

А. А. СОКОЛОВ,
Ю. М. ЛОСКУТОВ,
И. М. ТЕРНОВ

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

ИЗДАНИЕ 2-е,
ИСПРАВЛЕННОЕ
И ДОПОЛНЕННОЕ

ИЗДАТЕЛЬСТВО
«ПРОСВЕЩЕНИЕ»
Москва 1965



Книга посвящена систематическому изложению основ квантовой механики, т. е. теории движения атомных частиц.

В первой части книги изложена нерелятивистская квантовая механика Шредингера, где наряду со стандартными приложениями (гармонический осциллятор, ротатор, атом водорода и т. д.) рассматриваются также и другие приложения квантовой теории, например основы теории твердого тела, теория дисперсии и т. д.

Во второй части рассматривается теория Дирака, позволяющая учесть не только релятивистские, но и спиновые эффекты, а также теория многоэлектронных атомов и простейших молекул.

Наконец, третья часть посвящена некоторым общим вопросам теории атомного ядра и элементарных частиц, а также некоторым положениям метода вторичного квантования, являющегося дальнейшим развитием квантовой механики.

Изложение строится таким образом, чтобы помочь читателю разобраться не только в физических основах, но и овладеть математическим аппаратом квантовой механики.

Книга может быть использована в качестве учебного пособия для студентов физических специальностей университетов, педагогических институтов и других вузов, а также для желающих самостоятельно изучать квантовую механику.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Книга посвящена изложению основ квантовой механики и ее применению главным образом для изучения движения атомных частиц.

Перед нами была поставлена трудная задача. Мы считали необходимым изложить в одном томе основные положения учения об атоме, а именно: нерелятивистскую теорию Шредингера (часть I), релятивистскую теорию Дирака и теорию сложных атомов (часть II), а также основные приложения квантовой механики к твердому телу (§ 6), к физике атомного ядра и элементарных частиц (часть III).

Мы хотим наряду с изложением некоторых общетеоретических вопросов также научить студентов использовать математический аппарат квантовой механики для анализа конкретных вопросов, связанных со строением атома. Чтобы при этом не очень сильно увеличить объем книги, мы пошли на сокращенное изложение некоторых разделов, носящих узкоспециальный характер. В этом случае мы, как правило, будем отсылать читателя к соответствующей литературе (монографиям и статьям, опубликованным у нас в Советском Союзе).

Если в учебной литературе решение конкретных задач с помощью уравнения Шредингера разработано сравнительно хорошо (основной математический аппарат при этом базируется на дифференциальных уравнениях 2-го порядка с использованием специальных функций и в первую очередь полиномов Эрмита, Лежандра, Лагерра) и может быть изложено в компактной форме, то применение теории Дирака к исследованию конкретных вопросов (например, атома водорода) обычно излагается либо с чрезвычайно громоздкими выкладками, за которыми трудно усмотреть физический смысл полученных решений, либо с использованием некоторых физических соображений, так что результаты приводятся фактически без вывода и в лучшем случае доказательства даются лишь «на пальцах». Поэтому для решения задачи о движении электрона в атоме водорода в рамках теории Дирака мы

использовали уравнение Дирака в приближенной форме (§ 19), с помощью которой была получена не только формула для расщепления уровней с необходимым приближением, но и найдены правила отбора (§ 18, 20). Кроме того, мы привели в несколько упрощенной форме анализ некоторых последних открытий в области строения атомов и атомного ядра: лэмбовского сдвига уровней, обусловленного электронно-позитронным вакуумом (§ 22), фермиевской теории бета-распада (§ 30) и оболочечной модели ядра (см. § 28) и т. д.

Мы сочли целесообразным ограничиться хотя бы качественным описанием некоторых последних достижений в области атомной физики и теории атомного ядра, а именно: молекулярного (квантового) генератора, эффекта Мёссбауэра и его применений (§ 29), проблемы несохранения четности (§ 30), систематики элементарных частиц (§ 31) и т. д.

Поскольку в настоящее время появилось сравнительно много хороших сборников задач по квантовой механике, мы ограничились рассмотрением лишь некоторых характерных задач, порой поясняющих и дополняющих общую теорию¹⁾.

В основу нашего курса «Квантовая механика» были положены лекции, прочитанные мною в Московском областном педагогическом институте (с 1945 по 1948 г.) и в Московском государственном университете имени М. В. Ломоносова (начиная с 1945 г.) для студентов-физиков.

Кроме исправлений некоторых опечаток и неточностей, которые были нами замечены в первом издании, а также уточнения некоторых математических выводов, мы сочли целесообразным поместить ряд дополнительных задач, в которых рассмотрены следующие вопросы: задача о гармоническом осцилляторе в матричном представлении (см. задачу 10.8), определение волновых функций методом ВКБ для гармонического осциллятора (см. задачу 10.2). Введены три задачи, посвященные обобщенному трехмерному единичному вектору спина, СРТ-преобразованию, а также применению уравнения Дирака к описанию нейтрино, т. е. частицы со спином $1/2$ и массой покоя, равной нулю (см. задачи 18.6, 18.7 и 18.8), которые могут найти свое применение при построении теории несохранения четности. Был написан новый раздел о квантовой теории ферромагнетизма и ван-дер-ваальсовых сил, который дополнил § 27. Точно так же в § 27 существенной

¹⁾ Наиболее удачным, как нам кажется, является «Сборник задач по квантовой механике», составленный И. И. Гольдманом и В. Д. Кривченковым (Гостехиздат, М., 1957) на базе семинарских занятий по квантовой механике, проводимых в Московском государственном университете. Хорошим дополнением к нему может служить «Сборник задач по атомной физике», составленный И. Е. Иродовым (Атомиздат, М., 1959).

переработке подвергся раздел, посвященный квантовым генераторам. Мы уточнили некоторые принципиальные вопросы, связанные с философским обоснованием квантовой механики. В частности, в задаче 31.3 рассмотрена новая попытка (конечно, далеко еще не апробированная) обосновать соотношение неопределенности как результат воздействия вакуума на точечную заряженную частицу.

Первая часть этого курса была написана мною совместно с Ю. М. Лоскутовым, вторая — совместно с проф. И. М. Терновым. Большую помощь при написании курса оказала М. М. Колесникова, составившая конспекты моих лекций по квантовой механике. Кроме того, она оказала существенную помощь при подготовке рукописи к печати; ею же подготовлен и предметный указатель ко второму изданию настоящей книги.

Отдельные параграфы рукописи, а именно § 25 и 28, внимательно просмотрел Н. Н. Колесников, сделавший ряд важных замечаний. Мне хотелось бы также отметить большую и весьма плодотворную работу С. И. Ларина по редактированию рукописи первого издания.

А. А. Соколов

Московский государственный университет
имени М. В. Ломоносова
март 1964 г.

ВВЕДЕНИЕ

Квантовая механика, представляющая собой один из важнейших разделов современной теоретической физики, была создана сравнительно недавно — в 20-х годах нашего столетия. Ее основной задачей является изучение поведения микрочастиц, например движения электронов в атоме.

По своей сущности квантовая механика представляет собой дальнейшее развитие классической механики, электродинамики (включая электронную теорию и теорию относительности), кинетической теории материи и других разделов теоретической физики.

В истории развития каждого раздела теоретической физики следует различать два основных этапа: во-первых, накопление экспериментальных фактов, открытие отдельных полуэмпирических законов и создание предварительных гипотез и теорий, во-вторых, открытие общих закономерностей, позволяющих с единой точки зрения понять совокупность многих явлений. Так, например, первый (доньютоновский) этап развития механики был связан с открытием отдельных, казалось бы, не связанных между собой законов: закона инерции, закона свободного падения тел, законов Кеплера, определяющих движения планет, и т. д.

Необходимо отметить, что открытие каждого из этих законов сопровождалось, как правило, кропотливой работой многих ученых в течение десятков, а порой даже и сотен лет. Например, открытию законов Кеплера предшествовали многочисленные астрономические наблюдения за движением планет. Вспомним, сколько трудов было вложено Коперником, Бруно, Галилеем и другими для доказательства того, что в центре нашей планетной системы находится Солнце, а не Земля, которая сама является такой же планетой, как и Марс, Венера или Юпитер. И только на основе весьма ценного экспериментального материала, полученного Тихо де Браге при наблюдении движения планет, Кеплер в результате пятнадцатилетней обработки этих экспериментальных данных сумел, наконец, открыть правильные (правда, полуэмпирические) законы движения планет вокруг Солнца. Лишь после такого предвари-

тельного этапа Ньютону удалось под все эти казавшиеся несвязанными законы подвести единый фундамент. С этого момента начинается новый этап развития теоретической механики, основанной на трех законах движения Ньютона и на законе всемирного тяготения. На базе ньютоновских законов механики были объяснены законы Кеплера и интенсивно начала развиваться теоретическая астрономия. Триумфом развития механики Ньютона является предсказание французским ученым Леверье (по возмущениям движения планеты Юпитер) новой планеты Нептун, которая сразу же была обнаружена астрономами по вычислениям Леверье.

Точно так же созданию электродинамики Максвелла предшествовало (в XVIII в. и в первой половине XIX в.) открытие различных эмпирических законов электрических и магнитных явлений. По аналогии с ньютоновским законом тяготения были открыты законы Кулона для электрических зарядов и магнитных полюсов¹⁾, а также законы электрического тока и его взаимодействия с магнитными полюсами (закон Био—Савара) и т. д. Все эти явления находили объяснение с точки зрения дальнего действия, согласно которой один электрический заряд действует непосредственно на другой заряд через все разделяющее их пространство.

Совершенно независимо от изучения электрических и магнитных явлений примерно со времен Ньютона усиленно развивалась оптика — наука о свете²⁾. Хотя сравнительно быстро было установлено, что свет представляет собой поперечные волны, распространяющиеся с конечной скоростью $c \approx 3 \cdot 10^{10}$ см/сек, природа световых волн долгое время оставалась невыясненной.

Все эти предварительные исследования можно отнести к первому этапу развития электродинамики, подготовившему почву для создания теории Максвелла, играющей в электродинамике примерно такую же роль, какую играют законы Ньютона в механике.

Уравнения Максвелла оказались мощным орудием в руках физиков при исследовании электрических, магнитных и световых явлений. Было предсказано существование электромагнитного поля, переносящего взаимодействия непрерывно от точки к точке,

¹⁾ Поскольку свободных магнитных полюсов пока что не обнаружено, то непосредственно закон Кулона в магнетизме проверяется в применении к магнитным диполям.

²⁾ Волновая теория света была предложена Гюйгенсом в конце XVII века. Ньютон же, не отвергая волновую теорию, развивал главным образом корпускулярную теорию света, рассматривая свет как поток мельчайших частиц (теория истечения). В связи с тем, что большинство экспериментальных фактов в особенности после работ Френеля (начало XIX века) в основном укладывались в рамки волновой теории, корпускулярная теория Ньютона была по существу забыта. Только в начале XX века, когда появились новые экспериментальные факты, приведшие к открытию квантовой теории, ученым пришлось вновь, но уже на новой основе вернуться к построению корпускулярно-волновой теории света.

т. е. появилась теория близкодействия, которая нанесла решающий удар дальнодействию. Одним из важнейших следствий теории Максвелла является предсказание существования электромагнитных волн, открытых впоследствии Герцем. В настоящее время теория распространения электромагнитных волн лежит в основе всей современной радиотехники, начало которой было положено изобретением радио А. С. Поповым. Открытие электромагнитных волн было первым триумфом теории Максвелла.

Вторым важнейшим следствием теории Максвелла является доказательство того, что свет представляет собой те же электромагнитные волны, но с малой длиной волны ($\lambda \sim 10^{-5}$ см); таким образом, теория Максвелла ознаменовала новый этап в развитии учения о свете.

Наконец, большую роль в появлении квантовой механики сыграло также развитие атомистического учения о веществе вообще и в особенности об атомизме электричества. Атомистическая гипотеза о строении вещества была высказана еще в античное время. Научное же обоснование она получила сравнительно недавно, когда был открыт фундаментальный закон химии — закон кратных отношений. Большую роль в развитии атомизма сыграло построение кинетической теории материи и, в частности, кинетической теории газов. В основе этой теории лежит созданная Больцманом и Максвеллом классическая статистика.

Следует заметить, что классическая статистика Максвелла — Больцмана, основанная на теории вероятности, не может быть полностью объяснена механикой Ньютона и содержит новые закономерности, свойственные совокупности большого числа частиц (например, необратимость некоторых процессов).

С помощью статистических методов удалось объяснить ряд макроскопических свойств вещества (температуру, теплоемкость и т. д.), что представляет собой лишь косвенное доказательство его атомного строения.

Одним из решающих доказательств в пользу атомизма явилось открытие флуктуаций, т. е. обусловленных движением отдельных молекул отклонений физических характеристик вещества от средних макроскопических значений. В первую очередь здесь следует отметить открытие броуновского движения, которое со всей очевидностью подтверждает наличие молекулярного движения в жидкости.

