt} H_y \right) \right].$$

Следовательно, наше выражение для гамильтониана  $H$  правильно. Оно получается добавлением гамильтониана взаимодействия с магнитным полем

$$H_m = - \frac{e}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$$

к обычному, выписанному на стр. 164. Из канонических уравнений следует, что полный гамильтониан постоянен; его вели-

чина представляет собой полную энергию. Следовательно,  $H_m$  должен представлять магнитную добавку к энергии. В теории эффекта Зеемана (гл. VI, § 2) мы использовали другое выражение для  $E_{\text{маг}}$ , которое в векторных обозначениях можно записать как скалярное произведение  $E_m = -\mathbf{H} \cdot \mathbf{M}$ , где  $\mathbf{M}$  — вектор магнитного момента. Однако легко видеть, что наше выражение для  $H_m$  идентично выражению для однородного магнитного поля; компоненты  $H_x, H_y, H_z$  такого поля постоянны, а его потенциал можно записать в виде

$$A = \frac{1}{2} (\mathbf{H} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{2} (H_y z - H_z y, \dots),$$

откуда

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{H} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathbf{H} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{H} \cdot \mathbf{m},$$

где использовано определение момента (гл. V, § 5). Если подставить это в  $H_m$ , то мы получим

$$H_m = -\frac{e}{2mc} \mathbf{H} \cdot \mathbf{m} = -\mathbf{H} \mathbf{M},$$

так как, согласно гл. VI, § 2, умножение на  $e/2mc$  как раз и переводит механический момент  $\mathbf{m}$  в магнитный момент  $\mathbf{M}$ .

Переходя к квантовой механике, мы должны учесть тот факт, что  $p_x, p_y, p_z$  становятся операторами, не коммутирующими с  $x, y, z$ , а поэтому и с компонентами  $\mathbf{A}$ , являющимися функциями  $x, y, z$ . Следовательно, в первоначальном выражении для  $H$  мы имеем

$$\left( p_x - \frac{e}{c} A_x \right) \left( p_x - \frac{e}{c} A_x \right) = p_x^2 - \frac{e}{c} (A_x p_x + p_x A_x) + \dots,$$

где два члена в скобке не идентичны.

Поэтому оператор, представляющий гамильтониан взаимодействия с магнитным полем, имеет вид

$$H_m = -\frac{e}{2mc} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}),$$

и теперь результат наших рассуждений можно сформулировать следующим образом: модифицированный гамильтониан получается добавлением  $H_m$  к обычному выражению, данному в гл. IV, § 4, а модифицированное уравнение Шредингера отличается от обычного добавочным членом

$$\begin{aligned} H_m \psi &= -\frac{e}{2mc} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) \psi = \\ &= -\frac{e}{2mc} \left( A_x \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} A_x \right) \psi + \dots = \\ &= -\frac{e}{2mc} \frac{\hbar}{2\pi i} \left( 2A_x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \frac{\partial A_x}{\partial x} \right) + \dots \end{aligned}$$

Следующий шаг состоит в выяснении того, как влияет добавочный член  $H_m\psi$  на закон сохранения числа частиц, выведенный в приложении 20. Вспомнив использованный тогда прием, мы должны умножить уравнение Шредингера на  $\psi^*$ , а сопряженное ему уравнение на  $\psi$  и вычесть одно из другого. Пропедев это с новыми членами, получим

$$\begin{aligned}\psi^* H_m \psi - \psi H_m^* \psi^* &= -\frac{e}{mc} \frac{\hbar}{2\pi i} \left\{ A_x \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) + \psi \psi^* \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dots \right\} = \\ &= -\frac{e}{mc} \frac{\hbar}{2\pi i} \left( \frac{\partial}{\partial x} (\psi \psi^* A_x) + \dots \right) = -\frac{\hbar}{2\pi i} \operatorname{div} s_m,\end{aligned}$$

где

$$s_m = \frac{e}{mc} \psi \psi^* A$$

есть вклад в полный ток, обязанный своим происхождением влиянию магнитного поля; его необходимо добавить к выражению для  $s$ , данному в приложении 20.

В действительности входящая в это выражение волновая функция  $\psi$  не совпадает с таковой в отсутствие магнитного поля, поэтому влияние поля изменит невозмущенное выражение для  $s$ ; однако можно показать, что это изменение — пренебрежимый эффект высшего порядка. Следовательно, приведенное выражение для  $s_m$  представляет полный ток частиц, вызванный полем, если в качестве  $\psi$  подставить невозмущенную волновую функцию.

Теперь можно вычислить рассеяние, взяв в качестве  $A_x$  падающую плоскую волну, распространяющуюся вдоль оси  $x$  и поэтому пропорциональную  $e^{ikx}$ , а  $A_y$  и  $A_z$  взяв равными 0. Тогда у электрического тока в атоме будет только одна  $x$ -компонента, равная

$$es_m = \frac{e^2}{mc} |\psi|^2 A e^{ikx}.$$

Ток порождает вторичное поле, вектор-потенциал  $A$  которого имеет только компоненту  $\Psi$ , параллельную оси  $x$  и удовлетворяющую волновому уравнению

$$\Delta \Psi + k^2 \Psi = -\frac{4\pi}{c} es_m = -4\pi \frac{e^2}{mc^2} |\psi|^2 A e^{ikx}.$$

Это уравнение имеет в точности тот же вид, что и уравнение, использованное в приложении 20 при вычислении рассеяния  $\alpha$ -частиц; при этом  $F(x, y, z)$  заменяется на  $-4\pi(e^2/mc^2)|\psi|^2 A$ . Таким образом, решение может быть получено тем же способом, что и в приложении 20 (с той лишь разницей, что следует опустить падающую  $\Psi$ -волну); асимптотика решения имеет

вид

$$\Psi = \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta),$$

где

$$f(\theta) = 4\pi \frac{e^2}{mc^2} A \int_0^\infty r'^2 |\psi|^2 \frac{\sin Kr'}{Kr'} dr',$$

причем

$$K = 2k \sin \frac{\theta}{2},$$

$\theta$  — угол рассеяния,  $k = 2\pi/\lambda$  — волновое число. Теперь нужно перейти от вектор-потенциала  $\Psi (=A_x)$  к напряженностям полей  $E$  и  $H$  и вычислить вектор Пойнтинга. Эта процедура в точности совпадает с проведенной в приложении 8 для классического случая свободного электрона; она приводит к множителю  $(1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta)$ , который в комбинации с  $e^2/mc^2$  дает формулу Томсона для рассеяния свободными электронами

$$I_r(\theta) = I_0 \frac{1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta}{r^2} \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2,$$

причем  $I_0$  — интенсивность падающего пучка. Действительная интенсивность рассеянной волны равна

$$I(\theta) = |F(\theta)|^2 I_r(\theta),$$

где

$$F(\theta) = 4\pi \int_0^\infty r'^2 |\psi|^2 \frac{\sin Kr'}{Kr'} dr'.$$

— так называемый *атомный формфактор*, описывающий влияние плотности электронов  $|\psi|^2$  на рассеяние.

Такой же формфактор определяет влияние электронного облака на рассеяние электронов атомом. Чтобы убедиться в этом, мы должны вернуться к формулам приложения 20, согласно которым  $f(\theta)$  можно записать в виде

$$f(\theta) = \frac{1}{4\pi} \int \int \int e^{ikr' \cdot (m-s)} F(r') dx' dy' dz'.$$

Для случая взаимодействия электрона с ядром, несущим заряд  $Ze$  и окруженным облаком электронов с плотностью заряда  $e|\psi|^2 = \rho(x, y, z)$ , мы имеем

$$F(r) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} V(r) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left( -\frac{Ze^2}{r} + e^2 \int \int \int \frac{\rho(x'', y'', z'')}{|r - r''|} dx'' dy'' dz'' \right).$$

Подставив это в предыдущую формулу, можно осуществить интегрирование по  $dx' dy' dz'$  при помощи тождества

$$\iiint \frac{e^{i\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dx' dy' dz' = \frac{4\pi}{|\mathbf{n}|^2} e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{n}},$$

и в результате мы найдем, что

$$f(\theta) = \frac{8\pi^2 m e^2}{h^2} \frac{1}{K^2} \{Z - F(\theta)\};$$

подставив сюда, согласно де-Бройлю,  $k = (2\pi/h) mv$ , получим

$$f(\theta) = \frac{e^2}{2m v^2} \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2} \theta} \{Z - F(\theta)\}.$$

Если пренебречь в этой формуле членом  $F(\theta)$ , то квадрат  $f(\theta)$  сводится к известной формуле Резерфорда для частиц с зарядом электрона ( $E$  равно  $e$ , а не  $2e$ , как для  $\alpha$ -частиц). Формфактор  $F(\theta)$  определяет экранирующее влияние электронов, понижая фактический заряд ядра  $Z$ .

Обе формулы рассеяния представляют собой лишь приближения, справедливые при определенных условиях. Применимость оптической формулы ограничена малостью скоростей рассеивающихся электронов по сравнению со скоростью света. Модифицированная формула Резерфорда справедлива только тогда, когда энергия падающих электронов велика по сравнению с энергией взаимодействия, так что его можно рассматривать как возмущение. Более подробное исследование показывает, что это приближение достаточно точно для электронов с энергией  $> 75$  эв в водороде,  $> 100$  эв в гелии,  $> 1000$  эв в ионе и аргоне. Ниже этих пределов необходимо использовать другие методы вычисления.

Теперь мы выведем выражение для формфактора, следующее из модели Томаса — Ферми. Так как  $|\psi|^2$  представляет собой плотность вероятности, то плотность заряда для (отрицательных) электронов будет равна  $-e|\psi|^2 = \rho$ . Подставляя сюда приведенное в тексте (гл. VI, § 9) выражение для  $\rho$  через  $\phi(r)$  и заменяя затем  $\phi(r)$  на  $\Phi(x)$ , где  $r = ax$ , причем величина  $a$  связана с первым радиусом Бора  $a_1 = h^2/4\pi^2 m e^2$  равенством

$$a = a_1 \left( \frac{9\pi^2}{128Z} \right)^{1/3},$$

мы после элементарного подсчета получим простое выражение

$$4\pi|\psi|^2 = -\frac{4\pi\rho}{e} = \frac{Z}{a^3} \left[ \frac{\Phi(x)}{x} \right]^{1/2}.$$



Подставив его в формулу для  $F(\theta)$  (стр. 432) и заменив переменную интегрирования  $r$  на  $x$ , получим окончательно

$$F(\theta) = Z \int_0^{\infty} x^{1/2} [\Phi(x)]^{3/2} \frac{\sin \sigma x}{\sigma x} dx, \quad \sigma = \frac{4\pi a}{\lambda} \sin \frac{1}{2} \theta,$$

что совпадает с формулой, приведенной в тексте (гл. VI, § 9).

Получить дифференциальное сечение рассеяния электронов можно, либо подставив это выражение для  $F(\theta)$  в записанную выше формулу для  $f(\theta)$ , либо вернувшись к первоначальному выражению  $f(\theta)$  через потенциал  $V(r)$  и заменив последний функцией Томаса — Ферми

$$V(r) = -e\varphi(r) = -\frac{Ze^2}{ax} \Phi(x).$$

Подставляя эту функцию в формулу (приложение 20)

$$f(\theta) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} \int_0^{\infty} r^2 V(r) \frac{\sin Kr}{Kr} dr$$

и заменяя здесь  $r$  на  $x = r/a$ , имеем

$$f(\theta) = -C\Psi(\sigma), \quad \Psi(\sigma) = \frac{1}{\sigma} \int_0^{\infty} \Phi(x) \sin \sigma x dx;$$

здесь

$$C = \frac{2Za^2}{a_1} = 2Za_1 \left( \frac{9\pi^2}{128Z} \right)^{1/2} = Z^{1/2} a_1 \pi^{1/2} C_0,$$

причем  $C_0$  — постоянное число, а

$$\sigma = \frac{4\pi a}{\lambda} \sin \frac{1}{2} \theta,$$

как и раньше;  $\lambda$  означает длину волны де-Бройля для электрона  $\lambda = h/mv$ . Поэтому  $\sigma$  имеет вид

$$\sigma = \sigma_0 Z^{-1/2} v \sin \frac{1}{2} \theta,$$

где  $\sigma_0$  — постоянная.

Дифференциальное сечение равно

$$Q(\theta) = |f(\theta)|^2 = C^2 |\Psi(\sigma)|^2 = Z^2 a_1^2 \pi C_0^2 |\Psi(\sigma)|^2.$$

Полное сечение получают, умножив это выражение на  $4\pi \sin \theta d\theta$  и выполнив интегрирование по углу  $\theta$ , от которого зависит только  $\sigma$ . Результат можно записать в виде

$$\frac{Q}{\pi a_1^2 Z^{1/2}} = F\left(\frac{v}{Z^{1/2}}\right),$$

где  $F$  — универсальная функция, которую можно найти численным интегрированием. Если, наконец, заменить скорость  $v$  на  $\sqrt{V}$ , где  $V$  — ускоряющий потенциал (в согласии с уравнением  $\frac{1}{2}mv^2 = eV$ ), то мы получим зависимость, изображенную в тексте на фиг. 71 (стр. 233).

## 25. Формализм квантовой механики

Полное изложение квантовой механики выходит за рамки этой книги. Мы сможем дать лишь краткий очерк общего формализма, достаточный для понимания статистической интерпретации и эквивалентности матричной и волновой механики. Связующим звеном между этими трактовками является понятие линейного оператора.

В волновой механике каждой физической величине соответствует (линейный) оператор  $A$ , который, действуя на волновую функцию  $\psi$ , зависящую от координат  $q$  (через  $q$  ради краткости обозначена вся совокупность  $q_1, q_2, \dots$ ), переводит ее в другую функцию  $\varphi(q)$ :

$$\varphi = A\psi.$$

Самой координате  $q$ , рассматриваемой как оператор, соответствует операция «умножения на  $q$ », так что  $\varphi = q\psi$ ; импульсу  $p$  соответствует оператор  $(\hbar/2\pi i)(\partial/\partial q)$ , так что  $\varphi = (\hbar/2\pi i) \times (\partial\psi/\partial q)$ . Вообще мы можем считать  $A$  произвольной функцией  $q$  и  $p$ ; например,  $p^2 + q^2$  переводит функцию  $\psi$  в функцию

$$\varphi = (p^2 + q^2)\psi = \left(\frac{\hbar}{2\pi i}\right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} + q^2 \psi.$$

Вообще говоря, две операции  $A$  и  $B$  не коммутативны — их коммутатор  $AB - BA$  не равен нулю, например  $pq - qp = \hbar/2\pi i$ . Если оператор  $A$  воспроизводит функцию  $\psi$  с точностью до множителя,  $A\psi = a\psi$ , то функцию  $\psi$  называют *собственной функцией*  $A$ , а множитель  $a$  — *собственным значением* оператора  $A$ . В качестве примера можно взять уравнение  $p\psi = a\psi$ , или  $(\hbar/2\pi i)(\partial\psi/\partial q) = a\psi$ , с решением  $\psi = e^{(2\pi i/\hbar)aq}$ , где собственным значением  $a$  может быть любое число. Этот пример показывает, что в общем случае собственные функции комплексны.

Полезным оказалось следующее определение: каждому оператору  $A$  соответствует *сопряженный ему оператор*  $A^+$ , определяемый тем условием, что для всякой пары функций  $\varphi$  и  $\psi$

$$\int \varphi^*(A\psi) dq = \int (A^+\varphi)^* \psi dq.$$

Если  $A=A^+$ , то  $A$  называют *самосопряженным*, или вещественным<sup>1)</sup>. Например, таковы операторы  $q$  и  $p$ . Для  $q$  это утверждение тривиально; для  $p$ , интегрируя по частям, получим

$$\begin{aligned}\int \varphi^*(p\psi) dq &= \int \varphi^* \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) dq = - \int \psi \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \varphi^*}{\partial q} dq = \\ &= \int \psi \left( \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \varphi^*}{\partial q} \right)^* dq = \int \psi (p\varphi)^* dq,\end{aligned}$$

где предполагается, что проинтегрированные члены исчезают. Вообще собственные значения вещественных операторов вещественны, ибо из  $A=A^+$  при  $\varphi=\psi$  следует, что

$$\int \psi^*(A\psi) dq = \int (A\psi)^* \psi dq = \left( \int (A\psi) \psi^* dq \right)^*,$$

и поэтому интеграл веществен. Если, далее,  $A\psi=a\psi$ , то этот интеграл равен  $a \int \psi^* \psi dq$ .

Пусть  $A$  — вещественный оператор,  $a_1, a_2$  — два его собственных значения, а  $\psi_1, \psi_2$  — соответствующие собственные функции, так что

$$A\psi_1 = a_1\psi_1, \quad A\psi_2 = a_2\psi_2.$$

Умножим первое уравнение на функцию  $\psi_2^*$ , комплексно сопряженную второй собственной функции, а уравнение, комплексно сопряженное второму уравнению, на функцию  $\psi_1$ , затем проинтегрируем каждое произведение по  $q$ -пространству и вычтем одно из другого; мы получим

$$\int [\psi_2^*(A\psi_1) - \psi_1(A\psi_2)^*] dq = (a_1 - a_2) \int \psi_1 \psi_2^* dq.$$

Интеграл слева равен нулю в силу того, что  $A=A^+$ . Поэтому для любых двух разных собственных значений ( $a_1 \neq a_2$ )

$$\int \psi_1 \psi_2^* dq = 0;$$

о таких собственных функциях говорят, что они *ортонормальны*.