Еще более внушительным доказательством атомистического строения твердого тела явилось открытие Лауэ дифракции рентгеновских лучей в кристаллах и масс-спектрографического анализа, с помощью которого Астону удалось измерить атомный вес каждого изотопа в отдельности, а не в среднем, как это делалось прежде.

Из атомизма вещества, как неизбежное следствие, вытекает атомизм электричества. Исходя из анализа законов электролиза Фарадея, Гельмгольц показал, что должны существовать атомы положительного и отрицательного электричества, абсолютное значение заряда которых одинаково и всегда равно или кратно элементарному заряду $e_0 = 4,8 \cdot 10^{10}$ CGSE.

Исследование анодных лучей показало, что положительные заряды всегда встречаются в виде ионов, т. е. связаны с основной массой атома. Самый легкий положительный ион, а именно ион атома водорода, обладает массой, приблизительно равной массе атома водорода. Он получил название протона. Что касается носителей отрицательного электричества, то ими могут быть как ионы (связанные с основной массой атома), так и отделенные от атомов отрицательно заряженные частицы, получившие название электронов.

В опытах по отклонению катодных лучей, т. е. потока электронов, в электрическом и магнитном полях, была найдена масса электрона, причем она оказалась примерно в 1836 раз меньше массы протона¹⁾.

На основе этих открытий была построена электронная теория Лоренца, явившаяся своеобразным синтезом электродинамики Максвелла для вакуума и атомистических представлений о веществе, как о среде, состоящей из положительно и отрицательно заряженных частиц. Значения диэлектрической и магнитной проницаемостей, проводимости и т. д. получались в теории Лоренца путем усреднения уравнений Максвелла для вакуума по зарядам и токам образующих вещество частиц. В этой теории проводник рассматривался как некоторая среда, заполненная свободными электронами или, как говорят, «электронным газом».

Только с помощью теории Лоренца удалось показать, что диэлектрическая проницаемость не есть в самом деле постоянная величина, как это предполагалось в теории Максвелла, а зависит от частоты электромагнитных волн. Таким образом, теория Лоренца смогла объяснить явление дисперсии света.

Вместе с электронной теорией Лоренца началось развитие электродинамики движущихся сред, завершившееся созданием специальной теории относительности.

¹⁾ Следует заметить, что в 1932 г. был открыт также позитрон, т. е. частица с положительным зарядом и массой, равной массе электрона. В небольшом количестве позитроны образуются при прохождении космических лучей через вещество. Однако в обычных условиях позитрон в окружающем нас веществе не может существовать сколько-нибудь продолжительное время, поскольку, сталкиваясь с электроном, он превращается вместе с последним в гамма-кванты (более подробно см. § 22 и 31).

Как известно, формулируя математически те или иные законы движения материи (будь то законы движения Ньютона или законы движения электромагнитного поля, нашедшие свое отражение в уравнениях Максвелла), мы должны связывать их с какой-либо системой отсчета. В частности, Ньютон считал, что сформулированные им законы механики относятся к абсолютно неподвижной системе отсчета. Вместе с тем такое понятие абсолютно неподвижной системы отсчета оказалось даже в его учении понятием чисто метафизическим. Сам Ньютон открыл в механике принцип относительности, согласно которому невозможно обнаружить равномерного и прямолинейного движения тела (или систем отсчета) относительно этой абсолютной системы, поскольку все системы отсчета, движущиеся равномерно и прямолинейно друг относительно друга (инерциальные системы), равноправны между собой.

В самом деле, переходя от одной инерциальной системы отсчета (нештрихованной), которую мы примем условно за неподвижную, к другой (штрихованной), движущейся вдоль оси x с постоянной скоростью v , в соответствии с преобразованиями Галилея — Ньютона:

$$x' = x - vt, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = t,$$

мы найдем, что ускорения и силы в обеих системах отсчета будут одинаковыми; поэтому уравнения механики (куда выражение для скорости не входит) останутся при этом переходе неизменными, т. е. инвариантными.

Если же преобразование Галилея — Ньютона применить к уравнениям Максвелла — Лоренца, то последние в каждой инерциальной системе координат будут иметь различный вид, поскольку в эти уравнения входит скорость распространения электромагнитных волн, которая согласно закону сложения скоростей в механике Ньютона в каждой инерциальной системе будет иметь свое значение. Однако многочисленные опыты (в первую очередь опыты Майкельсона) показали, что скорость света во всех инерциальных системах координат должна быть по всем направлениям одной и той же. В связи с этим Эйнштейн предложил обобщение ньютоновского принципа относительности, из которого автоматически следовали так называемые преобразования Лоренца:

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad y' = y, \quad z' = z,$$

$$t' = \frac{t - \beta \frac{x}{c}}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c},$$

представляющие собой обобщение преобразований Галилея — Ньютона. Преобразования Лоренца оставляют законы электродинамики во всех инерциальных координатных системах неизменными (инвариантными). В частности, при таких преобразованиях скорость света в различных инерциальных системах отсчета должна иметь по всем направлениям одно и то же значение c .

Для того чтобы уравнения механики Ньютона также оставались инвариантными относительно преобразований Лоренца, их пришлось заменить релятивистскими уравнениями, из которых, в частности, следует, что масса m движущейся частицы связана с ее скоростью v и массой покоя m_0 соотношением:

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

Заметим, что в случае малых скоростей движения, когда можно положить $\beta^2 \approx 0$, уравнения релятивистской механики переходят в уравнения Ньютона.

Уравнения Максвелла — Лоренца для электромагнитного поля и релятивистское уравнение движения электрона оказались завершающим этапом классической электронной теории. Согласно этой теории свет должен представлять собой электромагнитные волны, а электроны — частицы, движение которых должно описываться законами релятивистской механики.

По мере того как с помощью теории Максвелла — Лоренца объяснялось все большее число явлений микромира (распространение света, дисперсия света в средах, движение электронов в электрическом и магнитном полях и т. д.), постепенно стали накапливаться и такие экспериментальные факты, которые уже не укладывались в рамки классических представлений.

Все эти эксперименты будут сравнительно подробно рассмотрены в § 1—3, и поэтому мы здесь ограничимся лишь кратким их перечислением.

С одной стороны, для построения теории равновесного теплового излучения, фотоэффекта и эффекта Комптона необходимо было ввести предположение о том, что свет наряду с волновыми должен обладать также и корпускулярными свойствами. Это было учтено в теории квант Планка — Эйнштейна. Дискретная структура света нашла свое отражение в постоянной Планка $h = 6,62 \cdot 10^{-27}$ эрг·сек. Теория квант была с успехом также использована при построении первой квантовой теории атома — теории Бора, которая опиралась на модель атома, следовавшую из опытов Резерфорда по рассеянию альфа-частиц различными веществами.

С другой стороны, целый ряд экспериментальных данных, таких, как дифракция, интерференция пучка электронов, говорил

о том, что электроны наряду с корпускулярными свойствами проявляют также и волновые. Длина волны электрона, введенная де-Бройлем, также содержала постоянную Планка h . На базе этого позднее возникла целая отрасль науки — электронная оптика, лежащая в основе расчетов разнообразных электронных устройств, и в первую очередь разрешающей способности электронных микроскопов.

Первым обобщающим результатом тщательного анализа всех экспериментальных данных, подтверждающих квантовую природу света и волновые свойства электронов, а также отдельных, носящих предварительный характер теорий (Планка, Эйнштейна, Бора, де-Бройля), явилось волновое уравнение Шредингера (1926), позволившее вскрыть законы движения электронов и других атомных частиц и построить сравнительно последовательную теорию излучения с учетом квантовой природы света¹). С открытием уравнения Шредингера ученые, исследовавшие атом, получили в свои руки такое же мощное оружие, какое в свое время получили астрономы после открытия основных законов механики Ньютона, включая закон всемирного тяготения.

Поэтому не удивительно, что с открытием уравнения Шредингера многие явления, связанные с движением электронов внутри атома и проблемой излучения и поглощения атомом света, получили теоретическое объяснение (см. § 4—14).

Однако, как оказалось в дальнейшем, теория Шредингера описывала далеко не все свойства атомов; с ее помощью нельзя было, в частности, правильно объяснить взаимодействие атома с магнитным полем (например, аномальный эффект Зеемана), а также построить теорию сложных атомов. Это было связано главным образом с тем обстоятельством, что в теории Шредингера не учитывались спиновые свойства электрона.

Дальнейшим развитием теории Шредингера явилась релятивистская теория Дирака (см. § 15—17). Уравнение Дирака позволило описать как релятивистские, так и спиновые эффекты движущихся электронов (см. § 18—20). При этом оказалось, что если учет релятивистских эффектов в атомах приводит к срав-

¹) Строго говоря, уравнение квантовой механики Шредингера открывает возможность более полно по сравнению с классической механикой Ньютона исследовать движение электронов или других микрочастиц, когда можно пренебречь излучением. Квантовая же теория излучения может быть последовательно сформулирована лишь с учетом квантованных электромагнитных полей (см. § 30). Однако принцип соответствия (см. § 2) позволяет в некоторых простейших задачах теории атома обобщить классические законы излучения непосредственно на квантовую механику и тем самым хотя бы не совсем последовательными методами описать излучение в рамках теории Шредингера (см. § 9).

нительно небольшим количественным поправкам, то учет спиновых эффектов играет при изучении строения атомов с несколькими электронами решающее значение (см. § 23, 24). Только после того как были приняты во внимание спиновые свойства электронов, удалось, наконец, объяснить правило заполнения электронных оболочек в атоме и дать периодическому закону Менделеева, открытому им при изучении химических свойств атомов (см. § 25, 26), строгое обоснование.

С появлением уравнения Дирака принципиальные вопросы, связанные со строением электронной оболочки атома, можно было считать в основном разрешенными, хотя углубление наших знаний в области отдельных деталей должно все время продолжаться. В связи с этим следует заметить, что в настоящее время подробно изучается влияние так называемого электронно-позитронного вакуума, а также влияние магнитных моментов ядер и размеров ядер на энергетические уровни атомов (см. § 21, 22).

Помимо атома, квантовая механика нашла свое применение при исследовании простейших молекул (см. § 27), при построении теории твердого тела (см. § 6), а также при объяснении ряда явлений в атомном ядре (§ 28—30).

В настоящее время накоплен и продолжает накапливаться обширный экспериментальный материал и начала уже создаваться общая теория элементарных частиц, число которых уже более тридцати (см. § 31).

Одной из характерных особенностей первого этапа теории элементарных частиц, получившей название квантовой теории поля, является описание взаимной превращаемости элементарных частиц. В частности, в теории Дирака было предсказано возможное превращение гамма-квантов в пару электрон-позитрон и обратно, что впоследствии было подтверждено экспериментально.

Таким образом, если в классической теории между светом и электронами было два различия: а) свет — волны, электроны — частицы; б) свет может появляться и поглощаться, число же электронов должно оставаться неизменным, то в квантовой механике со свойственным ей корпускулярно-волновым дуализмом было стерто первое различие между светом и электронами. Однако в ней так же, как и в теории Лоренца, число электронов должно было оставаться неизменным. Только после появления квантовой теории поля, описывающей взаимную превращаемость элементарных частиц, было фактически стерто и второе различие.

Следует заметить, что развитие теоретической физики самым тесным образом связано с математикой. В самом деле, основной метод исследования физика-теоретика — вычисления. Поэтому для изучения теоретической физики необходимо обладать определен-

ной суммой знаний в области математики и уметь применять эти знания для проведения различных расчетов.

Далее, поскольку одной из основных задач теоретической физики является изучение реального мира и прежде всего простейших форм его движения, определяющих также и более сложные явления, то естественно, что все эти вопросы всегда связаны с общеполитическими вопросами и, в частности, с вопросом познаваемости микромира.

Поэтому не удивительно, что многие крупные физики, сделавшие важнейшие открытия в области физики, пытались вместе с тем интерпретировать эти открытия с той или иной философской точки зрения.

К сожалению, предлагавшаяся интерпретация была не у всех удачной. К числу подобных физиков в первую очередь следует отнести Маха и Оствальда. Достаточно сказать, что результаты физических исследований Маха в настоящее время играют исключительно важную роль, например, при изучении движения тел со сверхзвуковыми скоростями. Однако, с другой стороны, Мах, исходя из идеалистической теории «принципиальной координации субъекта и объекта», вместе с Оствальдом до конца жизни боролся против «атомистической гипотезы», рассматривая ее как нечто искусственное, введенное учеными лишь для удобства понимания явлений в микромире.

Точно так же известный французский математик и философ А. Пуанкаре, который независимо и почти одновременно с Эйнштейном сформулировал ряд положений специальной теории относительности, усмотрел в появлении новой физики XX века исчезновение материи, т. е. крах материализма. Все эти неправильные методологические выводы, сильно мешавшие пониманию развития современной физики, подверглись резкой критике В. И. Лениным в его известном труде «Материализм и эмпириокритицизм».

В. И. Ленин показал, что наше познание природы, существующей независимо от сознания субъекта, идет по линии асимптотического приближения к истине, и появление новой теории означает не крушение старой, а лишь ее дальнейшее развитие и уточнение, связанное с получением новых экспериментальных фактов. Поэтому те новые открытия в области физики, которые ограничили применимость механического мировоззрения, никоим образом не означают исчезновения материи. Подобного рода неверные интерпретации были связаны с тем обстоятельством, что физики просто не знали диалектики.

Мысль В. И. Ленина о том, что электрон так же неисчерпаем, как и атом, действительно оказалась той путеводной звездой, которая указывает единственно правильный путь развитию современной физики.

Поэтому несмотря на то, что квантовая механика, вскрыв многие закономерности микромира, дала в руки исследователей атома неоценимый математический аппарат, ее нельзя рассматривать как теорию, позволяющую абсолютно точно познать все закономерности микромира.

Если в рамках квантовой механики какие-то явления остаются необъясненными, то это никоим образом не означает, что не надо создавать более совершенных теорий для их объяснения.

ЧАСТЬ I

НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

§ 1. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СВЕТА

В период, предшествовавший появлению квантовой теории (до начала XX в.), т. е. в период господства классической физики, явления, связанные с движением корпускул, резко отличались от явлений, связанных с волновым движением. В связи с этим и окружающий нас мир представлялся состоящим из корпускул (например, электронов и ионов) и полей (например, света), для которых после построения теории Максвелла (1873) как будто окончательно была установлена волновая природа,

Однако уже в конце XIX и в особенности в начале XX в. появились экспериментальные факты, которые не укладывались в рамки классических представлений.

С одной стороны, стали известны такие опытные факты, которые можно было понять только на основе корпускулярных свойств света (распределение энергии в спектре излучения абсолютно черного тела, фотоэффект, комптон-эффект и т. д.), а с другой стороны, были обнаружены волновые свойства электронов (например, их дифракция), на основе чего в настоящее время создана квантовая, или волновая механика, получившая широкое практическое применение.

а. Основные положения электронной теории

Как известно, поведение электромагнитного поля при заданных распределениях зарядов и токов описывается в общем случае уравнениями Максвелла — Лоренца:

$$\begin{aligned}\operatorname{rot} \mathbf{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \frac{4\pi\rho\mathbf{v}}{c}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} &= 0, \\ \operatorname{div} \mathbf{E} &= 4\pi\rho, \\ \operatorname{div} \mathbf{H} &= 0,\end{aligned}\tag{1.1}$$

где \mathbf{E} и \mathbf{H} — напряженности соответственно электрического и магнитного полей, ρ — плотность заряда (например, электрона), а \mathbf{v} — его скорость.

Электромагнитное поле, во-первых, может переносить взаимодействие между зарядами. Взаимодействие между неподвижными зарядами e переносится электростатическим полем, обуславливающим, в частности, закон Кулона

$$F = \frac{e_1 e_2}{r^2},$$

а между движущимися — электрическим и магнитным полями, поскольку движущийся заряд можно рассматривать как электрический ток, который, как известно, взаимодействует с магнитным полем. Существование этих полей, обуславливающих взаимодействие, всегда связано с существованием соответствующих источников, например зарядов.

Во-вторых, электромагнитное поле может представлять собой распространяющиеся со скоростью света c электромагнитные волны (радиоволны, световые волны). Источником излучения световых волн является, в частности, ускоренно движущийся заряд, причем количество энергии, которую он излучает в единицу времени, определяется выражением:

$$W = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega^2}{c^3}, \quad (1.2)$$

где e — заряд, а ω — его ускорение. После того как электромагнитные волны возникли, они могут существовать самостоятельно без наличия зарядов или других источников.

Уравнение, описывающее распространение световой волны, может быть получено из уравнений (1.1), если в них плотность заряда ρ положить равной нулю.

Тогда, исключая из второго уравнения Максвелла вектор \mathbf{H} (для этого достаточно взять от него rot и воспользоваться первым уравнением) и принимая во внимание, что $\text{div } \mathbf{E} = 0$, вследствие чего:

$$\text{rot rot } \mathbf{E} = \text{grad div } \mathbf{E} - \nabla^2 \mathbf{E} = -\nabla^2 \mathbf{E},$$

мы получим следующее волновое уравнение для составляющих вектора \mathbf{E} (а также \mathbf{H}):

$$\nabla^2 f - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0, \quad (1.3)$$

где f — одна из составляющих вектора \mathbf{E} или вектора \mathbf{H} .

Более детальный анализ уравнений Максвелла — Лоренца показывает, что электромагнитные волны являются поперечными, т. е. векторы напряженности электрического (\mathbf{E}) и магнитного (\mathbf{H})

полей ортогональны волновому вектору \mathbf{k} , в направлении которого электромагнитная волна распространяется, а также ортогональны друг другу, причем образуют такую тройку, что при вращении винта с правой нарезкой от \mathbf{E} к \mathbf{H} он будет двигаться по направлению \mathbf{k} :

$$\mathbf{H} = [\mathbf{k}^0 \mathbf{E}], \quad (1.4)$$

где $\mathbf{k}^0 = \mathbf{k}/k$ — единичный вектор.

На заряд, движущийся во внешнем электрическом и магнитном поле (например, на электрон), со стороны последнего действует сила:

$$\mathbf{F} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right), \quad (1.5)$$

получившая название *силы Лоренца*.

Уравнение движения электрона во внешнем поле с учетом релятивистского изменения массы должно принимать вид:

$$\frac{d}{dt} \frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1-\beta^2}} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right), \quad (1.6)$$

где

$$\beta = \frac{v}{c}.$$

Мы можем подобрать функцию Лагранжа \mathcal{L} таким образом, чтобы из вариационного принципа:

$$\delta \int \mathcal{L}(x_i, \dot{x}_i, t) dt = 0, \quad (1.7)$$

т. е. из уравнения:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = 0 \quad (i = 1, 2, 3), \quad (1.8)$$

следовало бы уравнение движения электрона (1.6). Здесь $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$ — пространственные координаты, а \dot{x}_i — соответствующие скорости. Для этого мы должны положить:

$$\mathcal{L} = -m_0 c^2 \sqrt{1-\beta^2} - e\Phi + \frac{e}{c} (\mathbf{v} \mathbf{A}), \quad (1.9)$$

где \mathbf{A} и Φ — векторный и скалярный потенциалы электромагнитного поля, связанные между собой условием Лоренца:

$$\operatorname{div} \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0. \quad (1.10)$$

Векторы напряженности электрического и магнитного полей выражаются через \mathbf{A} и Φ с помощью соотношений:

$$\mathbf{E} = -\operatorname{grad} \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (1.11)$$

$$\mathbf{H} = \operatorname{rot} \mathbf{A}.$$

Тогда для импульса электрона мы найдем выражение:

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} = \frac{m_0 \dot{x}_i}{\sqrt{1 - \beta^2}} + \frac{e}{c} A_i. \quad (1.12)$$

Точно так же для действующей на электрон обобщенной силы будем иметь:

$$Q_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = -e \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \frac{e}{c} \left(\mathbf{v} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_i} \right). \quad (1.13)$$

Подставив (1.12) и (1.13) в (1.8) и приняв во внимание (1.10) и (1.11), получим уравнение движения для электрона (1.6), что оправдывает сделанный нами выбор для функции Лагранжа.

Зная \mathcal{L} , можно определить также функцию Гамильтона H :

$$\begin{aligned} H = \sum_i p_i \dot{x}_i - \mathcal{L} &= \frac{m_0 v^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} + m_0 c^2 \sqrt{1 - \beta^2} + e\Phi = \\ &= \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} + e\Phi. \end{aligned}$$

Как известно, функция Гамильтона должна зависеть не от скорости $c\beta$, а от обобщенного импульса:

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A},$$

связанного благодаря (1.12) с $c\beta$ равенством:

$$c^2 \mathbf{P}^2 + m_0^2 c^4 = \frac{c^2 m_0^2 v^2}{1 - \beta^2} + m_0^2 c^4 = \frac{m_0^2 c^4}{1 - \beta^2}.$$

Поэтому релятивистское выражение функции Гамильтона принимает вид:

$$H = \sqrt{c^2 \mathbf{P}^2 + m_0^2 c^4} + e\Phi. \quad (1.14)$$

Заметим, что если потенциалы не зависят от времени, то функция Гамильтона будет равна полной энергии:

$$E = H.$$

В нерелятивистском приближении ($P \ll m_0 c$) выражение (1.14) может быть представлено в форме:

$$H = H' + m_0 c^2,$$

где H' приближенно равна нерелятивистской части функции Гамильтона:

$$H' \approx H^{\text{нерел.}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} + e\Phi = \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2}{2m_0} + e\Phi. \quad (1.15)$$

Отсюда видно, что релятивистское выражение функции Гамильтона (1.14) включает в себя и собственную энергию покоящегося электрона $m_0 c^2$, учет которой является весьма существенным при изучении превращений одних элементарных частиц в другие.

б. Классическая теория равновесного излучения

Среди широкого круга явлений, связанных с электромагнитными полями, особое место занимает так называемое равновесное излучение, возникающее внутри полости, окруженной со всех сторон теплонепроницаемыми стенками, нагретыми до некоторой постоянной температуры T . Кстати сказать, небольшое отверстие, сделанное в стенке этой полости, можно рассматривать как абсолютно черное тело, так как внешние лучи, падающие на это отверстие, практически не смогут вернуться обратно, т. е. полностью будут поглощены им, точнее, соответствующая вероятность обратного выхода будет ничтожно мала. Таким образом, равновесное излучение следует рассматривать как излучение абсолютно черного тела (его часто называют также черным излучением).

Анализ равновесного излучения сыграл исключительно важную роль в создании квантовой теории.

Дело в том, что все попытки построить полностью удовлетворяющую эксперименту непротиворечивую теорию равновесного излучения, оставаясь на позициях классических представлений, неизбежно терпели неудачу, в то время как многие другие явления находили в классической теории более или менее разумное объяснение.

Только после того как в начале XX века было введено новое понятие планковского кванта, сыгравшее в дальнейшем большую роль при создании первоначальной квантовой теории атома, а затем и квантовой механики, была, наконец, построена последовательная теория черного излучения.

Рассмотрим теперь теорию равновесного излучения, основываясь пока что на классических представлениях. Будем характеризовать излучение спектральной плотностью ρ_ω ¹⁾, связанной с обычной плотностью электромагнитной энергии:

$$u = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2) \quad (1.16)$$

соотношением:

$$\rho_\omega = \frac{du}{d\omega}, \quad (1.17)$$

где du — плотность энергии излучения в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$. Очевидно, что при этом

$$u = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega. \quad (1.18)$$

¹⁾ В литературе в качестве спектральной плотности употребляется также функция ρ_ν . Выбранная нами ρ_ω связана с ρ_ν соотношением:

$$\rho_\omega = \frac{1}{2\pi} \rho_\nu,$$

так как $\omega = 2\pi\nu$.

Кирхгоф на основе второго начала термодинамики показал, что плотность ρ_ω определяется только температурой стенок замкнутой полости и совершенно не зависит от материала стенок, т. е. $\rho_\omega = f(\omega, T)$.

Принимая во внимание это обстоятельство, стенки полости можно отождествить, например, с некоторой совокупностью осцилляторов. Тогда средняя энергия последних будет полностью задаваться спектральной плотностью равновесного излучения. Покажем это, исходя из уравнения движения осциллятора с учетом планковской силы лучистого трения:

$$\ddot{x} + \omega^2 x - \frac{2}{3} \frac{e^2}{m_0 c^3} \ddot{\dot{x}} = \frac{e}{m_0} E_x. \quad (1.19)$$

Здесь e и m_0 — соответственно заряд и масса покоя осциллятора, ω — частота его собственных колебаний, а E_x — x -компонента напряженности электрического поля черного излучения.