Любая собственная функция определяется с точностью до произвольного множителя; мы фиксируем его условием нормировки

$$\int \psi_1 \psi_1^* dq = \int |\psi_1|^2 dq = 1.$$

Тогда для любых двух собственных значений  $a_m, a_n$  (предполагающихся разными) будет верно равенство

$$\int \psi_m \psi_n^* dq = \delta_{mn},$$

<sup>1)</sup> Чаще пользуются термином *эрмитов оператор*. — Прим. ред.

где величина  $\delta_{mn}$  равна 1 или 0 соответственно тому, что  $m=n$  или  $m \neq n$ . Система таких функций называется *ортонормированной*. Примеры ортонормированных систем уже рассматривались (осциллятор, приложение 16; атом водорода, приложение 18).

Вещественный оператор имеет, вообще говоря, бесконечно много собственных значений  $a_1, a_2, \dots$ , которые мы будем считать здесь для простоты дискретными и различными. Им соответствует набор собственных функций  $\psi_1, \psi_2, \dots$ , образующий *полную* систему. Это означает, что любую функцию  $\varphi$  можно разложить в ряд по таким собственным функциям (в обобщенный ряд Фурье):

$$\varphi = \sum_n c_n \psi_n.$$

После умножения на  $\psi_m^*$  это дает вследствие условий ортонормированности

$$\int \varphi \psi_m^* dq = c_m.$$

Далее, мы имеем

$$\int |\varphi|^2 dq = \int \varphi \varphi^* dq = \sum_n c_n \int \psi_n \varphi^* dq = \sum_n c_n c_n^* = \sum_n |c_n|^2.$$

Можно взять в качестве  $\varphi$  функцию  $B\psi_m$ , где  $\psi_m$  — одна из собственных функций оператора  $A$ , а  $B$  — другой оператор; тогда коэффициенты  $c_n$  будут зависеть от обоих индексов  $m$  и  $n$ :

$$B\psi_m = \sum_n B_{nm} \psi_n,$$

$$B_{nm} = \int \psi_n^* (B\psi_m) dq.$$

Величины  $B_{nm}$  можно рассматривать как элементы *матрицы*, представляющей оператор  $B$  в системе собственных функций  $\psi_1, \psi_2, \dots$  оператора  $A$ ; легко показать, что  $B_{mn}$  обладают свойствами элементов матрицы. Из определения сопряженного оператора следует, что

$$B_{nm} = \int \psi_n^* (B\psi_m) dq = \int (B^+ \psi_n)^* \psi_m dq;$$

меняя местами  $n$  и  $m$  и применяя операцию комплексного сопряжения, мы получим

$$B_{mn}^* = \int (B^+ \psi_m) \psi_n^* dq = (B^+)_{nm}.$$

Это показывает, что для нахождения матричных элементов сопряженного оператора  $B^+$  необходимо поменять местами строки и столбцы  $B_{nm}$  ( $m \leftrightarrow n$ ) и заменить каждый элемент  $B_{mn}$  комплексно сопряженным.

Рассмотрим теперь матричный элемент произведения операторов  $BC$ :

$$(BC)_{nm} = \int \psi_n^* (BC\psi_m) dq = \int \psi_n^* B(C\psi_m) dq;$$

используя определение сопряженного оператора  $B^+$ , получаем

$$(BC)_{nm} = \int (B^+\psi_n)^* (C\psi_m) dq.$$

Теперь, подставив сюда разложения

$$B^+\psi_n = \sum_k (B^+)_{kn} \psi_k, \quad C\psi_m = \sum_l C_{lm} \psi_l,$$

найдем, что

$$\begin{aligned} (BC)_{nm} &= \int \sum_k (B^+)_{kn}^* \psi_k^* \sum_l C_{lm} \psi_l dq = \sum_{kl} B_{nk} C_{lm} \int \psi_k^* \psi_l dq = \\ &= \sum_k B_{nk} C_{km}. \end{aligned}$$

Эта формула показывает, что матричный элемент произведения операторов  $BC$  равен элементу матричного произведения матриц, принадлежащих  $B$  и  $C$ . Другими словами, операторное исчисление и матричное исчисление являются эквивалентными представлениями одной и той же математической структуры.

Из этого сразу вытекает, что волновая механика и матричная механика стационарных состояний эквивалентны. В самом деле, уравнение Шредингера,

$$\{H(p, q) - E_m\} \psi_m = 0,$$

можно записать как матричное уравнение:

$$\sum_n H_{n,n} \psi_n - E_m \psi_m = 0;$$

умножив его слева на  $\psi_k^*$  и проинтегрировав по всем  $q$ , мы получим.

$$H_{km} = E_k \delta_{km}.$$

Другими словами, матрица оператора энергии, вычисленная для набора его собственных функций, диагональна. Следовательно, проблема матричной механики, состоящая в нахождении набора матриц  $p = \|p_{nm}\|$ ,  $q = \|q_{nm}\|$ , удовлетворяющих переста-

новочным соотношениям  $pq - qp = h/2\pi i$ , такого, что в нем матрица  $H$  диагональна, эквивалентна нахождению собственных функций волнового уравнения с соответствующим оператором  $H$ .

Остается показать, что для нестационарного случая зависящее от времени уравнение Шредингера

$$\left(H + \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}\right)\psi = 0$$

эквивалентно каноническим уравнениям механики

$$\frac{dq_\alpha}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \quad \frac{dp_\alpha}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}.$$

Смысл частных производных здесь очевиден: если гамильтониан  $H$  задан в виде полинома или сходящегося ряда по степеням  $p_\alpha, q_\alpha$ , то можно применять обычные правила дифференцирования с той единственной оговоркой, что порядок множителей должен сохраняться: например,  $\partial p^2 q / \partial p = 2pq$ ,  $\partial p q r / \partial p = q r + p r$ . Не очевиден, однако, смысл производной по времени от оператора, действующего на функции координат  $q$ ; смысл его действительно необходимо еще определить подходящим образом. Сделать это можно, лишь апеллируя к физическому смыслу формализма. Как объяснялось в тексте, квантовая механика должна интерпретироваться статистическим образом. Делаются следующие предположения.

Каждой физической величине, или «наблюдаемой», отвечает вещественный оператор  $A$ . Собственные функции  $\psi_1, \psi_2, \dots$  соответствуют квантованным, или чистым, состояниям, для которых оператор принимает значения  $a_1$ , или  $a_2$ , или  $a_3 \dots$ ; любая функция  $\varphi$  представляет состояние, которое можно рассматривать как суперпозицию чистых состояний. Каждый коэффициент  $c_n$  разложения определяет вес, с которым данное квантовое состояние  $n$  появляется в общем состоянии  $\varphi$ . Вероятность получить собственное значение  $a_n$  при измерении выражается формулой

$$w_n = |c_n|^2.$$

Если принять, что  $\int |\varphi|^2 dq = 1$ , то будет

$$\sum_n w_n = \sum_n |c_n|^2 = 1.$$

*Среднее значение*, или *ожидаемое значение*, величины, представленной оператором  $A$ , в состоянии  $\varphi$  равно

$$\bar{A} = \int \varphi^* (A\varphi) dq = \int \varphi^* \sum_n c_n A \psi_n dq = \sum_n |c_n|^2 a_n = \sum_n w_n a_n.$$

Теперь мы можем определить полную скорость изменения во времени  $dA/dt$  оператора  $A$  как оператор, среднее от которого для любого из решений зависящего от времени уравнения Шредингера тождественно совпадает с производной по времени от среднего значения оператора  $A$  по той же функции

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \frac{dA}{dt}.$$

Тогда

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \frac{d}{dt} \int \psi^* (A\psi) dq = \int \left\{ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} (A\psi) + \psi^* \left( \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right) + \psi^* \left( A \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right\} dq.$$

Здесь предполагается, что  $A$ , будучи функцией  $q_\alpha$  и  $p_\alpha = (h/2\pi i)(\partial/\partial q_\alpha)$ , может и явно зависеть от времени, причем  $\partial A/\partial t$  как раз и есть соответствующая частная производная. Поскольку  $\psi$  удовлетворяет волновому уравнению, а  $\psi^*$  — сопряженному уравнению, то

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{2\pi i}{h} H\psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{2\pi i}{h} (H\psi)^*,$$

поэтому

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \int \left\{ \frac{2\pi i}{h} (H\psi)^* (A\psi) + \psi^* \left( \frac{\partial A}{\partial t} \psi \right) - \frac{2\pi i}{h} \psi^* A (H\psi) \right\} dq.$$

Но так как оператор  $H$  — самосопряженный (вещественный оператор), то первый член под интегралом можно записать в виде  $(2\pi i/h)(H^*\psi)^* A\psi$  и, согласно определению сопряжения, заменить выражением  $(2\pi i/h)\psi^* H(A\psi)$ . Понимая, что все операторы действуют только на функции, записанные справа от них, мы можем опустить скобки. Тогда

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \int \psi^* \left\{ \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{2\pi i}{h} (HA - AH) \right\} \psi dq.$$

Приравнявая это выражение

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \int \psi^* \frac{dA}{dt} \psi dq,$$

мы найдем, что

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{2\pi i}{h} (HA - AH).$$

Если  $A$  не зависит от времени явно, то

$$\frac{dA}{dt} = \frac{2\pi i}{h} (HA - AH).$$

В частности, это справедливо, когда вместо  $A$  стоит  $p_\alpha$  или  $q_\alpha$ . Далее, можно показать, что для любой функции  $F(p, q)$ , которая может зависеть и от  $t$ , имеют место равенства

$$Fq_\alpha - q_\alpha F = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial F}{\partial p_\alpha}, \quad Fp_\alpha - p_\alpha F = -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial F}{\partial q_\alpha}.$$

Это, очевидно, справедливо, когда вместо  $F$  стоит  $p_\alpha$  или  $q_\alpha$ ; далее, в предположении, что эти равенства верны для некоторых функций  $F_1$  и  $F_2$  переменных  $p, q$ , можно непосредственно убедиться, что это будет также справедливо и для  $F_1 + F_2$  и  $F_1 \cdot F_2$ , а следовательно, и для всех полиномов и всех функций, которые можно представить бесконечными полиномами (рядами), т. е., практически говоря, справедливо для всех функций.

Комбинируя только что полученные результаты, в применении к случаю, когда  $F = H$ , а  $A$  равно одному из  $q_\alpha$  и  $p_\alpha$ , получаем

$$\frac{dq_\alpha}{dt} = \frac{2\pi i}{\hbar} (Hq_\alpha - q_\alpha H) = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha},$$

$$\frac{dp_\alpha}{dt} = \frac{2\pi i}{\hbar} (Hp_\alpha - p_\alpha H) = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}.$$

Итак, канонические уравнения являются следствием зависящего от времени уравнения Шредингера, причем, как нетрудно убедиться, обратив рассуждения, справедливо и обратное утверждение.

Чтобы выяснить смысл этих уравнений на матричном языке, обратим внимание сначала на тот факт, что можно менять порядок дифференцирования по времени и взяв матричных элементов.

Итак, возьмем  $\psi = a\psi_n + b\psi_m$ , где  $\psi_n$  и  $\psi_m$  — две функции из ортонормированной системы, а  $a$  и  $b$  — вещественные или комплексные постоянные, удовлетворяющие равенству  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ , так что  $\int |\psi|^2 dq = 1$ . Тогда

$$\bar{A} = \int (a\psi_n + b\psi_m)^* A (a\psi_n + b\psi_m) dq =$$

$$= |a|^2 A_{nn} + ab^* A_{mn} + a^* b A_{nm} + |b|^2 A_{mm}$$

и точно так же

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = |a|^2 \left( \frac{dA}{dt} \right)_{nn} + ab^* \left( \frac{dA}{dt} \right)_{mn} + a^* b \left( \frac{dA}{dt} \right)_{nm} + |b|^2 \left( \frac{dA}{dt} \right)_{mm}.$$

Согласно определению  $dA/dt$ , производная по времени от первого выражения равна второму; но то же самое верно для первого и последнего членов двух сумм соответственно — чле-



нов, представляющих собой средние по состояниям  $\psi_n$  и  $\psi_m$ . Поэтому мы имеем

$$\frac{dA_{nm}}{dt} = \left( \frac{dA}{dt} \right)_{nm}$$

и уравнение, сопряженное этому.

С другой стороны, если  $H$  не зависит от времени явно, а  $E_n$  есть одно из его собственных значений, то в матричном представлении  $H$  имеет диагональный вид  $H_{nm} = E_n \delta_{nm}$ ; поэтому

$$\begin{aligned} (HA - AH)_{nm} &= \sum_k (E_n \delta_{nk} A_{km} - A_{nk} E_k \delta_{km}) = \\ &= (E_n - E_m) A_{nm} = h\nu_{nm} A_{nm}. \end{aligned}$$

Комбинируя последние два результата, находим

$$\frac{dA_{nm}}{dt} = \frac{2\pi i}{h} (HA - AH)_{nm} = 2\pi i \nu_{nm} A_{nm}.$$

Это дифференциальное уравнение для матричных элементов; его решение имеет вид

$$A_{nm} = a_{nm} e^{2\pi i \nu_{nm} t}, \quad h\nu_{nm} = E_n - E_m,$$

где  $a_{nm}$  — постоянные. Таким образом, мы получаем обычную формулировку матричной механики (Гейзенберг, Борн и Йордан, 1925 г.), в которой предполагалось, что матричные элементы периодичны во времени, причем периоды удовлетворяют комбинационному принципу Ритца (гл. V, § 3).

## 26. Общее доказательство соотношения неопределенностей

Приведенный в гл. IV, § 7 вывод соотношения неопределенностей, исходя из явлений дифракции и других наглядно представляемых процессов, приводит к результату, определяющему лишь порядок величин. Для получения точного неравенства мы должны призвать на помощь общий формализм квантовой механики, изложенный в приложении 25.

Для любого оператора  $A$  среднее значение произведения  $AA^+$  всегда неотрицательно; действительно, по определению  $A^+$

$$\begin{aligned} \overline{AA^+} &= \int \varphi^* (AA^+ \varphi) dq = \int \varphi^* A (A^+ \varphi) dq = \\ &= \int (A^+ \varphi)^* (A^+ \varphi) dq = \int |A^+ \varphi|^2 dq \geq 0. \end{aligned}$$

Теперь мы можем вывести неравенства, относящиеся к средним значениям двух вещественных операторов  $A$  и  $B$ , — неравенства, приводящие к соотношению неопределенностей Гейзенберга.

Из определения  $A^+$  следует после умножения на  $i$ , что

$$\int \varphi^* (iA^+ \psi) dq = - \int (iA^+ \varphi)^* \psi dq,$$

т. е. что  $(iA)^+ = -iA^+$ . В более общем случае мы также имеем

$$(A + iB)^+ = A^+ - iB^+.$$

Если операторы  $A$  и  $B$  — вещественные, а  $\lambda$  — вещественное число, то

$$\overline{(A + i\lambda B)(A + i\lambda B)^+} \geq 0,$$

или

$$\overline{(A + i\lambda B)(A - i\lambda B)} = \overline{A^2 + B^2 \lambda^2 - i(\overline{AB - BA})} \lambda \geq 0.$$

Отсюда следует, что среднее коммутатора  $AB - BA$  есть чисто мнимая величина. Минимум последнего выражения достигается, когда

$$\lambda = \frac{i}{2} \frac{\overline{AB - BA}}{B^2},$$

и равен

$$\overline{A^2} + \frac{1}{4} \frac{\overline{(AB - BA)^2}}{B^2} \geq 0.$$

Поэтому

$$\overline{A^2} \cdot \overline{B^2} \geq -\frac{1}{4} \overline{(AB - BA)^2}.$$

Заменим теперь  $A$  и  $B$  соответственно на  $\delta A = A - \bar{A}$  и  $\delta B = B - \bar{B}$ ; тогда

$$\begin{aligned} \delta A \delta B - \delta B \delta A = AB - A\bar{B} - \bar{A}B + \bar{A}\bar{B} - BA + \\ + \bar{B}A + B\bar{A} - \bar{B}\bar{A} = AB - BA, \end{aligned}$$

так что предыдущее уравнение дает

$$\overline{(\delta A)^2} \cdot \overline{(\delta B)^2} \geq -\frac{1}{4} \overline{(AB - BA)^2}.$$

Если  $p$  и  $q$  есть сопряженные операторы (импульс и координата), то

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i},$$

и, следовательно,

$$\overline{(\delta p)^2} \overline{(\delta q)^2} \geq \frac{h^2}{16\pi^2}.$$

Для средних квадратичных отклонений

$$\Delta p = \sqrt{\overline{(\delta p)^2}}, \quad \Delta q = \sqrt{\overline{(\delta q)^2}}.$$

Мы имеем поэтому

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{h}{4\pi}.$$

Знак равенства достигается только для одного определенного распределения (собственной функции), а именно для гауссовой функции ошибок; это распределение реализуется в случае линейного осциллятора (см. приложение 12, приложение 16 и приложение 39).

## 27. Вероятности перехода

В квантовой механике замкнутая система обладает определенными стационарными состояниями, в которых она остается бесконечно долгое время. Физический процесс перехода из одного такого состояния в другое может быть вызван только взаимодействием системы с некоторой другой системой; даже возможность наблюдения системы зависит от подобного взаимодействия (скажем, с электромагнитным полем, переносящим световые волны или фотоны к наблюдателю). Взаимодействие должно быть слабым, с тем чтобы мы могли описать эффект связи между двумя системами как малое возмущение, выражаемое через величины, относящиеся к невозмущенным системам. Рассмотрим такое возмущение-взаимодействие, опираясь на уравнение Шредингера. Обозначим невозмущенный гамильтониан несвязанных систем через  $H^0$  (обычно сумма двух или более гамильтонианов, каждый из которых соответствует одной системе), а энергию взаимодействия — через  $H'$ .