Представляя E_x в виде ряда Фурье:

$$E_x = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_{xn} e^{in\omega_0 t}, \quad (1.20)$$

где E_{xn} — амплитуда отдельного колебания поля с частотой:

$$\omega_n = n\omega_0, \quad (1.21)$$

для $x(t)$ из уравнения (1.19) найдем выражение:

$$x = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\frac{e}{m_0} E_{xn} e^{in\omega_0 t}}{\omega^2 - (n\omega_0)^2 + i \frac{2}{3} \frac{e^2 (n\omega_0)^3}{m_0 c^3}}. \quad (1.22)$$

Средняя же энергия осциллятора, равная согласно теореме вириала удвоенному значению средней кинетической энергии, определится при этом формулой:

$$\bar{E} = \overline{m_0 \dot{x}^2} = m_0 \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(in\omega_0) \frac{e}{m_0} E_{xn} e^{in\omega_0 t}}{\omega^2 - (n\omega_0)^2 + i \frac{2}{3} \frac{e^2 (n\omega_0)^3}{m_0 c^3}} \right\}^2, \quad (1.23)$$

где черта означает усреднение по времени. Замечая, что

$$\left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e^{in\omega_0 t} \right\}^2 = \sum_{n, n'=-\infty}^{\infty} f_n f_{-n'} e^{i\omega_0 t (n-n')},$$

причем $f_{-n} = f_n^*$, а также принимая во внимание равенство:

$$\overline{e^{i\omega_0 t (n-n')}} = \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} e^{i\omega_0 t (n-n')} dt = \begin{cases} 1 & \text{при } n' = n, \\ 0 & \text{при } n' \neq n, \end{cases} \quad (1.24)$$

где $\tau = 2\pi/\omega_0$, выражение (1.23) можно привести к виду:

$$\overline{m_0 \dot{x}^2} = 2m_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n\omega_0)^2 \frac{e^2}{m_0^2} |E_{xn}|^2}{\{(n\omega_0)^2 - \omega^2\}^2 + \left\{\frac{2}{3} \frac{e^2 (n\omega_0)^3}{m_0 c^3}\right\}^2}.$$

Это выражение в окрестности частоты ω имеет весьма резкий максимум, и поэтому вся энергия осциллятора будет определяться фактически только теми членами ряда, для которых $n\omega_0 \approx \omega$. В связи с этим в последнем выражении квадрат модуля амплитуды $|E_{xn}|^2$ можно заменить его значением $|E_{xn_0}|^2$, где $n_0 = \frac{\omega}{\omega_0}$, а от суммирования при этом можно перейти к интегрированию. Тогда, учитывая, что согласно (1.21) ¹⁾:

$$d\omega_n = \omega_0 dn = \omega_0 \frac{\omega}{n_0}, \quad (1.25)$$

так как $dn = 1$, получаем:

$$\overline{E} = 2 \frac{n_0 e^2}{m_0} \frac{|E_{xn_0}|^2}{\omega} \int_0^{\infty} \frac{\omega_n^2 d\omega_n}{\{\omega_n^2 - \omega^2\}^2 + \left\{\frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_n^3}{m_0 c^3}\right\}^2}. \quad (1.26)$$

Заменяя здесь всюду за исключением разности $\omega_n - \omega$ частоту ω_n на ω и вводя переменную интегрирования $\xi = \omega_n - \omega$, в результате расширения пределов интегрирования до $\pm \infty$, находим:

$$\begin{aligned} \overline{E} &= 2 \frac{n_0 e^2}{m_0} \frac{|E_{xn_0}|^2}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{4\xi^2 + \left(\frac{2}{3} \frac{e^2 \omega^2}{m_0 c^3}\right)^2} = \\ &= \frac{3\pi n_0 c^3}{2 \omega^3} \cdot |E_{xn_0}|^2. \end{aligned} \quad (1.27)$$

С другой стороны, плотность энергии u , связанная с электромагнитным полем излучения равенством (1.16), также может быть выражена через $|E_{xn_0}|^2$. В самом деле, в силу изотропности излучения на основании (1.16) имеем:

$$u = \frac{1}{8\pi} (\overline{E^2} + \overline{H^2}) = \frac{1}{4\pi} \overline{(E_x^2 + E_y^2 + E_z^2)}, \quad (1.28)$$

или, учитывая разложение (1.20) и правило усреднения по t (1.24), находим:

$$u = \frac{3}{4\pi} \overline{E_x^2} = \frac{3}{4\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |E_{xn}|^2 = \frac{3}{2\pi} \int_0^{\infty} |E_{xn}|^2 dn. \quad (1.29)$$

Отсюда, принимая во внимание (1.18), а также соотношение:

$$dn = \frac{d\omega_n}{\omega_0} = n_0 \frac{d\omega_n}{\omega}, \quad (1.30)$$

¹⁾ Читателя не должно смущать приравнивание дифференциала $d\omega_n$ к конечной величине $\omega_0 = 2\pi/\tau$. В самом деле, период τ всегда можно выбрать настолько большим, что будет иметь место соотношение: $\omega_0 \ll \omega$. Математически это соответствует переходу от ряда к интегралу Фурье.

при $\omega_n = \omega$ ($n = n_0$) получаем:

$$\rho_\omega = \frac{3n_0}{2\pi} \frac{|E_{xn_0}|^2}{\omega}. \quad (1.31)$$

Сравнивая (1.31) и (1.27), находим зависимость между средней энергией $\bar{E} = \overline{m_0 x^2}$ осциллятора и спектральной плотностью излучения ρ_ω :

$$\rho_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \bar{E}, \quad (1.32)$$

которая и положена в основу теории равновесного излучения.

В классической статистической физике распределение частиц по энергиям задается функцией:

$$N(E) = Ae^{-\alpha E}, \quad (1.33)$$

где $\alpha = \frac{1}{kT}$, $k = 1,38 \cdot 10^{-16}$ эрг·град⁻¹ — постоянная Больцмана, а T — температура среды. В связи с этим средняя энергия будет равна:

$$\begin{aligned} E &= \frac{A \int_0^\infty E e^{-\alpha E} dE}{A \int_0^\infty e^{-\alpha E} dE} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \int_0^\infty e^{-\alpha E} dE = \\ &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \alpha = kT \quad 1). \end{aligned} \quad (1.34)$$

1) Вообще говоря, среднюю энергию одномерного осциллятора следует вычислять по формуле:

$$\bar{E} = \frac{A \int dx \int dp E e^{-\alpha E}}{A \int dx \int dp e^{-\alpha E}}, \quad (1.34a)$$

где

$$E = \frac{p^2}{2m_0} + m_0 \omega^2 \frac{x^2}{2},$$

а интегралы по x и p берутся в пределах от $-\infty$ до $+\infty$.

В формуле (1.34a) сделаем замену:

$$p = \sqrt{2m_0 E} \cos \varphi \text{ и } x = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m_0}} \sin \varphi$$

и учтем, что

$$dp dx = D dE d\varphi,$$

где модуль определителя:

$$D = \left\| \begin{array}{cc} \frac{\partial p}{\partial \varphi} & \frac{\partial p}{\partial E} \\ \frac{\partial x}{\partial \varphi} & \frac{\partial x}{\partial E} \end{array} \right\| = \frac{1}{\omega}.$$

Тогда после интегрирования по φ ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$) получаем для E значение (1.34). Результат (1.34) является вполне очевидным, поскольку линейный осциллятор обладает двумя степенями свободы (поступательное движение центра тяжести и колебание около центра тяжести), а на каждую степень свободы, как известно, приходится в среднем энергия $\frac{1}{2} kT$.

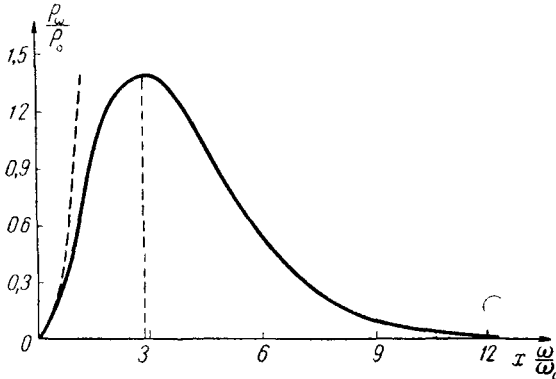
Подставляя это значение \bar{E} в соотношение (1.32), получаем формулу Рэлея — Джинса:

$$\rho_{\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT. \quad (1.35)$$

Эта формула удовлетворяет термодинамическому закону Вина:

$$\rho_{\omega} = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right), \quad (1.36)$$

полученному им после ряда работ — в том числе важных работ русских физиков В. А. Михельсона и Б. Б. Голицина — на ос-



Фиг. 1.1 Спектр излучения абсолютно черного тела.

Штриховая (жирная) линия — кривая Рэлея — Джинса $\rho_{\omega} = \rho_0 \omega^2$, сплошная линия — кривая Планка $\rho_{\omega} = \rho_0 x^3 / (e^x - 1)$, совпадающая с экспериментальной. Здесь $\rho_0 = (kT)^3 / \pi^2 \hbar^2 c^3$, $\omega = \omega_0 x$, $\omega_0 = kT / \hbar$.

нове термодинамики и электромагнитной теории света, и в области длинных волн (малых частот) находится в хорошем согласии с экспериментальными данными. Однако в коротковолновой части расхождение с экспериментом (см. фиг. 1.1) становится значительным.

Точно так же, если воспользоваться формулой Рэлея — Джинса для вычисления плотности энергии излучения u [см. (1.18)], то мы найдем, что соответствующий интеграл расходится, т. е. получаем явно абсурдный результат:

$$u = \int_0^{\infty} \rho_{\omega} d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \omega^2 d\omega = \infty. \quad (1.37)$$

Это было названо Эренфестом «ультрафиолетовой катастрофой». Таким образом, классическая теория оказалась не в состоянии дать сколько-нибудь удовлетворительное описание равновесного излучения.

в. Формула Планка

Для устранения «ультрафиолетовой катастрофы» Планк в 1900 г. выдвинул существенную гипотезу, коренным образом изменившую ряд основных положений классической физики. А именно, Планк предположил, что энергия микроскопических систем (атомов, молекул и т. д.) может принимать не любые непрерывные, а только определенные дискретные значения. В частности, при построении теории черного излучения Планк выбрал модель осциллятора, предположив, что его энергия может принимать только определенные дискретные значения, кратные минимальной энергии ϵ :

$$E = n\epsilon, \quad (1.38)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$.

В связи с этим при определении среднего значения мы должны интеграл (1.34) заменить суммой:

$$\begin{aligned} E &= -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon e^{-n\alpha\epsilon} = \\ &= -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \frac{\epsilon}{1 - e^{-\alpha\epsilon}} = \frac{\epsilon}{e^{\alpha\epsilon} - 1}. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Подставляя это значение \bar{E} в (1.32), для спектральной плотности излучения получаем формулу:

$$\rho_{\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\epsilon}{e^{\frac{\epsilon}{kT}} - 1}. \quad (1.40)$$

Чтобы эту формулу привести в соответствие с термодинамическим законом Вина (1.36), достаточно положить ϵ пропорциональным ω :

$$\epsilon = \hbar\omega. \quad (1.41)$$

Тогда получаем формулу Планка:

$$\rho_{\omega} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega/kT} - 1)}, \quad (1.42)$$

явившуюся блестящим достижением квантовой теории.

Величина $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-27}$ эрг·сек, имеющая размерность действия, получила название *постоянной Планка*¹⁾.

¹⁾ В литературе чаще постоянной Планка называют величину $h = 2\pi\hbar = 6,6249 \cdot 10^{-27}$ эрг·сек, которая связывает энергию ϵ с частотой ν :

$$\epsilon = h\nu.$$

Для небольших частот ($\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1$) экспоненту $e^{\hbar\omega/kT}$ можно представить в виде разложения в ряд по ($\hbar\omega/kT$); тогда, ограничиваясь линейным членом разложения, имеем:

$$e^{\hbar\omega/kT} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{kT}.$$

При этом формула Планка (1.42) переходит в формулу Рэлея — Джинса (1.35).

В случае же больших частот ($\frac{\hbar\omega}{kT} \gg 1$) в знаменателе (1.42) можно пренебречь единицей и тогда ρ_ω запишется в форме:

$$\rho_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\hbar\omega/kT}. \quad (1.43)$$

Формула Планка (1.42), описывающая зависимость спектральной плотности теплового излучения ρ_ω от частоты ω , находится в прекрасном согласии с экспериментом (см. фиг. 1.1).

На основании формулы (1.42) и соотношения (1.18) можно найти интегральную плотность излучения:

$$u = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (1.44)$$

Вводя переменную $\xi = \hbar\omega/kT$ и учитывая, что

$$\int_0^\infty \frac{\xi^3 d\xi}{e^\xi - 1} = \frac{\pi^4}{15}, \quad 1)$$

¹⁾ Для того чтобы раскрыть этот интеграл, мы должны разложить подынтегральное выражение в ряд:

$$\frac{\xi^3}{e^\xi - 1} = \xi^3 (e^{-\xi} + e^{-2\xi} + e^{-3\xi} + \dots).$$

Тогда, принимая во внимание, что

$$\int_0^\infty \xi^3 e^{-a\xi} d\xi = \frac{6}{a^4}$$

и

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90},$$

легко докажем искомое равенство.

получаем известный закон Стефана — Больцмана¹⁾:

$$u = \frac{\pi^2}{15} \frac{k^4 T^4}{c^3 \hbar^3} = a T^4, \quad (1.45)$$

где

$$a = \frac{\pi^2 k^4}{15 c^3 \hbar^3} = 7,56 \cdot 10^{-16} \text{ эрг} \cdot \text{см}^3 \cdot \text{град}^{-4}. \quad (1.46)$$

Как видно из формулы (1.42), спектральная плотность равновесного излучения при некотором ω должна иметь максимум, положение которого зависит от температуры (закон смещения Вина). Однако закон смещения Вина обычно записывается для спектрального распределения ρ_λ по длинам волн λ . Чтобы определить ρ_λ , воспользуемся выражением для u :

$$u = \int_0^\infty \rho_\lambda d\lambda.$$

Учитывая, что $\lambda = 2\pi c/\omega$, при переходе к спектральному распределению по частотам будем иметь:

$$u = \int_0^\infty \frac{\lambda^2}{2\pi c} \rho_\lambda d\omega = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega. \quad (1.47)$$

Отсюда находим:

$$\rho_\lambda = \frac{2\pi c}{\lambda^2} \rho_\omega = \frac{16\pi^2 c \hbar}{\lambda^5 (e^{\frac{\hbar c}{kT\lambda}} - 1)}. \quad (1.48)$$

Чтобы определить значение $\lambda_{\text{макс.}}$, при котором ρ_λ имеет максимальное значение, производную $\frac{\partial \rho_\lambda}{\partial \lambda}$ следует приравнять нулю:

$$\left\{ -5 + \frac{\frac{2\pi c \hbar}{kT\lambda_{\text{макс.}}} \cdot e^{\frac{2\pi c \hbar}{kT\lambda_{\text{макс.}}}}}{\frac{2\pi c \hbar}{kT\lambda_{\text{макс.}}}} - 1 \right\} = 0.$$

Полагая $2\pi c \hbar / kT\lambda_{\text{макс.}} = y$, приходим к уравнению:

$$y = 5(1 - e^{-y}),$$

¹⁾ Обычно измеряют не плотность u , а энергию σT^4 , излучаемую в 1 сек черным телом с 1 см² его поверхности в одну сторону ($\Omega = 2\pi$). Здесь постоянная Стефана — Больцмана:

$$\sigma = 2\pi \frac{c}{8\pi} a = \frac{c}{4} a = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ эрг} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{град}^{-4} \cdot \text{сек}^{-1}.$$

решение которого с большой точностью может быть представлено в виде:

$$y \approx 5(1 - e^{-5}) = 4,965.$$

Таким образом, $\lambda_{\text{макс}}$ оказывается связанным с температурой T при помощи соотношения:

$$\lambda_{\text{макс}} T = \frac{2\pi c \hbar}{4,965k} = b = 0,29 \text{ см} \cdot \text{град}, \quad (1.49)$$

выражающего закон смещения Вина, причем b называется постоянной Вина. Согласно этому закону при повышении температуры абсолютно черного тела максимум интенсивности излучения смещается в сторону более коротких длин волн (см. фиг. 1.2).

Равенства (1.46) и (1.49) связывают постоянные Планка \hbar и Больцмана k с постоянными a и b .

Зная же численные значения a и b , мы можем определить \hbar и k . Таким образом, впервые было найдено численное значение для \hbar и уточнено значение для k .

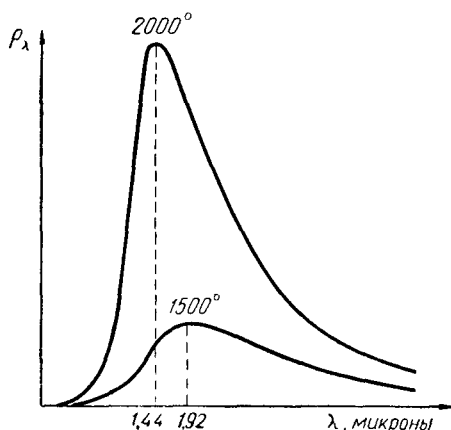
Резюмируя, можно сказать, что, согласно гипотезе Планка, такие процессы, как излучение и поглощение, должны обладать квантовым характером, т. е. изменение

энергии микрочастиц в этих процессах должно происходить скачкообразно, а не плавно, как это следует из классической физики.

г. Теория фотонов Эйнштейна

При выводе своей формулы Планк предположил, что осцилляторы могут принимать лишь дискретные значения энергии. Однако это новое свойство осциллятора в первоначальном варианте теории осталось физически не обоснованным (точнее, сам Планк «особые свойства» старался скорее приписать только нагретому телу, а не электромагнитному излучению).

Эйнштейн сделал второй крупный шаг на пути развития теории «квант». А именно, он выдвинул новую гипотезу, согласно которой осцилляторы могут порциями поглощать и испускать



Фиг. 1.2. Закон смещения Вина.

Кривые распределения энергии в спектре абсолютно черного тела в зависимости от температуры:
 $\lambda_{\text{макс}} T \approx 0,29 \text{ см} \cdot \text{град}.$

электромагнитную энергию благодаря тому, что само электромагнитное излучение состоит из отдельных корпускул — фотонов, несущих энергию $\hbar\omega$. Таким образом, Эйнштейн считает, что формула Планка характеризует прежде всего корпускулярные свойства света.

Попытаемся теперь построить элементарную теорию фотонов.

Согласно классической теории, энергия световой волны определяется равенством:

$$\varepsilon = \frac{1}{8\pi} \int (E^2 + H^2) d^3x = \frac{1}{4\pi} \int E^2 d^3x, \quad (1.50)$$

где d^3x — элемент объема, и интегрирование проводится по всему пространству. Электромагнитное же количество движения (т. е. импульс) π световой волны дается в классической теории формулой:

$$\pi = \frac{1}{4\pi c} \int [EH] d^3x, \quad (1.51)$$

которую, согласно (1.4), можно записать также в виде:

$$\pi = \frac{k^0}{4\pi c} \int E^2 d^3x. \quad (1.51 \text{ а})$$

Сравнивая (1.51 а) с (1.50), находим связь между импульсом π и энергией ε :

$$\pi = k^0 \frac{\varepsilon}{c}. \quad (1.52)$$

Такое же соотношение между энергией и импульсом имеет место и в теории относительности для частиц с нулевой массой покоя, что может быть легко получено из равенства (1.14), полагая в последнем $m_0 = 0$, $\Phi = 0$, $A = 0$.

Исходя из этих соображений, Эйнштейн пришел к заключению, что электромагнитное поле можно рассматривать как совокупность частиц — фотонов с массой покоя, равной нулю, и энергией:

$$\varepsilon = \hbar\omega. \quad (1.53)$$

Для импульса фотона при этом получается соотношение:

$$\pi = k^0 \frac{\hbar\omega}{c} = k^0 \frac{\hbar}{\lambda} = \hbar k, \quad (1.54)$$

где $h = 2\pi\hbar$, $k = \frac{2\pi k^0}{\lambda}$ — волновой вектор ($k = \frac{2\pi}{\lambda}$ — волновое число).

На основе этих представлений Эйнштейном в 1905 г. была построена количественная теория фотоэлектрического эффекта, открытого Герцем (1887)¹⁾. Сущность фотоэффекта заключается

¹⁾ Большую роль в исследовании фотоэффекта сыграли также опыты русского физика А. Г. Столетова.

в том, что искра между двумя заряженными шариками проскакивает при меньшем напряжении между ними, если осветить катод, по сравнению с тем, когда катод не освещен. Для объяснения этого явления Эйнштейн предложил простое уравнение:

$$\frac{m_0 v^2}{2} = \hbar\omega - W, \quad (1.55)$$

представляющее собой баланс энергии и означающее, что кинетическая энергия $\frac{m_0 v^2}{2}$ вылетевшего электрона должна быть равной разности энергии поглощенного фотона $\hbar\omega$ и работы выхода W электрона из металла. Очевидно, что если $\hbar\omega < W$, то электроны не могут выйти из металла. Только в том случае, когда энергия падающих фотонов превысит величину W , электроны смогут покинуть металл.

Экспериментальная проверка теории фотоэффекта Эйнштейна блестяще подтвердила основной вывод о том, что энергия вылетевших электронов зависит только от частоты (но не от интенсивности) падающего света, причем фотоэлектроны начинают вылетать тогда, когда частота света ω будет превышать некоторое предельное значение:

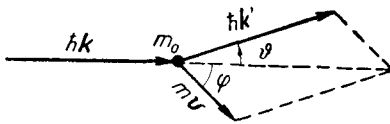
$$\omega > \frac{W}{\hbar}.$$

Весьма убедительно выводы теории фотонов были подтверждены экспериментально в 1923 г. при исследовании рассеяния рентгеновских лучей свободными электронами (эффект Комптона). Эффект Комптона интересен еще и в том отношении, что в нем проверяется не только закон сохранения энергии (как в теории фотоэффекта), но и закон сохранения импульса.

Как известно, в классической теории при рассеянии света свободными электронами его частота не меняется ($\omega' = \omega$). По квантовой же теории часть энергии фотона $\varepsilon = \hbar\omega$ передается электрону (см. фиг. 1.3) и поэтому энергия рассеянного фотона $\varepsilon' = \hbar\omega'$, а вместе с тем и его частота, вообще говоря, должны быть несколько меньше ($\varepsilon' < \varepsilon$, $\omega' < \omega$).

Чтобы найти зависимость частоты от угла рассеяния, напишем законы сохранения энергии и импульса, рассматривая фотоны, как частицы:

$$\begin{aligned} \hbar\omega - \hbar\omega' &= c^2(m - m_0), \\ \hbar k - \hbar k' &= m\mathbf{v}. \end{aligned} \quad (1.56)$$



Фиг. 1.3. Рассеяние света на свободном электроне (эффект Комптона).

Здесь m_0 и $m = m_0/\sqrt{1 - \beta^2}$ — масса электрона соответственно до и после столкновения, v — его скорость, $\beta = v/c$, $\hbar k = \hbar\omega/c$ и $\hbar k' = \hbar\omega'/c$ — импульс фотона до и после рассеяния.

Перепишем уравнения (1.56) в виде:

$$\begin{aligned}\omega - \omega' &= \frac{c^2}{h} (m - m_0), \\ k - k' &= \frac{mv}{h}.\end{aligned}\quad (1.56 a)$$

Возводя эти равенства в квадрат и вычитая затем первое равенство из второго, получаем:

$$\omega\omega'(1 - \cos\vartheta) = \frac{m_0c}{h} (c\omega - c\omega').\quad (1.57)$$

Замечая далее, что $\lambda = 2\pi c/\omega$ и $\lambda' = 2\pi c/\omega'$, после деления (1.57) на $\omega\omega'$, находим выражение для увеличения длины волны рассеянного света:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2\lambda_0 \sin^2 \frac{\vartheta}{2},\quad (1.58)$$

где λ_0 — комптоновская длина волны электрона:

$$\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{m_0c} = \frac{h}{m_0c} = 2,4 \cdot 10^{-10} \text{ см.}$$

Таким образом, мы видим, что с точки зрения квантовых представлений длина волны рассеянного света λ' должна быть больше начальной λ ($\lambda' > \lambda$), так как $\omega' < \omega$. Это увеличение тем существеннее, чем больше угол рассеяния ϑ . Поскольку комптоновская длина волны λ_0 сравнительно малая величина, комптоновское рассеяние можно наблюдать при сравнительно малых длинах волн (рентгеновское излучение, гамма-кванты). В самом деле, для видимого света ($\lambda \sim 10^{-8}$ см):

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \sim \frac{\lambda_0}{\lambda} \sim 10^{-8} = 10^{-3} \%,$$

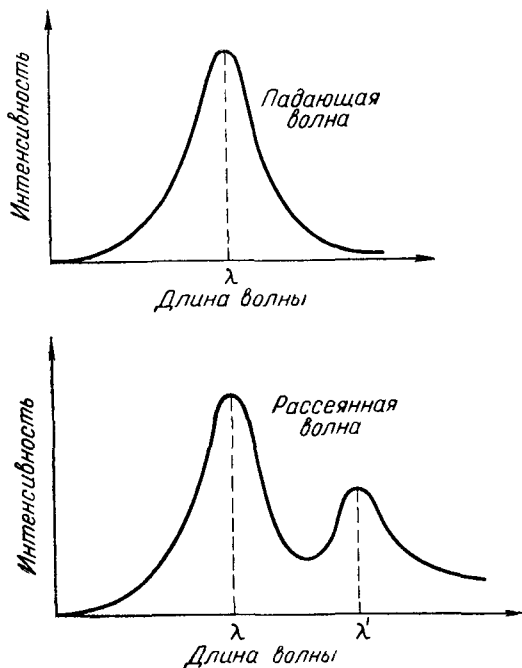
для рентгеновских же лучей ($\lambda \sim 10^{-8} \div 10^{-9}$ см):

$$\frac{\lambda_0}{\lambda} \sim 10^{-1} = 10 \%.$$

Поэтому только во втором случае комптоновское смещение может наблюдаться экспериментально.