Пусть  $E_n$  и  $\psi_n(q)$  — энергия и нормированные собственные функции невозмущенной системы; тогда

$$H^0 \psi_n = E_n \psi_n.$$

Зависящее от времени уравнение Шредингера для возмущенной (взаимодействующей) системы имеет вид (гл. V, § 4)

$$\left( H^0 + H' + \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi = 0;$$

мы предполагаем выразить его решение через невозмущенные функции  $\psi_n$ . С этой целью пользуемся методом варьирования постоянной, разлагая функцию  $\psi$  в ряд вида

$$\psi(q, t) = \sum_n a_n(t) e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} E_n t} \psi_n(q)$$

и пытаемся так определить коэффициенты  $a_n(t)$ , чтобы суперпозиция функций  $\psi_n$  удовлетворяла уравнению Шредингера для  $\psi$ .

Непосредственно видно, что действие операторов  $H^0$  и  $(\hbar/2\pi i)(\partial/\partial t)$  на произведение  $\psi_n(q) \exp[(2\pi i/\hbar)E_n t]$  дает одинаковые по величине и противоположные по знаку результаты; следовательно, наше уравнение сведется к уравнению

$$\sum_n e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} E_n t} \left( a_n H' \psi_n + \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{da_n}{dt} \psi_n \right) = 0.$$

Если умножить это уравнение на сопряженную функцию  $\psi_m^*$  и проинтегрировать по  $q$ , мы получим в силу условия ортогональности

$$\sum_n e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} E_n t} H_{mn} a_n + \frac{\hbar}{2\pi i} e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} E_m t} \frac{da_m}{dt} = 0,$$

где

$$H_{mn} = \int \psi_m^* H' \psi_n dq$$

является матричным элементом оператора  $H'$  (приложение 25). Умножив это на  $\exp[(2\pi i/\hbar)E_m t]$  и введя частоты перехода

$$\nu_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar},$$

мы получим

$$\sum_n e^{-2\pi i \nu_{mn} t} H'_{mn} a_n + \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{da_m}{dt} = 0,$$

т. е. систему линейных дифференциальных уравнений для  $a_n(t)$  с известными зависящими от времени коэффициентами.

Предположим теперь, что первоначально система находилась в невозмущенном состоянии  $E_k$ ,  $\psi_k$ , так что при  $t=0$  выражение для  $\psi(q, t)$  должно сводиться к  $\psi_k(q)$ . Следовательно, должны равняться нулю все  $a_n(0)$ , за исключением  $a_k(0)$ , равного единице, иначе говоря,

$$a_n(0) = \delta_{nk} = \begin{cases} 1 & \text{для } n = k, \\ 0 & \text{для } n \neq k. \end{cases}$$

Так как мы полагаем  $H'$  малым возмущением, приближенное решение можно получить, подставив в сумму в дифференциальном уравнении эти начальные величины; тогда мы приходим к уравнению

$$\frac{da_m}{dt} = -\frac{2\pi i}{\hbar} H'_{mk} e^{-2\pi i \nu_{mk} t},$$

которое уже можно непосредственно проинтегрировать с соблюдением начальных условий

$$a_m = \frac{2\pi i}{h} H'_{mk} \frac{1 - e^{2\pi i \nu_{mk} t}}{2\pi i \nu_{mk}}$$

Согласно приложению 25, квадрат модуля этого выражения равен вероятности найти систему в  $m$ -м невозмущенном состоянии в момент  $t$ , если известно, что она находилась в состоянии  $k$  при  $t=0$ ; это и есть вероятность перехода  $P_{mk}(t)$ :

$$P_{mk}(t) = \left(\frac{2\pi}{h}\right)^2 |H'_{mk}|^2 \left(\frac{\sin \pi \nu_{mk} t}{\pi \nu_{mk}}\right)^2.$$

Она симметрична по двум состояниям  $m, k$ , так как  $H'$  — вещественный оператор,  $H'^+ = H'$ , а поэтому  $|H'_{mk}|^2 = H'_{mk} H'_{mk} = H_{mk} H_{km}$ . Эта вероятность периодически меняется со временем, поэтому такие переходы вряд ли можно наблюдать у атомных систем (высокие частоты).

Однако положение вещей совершенно меняется, если уровни энергии невозмущенной системы расположены настолько тесно, что их можно считать распределенными непрерывно. В качестве примера рассмотрим случай, когда система с дискретными уровнями энергии связана с другой, энергия которой непрерывна; в частности, рассмотрим переход из состояния  $k$ , в котором только первая система возбуждена, а вторая нет, в состояние  $m$ , в котором первая система обладает меньшей энергией,  $E_m < E_k$ , но некоторая энергия  $E$  передана второй системе. Тогда  $\nu_{mk}$  нужно заменить на  $\nu_{mk} + \nu = \nu - \nu_{km}$ , где  $\nu = E/h$  и  $\nu_{km} > 0$ .

Теперь матричный элемент  $H'$  зависит не только от состояний  $m$  и  $k$ , но и от энергии  $E$ , переданной в непрерывную область, или от  $\nu = E/h$ ; соответственно следует писать  $H'_{mk}(\nu)$ .

Если подставить все это в  $P_{mk}(t)$  и умножить на функцию плотности конечных состояний  $\rho(\nu)$ , мы получим полную вероятность переходов во все нижние состояния как интеграл по  $dE = h d\nu$ :

$$P_{mk}(t) = \frac{4\pi^2}{h^2} \int_0^{\infty} |H'_{mk}(\nu)|^2 \left(\frac{\sin \pi (\nu - \nu_{km}) t}{\pi (\nu - \nu_{km})}\right)^2 \rho(\nu) d\nu.$$

Теперь можно положить  $t$  большим по сравнению со всеми атомными периодами  $(\nu - \nu_{km})^{-1}$  и найти предел  $P_{mk}(t)$  при  $t \rightarrow \infty$ , используя известную формулу

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_a^b f(x) \left(\frac{\sin \pi x t}{\pi x}\right)^2 dx = f(0),$$

справедливую, если интеграл  $(a, b)$  включает начало координат  $x=0$ . Подставив  $v - v_{km} = x$ , мы получим *вероятность перехода в единицу времени*:

$$P_{mk} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} P_{mk}(t) = \\ = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{4\pi^2}{\hbar t} \int_{-v_{km}}^{\infty} |H'_{mk}(x + v_{km})|^2 \rho(x + v_{km}) \left(\frac{\sin \pi x t}{\pi x}\right)^2 dx,$$

и так как  $v_{km} > 0$ , то

$$P_{mk} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |H'_{mk}(v_{km})|^2 \rho(v_{km}).$$

Если теперь определить  $\rho(E)$  таким образом, что

$$\rho(E) dE = \rho(v) h dv = \rho(v) dv,$$

откуда

$$\rho(E) = \frac{1}{h} \rho(v),$$

то мы получим

$$P_{mk} = \frac{4\pi^2}{\hbar} |H'_{mk}|^2 \rho(E).$$

Это и есть формула, приведенная в тексте (гл. V, § 7). Она показывает, что при принятых предположениях вероятность перехода в единицу времени определяется величинами матричного элемента возмущения и плотности, взятой для частот переходов системы с непрерывным спектром.

Применение этого вывода к случаю излучения атомом мы рассмотрим в приложении 28.

## 28. Квантовая теория излучения

Метод, который мы здесь применим к проблеме излучения атомной системой, фактически отличается большой общностью. Он может быть применен не только к другим случаям взаимодействия между атомами и электромагнитным полем (поглощение, рассеяние), но и к любому взаимодействию частиц с полем, например нуклона с мезонным полем Юкавы. Метод состоит в разложении поля на нормальные колебания, которые для достаточно больших объемов представляют собой практически плоские волны. Можно показать, что амплитуды этих волн ведут себя подобно гармоническим осцилляторам и поддаются квантовомеханической трактовке. Тогда взаимодействие атома с таким набором осцилляторов, представляющим поле, может

быть описано с помощью квантовомеханических вероятностей переходов.

Сначала мы рассмотрим свободное излучение в отсутствие атомной системы. Точный математический анализ электромагнитных колебаний, происходящих в очень большом объеме, показывает, что на больших расстояниях от границы решение практически не зависит от формы граничной поверхности и может быть приближенно представлено в виде суперпозиции плоских стоячих волн. Выпишем явно одну из них, именно ту, у которой вектор-потенциал  $A$  колеблется в  $x$ -направлении, тогда как сама волна распространяется в направлении оси  $z$ :

$$A_x = q(t) \sqrt{2} \cos(kz + \delta), \quad A_y = 0, \quad A_z = 0, \quad kc = \omega = 2\pi\nu.$$

Пространственная нормировка выбрана здесь так, что интеграл от квадрата  $A_x$  по единичному объему равен единице

$$\int_{(1)} 2 \cos^2(kz + \delta) dV = 1,$$

а фаза  $\delta$  зависит от совершенно случайного расположения начала координат относительно удаленной поверхности. Величина  $q(t)$  удовлетворяет уравнению

$$\ddot{q} + \omega^2 q = 0,$$

поэтому ее можно рассматривать как амплитуду осциллятора частоты  $\nu = \omega/2\pi$ .

Напряженности электрического и магнитного полей находятся из уравнений

$$E = -\frac{1}{c} \dot{A}, \quad H = \text{rot } A,$$

причем единственные исчезающие компоненты их суть

$$E_x = -\frac{1}{c} \sqrt{2} \dot{q} \cos(kz + \delta)$$

и

$$H_y = k \sqrt{2} q \sin(kz + \delta).$$

Полную электромагнитную энергию в объеме  $V$  можно без труда выразить через  $q$  и  $\dot{q}$ , именно

$$U = \frac{1}{8\pi} \int (E_x^2 + H_y^2) dV = \frac{V}{4\pi c^2} \frac{1}{2} (\dot{q}^2 + \omega^2 q^2).$$

Это совпадает с энергией гармонического осциллятора, частота которого  $\nu = \omega/2\pi$  и масса

$$m = \frac{V}{4\pi c^2}.$$

Теперь к осциллятору можно применить квантовомеханические методы; он обладает рядом стационарных состояний  $n=0, 1, 2, \dots$  с энергиями  $h\nu(n + 1/2)$ . Очевидно, что  $n$  можно интерпретировать как число фотонов  $h\nu$ , связанных с волной; но даже состояние без фотонов,  $n=0$ , соответствует волне с неисчезающей нулевой энергией  $h\nu/2$ .

Если мы рассмотрим теперь подобные волны с различными частотами и распространяющиеся в различных направлениях, то окажется, что они не интерферируют (нет перекрестных членов в интеграле энергии) и что их энергии просто складываются (благодаря нормировке пространственной части волновой функции). Следовательно, электромагнитное поле динамически соответствует смеси независимых фотонов, летящих со скоростью света.

Рассмотрим теперь расположенную в начале координат атомную систему, взаимодействующую с электромагнитным полем. Пусть скорость одного электрона равна  $v$  (если имеется несколько электронов, то следует просто просуммировать по всем электронам), и предположим, что линейные размеры атомной системы пренебрежимо малы по сравнению с длиной волны  $\lambda = 2\pi/k$ . Тогда энергия взаимодействия будет равна (приложение 24)

$$H = -\frac{e}{c} v \cdot A(0) = -\frac{e}{c} v_x A_x(0) = -\frac{e}{c} v_x q \sqrt{2} \cos \delta.$$

Теперь применим теорию переходов, изложенную в приложении 27. Для этого мы должны образовать матричный элемент между начальным и конечным состояниями:

$$H'_{if} = -\frac{e}{c} \sqrt{2} (v_x q)_{if} \cos \delta = -\frac{e}{c} \sqrt{2} v_{ab} q_{nn'} \cos \delta,$$

где  $a$  и  $b$  означают два состояния атомной системы, а  $n$  и  $n'$  — два состояния осциллятора  $q$ , представляющего излучение. Далее,  $v_{ab} = x_{ab} = \omega_{ab} x_{ab}$ , где  $h\omega_{ab} = 2\pi(E_a - E_b)$ , а  $x_{ab}$  есть матричный элемент координаты электрона. Следовательно,

$$H'_{if} = -\frac{e}{c} \sqrt{2} \omega_{ab} x_{ab} q_{nn'} \cos \delta.$$

Применим это к случаю испускания излучения, предположив, что начальное состояние  $i$  атома есть возбужденное состояние  $a$ , причем фотоны отсутствуют (все  $n=0$ ), а конечное состояние  $f$  атома есть его основное состояние, причем присутствует несколько фотонов, или, что то же самое, один из осцилляторов, представляющих излучение, возбужден. Но так как матричные элементы  $q_{nn'}$  осциллятора всегда равны нулю, за исключением тех, у которых  $n' = n \pm 1$ , в нашем случае нужно рассмотреть



только матричный элемент  $q_{01}$ , соответствующий испусканию одного фотона. В приложении 15 мы нашли, что

$$|q_{01}|^2 = \frac{\hbar}{4\pi m \omega} = \frac{\hbar c^2}{V \omega},$$

где использовано полученное выше значение  $m$ .

Прежде чем подставить это в выражение для  $H'_{if}$ , вспомним, что для любого направления распространения имеются два перпендикулярных к нему направления поляризации; в нашем случае волна движется вдоль оси  $z$ , так что должны происходить  $x$ - и  $y$ -колебания. Следовательно, мы получаем

$$|H'_{if}|^2 = \frac{2e^2}{c^3} \omega_{ab} (|x_{ab}|^2 + |y_{ab}|^2) \frac{\hbar c^2}{V} \cos^2 \delta.$$

Для вычисления вероятности перехода в единицу времени это выражение следует умножить на  $4\pi^2 \rho(\nu_{ab})/\hbar^2$ , где  $\rho(\nu)$  означает плотность колебаний в интервале частот.

Вероятность перехода в единицу времени теперь равна

$$P_{if} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |H'_{if}|^2 \rho = \frac{8\pi e^2}{\hbar c^3} \omega_{ab}^3 (|x_{ab}|^2 + |y_{ab}|^2) \cos^2 \delta.$$

Так как положение атома (начало координат) произвольно, мы должны провести усреднение по всем фазам  $\delta$ ; тогда множитель  $\cos^2 \delta$  становится равным  $1/2$ . Далее, мы должны усреднить по всем ориентациям атома и, следовательно, заменить  $|x_{ab}|^2 + |y_{ab}|^2$  на  $2/3 |r_{ab}|^2$ , где  $r$  есть радиус-вектор электрона. После этого интенсивность излучения, испускаемого в секунду, можно получить; умножив найденное выражение на  $\hbar \nu_{ab} = \hbar \omega_{ab}/2\pi$ :

$$I = \frac{4}{3} \frac{e^2}{c^3} \omega_{ab}^4 |r_{ab}|^2.$$

что совпадает с формулой, выведенной из соображений, опирающихся на принцип соответствия (гл. V, § 7).

Если предположить, что в начальном состоянии присутствует излучение, содержащее  $n$  фотонов определенного сорта (направления, частоты), то выражение для  $H'_{if}$  будет иным: оно будет содержать матричный элемент  $q_{n, n+1}$ . Но формулы приложения 15 указывают, что

$$|q_{n, n+1}|^2 = (n+1) |q_{01}|^2,$$

следовательно, первоначальное выражение для  $H'_{if}$  оказывается умноженным на  $n+1$ , или, другими словами, кроме спонтанного излучения, вычисленного выше, имеется вынужденное излучение, пропорциональное  $n$ , т. е. интенсивности присутствующего (вынуждающего) излучения.

Случай поглощения можно получить, рассмотрев начальное состояние  $i$ , в котором атом находится на низшем энергетическом уровне  $b$  и присутствуют  $n$  квантов, и конечное состояние  $f$ , в котором атом находится на более высоком уровне  $a$ , но присутствуют только  $n-1$  квантов. Соответственно нужно рассмотреть матричный элемент  $q_{n, n-1} = q_{n-1, n}^*$  и мы получим

$$|q_{n, n-1}|^2 = n |q_{01}|^2.$$

Подстановка этого выражения в вероятность перехода вместо  $|q_{01}|^2$  сразу дает коэффициент поглощения. Мы не будем приводить его точное выражение, но рассмотрим случай *теплового равновесия* между излучением и атомами, когда в среднем происходит одинаковое число актов испускания и актов поглощения. Пусть  $g = \rho d\nu$  — число волн в малом интервале частот  $d\nu$ , а  $\bar{n} = \Sigma n$  — полное число фотонов в  $d\nu$ ; тогда, согласно только что полученным результатам, отношение полных чисел актов испускания и актов поглощения в интервале  $d\nu$  равно  $(\bar{n} + g) : \bar{n}$ . Если  $N_a$  и  $N_b$  — число атомов в состояниях  $a$  и  $b$  соответственно, то условие статистического равновесия имеет, очевидно, вид

$$N_a (\bar{n} + g) = N_b \bar{n},$$

откуда

$$\bar{n} = \frac{g}{\frac{N_a}{N_b} - 1}.$$

Используем теперь основной закон статистической механики, называемый теоремой Больцмана (гл. I, § 6), устанавливающий, что в статистическом равновесии

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{e^{-E_a/kT}}{e^{-E_b/kT}} = e^{-h\nu_{ab}/kT},$$

где  $T$  означает абсолютную температуру, а  $k$  есть постоянная Больцмана. Отсюда видно, что среднее число  $\bar{n}$  световых квантов данной частоты  $\nu$ , которые могут быть испущены или поглощены атомами при температуре  $T$ , равно

$$\bar{n} = \frac{g}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Если предположить существование атомных систем со столь большим числом уровней энергии, что присутствуют практически все частоты  $\nu$ , то формула будет представлять усредненное распределение фотонов, находящихся в тепловом равновесии с веществом. Энергия излучения  $u_\nu d\nu$  в интервале частот

$dv$  получается, если умножить  $\bar{n}$  на  $h\nu$  и положить  $g = \rho(\nu) dv = 8\pi\nu^2 V d\nu / c^3$  (в соответствии с существованием двух поляризованных волн для каждого направления):

$$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Это — знаменитая формула Планка, выведенная в гл. VIII, § 1 другим методом, в котором не используются вероятности перехода между состояниями, выводящими из статистического равновесия, и который основан целиком на свойствах равновесного распределения.