Опыты Комптона представляли собой исследование рассеяния излучения рентгеновской трубки на графите или другом веществе (литии, бериллии, натрии, калии, железе, никеле, меди и т. д.) под различными углами ϑ . Спектральное же распределение интенсивности рассеянного излучения под различными углами измерялось при помощи ионизационной камеры.

На фиг. 1.4 изображено спектральное распределение падающей и рассеянной волны. Если в падающей волне (верхняя кривая) имеется один максимум, то в рассеянной (нижняя кривая) наряду с этим максимумом появляется дополнительный максимум, смещенный в сторону длинных волн.



Фиг. 1.4. Спектральные распределения рентгеновских лучей в эффекте Комптона до (верхняя кривая) и после (нижняя кривая) рассеяния.

Поскольку длина волны, соответствующая этому дополнительному максимуму, смещается в соответствии с формулой (1.58) тем сильнее, чем больше угол рассеяния, и не зависит от рода вещества, то он должен соответствовать комptonовскому смещению¹⁾. Несмещенный максимум соответствует рассеянию на электронах атома, сильно связанных с ядром (точнее на электронах, у которых энергия связи с ядром больше энергии кванта рентгеновских лучей). Смещенный же максимум соответствует рассеянию на электронах, слабо связанных с ядром, когда практически их можно считать свободными.

Таким образом, результаты опытов Комптона полностью подтвердили квантовую природу света (теорию фотонов).

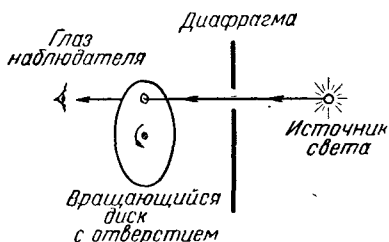
Рассмотрим, наконец, весьма интересные опыты С. И. Вавилова с флуктуациями видимого света. Если световой поток действительно представляет собой совокупность отдельных фотонов, то согласно законам статистической физики он может флуктуировать, т. е. число фотонов в единице объема может с течением времени хаотически изменяться.

¹⁾ От природы рассеивающего вещества зависит лишь величина интенсивности смещенного и несмещенного максимумов. При увеличении атомного веса рассеивающего вещества интенсивность несмещенной линии возрастает, а смещенной — уменьшается.

Известно также, что для человеческого глаза существует резкий зрительный порог ощущения: если энергия излучения, падающего на сетчатку глаза, меньше некоторой определенной величины, то глаз совершенно не ощущает света. Этими двумя свойствами и воспользовался С. И. Вавилов для непосредственного наблюдения квантовых флуктуаций света.

По оценке Вавилова, приближенное число фотонов, необходимых для того, чтобы вызвать зрительное ощущение глаза, достаточно долго пробывшего в темноте, составляет около 200. При этом небольшое уменьшение (примерно на 10 фотонов) может привести к тому, что свет уже не будет воздействовать на глаз наблюдателя.

Пропуская лучи зеленого света (к этому цвету глаз человека наиболее чувствителен) через отверстие диска (см. фиг. 1.5), вращающегося с частотой, подобранной таким образом, чтобы глаз мог отдыхать (вспышка создавалась длительностью 0,1 сек, а в течение 0,9 сек глаз отдыхал), наблюдатель мог фиксировать вспышку, нажимая кнопку хронографа. Яркость светового источника можно было непрерывно уменьшать.



Фиг. 1.5. Схема опытов Вавилова с флуктуациями света.

В результате опыта оказалось, что вначале наблюдатель отмечает каждую вспышку. При дальнейшем же понижении яркости вспышки перестают соответствовать каждому прохождению света через отверстие диска, т. е. начинают наблюдаться флуктуации: в одном случае вспышки видны, в другом нет, хотя яркость при этом не изменяется. Это говорит о том, что при понижении интенсивности число фотонов в данном пучке флуктурует настолько сильно, что изучаемый пучок может стать то видимым, то невидимым.

Таким образом, С. И. Вавилов показал, что пучок света наряду с интенсивностью, частотой и поляризационными свойствами должен характеризоваться также и флуктуациями. Последнее же обстоятельство может быть понятно только в том случае, если свет имеет дискретную структуру. Большой экспериментальный материал, полученный С. И. Вавиловым, окончательно подтвердил фотонную природу света, в соответствии с теорией Эйнштейна.

Более того, как нам кажется, эти опыты Вавилова с флуктуациями световых пучков дали новое понимание связи волно-

вых и корпускулярных свойств света, которые мы постараемся использовать при интерпретации корпускулярно-волнового дуализма в квантовой механике (см. § 3 и 7)¹⁾.

§ 2. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ БОРА

а. Основные сведения о свойствах атомов

Построению теории атома предшествовало получение надежных экспериментальных данных при изучении следующих эффектов.

1) Излучение света атомами. В результате тщательного изучения излучения атомов было установлено, что спектр атомов является линейчатым и образует определенные серии. Например, все линии в атоме водорода можно было объединить известной формулой Бальмера²⁾:

$$\omega = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (2.1)$$

где R — постоянная Ридберга, n' и n — целые числа. Полагая здесь $n' = 1$ и $n = 2, 3, 4, \dots$, получим серию Лаймана, лежащую в ультрафиолетовой части спектра.

При $n' = 2$ и $n = 3, 4, 5, \dots$ будем иметь расположенную в видимой части спектра и в связи с этим наиболее доступную для изучения серию Бальмера и т. д.

Формулу (2.1) можно также представить в виде разности двух величин:

$$\omega_{nn'} = T_{n'} - T_n, \quad (2.1a)$$

¹⁾ Работы С. И. Вавилова изложены в его монографии «Микроструктура света», изд. АН СССР, М., 1950.

²⁾ В спектроскопии формулу Бальмера записывают, как правило, в виде:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\text{сп.}} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

где постоянная Ридберга для атома водорода $R_{\text{сп.}} = 109677,6 \text{ см}^{-1}$.

Значение постоянной Ридберга в (2.1) связано с $R_{\text{сп.}}$ при помощи соотношения:

$$R = 2\pi c R_{\text{сп.}} = 2\pi \cdot 3,29 \cdot 10^{15} \text{ сек}^{-1} = 20,66 \cdot 10^{15} \text{ сек}^{-1}.$$

Заметим, что в спектроскопии последнее выражение является не совсем удобным ввиду того, что экспериментально, как правило, определяются длины волн. При построении же теории это обстоятельство не является существенным, поскольку мы всегда можем совершить переход от частот ω к длинам волн:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\omega}{2\pi c}.$$

получивших название *спектральных термов*. Для атома водорода эти термы равны:

$$T_n = \frac{R}{n^2}.$$

Возможность представления частоты излучения как разности двух термов следует из так называемого комбинационного принципа Ритца¹⁾, имеющего большое значение при изучении спектра не только атома водорода, но и более сложных атомов.

Заметим, что вначале для атома водорода были обнаружены две серии, соответствующие $n' = 1$ (серия Лаймана) и $n' = 2$ (серия Бальмера). На основе комбинационного принципа Ритца была предсказана третья серия с $n' = 3$ и $n = 4, 5, 6, \dots$, которая затем была экспериментально открыта Пашеном в инфракрасной области спектра.

2) Поведение атома во внешнем электрическом и магнитном полях и в особенности взаимодействие атома с быстрыми частицами, проходящими сквозь вещество.

В этом отношении наиболее существенными оказались опыты Резерфорда, которому удалось найти распределение положительного заряда внутри атома путем исследования рассеяния быстрых альфа-частиц при прохождении их через вещество.

3) Наконец, важные данные о свойствах атомов были получены при анализе различных свойств молекул. Образование простейших гомеоплярных молекул, а также теория валентности получили свое объяснение только на основе современной квантовой теории атома.

6. Классическая модель атома

После того как было установлено, что атом состоит из положительно заряженной части, связанной с основной массой атома, и легких отрицательно заряженных электронов, были сделаны попытки построить статическую модель. Такой подход подсказыв-

1) Комбинационный принцип Ритца вначале был сформулирован следующим образом: если мы имеем две различные частоты, принадлежащие одной и той же серии, то разность между этими частотами дает частоту, которую также может излучать атом, но она будет принадлежать другой серии. С помощью понятия термов это может быть объяснено сравнительно просто. В самом деле,

$$\omega_{nn'} = T_{n'} - T_n, \quad \omega_{n''n'} = T_{n'} - T_{n''},$$

откуда находим:

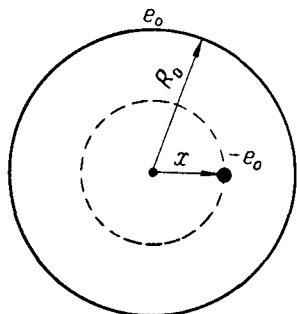
$$\omega_{nn'} - \omega_{n''n'} = T_{n''} - T_n = \omega_{nn''}.$$

Таким образом, комбинационный принцип Ритца непосредственно ведет к соотношению (2.1а).

вался тем обстоятельством, что, согласно классической электродинамике, ускоренно движущийся электрон должен излучать. Количество энергии, излучаемое им в единицу времени, определяется формулой:

$$W = -\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega^2}{c^3}, \quad (2.2)$$

где $e = -e_0$ — заряд электрона ($e_0 = 4,80 \cdot 10^{-10}$ CGSE — элементарный заряд), ω — ускорение электрона, c — скорость света в вакууме. Знак минус перед $\partial E/\partial t$ показывает, что благодаря излучению энергия электрона уменьшается. Поскольку в основном состоянии атомы не излучают, то согласно классической теории, заряды в них должны покоиться.



Фиг. 2.1. Модель атома водорода по Томсону.

Положительный заряд e_0 равномерно распределен по объему сферы радиуса R_0 . Электрон (с зарядом $-e_0$) находится на расстоянии x от центра атома.

Наиболее интересной классической моделью оказалась модель Томсона, согласно которой положительный заряд атома должен равномерно заполнять весь атом, а внутри него находятся практически точечные отрицательные заряды — электроны.

Например, в атоме водорода его положительный заряд e_0 должен равномерно заполнять сферу радиуса R_0 (см. фиг.

2.1). Плотность заряда внутри сферы будет определяться выражением:

$$\rho = \frac{3e_0}{4\pi R_0^3}.$$

В основном состоянии по этой теории электрон должен находиться в центре сферы, где электрическое поле равняется нулю. На расстоянии $r = x < R_0$ от центра электрическое поле E будет направлено по радиусу, причем его значение может быть найдено по теореме Гаусса:

$$E_r r^2 = \rho \frac{4\pi}{3} r^3 = \frac{e_0 r^3}{R_0^3},$$

откуда

$$E = \frac{e_0}{R_0^3} r. \quad (2.3)$$

Поэтому на электрон с зарядом $e = -e_0$ и массой m_0 , удаленный от центра атома на расстояние x , должна действовать квазиупругая сила притяжения к центру:

$$F = -e_0 E = -\frac{e_0^2}{R_0^3} x = -m_0 \omega_0^2 x.$$

Учитывая эту силу, можно написать следующее дифференциальное уравнение:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0, \quad (2.4)$$

описывающее движение электрона. Решение этого уравнения имеет вид:

$$x = A \cos(\omega_0 t + \varphi_0),$$

где

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{e_0^2}{m_0 R_0^3}}.$$

Подставляя сюда вместо ω_0 основную частоту, наблюдаемую в серии Бальмера, находим для радиуса атома вполне разумное значение $R_0 \sim 10^{-8}$ см. Эта величина во много раз больше классического радиуса электрона:

$$r_0 = \frac{e_0^2}{m_0 c^2} \cong 2,8 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

Модель Томсона вполне соответствовала классической теории Лоренца, согласно которой атомы должны были представлять собой гармонические осцилляторы.

В то же время модель Томсона не могла объяснить законы линейчатых спектров атомов и, в частности, возникновение спектральных серий в атоме водорода, описываемых формулой (2.1), поскольку, согласно классической теории, томсоновский атом мог излучать в лучшем случае, кроме основной частоты ω_0 , лишь ее гармоники:

$$\omega_n = n\omega_0, \quad (2.5)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$

Однако против модели Томсона говорили опыты Резерфорда, в которых было показано, что положительный заряд распределен не по всему объему атома, а сосредоточен в объеме с радиусом много меньше атомного, т. е. с точки зрения атомных размеров — в одной точке. Тем не менее томсоновский потенциал внутри ядра конечных размеров с зарядом Ze_0^1 , равномерно распределенным по объему:

$$\Phi = \frac{Ze_0}{R_0} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R_0^2} \right), \quad (2.6)$$

играет известную роль, в особенности, когда следует учитывать небольшие поправки на объем ядра. Необходимо также заме-

¹⁾ Если заряд ядра равен Ze_0 , то вектор напряженности электрического поля внутри ядра будет равен:

$$\mathbf{E} = \frac{Ze_0}{R_0^3} \mathbf{r} = - \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{\mathbf{r}}{r}.$$

Отсюда, учитывая граничное условие, согласно которому при $r = R_0$ потенциал должен переходить в потенциал точечного заряда, т. е. в

$$\Phi_{r=R_0} = \frac{Ze_0}{R_0},$$

приходим к соотношению (2.6).

тить, что при образовании мезоатомов (вместо электрона в состав атома входит отрицательный мю-мезон, масса которого в 207 раз больше массы электрона) при больших Z могут быть такие состояния, когда отрицательный мю-мезон все время будет находиться внутри ядра. В этом случае движение мю-мезона будет в основном определяться потенциалом (2.6). Однако законы его движения будут не классические, а квантовые (более подробно см. § 21).

в. Опыты Резерфорда. Строение атома по Резерфорду

Современная модель атома была установлена на основе знаменитых опытов Резерфорда (1911), исследовавшего прохождение альфа-частиц сквозь вещество. Как известно, альфа-частицы, образовавшиеся в результате ядерного распада, обладают достаточной энергией, чтобы проникнуть в глубь атома. В то время не было еще известно других источников получения достаточно тяжелых (т. е. по массе соизмеримых с массой ядра) частиц, обладающих столь большой энергией, чтобы проникнуть внутрь атома.

Пропуская альфа-частицы через тонкие металлические пластинки (фольги), Резерфорд показал¹⁾, что большая часть прошедших сквозь вещество альфа-частиц отклоняется от своего первоначального направления движения (рассеивается) на сравнительно малые углы ($2-3^\circ$). Эти небольшие отклонения можно было трактовать в рамках томсоновской модели с точки зрения статистической теории случайных процессов как результат сравнительно слабых воздействий атомов на альфа-частицы. Однако наряду с рассеянием на малые углы Резерфорд и его сотрудники обнаружили отклонение отдельных альфа-частиц и на очень большие углы, достигающие порой до 180° . Хотя число таких отклонений было ничтожным (например, при прохождении пучка альфа-частиц от RaC через платиновую фольгу из 8000 падающих альфа-частиц всего лишь одна отклоняется на угол, больший 90°), оно все-таки намного превышало то значение, которое следовало ожидать, если исходить из возможности наложения ряда малых случайных отклонений.

Рассеяние на большие углы наблюдалось также и при прохождении альфа-частиц через газы. Это легко можно было обнаружить на фотографиях в камере Вильсона.

¹⁾ Еще в более ранних опытах Резерфордом и его сотрудниками было установлено, что альфа-частицы обладают положительным зарядом, равным по абсолютной величине удвоенному заряду электрона, и массой, совпадающей с массой атома гелия. В настоящее время установлено, что альфа-частицы представляют собой ядра атомов гелия.

Обобщая результаты проведенных опытов, Резерфорд установил, что, во-первых, атомы по своей природе в значительной мере прозрачны для альфа-частиц, т. е. имеют сравнительно «ажурную» структуру, и, во-вторых, что отклонения на большие углы возможны только в том случае, если внутри атома имеется очень сильное электрическое поле, создаваемое положительным зарядом, связанным с большой и сконцентрированной в очень малом объеме массой. В связи с этим заметим, что, согласно формуле (2.6), наибольшее поле, создаваемое ядром радиуса R_0 , определяется выражением:

$$\Phi_{\text{макс.}} = \frac{Ze_0}{R_0}.$$

Для объяснения этих опытов Резерфорд предложил планетарную модель атома, согласно которой атом построен по типу планетной системы: в центре в весьма малом объеме радиуса $R_0 \sim 10^{-13} - 10^{-12}$ см сосредоточено положительно заряженное ядро, определяющее почти всю массу атома, а вокруг него по замкнутым орбитам движутся, как планеты, отрицательно заряженные электроны. Попутно отметим, что зависимость потенциальной энергии ньютоновского притяжения планеты с массой m Солнцем (массы M) от r :

$$V_{\text{ньют.}} = - \frac{\chi m M}{r},$$

где χ — гравитационная постоянная, по форме совпадает с кулоновской потенциальной энергией притяжения электрона к ядру:

$$V_{\text{кул.}} = - \frac{Ze_0^2}{r}.$$

Исходя из этих представлений, Резерфордом была разработана количественная теория рассеяния. В основу расчетов было положено кулоновское взаимодействие альфа-частицы с ядром. При этом влиянием атомных электронов в первом приближении пренебрегалось, так как их энергия значительно меньше энергии налетающих частиц.

Найдем, следуя Резерфорду, траекторию альфа-частицы, движущейся в поле бесконечно тяжелого¹⁾ точечного ядра, обладаю-

¹⁾ Учет конечности массы $M_{\text{яд.}}$ ядра приводит к тому, что подобно альфа-частице ядро тоже будет получать (со стороны альфа-частиц) некоторую отдачу. В этом случае все расчеты следует отнести к системе центра инерции, т. е. в результатах, полученных для случая $M_{\text{яд.}} = \infty$, необходимо будет массу альфа-частицы M_0 заменить приведенной массой:

$$M_{\text{прив.}} = \frac{M_0 M_{\text{яд.}}}{M_0 + M_{\text{яд.}}}$$

(более подробно о приведенной массе см. § 12, в).

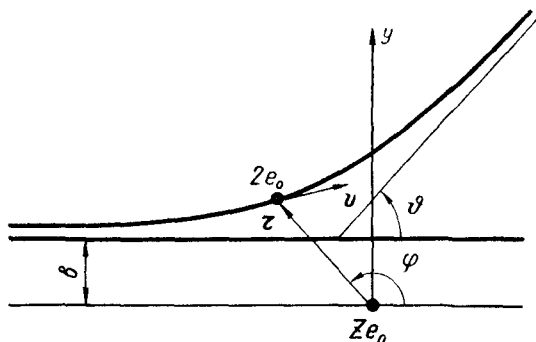
щего зарядом Ze_0 . Исследование будем проводить в системе координат, начало которой совмещено с ядром (см. фиг. 2.2). Замечая, что поле, создаваемое ядром, обладает центральной симметрией, для определения траектории альфа-частицы мы можем, кроме закона сохранения энергии:

$$E = \text{const}, \quad (2.7)$$

использовать еще закон сохранения момента количества движения:

$$L = M_0 [\mathbf{r}\mathbf{v}] = \text{const}, \quad (2.8)$$

где M_0 — масса альфа-частицы, а \mathbf{r} и \mathbf{v} — ее координата и скорость.



Фиг. 2.2. К выводу формулы Резерфорда для сечения упругого рассеяния альфа-частиц на ядрах.

Вводя полярные координаты r и φ и учитывая, что скорость частицы определяется равенством:

$$v^2 = v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2 = \dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2, \quad (2.9)$$

где $v_{\parallel} = \dot{r}$ и $v_{\perp} = r\dot{\varphi}$ — соответственно параллельная и перпендикулярная радиусу-вектору \mathbf{r} составляющие скорости \mathbf{v} , а $\dot{r} = \frac{dr}{dt}$ и $\dot{\varphi} = \frac{d\varphi}{dt}$, вместо (2.7) и (2.8) получаем уравнения:

$$E = \frac{M_0 v^2}{2} + V = \frac{M_0}{2} (\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + \frac{2Ze_0^2}{r} = \text{const}, \quad (2.10)$$

$$L_z = M_0 [\mathbf{r}\mathbf{v}]_z = M_0 r^2\dot{\varphi} = \text{const}. \quad (2.11)$$

Принимая расстояние, на котором бы альфа-частица прошла от ядра в отсутствии взаимодействия, равным b (это расстояние b называется прицельным расстоянием или параметром удара) и считая начальную (т. е. при $r \rightarrow \infty$ и $\varphi \rightarrow \pi$; см. фиг. 2.2)

скорость, равной v_0 , соотношения (2.10) и (2.11) можно привести к виду:

$$\frac{M_0}{2} (r^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + \frac{2Ze_0^2}{r} = E_0, \quad (2.12)$$

$$|M_0 r^2 \dot{\phi}| = M_0 b v_0, \quad (2.13)$$

где начальная энергия E_0 связана с начальной скоростью v_0 соотношением:

$$\frac{M_0 v_0^2}{2} = E_0. \quad (2.14)$$

Вводя новую переменную:

$$u = \frac{1}{r} \quad (2.15)$$

и замечая, что в связи с этим, согласно (2.13):

$$|\dot{\phi}| = \frac{v_0 b}{r^2} = v_0 b u^2, \quad (2.16)$$

а

$$|\dot{r}| = \left| \frac{dr}{d\varphi} \dot{\phi} \right| = |v_0 b u'|, \quad (2.17)$$

где $u' = \frac{du}{d\varphi}$, преобразуем (2.12) к виду:

$$u'^2 + u^2 + \frac{4Ze_0^2}{M_0 v_0^2 b^2} u - \frac{1}{b^2} = 0. \quad (2.18)$$

Дифференцируя это уравнение еще раз по φ , получаем:

$$u'' + u + \frac{2Ze_0^2}{M_0 v_0^2 b^2} = 0, \quad (2.19)$$

откуда находим:

$$u = A \cos \varphi + B \sin \varphi - \frac{2Ze_0^2}{M_0 v_0^2 b^2}. \quad (2.20)$$

Неизвестные постоянные коэффициенты A и B определим, исходя из начальных условий:

$$\lim_{\varphi \rightarrow \pi} r = \lim_{\varphi \rightarrow \pi} \frac{1}{u} = \infty, \quad (2.21)$$

и

$$\lim_{\varphi \rightarrow \pi} r \sin \varphi = \lim_{\varphi \rightarrow \pi} \frac{\sin \varphi}{u} = b. \quad (2.22)$$

Полагая в (2.20) $\varphi = \pi$ и $u = 0$, получаем:

$$A = - \frac{2Ze_0^2}{M_0 v_0^2 b^2}, \quad (2.23)$$

в результате чего примененное к (2.20) условие (2.22) дает:

$$B = \frac{1}{b}. \quad (2.24)$$

Таким образом, окончательно имеем:

$$u = \frac{1}{b} \sin \varphi - \frac{2Ze_0^2}{M_0 v_0^2 b^2} (1 + \cos \varphi). \quad (2.25)$$

Это соотношение устанавливает связь между абсолютным значением радиуса-вектора r и полярным углом φ и описывает тем самым траекторию альфа-частицы в кулоновском поле ядра. Оно представляет собой выраженное в полярных координатах уравнение гиперболической траектории.

Замечая, что угол рассеяния ϑ согласно определению равен углу φ ($\varphi \neq \varphi_0 = \pi$), при котором радиуса-вектора r обращается в бесконечность (т. е. $u = \frac{1}{r} = 0$; см. фиг. 2.2), из (2.25)

находим:

$$\operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} = \frac{M_0 b v_0^2}{2Ze_0^2} = \frac{bE_0}{Ze_0^2}. \quad (2.26)$$

Фиг. 2.3. Зависимость угла рассеяния ϑ от прицельного расстояния b , причем $b_0 < b_1 < b_2 < b_3 < b_{\infty}$.

Отсюда следует, что с уменьшением b угол рассеяния увеличивается и при $b=0$ достигает 180° (см. фиг. 2.3).

Формула (2.26) может быть проверена экспериментально путем фотографирования следов альфа-частиц в камере Вильсона, причем по максимальному значению угла рассеяния можно вычислить минимальное значение параметра b , имеющего значение порядка радиуса ядра. Однако более точно закон взаимодействия между альфа-частицей и ядром был установлен на основе исследования эффективного сечения рассеяния альфа-частиц на ядрах. Для этого Резерфорд нашел относительное число частиц, рассеянных на угол ϑ , точнее, число частиц, попадающих после рассеяния внутрь телесного угла:

$$d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta. \quad (2.27)$$

Пусть в единицу времени на единицу поверхности, расположенной перпендикулярно к первоначальной скорости, падает N частиц. Тогда, как видно из (2.26), угол рассеяния будет зави-

сеть только от значения прицельного расстояния b . Точнее, для того чтобы в результате рассеяния частица отклонилась на угол ϑ , она должна попасть внутрь кольца с радиусами b и $b - db$. Площадь такого кольца равна $2\pi b db$. Поэтому число альфа-частиц, попадающих в единицу времени на эту площадь, а затем в результате рассеяния попадающих внутрь телесного угла $d\Omega$, будет равно:

$$dN = N \cdot 2\pi |b db|. \quad (2.28)$$

Отсюда для относительного числа рассеянных на угол ϑ частиц, согласно (2.26), получаем выражение:

$$\frac{dN}{N} = \pi |db^2| = \pi \left(\frac{Ze_0^2}{E_0} \right)^2 \left| d \operatorname{ctg}^2 \frac{\vartheta}{2} \right|. \quad (2.29)$$

Отношение dN/N имеет размерность площади и называется *дифференциальным эффективным сечением*. Обозначается оно обычно через $d\sigma$. Взяв в (2.29) производную от $\operatorname{ctg}^2 \frac{\vartheta}{2}$, приходим к формуле Резерфорда для упругого рассеяния альфа-частиц на кулоновском центре:

$$d\sigma = \left(\frac{Ze_0^2}{2E_0} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}, \quad (2.30)$$

не зависящей уже от параметра b .