Здесь необходимо сделать замечание исторического характера. Использованный нами метод фактически более стар, чем квантовая механика. При глубоком анализе смысла формулы Планка Эйнштейн (1917 г.) ввел понятие вероятностей перехода для спонтанного излучения, поглощения и вынужденного излучения и показал, что для получения правильного уравнения необходимо предположить, что эти вероятности находятся в отношениях  $g : \bar{n} : \bar{n}$  соответственно. Равенство коэффициентов для поглощения и вынужденного излучения означает, что под влиянием поля излучения атом с одинаковой вероятностью может претерпеть переходы  $b \rightarrow a$  и  $a \rightarrow b$ . Эта симметрия стала позднее одной из путеводных нитей, приведших к матричной механике (в которой она следует из симметрии выражения  $|r_{ab}|^2 = r_{ab} \cdot r_{ab}^* = r_{ab} \cdot r_{ba}$ ).

## 29. Электростатическая энергия ядер

Электростатическая собственная энергия ядра выражается хорошо известной формулой

$$E = \frac{1}{2} \int \rho \varphi dx dy dz,$$

где  $\rho$  — плотность заряда всех  $Z$  протонов, а  $\varphi$  — потенциал в точке внутри ядра, порождаемый всеми протонами, кроме одного.

Предположим, что ядро имеет форму шара радиусом  $R$ ; тогда мы имеем

$$\rho = Ze \frac{3}{4\pi R^3},$$

$$\varphi = (Z-1)e \frac{3}{2R} \left(1 - \frac{1}{3} \frac{r^2}{R^2}\right).$$

Следовательно,

$$E(Z) = \frac{9}{4} \frac{Z(Z-1)e^2}{R^4} \int_0^R \left(1 - \frac{1}{3} \frac{r^2}{R^2}\right) r^2 dr.$$

или

$$E(Z) = \frac{3}{5} Z(Z-1) \frac{e^2}{R}.$$

Разница в электростатической энергии между ядром  $(Z+1, A)$  и его „зеркальным ядром“  $(Z, A)$  равна поэтому

$$W = E(Z+1) - E(Z) = \frac{6}{5} Z \frac{e^2}{R}.$$

### 30. Теория $\alpha$ -распада

Пусть  $\alpha$ -частица испускается ядром с атомным номером  $Z$  и, следовательно, находится в поле остаточного ядра  $Z-2$ , имеющего потенциал  $V(r)$ . На больших расстояниях этот потенциал — кулоновский, т. е.

$$V(r) = \frac{2(Z-2)e^2}{r} \quad \text{для } r > r_0;$$

для  $r < r_0$  вид  $V(r)$  неизвестен, но конкретные предположения о нем и не нужны, за исключением того, что он должен быть кратерообразного типа, изображенного на фиг. 72, стр. 237.

Согласно Лауэ, выражение для частоты испускаемой волны  $\lambda$  можно разложить на два множителя. Мы представляем себе  $\alpha$ -частицу осциллирующей в кратере, так что она ударяется о стенку  $n$  раз в секунду. При каждом столкновении имеется определенная вероятность  $p$  того, что  $\alpha$ -частица пройдет сквозь потенциальную стенку. Поэтому

$$\lambda = np.$$

По порядку величины число  $n$  мы можем принять равным  $v/2r_0$ , где  $v$  — скорость  $\alpha$ -частицы; последнюю в свою очередь можно определить, взяв длину связанной с частицей волны де-Бройля  $h/mv$  равной  $2r_0$ . Таким образом

$$n = \frac{h}{4mr_0^2}.$$

Для вычисления  $p$  мы должны найти подходящее решение уравнения Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\psi}{dr^2} + (E - V(r))\psi = 0.$$

При  $r < r_0$  функция  $\psi$  будет тем или иным образом осциллировать; в области, больших  $r$ , она будет расходящейся волной. Если энергия  $\alpha$ -частицы равна  $E$ , то это последнее со-

стояние может осуществиться примерно на расстоянии, где

$$E = \frac{2(Z-2)e^2}{r_1}, \quad r_1 = \frac{2(Z-2)e^2}{E}.$$

В промежуточной зоне от  $r_0$  до  $r_1$   $\psi$  будет спадать по экспоненте. Ясно, что таким образом мы приближенно получим

$$p = \left| \frac{\psi(r_1)}{\psi(r_0)} \right|^2.$$

Но в этой промежуточной зоне потенциал остается кулоновским; поэтому решать следует уравнение (ср. гл. VI, § 5)

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \psi'' + \left( E - \frac{2(Z-2)e^2}{r} \right) \psi = 0.$$

Так как  $Z$  велико, к искомому результату приводит следующий приближенный метод. Положим  $\psi = \exp[(2\pi/\hbar)y(r)]$ ; тогда получится уравнение

$$\frac{\hbar}{2\pi} y'' + y'^2 - F(r) = 0,$$

где

$$F(r) = 2m \left( -E + \frac{2(Z-2)e^2}{r} \right).$$

Пренебрегая членом с множителем  $\hbar$ , мы приходим к уравнению

$$y' = \sqrt{F(r)}, \quad y = \int_a^r \sqrt{F(r)} dr,$$

откуда

$$\frac{\psi_1}{\psi_0} = e^{(2\pi/\hbar)[y(r_1) - y(r_0)]} = e^{(2\pi/\hbar) \int_{r_1}^{r_0} \sqrt{F(r)} dr}$$

Подставив сюда выражение для  $F(r)$ , выполним интегрирование и найдем

$$p = e^{-\frac{(2n_0 - \sin 2n_0) 8\pi e^2}{\hbar} \frac{Z-2}{v}},$$

где  $n_0$  определяется из уравнения

$$\cos^2 n_0 = \frac{r_0 E}{2(Z-2)e^2}.$$

Если разложить экспоненту по степеням правой части этого уравнения (благодаря ее малости в случае небольших энергий  $\alpha$ -частицы и высоких потенциальных барьеров), мы полу-

чаем окончательное приближение

$$p = e^{-8\pi^2 e^2 \frac{Z-2}{hv} + \left(16\pi e \frac{V\pi}{h}\right) \sqrt{(Z-2)r_0}}$$

Следовательно, постоянная распада  $\lambda$  дается выражением

$$\ln \lambda = \ln \frac{h}{4\pi r_0^2} - \frac{8\pi^2 e^2 (Z-2)}{hv} + \frac{16\pi e}{h} \sqrt{m(Z-2)r_0}$$

или численно

$$\ln \lambda = 20,46 - 1,191 \cdot 10^9 \frac{Z-2}{v} + 4,084 \cdot 10^6 \sqrt{(Z-2)r_0}$$

здесь  $\lambda$  измеряется в  $\text{сек}^{-1}$  и связана с периодом полураспада уравнением

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0,6931}{\lambda}$$

Полученный таким образом закон отличается от эмпирической формулы Гейгера и Нуттала тем, что дает линейную зависимость  $\lg \lambda$  от  $1/v$ , кроме зависимости от  $Z$  и  $r_0$ ; однако ввиду того что область изменения  $v$  ограничена сравнительно узкими пределами (от  $v=1,4 \cdot 10^9$  см/сек до  $v=2,0 \cdot 10^9$  см/сек), а изменения  $Z$  и  $r_0$  пренебрежимо малы для элементов радиоактивных рядов, различие в формулах слабое. Из-за большого множителя при втором члене, который и содержит зависимость от  $v$ , диапазон изменения постоянных распада чрезвычайно широк.

## 31. Основное состояние дейтрона

### а. Центральные силы

Волновое уравнение для относительного движения двух нуклонов в дейтроне имеет вид

$$\nabla^2 \psi + \frac{4\pi^2}{h^2} M [E - V(r)] \psi = 0,$$

где  $V(r)$  — центральный потенциал,  $M$  — средняя масса нуклонов, а  $W = -E$  — энергия связи. Как и в тексте, предполагается, что зависимость  $V(r)$  от  $r$  имеет вид прямоугольной ямы

$$V(r) = -V_0 \quad \text{при } r < a,$$

$$V(r) = 0 \quad \text{при } r > a.$$

Ширина ямы  $a$  выбирается порядка  $e^2/mc^2$  на основании экспериментальных данных по рассеянию нуклонов. Так как потенциал  $V(r)$  сферически симметричен, то основным состоянием будет  $S$ -состояние. После подстановки в них  $\psi(r) = u(r)/r$

волновые уравнения в двух областях изменения  $r$  примут вид

$$\frac{d^2}{dr^2} u_1 + \frac{4\pi^2 M}{h^2} (V_0 - W) u_1 = 0 \quad \text{для } r < a;$$

$$\frac{d^2}{dr^2} u_2 - \frac{4\pi^2 M}{h^2} W u_2 = 0 \quad \text{для } r > a.$$

В качестве граничных условий для  $u_1$ ,  $u_2$  выступают требования

$$u_1 \rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow 0,$$

$$\frac{u_2}{r} \rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty$$

вместе с условиями непрерывности, которые должны удовлетворяться при  $r = a$ . Решениями будут функции

$$u_1 = A \sin kr,$$

$$u_2 = B e^{-\alpha r},$$

где

$$k = \frac{2\pi}{h} \sqrt{M(V_0 - W)},$$

$$\alpha = \frac{2\pi}{h} \sqrt{MW},$$

а  $A$  и  $B$  — произвольные постоянные. Используя условия непрерывности

$$\left( \frac{1}{u_1} \frac{du_1}{dr} \right)_{r=a} = \left( \frac{1}{u_2} \frac{du_2}{dr} \right)_{r=a},$$

можно получить простое соотношение между двумя параметрами  $V_0$  и  $a$ , именно

$$k \operatorname{ctg} ka = -\alpha.$$

Значение  $W$  известно из эксперимента и равно  $2,19 \text{ Мэв}$ . Подставляя значение  $a = e^2/mc^2$ , мы получаем

$$V_0 = 41 \text{ мс}^2 = 21 \text{ Мэв}.$$

Можно показать, что полученное выше соотношение  $k \operatorname{ctg} ka = -\alpha$  ведет к тому выводу, что не может существовать связанных возбужденных  $S$ -состояний. Величина

$$\operatorname{ctg} ka = -\frac{\alpha}{k} = -\left( \frac{W}{V_0 - W} \right)^{1/2}$$

представляет собой малое отрицательное число уже для основного состояния и будет еще меньше для возбужденных состояний, если они существуют. Аргумент  $ka$  должен немного превышать  $\pi/2$  (основное состояние), или немного превышать  $3\pi/2$

и т. д. (возбужденные состояния). Далее, из определения  $k$  имеем

$$W = V_0 - \frac{\hbar^2}{(2\pi a)^2} \frac{(ak)^2}{M} = 21 - 5,2(ak)^2,$$

где энергия выражена в миллионах электрон-вольт. По-видимому, не существует допустимых значений  $(ak)^2$ , соответствующих возбужденным состояниям, так как для связанных состояний  $W$  должна быть положительной.

### б. Нецентральные силы

Соображения, говорящие в пользу наличия нецентральных сил, были приведены в тексте. Здесь мы обсудим определенную модель, именно модель, в которой каждый из двух нуклонов обладает вектором спина соответственно  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ , а короткодействующая ядерная сила, более пока не конкретизируемая, направлена вдоль оси спина. Известно (например, из элементарной теории магнетизма), что потенциал взаимодействия имеет тогда вид

$$V_{12} = -S_{12}J(r),$$

где

$$S_{12} = \frac{1}{r^2} (\sigma_1 \cdot r)(\sigma_2 \cdot r) - \frac{1}{3} (\sigma_1 \cdot \sigma_2),$$

а  $J(r)$  — функция, точный вид которой неизвестен, за исключением того, что радиус действия ее мал. (В случае магнетизма она была бы пропорциональной  $1/r^3$ .)

Так как  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  — операторы, представляемые  $2 \times 2$ -матрицами Паули (гл VI, § 8), волновая функция должна иметь несколько компонент (четыре), а волновое уравнение фактически представляет собой систему связанных уравнений, как это объяснялось в гл. VI, § 8 для случая одного электрона.

И без вычисления можно увидеть, что  $V_{12}$  даст качественно правильные результаты. Из рассмотрения момента известно, что в основном состоянии дейтрона  $\sigma_1 \parallel \sigma_2$ . При заданном  $r$  потенциал  $V_{12}$  имеет минимум, равный  $-2/3 J(r)$  (притяжение), когда  $r$  параллелен направлению спина, и максимум, равный  $1/3 J(r)$  (отталкивание), когда  $r$  перпендикулярен направлению спина. Это нецентральное взаимодействие будет вместе с центральным стремиться сделать дейтрон сигарообразным с осью, параллельной полному спину, что как раз и требуется экспериментом, так как при таких условиях орбитальное движение даст вклад правильного знака в добавочный магнитный момент и в квадрупольный момент.

С введением нецентральных сил основное состояние дейтрона не является более  $S$ -состоянием, но представляет собой смесь



состояний с различными орбитальными моментами. Ввиду того что полный момент квантован и найденная на опыте величина его равна 1 (в единицах  $\hbar/2\pi$ ), а полный спин также равен 1, то орбитальный момент может равняться только 0 и 2, как следует из правила сложения моментов  $\mathbf{J} = \mathbf{S} + \mathbf{I}$ . Мы не будем входить в дальнейшие детали решения волнового уравнения и ограничимся замечанием, что все упомянутые физические свойства основного состояния дейтрона можно успешно объяснить, выбрав подходящую пропорцию центрального и нецентрального взаимодействий.

### 32. Мезонная теория

Текст этого приложения не включен в настоящее издание по причинам, изложенным выше — см. редакторское примечание 1 к стр. 63. — *Ред.*

### 33. Закон Стефана — Больцмана и закон смещения Вина

Термодинамический вывод закона Стефана — Больцмана основан на существовании давления излучения. Представим себе объем, запертый подвижным поршнем с отражающей поверхностью. Поле излучения оказывает на поршень давление; его величина зависит только от  $u$  — плотности энергии излучения в объеме. В самом деле, и теория Максвелла, и квантовая (корпускулярная) теория света дают формулу

$$p = \frac{1}{3} u.$$

Давление излучения обусловлено импульсом, который несет с собой излучение. В случае квантовой теории это ясно, так как в ней каждый световой квант с энергией  $h\nu$  обладает импульсом  $h\nu/c$ . Теория Максвелла также приписывает каждому полю излучения с плотностью энергии  $u$  «плотность импульса»  $|g| = u/c = (1/c^2)|S|$ , где  $S$  — вектор Пойнтинга; это утверждение можно доказать, представив себе, например, что плоская световая волна падает на металл, где и поглощается, и вычислив из уравнений Максвелла силу, действующую на металл. Таким образом, в обеих теориях импульс, содержащийся в определенном объеме поля излучения, равен заключенной в этом объеме энергии излучения, деленной на  $c$ . В остальном давление излучения вычисляется точно так же, как механическое давление в кинетической теории газов. Из телесного угла  $d\omega$  за отрезок времени  $dt$  на один квадратный сантиметр стенки падает энергия излучения, равная  $(uc/4\pi) dt d\omega \cos\theta$ ; отразившись от стенки, излучение передает ей импульс, равный удвоенной компо-

ненте своего импульса, перпендикулярной стенке, т. е. импульс  $2(u/c)(cdt/4\pi)d\omega \cos^2\theta$ . Проинтегрировав это выражение по  $\theta$  и  $\varphi$  (где  $d\omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ , угол  $\theta$  меняется от 0 до  $\pi/2$ , а угол  $\varphi$  — от 0 до  $2\pi$ ), мы получим давление  $p = 1/3u$  или, что то же самое, импульс, переданный за единицу времени стенке в результате отражения излучения.

Рассмотрим теперь излучение как тепловую машину и применим к ней основное уравнение термодинамики, включающее и первый, и второй ее законы. Если  $W$  — полная энергия,  $S$  — энтропия,  $T$  — абсолютная температура, а  $V$  — объем, то, как мы знаем,

$$T dS = dW + p dV.$$

Но  $W = Vu$ , где плотность энергии  $u$  зависит только от  $T$ ; поэтому

$$T dS = u dV + V \frac{du}{dT} dT + \frac{1}{3} u dV = V \frac{du}{dT} dT + \frac{4}{3} u dV.$$

Отсюда мы можем заключить, что

$$\frac{\partial S}{\partial V} = \frac{4}{3} \frac{u}{T}, \quad \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{V}{T} \frac{du}{dT},$$

так что

$$\frac{\partial}{\partial V} \left( \frac{V}{T} \frac{du}{dT} \right) = \frac{\partial^2 S}{\partial T \partial V} = \frac{4}{3} \frac{d(u/T)}{dT},$$

или

$$\frac{1}{T} \frac{du}{dT} = \frac{4}{3} \left( \frac{1}{T} \frac{du}{dT} - \frac{u}{T^2} \right).$$

Следовательно,

$$\frac{du}{dT} = 4 \frac{u}{T}, \quad \text{или} \quad u = aT^4,$$

что и представляет собой закон Стефана — Больцмана. Легко проверить также, что для энтропии  $S$  справедливо равенство  $\tilde{S} = \frac{4}{3} VT^3$ .

Закон смещения Вина вытекает из существования эффекта Допплера. Как известно, покоящемуся наблюдателю представляется, что частота волнового движения, источник которого движется, изменена. Фактическую роль при этом играет только компонента скорости в направлении наблюдения, и мы имеем формулу

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{v}{c} \cos\theta,$$

где  $\nu$  означает частоту,  $\Delta\nu$  — изменение частоты,  $v$  — скорость источника, а  $\theta$  — угол между направлением движения источника и линией наблюдения.

Итак, если зеркало, от которого отражается волна частоты  $\nu$ , движется со скоростью  $v$  в направлении распространения света, то мы можем полагать, что падающая волна приходит от покоящегося источника света. Тогда отраженная волна должна вести себя так, как если бы она приходила от зеркального изображения этого воображаемого источника света. Однако благодаря движению зеркала такое изображение движется со скоростью  $2v$  в направлении нормали к зеркалу. Следовательно, изменение частоты, обусловленное отражением в движущемся зеркале, равно  $-(2v/c)\nu$ , а для наклонного падения под углом  $\theta$  мы имеем

$$\nu' = \nu \left( 1 - \frac{2v}{c} \cos \theta \right).$$

Далее легко видеть, что при отражении волнового пакета, падающего на движущееся зеркало, в том же отношении меняется интенсивность излучения; энергия излучения, падающего на поверхность  $A$  всего зеркала за время  $dt$ , равна  $IAdt$ , а энергия отраженного равна  $I'Adt$ . Разность должна равняться работе, проделанной давлением излучения  $P$  при движении зеркала, т. е.  $PAvdt$ ; но, как показано выше,  $P = (2I/c) \cos \theta$ . Таким образом, мы получаем

$$I' = I \left( 1 - \frac{2v}{c} \cos \theta \right).$$

Теперь мы применим термодинамику не ко всему излучению, а к определенному узкому интервалу длин волн. Здесь следует отметить, что всякий раз, когда совершается связанная с перемещением отражающего поршня работа, излучение будет смещаться в другую область частот согласно формуле Допплера. Это смещение никоим образом не исчезает, когда движение зеркала становится бесконечно медленным. Чтобы убедиться в этом, вообразим себе замкнутый объем, полностью окруженный отражающими стенками, так что отдельный пучок лучей будет двигаться в этом объеме зигзагообразно, все время встречая стенки. Если скорость поршня уменьшится вдвое, то удвоится число отражений от него за время, соответствующее данному полному перемещению поршня, так что полное доплеровское смещение стремится к конечному пределу при  $v \rightarrow 0$ .

Вычислим теперь  $\sum \nu u_\nu d\nu$  — полное изменение энергии равновесного излучения в интервале частот  $(\nu, \nu + d\nu)$  за время  $dt$ , возникающее при отражении от зеркала, движущегося со скоростью  $v$ . Прежде всего все принадлежавшие этой области спектра компоненты излучения, падающего на зеркало, удаляются из рассматриваемой области благодаря эффекту Допплера. С другой стороны, все компоненты излучения, принадле-

жавшие перед отражением к интервалу  $(\nu', \nu' + d\nu')$ , попадут теперь в рассматриваемую область, если  $\nu' = \nu[1 + (2\nu/c) \cos \theta]$ . Количество энергии из интервала частот  $(\nu, \nu + d\nu)$ , падающее за секунду из телесного угла  $d\omega$  на поверхность зеркала  $A$ , равно

$$\Delta E = u_\nu \frac{c}{4\pi} A \cos \theta dt d\omega d\nu.$$

Энергию, попавшую при отражении в интервал частот  $(\nu, d\nu)$ , мы получаем после: 1) умножения на множитель  $[1 - (2\nu/c) \cos \theta]$ , 2) замены  $d\nu$  на  $d\nu' = d\nu[1 + (2\nu/c) \cos \theta]$  и 3) разложения в ряд

$$u_{\nu'} = u_\nu(1 + 2\nu/c \cos \theta) = u_\nu + \nu \frac{\partial u_\nu}{\partial \nu} 2 \frac{\nu}{c} \cos \theta + \dots$$

Однако произведение первых двух множителей отличается от  $d\nu$  только членом второго порядка по  $\nu/c$ , которым можно пренебречь. Таким образом, для энергии, попавшей при отражении в интервал  $(\nu, d\nu)$ , мы получим

$$\left(u_\nu + \nu \frac{\partial u_\nu}{\partial \nu} 2 \frac{\nu}{c} \cos \theta\right) \frac{c}{4\pi} A \cos \theta dt d\omega d\nu,$$

и, следовательно, приращение энергии пучка в результате отражения равно

$$\nu \frac{\partial u_\nu}{\partial \nu} \frac{1}{2\pi} dV d\nu \cos^2 \theta d\omega,$$

поскольку  $A\nu dt = dV$ . Проинтегрировав по полусфере, а для нее

$$\int \cos^2 \theta d\omega = \frac{2\pi}{3},$$

мы получим полное приращение энергии, обусловленное отражением,  $d(u_\nu V) d\nu$ . Таким образом,

$$d(u_\nu V) = \frac{1}{3} \nu \frac{\partial u_\nu}{\partial \nu} dV.$$

Это — дифференциальное уравнение для  $u_\nu$  как функции  $\nu$  и  $V$ :

$$\frac{\partial (Vu_\nu)}{\partial V} = \frac{1}{3} \frac{\partial u_\nu}{\partial \nu} \nu \quad \text{или} \quad V \frac{\partial u_\nu}{\partial V} = \frac{1}{3} \nu \frac{\partial u_\nu}{\partial \nu} - u_\nu.$$

Легко видеть, что этому уравнению удовлетворяет выражение

$$u_\nu = \nu^3 \varphi(\nu^3 V),$$

где  $\varphi$  — произвольная функция.

Сделаем теперь еще один шаг. Вообразим, что изменение объема происходит адиабатически, т. е. без обмена теплом. Это означает, что во время сжатия остается постоянной энтропия равновесного излучения. Но выше, при выводе закона Стефана — Больцмана, мы видели, что эта энтропия пропорциональна произведению объема  $V$  на куб температуры, так что постоянство энтропии предполагает, что

$$VT^3 = \text{const.}$$

Если с помощью этого соотношения заменить  $V$  через температуру, так чтобы закон излучения стал независимым от размера и формы объема, то мы получим

$$u_\nu = \nu^3 F\left(\frac{\nu}{T}\right),$$

т. е. закон смещения Вина, как он был приведен в тексте.

#### 34. Поглощение осциллятором

Приведем доказательство формулы

$$\delta W = \frac{1}{3} \frac{\pi e^2}{m} u_\nu,$$

использованной в тексте для вычисления работы, совершаемой полем излучения за секунду над осциллятором. Мы задаем поле излучения, устанавливая связь между электрической напряженностью  $E$  и временем. Ради сходимости интегралов предположим, что поле излучения существует только с момента  $t=0$  до момента  $t=T$ ; впоследствии легко будет перейти к предельному случаю  $T \rightarrow \infty$ . Выразим теперь одну из компонент, например  $E_x$ , через ее спектр (разложим ее в интеграл Фурье):

$$E_x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\nu) e^{2\pi i \nu t} d\nu,$$

где амплитуды  $f(\nu)$  определяются соотношением

$$f(\nu) = \int_0^T E_x(t) e^{-2\pi i \nu t} dt,$$

причем  $E_x(t)$  равна нулю вне интервала  $(0, T)$ ; поскольку  $E_x$  вещественна, комплексно сопряженная величина удовлетворяет уравнению

$$f^*(\nu) = f(-\nu).$$

Аналогичные соотношения справедливы и для двух других компонент. Согласно законам электродинамики, полная плотность энергии поля излучения тогда равна

$$u = \frac{1}{8\pi} (\overline{E^2} + \overline{H^2}) = \frac{1}{4\pi} \overline{E^2} = \frac{3}{4\pi} \overline{E_x^2},$$

причем последнее из равенств следует из соображений симметрии. Черта над символом означает усреднение по времени. Далее,

$$\overline{E_x^2} = \frac{1}{T} \int_0^T E_x^2 dt = \frac{1}{T} \int_0^T E_x dt \int_{-\infty}^{+\infty} f(\nu) e^{2\pi i \nu t} d\nu,$$

если заменить один множитель разложением Фурье. Если теперь изменить порядок интегрирования, то, поскольку значение нового интеграла по  $t$  равно  $f^*(\nu)$ , мы немедленно получим

$$\begin{aligned} \overline{E_x^2} &= \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\nu) d\nu \int_0^T E_x e^{2\pi i \nu t} dt = \\ &= \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\nu) f^*(\nu) d\nu = \frac{2}{T} \int_0^{\infty} |f(\nu)|^2 d\nu, \end{aligned}$$

ибо

$$|f(\nu)|^2 = f(\nu) f(-\nu) = |f(-\nu)|^2.$$

Таким образом, для полной плотности энергии излучения мы получаем выражение

$$u = \int_0^{\infty} u_\nu d\nu = \frac{3}{2\pi T} \int_0^{\infty} |f(\nu)|^2 d\nu,$$

а для спектрального распределения имеем поэтому

$$u_\nu = \frac{3}{2\pi T} |f(\nu)|^2.$$

Теперь после этих предварительных замечаний о поле излучения перейдем к уравнению, описывающему колебания линейного гармонического осциллятора. Если осциллятор может колебаться только в  $x$ -направлении, то его уравнение имеет вид

$$m\ddot{x} + ax = eE_x(t),$$

а собственная частота соответственно следует из соотношения  $m(2\pi\nu_0)^2 = a$ :

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{a}{m}}.$$

Как известно, самое общее решение неоднородного дифференциального уравнения получается добавлением какого-либо решения неоднородного уравнения к общему решению однородного уравнения. Последнее можно записать в виде

$$x(t) = x_0 \sin(2\pi\nu_0 t + \varphi),$$

где  $x_0$  и  $\varphi$  — две произвольные постоянные. Выражение

$$x(t) = \frac{e}{2\pi\nu_0 m} \int_0^t E_x(t') \sin 2\pi\nu_0(t - t') dt'$$

является решением неоднородного уравнения и удовлетворяет начальным условиям  $x(0) = 0$  и  $\dot{x}(0) = 0$ . То, что  $x(0) = 0$ , очевидно; для доказательства второго условия проведем дифференцирование:

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= \frac{e}{2\pi\nu_0 m} [E_x(t') \sin 2\pi\nu_0(t - t')]_{t=t'} + \\ &+ \frac{e}{m} \int_0^t E_x(t') \cos 2\pi\nu_0(t - t') dt'; \end{aligned}$$

здесь первый член обращается в нуль, и мы видим, что  $\dot{x}(0) = 0$ . Тогда

$$\begin{aligned} \ddot{x}(t) &= \frac{e}{m} [E_x(t') \cos 2\pi\nu_0(t' - t)]_{t=t'} - \\ &- \frac{2\pi\nu_0 e}{m} \int_0^t E_x(t') \sin 2\pi\nu_0(t - t') dt' = \\ &= \frac{e}{m} E_x(t) - \frac{a}{m} x(t), \end{aligned}$$

т. е. приведенное нами выше выражение действительно является решением неоднородного дифференциального уравнения.

Перейдем теперь к нахождению работы, совершаемой полем над осциллятором. Из дифференциального уравнения колебаний легко усмотреть (умножение на  $\dot{x}$  и интегрирование по времени приводит к уравнению сохранения энергии), что работа, совершаемая в единицу времени, равна

$$\delta W = \frac{e}{T} \int_0^T \dot{x}(t) E_x(t) dt.$$

Очевидно, однако, что часть работы, вклад в которую дают свободные колебания (решение однородного уравнения), обра-

щается в нуль. Поэтому совершаемая за секунду работа получается вычислением интеграла только от оставшейся части:

$$\delta W = \frac{e}{T} \frac{e}{m} \int_0^T E_x(t) dt \int_0^t E_x(t') \cos 2\pi\nu_0(t-t') dt'.$$

Подынтегральное выражение очевидным образом симметрично по  $t$  и  $t'$ , что позволяет выражение преобразовать для  $\delta W$ . Можно сразу увидеть, что

$$\delta W = \frac{e^2}{mT} \int_0^T E_x(t') dt' \int_{t'}^T E_x(t) \cos 2\pi\nu_0(t-t') dt.$$

Действительно, сначала мы должны интегрировать по  $t'$  от 0 до  $t$ , а затем по  $t$  от 0 до  $T$ ; но результат, конечно, будет тот же, если сначала интегрировать по  $t$  от  $t'$  до  $T$ , а затем по  $t'$  от 0 до  $T$ . Если, кроме того, поменять местами обозначения переменных  $t$  и  $t'$ , то  $\delta W$  можно будет записать также в виде

$$\delta W = \frac{1}{2} \frac{e^2}{mT} \int_0^T E_x(t) dt \left\{ \int_0^t + \int_t^T \right\} E_x(t') \cos 2\pi\nu_0(t-t') dt'$$

и, заменяя  $\cos 2\pi\nu_0(t-t')$  выражением

$$\frac{1}{2} \left\{ e^{2\pi i\nu_0(t-t')} + e^{-2\pi i\nu_0(t-t')} \right\},$$

получить

$$\delta W = \frac{1}{4} \frac{e^2}{mT} \left\{ \int_0^T E_x(t) e^{2\pi i\nu_0 t} dt \int_0^T E_x(t') e^{-2\pi i\nu_0 t'} dt' + \right. \\ \left. + \int_0^T E_x(t) e^{-2\pi i\nu_0 t} dt \int_0^T E_x(t') e^{2\pi i\nu_0 t'} dt' \right\} = \frac{e^2}{2mT} |f(\nu)|^2.$$

Таким образом (используя выведенную выше формулу для плотности излучения), мы находим, что работа, которую совершает поле над линейным осциллятором за секунду, равна

$$\delta W = \frac{e^2}{2mT} \frac{2\pi T}{3} u_\nu = \frac{\pi e^2}{3m} u_\nu,$$

т. е. получаем приведенное в тексте выражение.



### 35. Температура и энтропия в квантовой статистике

Доказательство того, что фигурирующая в различных статистиках величина  $\beta$  обратно пропорциональна абсолютной температуре, можно провести единым образом для всех трех статистик: Больцмана (Б.), Бозе — Эйнштейна (Б. — Э.) и Ферми — Дирака (Ф. — Д.). Во всех трех случаях мы имеем

$$\ln W = \sum_s f(n_s),$$

где (см. гл. I, § 1 о статистике Больцмана; гл. VIII, § 4 о статистике Бозе — Эйнштейна; гл. VIII, § 6 о статистике Ферми — Дирака)

$$f(n_s) = \begin{cases} n_s \ln g_s - n_s \ln n_s, & \text{в статистике} \\ (g_s + n_s) \ln (g_s + n_s) - g_s \ln g_s - n_s \ln n_s, & \text{в статистике} \\ -(g_s - n_s) \ln (g_s - n_s) + g_s \ln g_s - n_s \ln n_s, & \text{в статистике} \end{cases}$$

Больцмана,  
Бозе — Эйнштейна,  
Ферми — Дирака.

Максимум  $\ln W$ , подчиняющийся дополнительным условиям

$$\sum_s n_s = N, \quad \sum_s n_s \epsilon_s = E,$$

достигается при

$$\alpha + \beta \epsilon_s = \frac{\partial f}{\partial n_s},$$

откуда

$$\delta \ln W = \sum_s \frac{\partial f}{\partial n_s} \delta n_s = \sum_s (\alpha + \beta \epsilon_s) \delta n_s = \alpha \sum_s \delta n_s + \beta \sum_s \epsilon_s \delta n_s.$$

В равновесии, когда все  $\epsilon_s$ , так же как  $N$  и  $E$ , постоянны, обе суммы обращаются в нуль вследствие дополнительных условий. Но формула применима и к случаю «квазистационарных» процессов, когда внешние условия изменяются столь медленно, что в любой момент систему можно считать находящейся в равновесии. Если число атомов сохраняется, то дополнительные условия приводят к равенствам

$$\sum_s \delta n_s = 0, \quad \sum_s n_s \delta \epsilon_s + \sum_s \epsilon_s \delta n_s = \delta E.$$

Оба члена для  $\delta E$  допускают физическую интерпретацию. Первый представляет собой работу, совершаемую при расширении. Если объем меняется на  $dV$ , то

$$\sum_s n_s \delta \epsilon_s = \sum_s n_s \frac{\partial \epsilon_s}{\partial V} \delta V = -p \delta V,$$

где

$$p = - \sum_s n_s \frac{\partial \epsilon_s}{\partial V}$$

выражает давление как сумму сил по атомам в различных состояниях  $-\partial \epsilon_s / \partial V$ .

Второй член,  $\sum_s \epsilon_s \delta n_s$ , представляет собой изменение внутренней энергии, обусловленное перераспределением атомов по различным состояниям, порождаемым квантовыми скачками; это и есть «количество тепла, сообщенного системе»

$$\delta Q = \sum_s \epsilon_s \delta n_s.$$

Таким образом, мы имеем первый закон термодинамики

$$\delta E = - p \delta V + \delta Q.$$

С другой стороны,

$$\delta \ln W = \beta \sum_s \epsilon_s \delta n_s = \beta \delta Q.$$

Это показывает, что  $\beta \delta Q$  является полным дифференциалом, а  $\beta$  — «интегрирующим множителем» для сообщенного тепла. Таким образом, статистическая теория автоматически приводит и ко второму закону термодинамики, утверждающему, что  $\delta Q$  имеет интегрирующий множитель, а именно обратную абсолютную температуру:

$$\frac{\delta Q}{T} = \delta S,$$

где  $S$  — энтропия. Следовательно,  $\beta$  пропорциональна  $1/T$ ; полагая

$$\beta = \frac{1}{kT},$$

мы получаем из сравнения двух формул

$$S = k \ln W,$$

что и представляет собой знаменитую формулу Больцмана.

### 36. Термоэлектронная эмиссия

Здесь мы получим две формулы, приведенные нами в тексте для термоэлектронной эмиссии (эффекта Ричардсона), сначала на основе классической статистики, а затем статистики Ферми — Дирака. Для этого требуется найти число электронов, ударяющихся за секунду о квадратный сантиметр поверхности

металла, и причем таких, у которых кинетическая энергия перпендикулярной к поверхности составляющей движения достаточна для преодоления энергетического барьера высотой  $\epsilon_i$  у поверхности. Следовательно, мы должны на основе закона распределения найти число электронов, для которых, например,

$$\frac{1}{2} m v_x^2 \geq \epsilon_i.$$

Начнем с классической статистики. Здесь число электронов, скорость которых лежит между  $v$  и  $v+dv$ , равно

$$dN = 4\pi nV \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-1/2 m v^2 / kT} v^2 dv$$

(гл. I, § 6); аналогично (если заменить  $4\pi v^2 dv$  на  $dv_x dv_y dv_z$  с последующим интегрированием) число электронов с компонентой скорости между  $v_x$  и  $v_x + dv_x$  равно

$$\begin{aligned} dN_x &= nV \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} dv_x \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-1/2 m (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) / kT} d\sigma_y d\sigma_z = \\ &= nV \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} e^{-1/2 m v_x^2 / kT} dv_x. \end{aligned}$$

Чтобы получить число электронов, падающих на единичную площадку поверхности за секунду, мы должны сначала разделить полученное выражение на  $V$ , перейдя тем самым к плотности электронов, а затем умножить его на  $v_x$ , так как за единицу времени поверхности достигают все электроны с компонентой  $v_x$ , содержащиеся в слое толщины  $v_x$ , прилегающем к поверхности (гл. I, § 3). Таким образом, ток эмиссии выражается интегралом

$$i = en \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \int_{\sqrt{2\epsilon_i/m}}^{\infty} v_x e^{-1/2 m v_x^2 / kT} dv_x.$$

Этот интеграл можно взять, получив выражение

$$i = en \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} e^{-\epsilon_i/kT},$$

которое и приводится в тексте.

Аналогичным образом проводится вычисление и в случае распределения Ферми. Здесь мы начинаем с функции распределения (гл. VIII, § 6):

$$dN = \frac{8\pi V}{h^3} \frac{\sqrt{2m^3} \sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{\alpha + \epsilon/kT} + 1}, \quad \left( \epsilon = \frac{1}{2} m v^2 \right),$$

где параметр вырождения  $\alpha$  определяется из дополнительного условия

$$\int dN = N.$$

Если, однако, ограничиться сравнительно низкими температурами (раскаленные катоды), то можно использовать приближенную формулу, данную в гл. VIII, § 7,

$$dN = \frac{8\pi V}{h^3} \frac{\sqrt{2m^3} \sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{(\epsilon - \epsilon_0)/kT} + 1} = \frac{8\pi V m^3}{h^3} \frac{v^2 dv}{e^{(\epsilon - \epsilon_0)/kT} + 1},$$

где

$$\epsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}$$

представляет собой нулевую энергию. Здесь, как и раньше, мы получаем ричардсоновский ток, вычисляя интеграл

$$i = \frac{2m^3 e}{h^3} \int_{-\infty}^{+\infty} dv_y \int_{-\infty}^{+\infty} dv_z \int_{-\infty}^{+\infty} dv_x \frac{v_x}{e^{(\epsilon - \epsilon_0)/kT} + 1}.$$

Но для раскаленных катодов  $(\epsilon_1 - \epsilon_0)$  всегда очень велико по сравнению с  $kT$ , поскольку  $(\epsilon_1 - \epsilon_0)$  составляет несколько электрон-вольт (гл. VIII, § 8), тогда как  $kT$  при  $300^\circ \text{K}$  соответствует энергии около 0,03 эв. Следовательно, в подынтегральном выражении всегда  $e^{(\epsilon - \epsilon_0)/kT} \gg 1$ , так что в знаменателе можно пренебречь 1, приходя таким путем к интегралу

$$i = \frac{2m^3 e}{h^3} e^{\epsilon_0/kT} \int_{-\infty}^{+\infty} dv_y \int_{-\infty}^{+\infty} dv_z \int_{-\infty}^{+\infty} v_x e^{-\frac{m}{2}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)/kT} dv_x.$$

Интегрирования по  $v_y$  и  $v_z$  эквивалентны вычислению интегралов Гаусса (см. приложение 1); интегрирование по  $v_x$ , как и раньше, проводится элементарно, и мы получаем равенство

$$i = \frac{4\pi e m}{h^3} (kT)^2 e^{-(\epsilon_1 - \epsilon_0)/kT}.$$

т. е. закон, приведенный в тексте.

### 37. Температурная зависимость для парамагнетизма

Чтобы понять зависимость парамагнитных свойств от температуры, рассмотрим сначала упрощенную модель парамагнитного вещества. Вообразим, что вещество состоит из большого числа частиц, имеющих одинаковый магнитный момент  $M$ .

Пренебрежем также на первое время квантованием азимута, т. е. предположим, что этот момент может быть наклонен к направлению поля под *любым* углом  $\theta$ , а не только под некоторыми определенными углами.

Пока частица движется в магнитном поле, не испытывая возмущений, ее магнитный момент, всегда связанный с механическим относительно той же оси (ср., например, со случаем гироскопа), будет прецессировать вокруг направления поля, причем угол  $\theta$  наклона магнитного момента к полю остается неизменным. Магнитная энергия для такой ориентации равна

$$E = -MH \cos \theta.$$

Однако в результате взаимодействия с другими частицами (столкновений) такое равновесие нарушается, причем угол наклона момента после столкновения отличается от такового перед столкновением. Из кинетической теории мы уже знаем, что обусловленные тепловым движением столкновения приводят с течением времени к равномерному распределению частиц по всем возможным состояниям (здесь по возможным углам наклона к полю). Однако этому выравниванию противодействует магнитное поле; положения момента в направлении поля энергетически более выгодны, чем положения в противоположном направлении. Таким путем устанавливается состояние равновесия, которое можно найти статистическими методами.

Говоря о кинетической теории газов, мы уже показали, что статистика дает для вероятности состояния с определенной энергией закон распределения Больцмана, согласно которому определенное состояние с энергией  $E$  имеет вероятность

$$W \sim e^{-E/kT}.$$

Форма зависимости этого выражения от температуры  $T$  следует из термодинамических соображений;  $k$  есть постоянная Больцмана. Следовательно, в нашем случае вероятность расположения магнитного момента под определенным углом  $\theta$  к направлению поля равна

$$W \sim e^{\frac{MH}{kT} \cos \theta} = e^{\beta \cos \theta} \quad \left( \beta = \frac{MH}{kT} \right).$$

Найдем теперь средний магнитный момент в направлении поля. Если бы поле равнялось нулю или если бы тепловое движение (в случае очень высоких температур) преобладало над ориентирующим действием магнитного поля, так что распределение по направлениям стало бы почти однородным, то средний магнитный момент в любом фиксированном направлении, в частности в направлении поля, приближенно (либо точно) равнял-

ся бы нулю. При низких температурах или в столь сильных магнитных полях, что магнитная энергия  $MH$  достигает величин того же порядка, что и энергия теплового движения  $kT$ , появляется заметная предпочтительная ориентация в направлении поля, приводящая к конечному среднему магнитному моменту в этом направлении. Придерживаясь классических представлений, согласно которым равновозможны все направления момента, мы легко можем провести вычисление. По определению

$$\overline{M \cos \theta} = M \frac{\int_0^\pi \cos \theta e^{\beta \cos \theta} \sin \theta d\theta}{\int_0^\pi e^{\beta \cos \theta} \sin \theta d\theta}.$$

Вычисляя интегралы, получаем

$$\begin{aligned} \overline{M \cos \theta} &= M \frac{d}{d\beta} \ln \int_0^\pi e^{\beta \cos \theta} \sin \theta d\theta = M \frac{d}{d\beta} \ln \frac{e^\beta - e^{-\beta}}{\beta} = \\ &= M \left( \frac{e^\beta + e^{-\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}} - \frac{1}{\beta} \right) = M \left( \operatorname{cth} \beta - \frac{1}{\beta} \right). \end{aligned}$$

В предельном случае  $\beta \ll 1$ , т. е. в случае слабых полей или высоких температур, разложив в ряд по степеням  $\beta$ , получим выражение

$$\overline{M \cos \theta} = M \left( \frac{1}{3} \beta + \dots \right) = \frac{M^2 H}{3kT}.$$

Однако в этом предельном случае мы могли бы прийти к ответу и более простым путем, проведя разложения в ряд по  $\beta$  в формуле, определяющей  $\overline{M \cos \theta}$ . Тогда

$$\overline{M \cos \theta} = M \frac{\int_0^\pi \cos \theta (1 + \beta \cos \theta + \dots) \sin \theta d\theta}{\int_0^\pi (1 + \beta \cos \theta + \dots) \sin \theta d\theta}.$$

Первый член в числителе обращается в нуль после интегрирования, а второй дает  $2\beta/3$ . В знаменателе отличен от нуля первый член, причем равен 2. Частное дает приведенное выше выражение.

Весьма важно, что та же формула следует из вычислений на основе квантовой теории, т. е. при учете лишь конечного числа

возможных положений момента. Предположим, что  $\beta$  мало, а результирующий механический момент велик. То, что в этом случае мы получаем классический результат для  $\overline{M \cos \theta}$ , становится понятным, если рассмотреть принцип соответствия (предельный случай больших квантовых чисел). Все же желательно, по-видимому, чтобы читатель сам убедился в справедливости этого утверждения, непосредственно вычислив суммы. Если результирующий механический момент равен  $j$ , то имеется  $2j+1$  возможных положений момента относительно направления поля; действительно, проекция  $j$  на это направление может принимать значения  $-j, -j+1, \dots, +j$ . Поэтому в предыдущем вычислении мы должны лишь заменить  $\cos \theta$  на  $m/j$ , а интегралы — суммами:

$$\overline{M \cos \theta} = M \frac{\sum_{-j}^{+j} \frac{m}{j} e^{\frac{\beta m}{j}}}{\sum_{-j}^{+j} e^{\frac{\beta m}{j}}}.$$

Разлагая по степеням  $\beta$  и используя формулу

$$\sum_0^n v^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6},$$

найдем

$$\overline{M \cos \theta} = M \frac{\sum_{-j}^{+j} \frac{m}{j} \left(1 + \frac{\beta m}{j}\right)}{\sum_{-j}^{+j} \left(1 + \frac{\beta m}{j}\right)} = M\beta \frac{\frac{1}{3} \frac{(j+1)(2j+1)}{j}}{2j+1} = \frac{M\beta}{3} \frac{j+1}{j},$$

или для больших значений  $j$

$$\overline{M \cos \theta} = \frac{M\beta}{3},$$

что мы уже получили классическими методами.

Восприимчивость  $\chi$  определяется как магнитный момент моля рассматриваемого вещества на единицу напряженности поля  $H$ :

$$\chi = \frac{LM^2}{3kT} = \frac{(LM)^2}{3RT}.$$

Эта формула известна как закон Кюри; магнитная восприимчивость обратно пропорциональна температуре, т. е. с ростом температуры падает.

В заключение сделаем несколько коротких замечаний о принятых выше упрощениях. Только что проведенный подсчет, конечно, достаточен для грубой оценки температурной зависимости парамагнетизма; но если мы пожелаем извлечь из измерений восприимчивости какие-либо заключения, скажем, о величине атомных магнитных моментов, то тогда уже станет необходимым более тщательный вывод. Прежде всего, как уже указывалось, мы должны учесть квантование азимута; это приводит к множителю  $(j+1)/j$  в выражении, приведенном выше для среднего магнитного момента в направлении поля. Далее мы должны учесть, что, вообще говоря, не все атомы вещества имеют одинаковый магнитный момент. При обсуждении аномального эффекта Зеемана мы видели, что результирующий магнитный момент атома равен магнетону Бора, умноженному на результирующий механический момент и на так называемый множитель Ланде, зависящий от трех квантовых чисел  $j$ ,  $s$ ,  $l$ . Таким образом, следовало бы взять среднее по всем возможным комбинациям квантовых чисел.

В историческом плане необходимо отметить, что первые утверждения об атомистической структуре магнетизма сделал П. Вейсс (1924 г.); магнетон Вейсса был примерно в пять раз меньше магнетона Бора. Однако современные исследования (Ван Флек, 1932 г. и позже), опровергнув существование этой меньшей единицы, установили существование магнетона Бора.

### 38. Теория ковалентной связи

Основная идея теории ковалентной связи Гайтлера — Лондона состоит в следующем. В качестве модели молекулы водорода вообразим два ядра,  $a$  и  $b$ , расположенные на оси  $x$  на расстоянии  $R$  друг от друга, и два электрона, 1 и 2, вращающиеся вокруг них. Состоянию двух далеко отстоящих нейтральных атомов соответствуют большее  $R$  и такое движение электронов, что каждый из них движется вокруг одного из ядер. Пусть оба атома находятся в основном состоянии и обладают одинаковой энергией  $E_0^1 = E_0^2 = E_0$ . Движение электронов описывается собственными функциями  $u$ , одинаковыми по отношению к соответствующим ядрам, т. е. одна получается из другой заменой  $x$  на  $x+R$ ; запишем их кратко в виде

$$\begin{aligned}\psi_a^{(1)} &= u(x_1, y_1, z_1), \\ \psi_b^{(2)} &= u(x_2 + R, y_2, z_2).\end{aligned}$$

Функции  $u$  тождественны собственным функциям атома водорода (приложение 17). Поэтому тождественно удовлетворяются



два уравнения Шредингера:

$$H_a^0 \psi_a^{(1)} = E_0 \psi_a^{(1)},$$

$$H_b^0 \psi_b^{(2)} = E_0 \psi_b^{(2)},$$

где  $H^0$  обозначает оператор энергии атома водорода, а индексы  $a$  и  $b$  указывают, что в одном случае координаты электрона относятся к ядру  $a$ , а в другом — к ядру  $b$  (см. выше).

Оператор энергии молекулы, получающийся при сближении атомов (уменьшении  $R$ ), отличается от суммы  $H_a^0 + H_b^0$  на энергию взаимодействия двух атомов

$$V = e^2 \left( \frac{1}{r_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} \right),$$

где  $r_{ab}$  означает расстояние между ядрами (т. е.  $R$ ),  $r_{12}$  — расстояние между электронами, а  $r_{a2}$  и  $r_{b1}$  — расстояния от каждого из электронов до ядра чужого атома. Соответственно уравнение Шредингера для молекулы будет иметь вид

$$(H_a^0 + H_b^0 + V) \psi^{(1,2)} = E \psi^{(1,2)}.$$

Попытаемся теперь найти приближенное решение этого уравнения, приняв, что (в первом приближении) волновая функция  $\psi^{(1,2)}$ , зависящая от координат двух электронов, равна произведению некоторой собственной функции  $\psi_a^{(1)}$  одного электрона на некоторую собственную функцию  $\psi_b^{(2)}$  другого электрона. Однако здесь мы должны иметь в виду, что состояние системы вырождено. Полная энергия двух отдельных атомов,

$$E = E_0^1 + E_0^2 = 2E_0,$$

соответствует не только произведению  $\psi_a^{(1)} \psi_b^{(2)}$ , но и произведению  $\psi_a^{(2)} \psi_b^{(1)}$ , а также любой комбинации этих выражений. Благодаря связи атомов при сближении их возникнет взаимодействие, соответствующее переходам между этими состояниями. (Взаимодействие, соответствующее переходам между другими уровнями энергии, будет мало, так как в среднем энергия взаимодействия  $V$  мала по сравнению с расстояниями между уровнями энергии атома.) Поэтому учет только таких состояний достаточен в грубом приближении, и мы попытаемся приближенно представить функцию  $\psi^{(1,2)}$  линейной комбинацией двух функций,  $\psi_a^{(1)} \psi_b^{(2)}$  и  $\psi_a^{(2)} \psi_b^{(1)}$ . Вместо них можно исходить и из симметричной и антисимметричной комбинаций

$$\psi_c = \psi_a^{(1)} \psi_b^{(2)} + \psi_a^{(2)} \psi_b^{(1)},$$

$$\psi_s = \psi_a^{(1)} \psi_b^{(2)} - \psi_a^{(2)} \psi_b^{(1)}.$$

что имеет два преимущества: 1) последующее исследование показывает, что в первом приближении симметричная и антисимметричная функции не связаны друг с другом уравнением Шредингера, т. е. каждая функция сама по себе представляет отдельное состояние молекулы; 2) их легко различать при помощи спина, так как, согласно принципу запрета, собственные функции системы должны быть антисимметричными по всем координатам двух электронов (естественно, учитывая спин; ср. стр. 309). Если мы захотим приписать электронам спиновые переменные, как это было сделано в случае атомных спектров (гл. VI, § 8), то соответствующая спиновая функция будет антисимметричной для  $\psi_c$  и симметричной для  $\psi_a$ , чтобы удовлетворить принципу запрета. Это значит, что в состоянии  $\psi_c$  спины антипараллельны и компенсируют друг друга, а в случае  $\psi_a$  они параллельны и складываются.

Далее, теория возмущений показывает, что при сближении двух атомов (когда взаимодействие их увеличивается) собственное значение невозмущенной системы  $2E_0$  расщепляется на два:

$$E_1 = 2E_0 - M_1, \quad E_2 = 2E_0 + W_2,$$

где функции  $W(R)$  имеют следующий вид:

$$W_1 = \frac{H_1 S + H_2}{1 + S}, \quad W_2 = \frac{H_1 S - H_2}{1 - S},$$

$$H_1 = \int \int (\psi_a^{(1)})^2 (\psi_b^{(2)})^2 V d\tau_1 d\tau_2.$$

$$H_2 = \int \int \psi_a^{(1)} \psi_a^{(2)} \psi_b^{(1)} \psi_b^{(2)} V d\tau_1 d\tau_2,$$

$$S = \int \int \psi_a^{(1)} \psi_a^{(2)} \psi_b^{(1)} \psi_b^{(2)} d\tau_1 d\tau_2.$$

а интегрирования проводятся по координатам двух электронов. Поскольку  $\psi^2$  с точностью до множителя представляет собой плотность заряда электронного облака, первый интеграл выражает кулонову силу, обусловленную взаимодействием распределенных зарядов каждого атома. Второй интеграл характерен для квантовой теории; поскольку он не содержит квадратов собственных функций, интерпретация его в терминах плотности заряда невозможна. Он известен как «обменный интеграл».

Вычисление интегралов как функций  $R$ , очень громоздкое, дает графики зависимости энергии от расстояния между атомами, приведенные на фиг. 97 (стр. 347). Функция  $\psi_c$ , симметричная по координатам электронов, приводит к нижней кривой, на которой энергия имеет минимум при некотором внутримоле-

кулярном расстоянии; антисимметричная же функция  $\psi_a$  дает монотонно возрастающую ветвь кривой, соответствующую постоянному отталкиванию между атомами. Таким образом, оказывается, что к связи приводит то состояние, в котором спины электронов взаимно скомпенсированы. Следовательно, мы можем считать, что с физической точки зрения спин ответствен за химическую валентность. Но, как упоминалось в тексте, попытки дальнейшего передвижения в этом направлении (Гайтлер, Румер, Вейль, Борн) оказались не очень удачными и были заменены полуэмпирическими теориями

### 39. Теория сил Ван-дер-Ваальса

Согласно Лондону, теория вандерваальсовых сил опирается на факт существования нулевой энергии, составляющий отличительную черту квантовой теории (ср. случай гармонического осциллятора, приложения 15 и 16). По классической теории в низшем энергетическом состоянии энергия осциллятора равна нулю; это — состояние покоя в положении равновесия. Однако в волновой механике основному состоянию соответствует конечная энергия  $E_0 = \frac{1}{2} h \nu_0$ , причем собственной функцией основного состояния является функция ошибок Гаусса  $\psi_0 = a \exp(-\frac{1}{2} \alpha q^2)$ , где  $\alpha = 4\pi^2 m \nu_0 / h$ , а  $\nu_0$  означает собственную частоту осциллятора. Существование этой нулевой энергии можно понять в свете принципа неопределенности Гейзенберга, согласно которому невозможно точно определить положение частицы, если энергия ее задана точно. Собственная функция, являющаяся функцией ошибок Гаусса, непосредственно выражает эту неопределенность. Кривая ошибок сразу дает среднее квадратичное отклонение координаты (поскольку  $\bar{q} = 0$ ):

$$\overline{\delta q^2} = \overline{q^2} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} q^2 \psi_0^2 dq}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^2 dq} = \frac{1}{2\alpha} = \frac{h}{8\pi^2 m \nu_0}.$$

С другой стороны, из уравнения энергии имеем

$$E = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} + \frac{1}{2} m (2\pi \nu_0)^2 q^2.$$

Если энергия определена точно, то среднее квадратичное отклонение импульса равно

$$\overline{\delta p^2} = m^2 (2\pi \nu_0)^2 \overline{\delta q^2} = \frac{1}{2} h \nu_0 m.$$

Отсюда

$$\overline{\delta q^2} \overline{\delta p^2} = \frac{\hbar^2}{16\pi^2},$$

или, учитывая, что  $(\Delta q)^2 = \overline{\delta q^2}$ ,  $(\Delta p)^2 = \overline{\delta p^2}$ , имеем

$$\Delta q \Delta p = \frac{\hbar}{4\pi}.$$

Это и есть точный вид принципа неопределенности Гейзенберга (см. приложения 21, 26).

После этого отступления по поводу нулевой энергии и теоретической неопределенности положения и импульса частицы при точно определенной энергии мы вновь возвращаемся к тому, как Лондон объясняет появление сил Ван-дер-Ваальса. В качестве простой модели рассмотрим два линейных осциллятора, удаленных друг от друга на расстояние  $R$  и колеблющихся в направлении соединяющей их линии (оси  $x$ ). Вообразим эти осцилляторы как колеблющиеся электрические диполи, у которых положительные заряды  $e$  закреплены в положении равновесия, а отрицательные заряды  $-e$  колеблются около положений равновесия. (Их отклонения мы обозначим через  $x_1$  и  $x_2$ .) Запишем действующие на осцилляторы возвращающие силы как  $-(e^2/a)x_1$  и  $-(e^2/a)x_2$ ; тогда их потенциальные энергии будут соответственно равны  $1/2(e^2/a)x_1^2$  и  $1/2(e^2/a)x_2^2$ . Кроме того, существует еще сила взаимодействия между осцилляторами, подчиняющаяся, как мы предполагаем, закону Кулона. Потенциальная энергия этого взаимодействия равна

$$\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R+x_1+x_2} - \frac{e^2}{R+x_1} - \frac{e^2}{R+x_2}$$

или, в предположении, что  $R$  весьма велик по сравнению с  $x_1$  и  $x_2$  и после разложения в ряд, равна

$$\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}.$$

Следовательно, уравнение энергии для двух осцилляторов имеет вид

$$W = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{e^2}{2a} (x_1^2 + x_2^2) + \frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}.$$

В отсутствие взаимодействия каждый из осцилляторов колебался бы с частотой

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2}{am}}.$$

С учетом взаимодействия частота расщепляется, как мы уже неоднократно убеждались раньше. Здесь мы непосредственно

вычислим расщепление. Для этого наиболее удобно привести квадратичное выражение для потенциальной энергии «к главным осям»; это не затрагивает вида кинетической энергии. Приведение к главным осям осуществляется с помощью преобразования

$$x_c = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \quad x_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2);$$

поскольку  $p = m\dot{x}$ , мы имеем также

$$p_c = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 + p_2), \quad p_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 - p_2).$$

Подставив эти новые координаты и импульсы в выражение для энергии, получим

$$W = \frac{1}{2m}(p_c^2 + p_a^2) + \frac{e^2}{2a}(x_c^2 + x_a^2) + \frac{e^2}{R^3}(x_c^2 - x_a^2),$$

или в другой форме

$$W = \left\{ \frac{1}{2m} p_c^2 + \left( \frac{e^2}{2a} + \frac{e^2}{R^3} \right) x_c^2 \right\} + \left\{ \frac{1}{2m} p_a^2 + \left( \frac{e^2}{2a} - \frac{e^2}{R^3} \right) x_a^2 \right\}.$$

Но это есть уравнение энергии для двух несвязанных осцилляторов, колеблющихся с частотами

$$\nu_c = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2}{m} \left( \frac{1}{a} + \frac{2}{R^3} \right)} \quad \text{и} \quad \nu_a = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2}{m} \left( \frac{1}{a} - \frac{2}{R^3} \right)},$$

следовательно, квантования энергии системы равна

$$E_{n_c n_a} = h\nu_c \left( n_c + \frac{1}{2} \right) + h\nu_a \left( n_a + \frac{1}{2} \right)$$

и зависит от  $R$ , так как новые частоты зависят от расстояния между осцилляторами. Для нулевой энергии основного состояния осцилляторов мы получаем выражение

$$E_{00} = \frac{1}{2} h(\nu_c + \nu_a),$$

или, вновь разлагая в ряд,

$$\begin{aligned} E_{00} &= \frac{h}{4\pi} \left\{ \sqrt{\frac{e^2}{m} \left( \frac{1}{a} + \frac{2}{R^3} \right)} + \sqrt{\frac{e^2}{m} \left( \frac{1}{a} - \frac{2}{R^3} \right)} \right\} = \\ &= \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2}{ma}} \left( 1 - \frac{a^2}{2R^3} + \dots \right) = h\nu_0 \left( 1 - \frac{a^2}{2R^3} + \dots \right). \end{aligned}$$

Следовательно, добавочная энергия отрицательна и обратно пропорциональна шестой степени расстояния между осциллято-

рами; соответственно осцилляторы будут притягивать друг друга с силой, обратно пропорциональной седьмой степени расстояния между ними. Величина притяжения зависит также от  $\nu_0$  и от квадрата постоянной  $a$ , представляющей, очевидно, меру деформируемости осцилляторов.

Аналогичные соображения применимы к любой атомной системе, в которой имеется взаимодействие между ее составными частями. Они всегда приводят к тому результату, что в основном состоянии действует сила притяжения между двумя системами, причем потенциальная энергия взаимодействия обратно пропорциональна шестой степени расстояния, а величина взаимодействия пропорциональна произведению деформируемостей двух атомов.

**МАКС БОРН**

**Атомная физика**

**Редактор В. Н. Захаров**  
**Художник М. В. Борисова-Мусатова**  
**Художественный редактор**  
**Е. И. Подмарькова**  
**Технический редактор В. П. Сизова**

**Сдано в производство 3/VI-65 г.**

**Подписано к печати 5/XI-65 г.**

**Бумага 60×90<sup>1/16</sup>. 15,50 бум. л.**

**31,0 печ. л. в т/ч 6 вкл.**

**Уч.-изд. л. 27,47. Изд. № 2/8004**

**Цена 2 р. 13 к. Зан. 1563**

---

**ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»**

**Москва, 1-й Рижский пер., 2**

---

**Ленинградская типография № 2**

**имени Евгении Соколовой**

**Главполиграфиром**

**Государственного комитета**

**Совета Министров СССР по печати**

**Измайловский проспект, 29**



**Фото 1.** Параболы положительных лучей (Дж. Дж. Томсон).

Измерения положений отдельных парабол на таких фотографиях позволяют сопоставить их, как показано, химическим элементам и соединениям. Электрическое и магнитное отклоняющие поля параллельны общей оси парабол (см. стр. 40).



**Фото 3.** Электронно-позитронные ливни, вызванные космическими лучами (см. стр. 62).



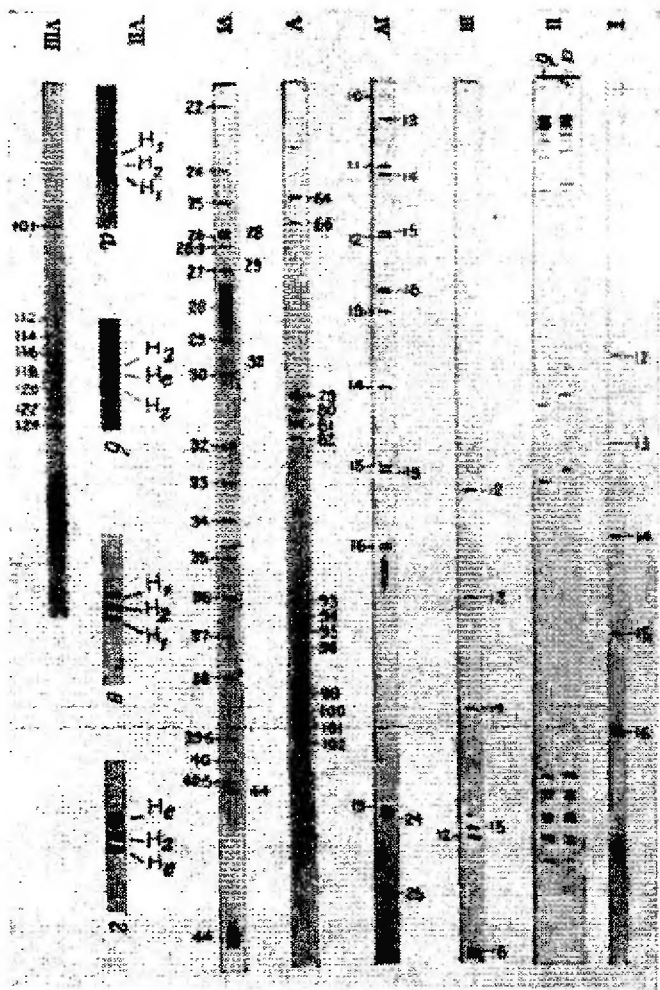


Фото 2. Примеры спектров масс (из книги Астона «Изотопы»).

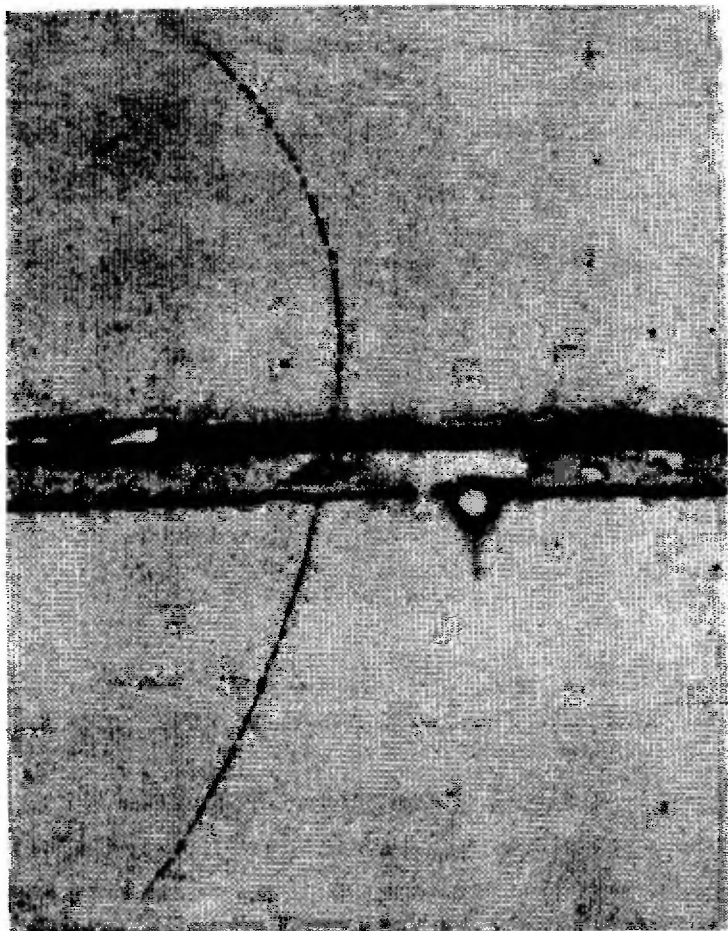
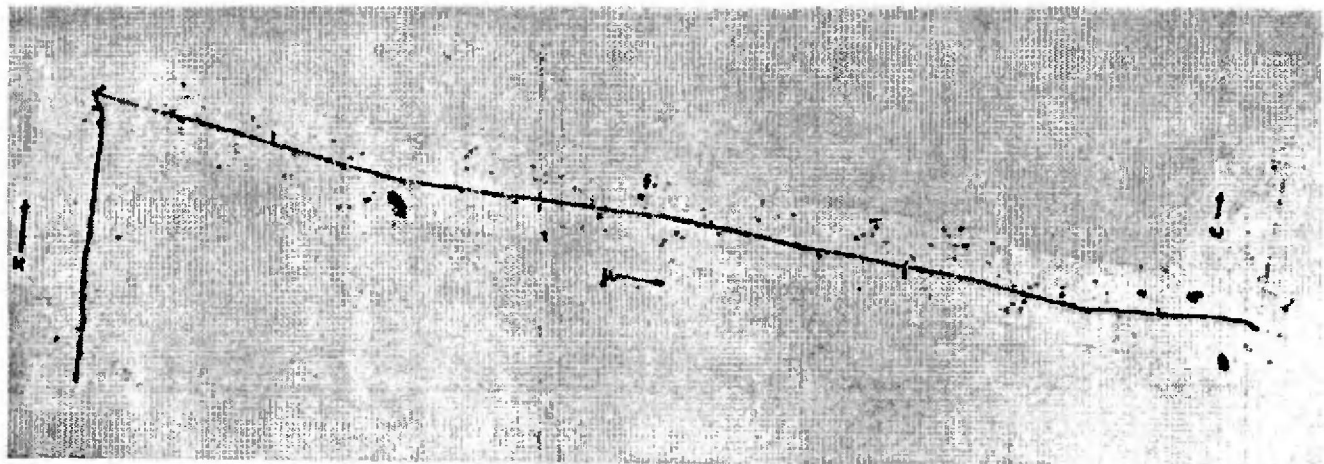
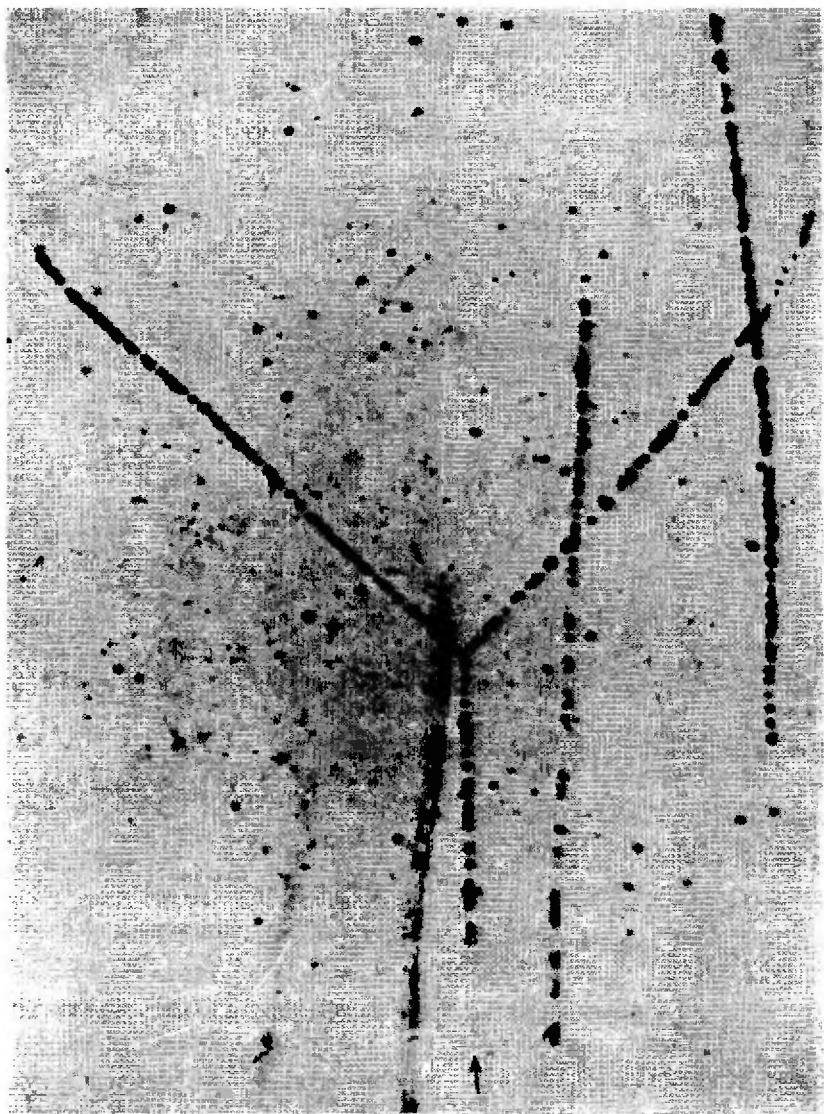


Фото 4. Позитрон с энергией 63 Мэв, проходящий через 6-миллиметровую пластинку свинца и вылетающий из нее с энергией 23 Мэв (см. стр. 63).



**Фото 5.** Первичный  $\pi$ -мезон распадается на  $\mu$ -мезон и невидимую (нейтральную) частицу.

Направление движения  $\mu$ -мезона определяется по тому, как возрастает почернение следа: ионизация, производимая медленной частицей, больше, чем производимая быстрой частицей. В конце трека  $\mu$ -мезон распадается на электрон и невидимую частицу. Картина составлена из ряда микрофотографий, снятых с различных расстояний и охватывающих небольшие участки траектории (см. стр. 67).



**Фото 6.** Треки в фотозмультисни, изображающие рассеяние протонов на протонах.

Стрелкой отмечен падающий протон. Треки двух протонов после столкновения перпендикулярны друг другу, как это следует из механических законов соударения частиц с равными массами (см. стр. 19 и 55).



**Фото 7.** Распад ядра азота в результате столкновения с  $\alpha$ -частицей. При этом испускается протон с очень большой энергией. Можно видеть две категории  $\alpha$ -частиц, излучаемых смесью тория В и С: высокоэнергетические и низкоэнергетические  $\alpha$ -частицы (см. стр. 90).



**Фото 8.** Упругое столкновение  $\alpha$ -частицы с ядром водорода. Треки двух испытывавших столкновение частиц имеют приблизительно одинаковую длину (см. стр. 96).



**Фото 9.** Упругое столкновение  $\alpha$ -частицы с ядром азота. Короткий трек — это трек ядра азота (см. стр. 96).

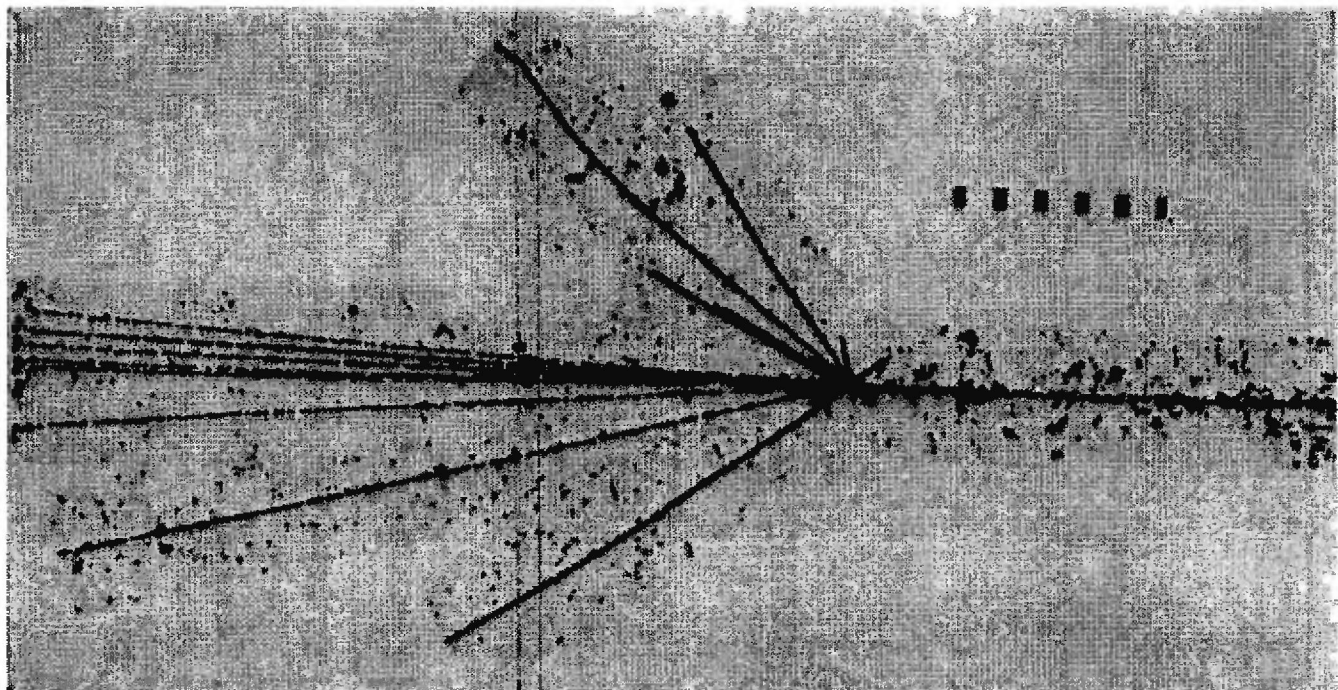


Фото 10. Ядро алюминия ( $Z = 13 \pm 1$ ), двигаясь со скоростью, превышающей половину скорости света, взаимодействует с ядром в фотоэмульсии и распадается на шесть  $\alpha$ -частиц, которые пучком разлетаются от точки, где произошло столкновение (см. стр. 90).

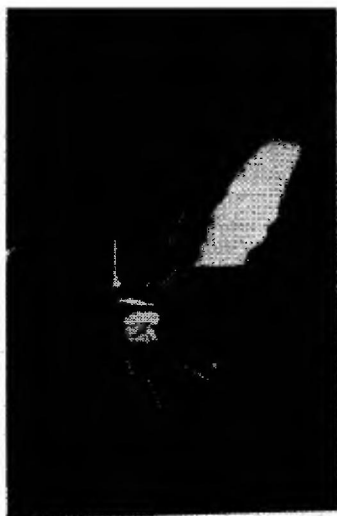


Фото 11. Расщепление лития при бомбардировке протонами. Пары  $\alpha$ -частиц разлетаются в противоположных направлениях (см. стр. 90).

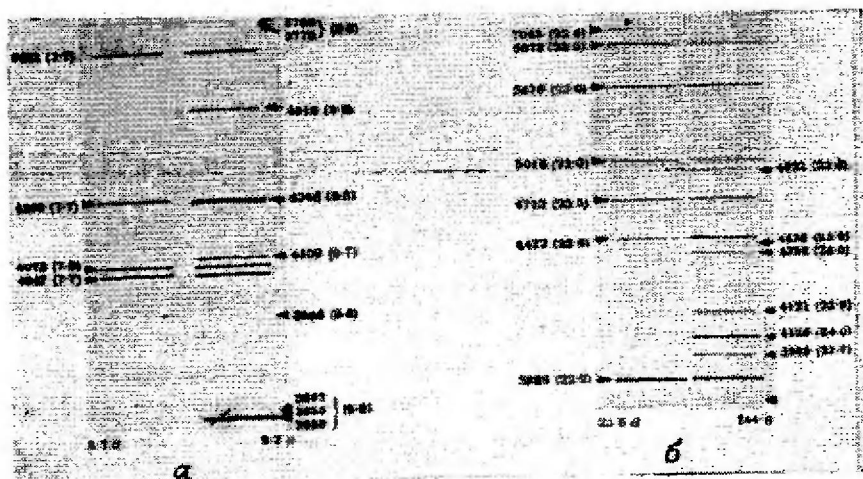


Фото 12. Спектральные линии, возбуждаемые при столкновениях с электронами (по Герцу).

В спектрах присутствуют лишь такие линии, потенциал возбуждения которых (числа в скобках) меньше, чем энергия падающих электронов (числа внизу под фотографиями).

*а* — спектр ртути, *б* — спектр железа. Длины волн даны в Å (см. стр. 108).



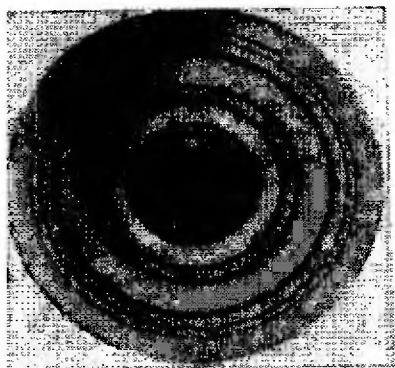


Фото 13. Дифракция электронов на тонкой серебряной пленке (по Г. Марку и Р. Вирлу).

Скорость электронов (ускоряющий потенциал равен 36 кВ) соответствует де-Бройлевской длине волны 0,0645 Å; экспонирование 1/10 сек (см. стр. 114).

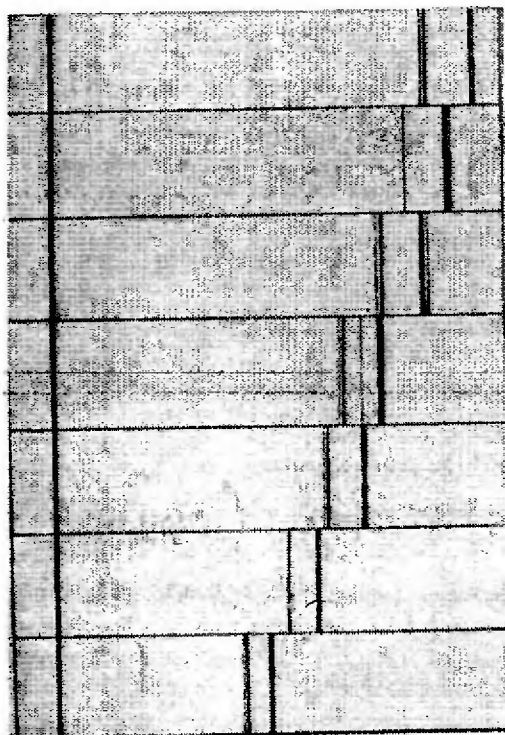


Фото 15. Фотография вращающихся кристаллов (K-серия) для элементов между мышьяком ( $Z = 33$ ) и ренгем ( $Z = 47$ ).

Можно видеть, как возрастает жесткость с увеличением атомного номера. Линия слеза показывает положение неотклоненного падающего луча (см. стр. 151).

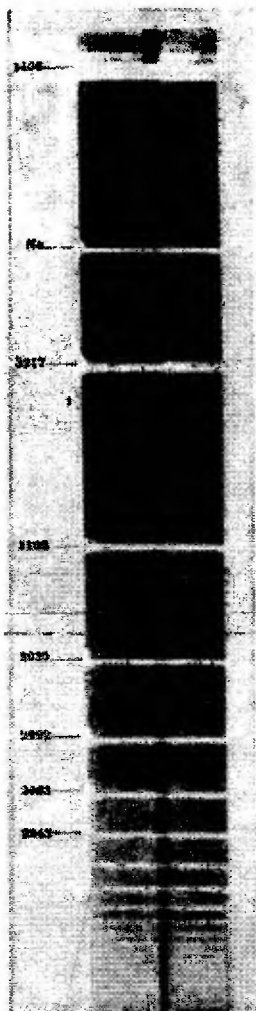


Фото 14. Спектр поглощения паров соды.

В верхней части между двумя линиями соды показана линия цинтия (см. стр. 149).

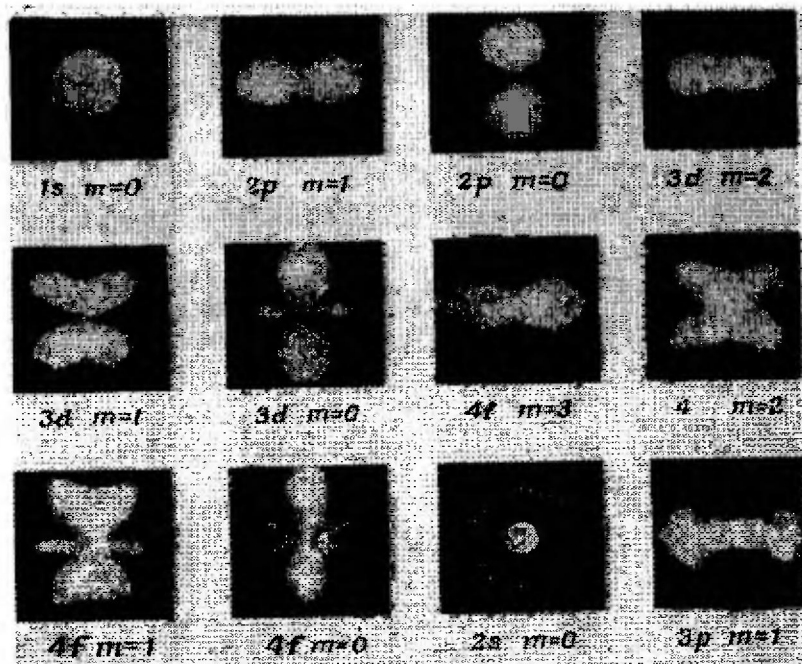


Фото 16. Силуэты на рисунках графически изображают те распределения заряда, которые должны осуществляться в электронном облаке по теории Шредингера.

Явно видны узловые поверхности, соответствующие указанным квантовым числам, особенно в  $x$ -состояниях, и в состояниях с малым  $l$  (см. стр. 175).

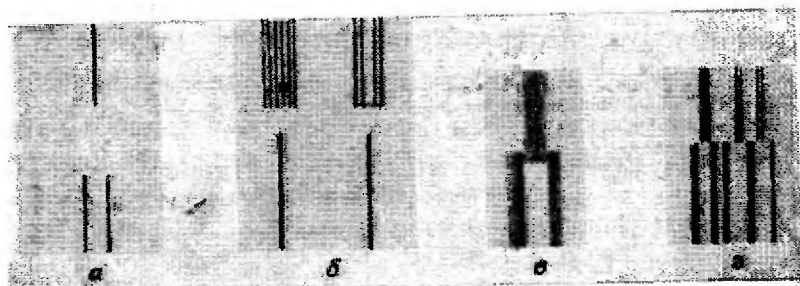


Фото 17. Расщепление спектральных линий в магнитном поле.

*a* — нормальный доренцев триплет для линии Cd 6439 (в нижнем ряду линий кадра перпендикулярны магнитным силовым линиям, в верхнем — параллельны им); *б* — аномальный эффект Зеемана для D-линий Na (в верхнем ряду показано расщепление в магнитном поле, в нижнем — приведены линии в отсутствие поля); *в* и *г* — эффект Зеемана для линий Sr (в верхнем ряду линий поле было параллельно полю, в нижнем — перпендикулярно ему) (см. стр. 183).

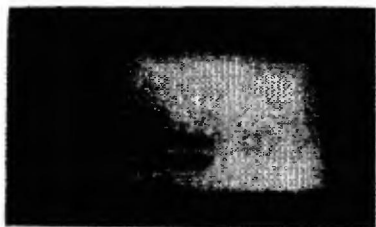


Фото 18. Магнитное расщепление пучка лития по методу Штерна и Герлаха (см. стр. 217).

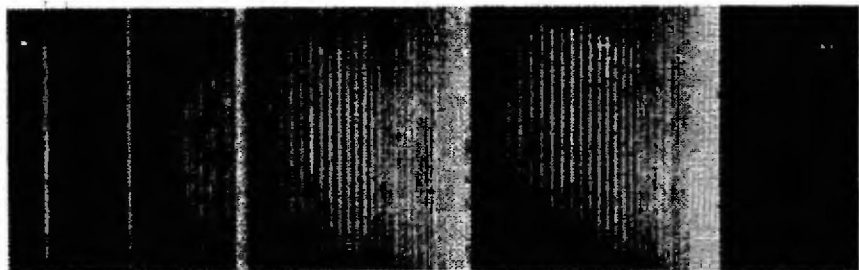


Фото 19. Полосатый спектр  $N_2$ .

Спектр состоит из системы вращательных полос, каждая из которых соответствует одному изменению вращательного квантового числа на единицу, сопровождаемому скачком колебательного и электронного квантовых чисел (это смещает систему в индифферентную область). Каждая линия — очень тесный триплет, образованный электронно-спиновыми переходами (см. стр. 347).



Фото 20. Полоса CO вблизи  $\lambda = 5610 \text{ \AA}$ .

Одна из так называемых полос Ангстрема. В данном левом краю полосы ясно видны триплеты, соответствующие трем изменениям вращательного квантового числа на  $-1, 0, +1$  (см. стр. 347).