Если в этом выражении изменять только угол ϑ , оставляя все остальные величины постоянными, то нетрудно видеть, что должно иметь место равенство:

$$d\sigma \sin^4 \frac{\vartheta}{2} = \left(\frac{Ze_0^2}{2E_0} \right)^2 d\Omega = \text{const}. \quad (2.31)$$

Однако при $\vartheta \rightarrow \pi$ величина $\sin^4 \frac{\vartheta}{2} d\sigma$ перестает быть постоянной и начинает несколько уменьшаться. Этот факт был объяснен учеником Резерфорда Блеккетом, изучавшим границы применимости закона Кулона. Блеккет сделал большое число фотографий следов альфа-частиц в камере Вильсона и подсчитал, как часто встречаются те или иные углы рассеяния. В результате обработки экспериментальных данных им было установлено, что в случае больших углов рассеяния [это, согласно (2.26), соответствует малым значениям параметра b] число рассеянных частиц, полученное на опыте, заметно меньше того числа, которое следует из формулы (2.30). На основании этого Блеккет пришел к выводу, что для воздуха, например, закон Кулона справедлив до расстояний порядка $3 \cdot 10^{-12}$ см. На меньших же расстояниях имеет место отклонение от закона Кулона. А именно, при $b < \sim 10^{-12}$ см взаимодействие альфа-частиц с ядром происходит

таким образом, как если бы между ними действовали силы взаимного притяжения. Дальнейшие экспериментальные исследования подтвердили существование на расстояниях, меньших 10^{-12} см, специфических сил притяжения, быстро убывающих с удалением от ядра (см. ниже формула (28.43)).

Формула Резерфорда (2.30) позволяет путем экспериментального определения dN и N найти число Z . Это было сделано другим учеником Резерфорда Чадвиком. В результате им было показано, что значения Z очень близки по своей величине к порядковому номеру элемента, который характеризует его положение в периодической системе Менделеева. Позже это совпадение было доказано строго.

Таким образом, опыты Резерфорда и его сотрудников окончательно подтвердили планетарную модель атома, доказав, что положительный заряд атома сосредоточен в ядре, имеющем размеры $10^{-13} - 10^{-12}$ см, и что внутри атома действуют кулоновские силы, которые и удерживают движущиеся вокруг ядра электроны. Размеры атома равны по порядку величины $10^{-8} - 10^{-7}$ см.

г. Теория Бора.

Попытаемся прежде всего с помощью классической теории построить планетарную модель атома, установленную Резерфордом. При этом мы ограничимся исследованием так называемого водородоподобного атома, когда вокруг ядра с зарядом Ze_0 вращается один электрон (заряд $e = -e_0$). Это может быть либо атом водорода ($Z = 1$), либо ионизированный атом He^+ ($Z = 2$) и т. д.

Вводя полярные координаты r и φ ($x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$), для кинетической энергии и потенциальной энергии кулоновского притяжения соответственно получаем выражения:

$$T = \frac{m_0}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2),$$

$$V = - \frac{Ze_0^2}{r}.$$

Отсюда для функции Лагранжа (лагранжиана) будем иметь:

$$\mathcal{L} = \frac{m_0}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) + \frac{Ze_0^2}{r}, \quad (2.32)$$

где m_0 — масса электрона¹⁾.

¹⁾ В дальнейшем в нерелятивистской теории массу электрона мы будем обозначать через m_0 , так как через m мы будем, как правило, обозначать магнитное квантовое число.

Из этого лагранжиана находим следующие уравнения движения электрона:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} p_\varphi - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} &= 0, \\ \frac{d}{dt} p_r - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} &= 0. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Здесь

$$p_\varphi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} = m_0 r^2 \dot{\varphi}$$

и

$$p_r = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = m_0 \dot{r}$$

обобщенные импульсы, соответствующие координатам φ и r . Так как φ не входит в \mathcal{L} явно (в связи с этим она называется циклической координатой), то $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} = 0$ и поэтому соответствующий обобщенный импульс будет представлять собой интеграл движения:

$$p_\varphi = m_0 r^2 \dot{\varphi} = \text{const}, \quad (2.35)$$

что соответствует закону сохранения момента количества движения классической механики. Второй закон сохранения, а именно закон сохранения энергии:

$$E = T + V = \text{const} \quad (2.36)$$

мы получим из условия, что время t не входит явно в лагранжиан.

Ограничимся в дальнейшем рассмотрении простейшего случая круговых орбит, когда $\dot{r} = 0$. Тогда в силу обращения в нуль $p_r = m_0 \dot{r}$ из (2.33) находим:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = m_0 r \dot{\varphi}^2 - \frac{Ze_0^2}{r^2} = 0, \quad (2.37)$$

откуда имеем:

$$\dot{\varphi}^2 = \frac{Ze_0^2}{m_0 r^3}. \quad (2.38)$$

Поэтому для энергии электрона получаем выражение:

$$E = \frac{m_0}{2} r^2 \dot{\varphi}^2 - \frac{Ze_0^2}{r} = -\frac{1}{2} \frac{Ze_0^2}{r} = \frac{1}{2} V. \quad (2.39)$$

Выразим теперь основные параметры, характеризующие атом, через так называемые *адиабатические инварианты* системы, введенные Эренфестом. Согласно Эренфесту, в случае периодического движения величины:

$$\oint p_i dx_i = I_i, \quad (2.40)$$

получившие название адиабатических инвариантов (p_i — обобщенный импульс, x_i — обобщенная координата), должны оставаться

постоянными при медленном (адиабатическом) изменении параметров системы (например, заряда).

В нашем случае имеется одна степень свободы ($x_i = \varphi$), и поэтому условия (2.35) и (2.40) приводят к выражению:

$$p_\varphi = m_0 r^2 \dot{\varphi} = \frac{l}{2\pi}, \quad (2.41)$$

или

$$\dot{\varphi} = \frac{l}{2\pi m_0 r^2}. \quad (2.42)$$

Тогда из соотношений (2.38) и (2.42) находим выражение для r и $\dot{\varphi}$ через адиабатический инвариант:

$$r = \frac{l^2}{4\pi^2 m_0 Z e_0^2}, \quad (2.43)$$

$$\dot{\varphi} = \omega_0 = \frac{8\pi^3 m_0 Z^2 e_0^4}{l^3}. \quad (2.44)$$

Для энергии же электрона согласно (2.39) имеем:

$$E = -2\pi^2 \frac{m_0 Z^2 e_0^4}{l^2}. \quad (2.45)$$

Отсюда следует, что частота механического колебания ν_0 определяется производной от энергии по адиабатическому инварианту:

$$\nu_0 = \frac{\partial E}{\partial l} = \frac{4\pi^3 m_0 Z^2 e_0^4}{l^3}. \quad (2.46)$$

Эта связь имеет место не только для рассматриваемого случая, но и для любых периодических или условно-периодических движений¹⁾.

¹⁾ Под периодическим движением понимается такое движение, когда через определенный промежуток времени материальная точка возвращается в свое первоначальное положение. Например, таковым является гармоническое движение:

$$x = a \cos \omega t$$

или движение по эллипсу:

$$x = a \cos \omega t \quad \text{и} \quad y = b \sin \omega t,$$

частным случаем которого является движение по окружности ($a = b$). Под условно-периодическим движением подразумевается такое, при котором материальная точка, как правило, не возвращается в свое первоначальное положение, но зато каждая из координат через некоторый промежуток времени (для каждой из координат различный) вновь принимает первоначальное значение. В качестве примера условно-периодического движения мы можем привести следующий:

$$x = a \cos \omega_1 t,$$

$$y = b \cos \omega_2 t,$$

причем частота ω_1 не соизмерима с ω_2 .

Если учесть, что система, совершающая какое-либо периодическое движение, может в общем случае излучать не только основной тон $k=1$, но и гармоники $k=2, 3, 4, \dots$, то для классической частоты излучения будет иметь место выражение:

$$\nu = k\nu_0 = k \frac{\partial E}{\partial I}. \quad (2.46a)$$

Классическая теория планетарной модели атома встретила на своем пути ряд трудностей при объяснении излучения атомов.

В самом деле, эта модель является динамической, и поэтому, согласно законам классической электродинамики, электрон, вращаясь вокруг ядра, благодаря наличию центростремительного ускорения ($\omega = \frac{v^2}{a}$, где v — его скорость, а a — радиус орбиты), должен терять энергию:

$$-\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega^2}{c^3}$$

до тех пор, пока не упадет на ядро.

Однако в действительности этого не происходит, и атомы в свободном состоянии существуют сколь угодно долго.

Кроме того, частота излучения по классической теории должна равняться механической частоте колебаний $\omega = \omega_0 = 2\pi\nu_0$ (основной тон) или хотя бы быть кратной ей $\omega_n = n\omega_0$ ($n=2, 3, 4, \dots$; гармоники), что также не может объяснить формулу Бальмера (2.1) для спектральных линий излучения, установленную экспериментально.

Выход из создавшегося затруднения был найден в 1913 г. Нильсом Бором, который дополнил классические законы движения двумя постулатами.

Во-первых, Бор предположил, что каждый атом имеет ряд дискретных стационарных состояний, в которых электрон не излучает, хотя и движется с ускорением (*постулат стационарных состояний*). Эти стационарные состояния согласно теории Бора можно определить путем квантования адиабатических инвариантов:

$$\oint p_i dq_i = nh, \quad (2.47)$$

где n — так называемое квантовое число, которое принимает лишь целочисленные значения: $n=1, 2, 3, \dots$. (Напомним, что согласно классической механике адиабатический инвариант I может принимать любые постоянные значения.)

Во-вторых, Бор предположил, что при переходе электрона из одного — начального — стационарного состояния с энергией E_n в другое — конечное — с энергией $E_{n'} < E_n$ атом должен излучать квант с энергией $h\nu = \hbar\omega$ (*постулат частот*), круговая час-

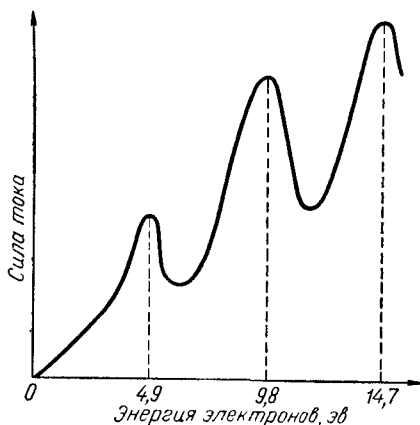
тока ω излучения при этом находится из соотношения:

$$\omega = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}. \quad (2.48)$$

Последнее выражение может быть записано в форме, напоминающей классическое выражение (2.46а) для частоты излучения:

$$\nu = (n - n') \frac{\Delta E}{\Delta t} = k \frac{\Delta E}{\Delta t}, \quad (2.48a)$$

где целое число $k = n - n'$ можно интерпретировать как соответствующую гармонику. Кроме того, производная E по I , входящая в классическое выражение, заменяется отношением конечных приращений.



Фиг. 2.4. Зависимость тока от энергии электронов в опытах Франка—Герца ($1 \text{ эв} = e_0/300 = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$).

энергия электронов достигает величины $4,9 \text{ эв}$ (см. фиг. 2.4), наступает внезапное спадание тока. При дальнейшем росте энергии электронов наблюдается периодически повторяющееся (примерно через $4,9 \text{ эв}$) резкое уменьшение тока. Это явление очень просто интерпретировать с точки зрения теории Бора. В самом деле, принимая энергию «невозбужденного» атома ртути (т. е. атома до столкновений) равной E_0 и предполагая в соответствии с первым постулатом Бора следующее возможное значение энергии равным $E_1 = E_0 + 4,9 \text{ эв}$, легко видеть, что если энергия электронов в пучке $E < 4,9 \text{ эв}$, то она недостаточна для того, чтобы перевести атомы в «возбужденное» состояние; поэтому соударения будут упругими, т. е. ток не изменится. Если же $E \geq 4,9 \text{ эв}$, то электроны в пучке могут отдавать часть энергии (равную $4,9 \text{ эв}$) атомам; вместе с тем будет меняться и ток. Если же энергия принимает значение в интервале $14,7 \text{ эв} > E >$

Постулированная Бором дискретность устойчивых энергетических состояний атомов нашла свое подтверждение в экспериментах, поставленных в 1913 г. Франком и Герцем. Пропуская пучок электронов (ток) через пары ртути, они показали, что в случае, когда энергия электронов меньше $4,9 \text{ эв}$, столкновения электронов с атомами ртути не влияют на величину тока. Когда же

$> 9,8 \text{ эв}$, то электроны могут передавать энергию атомам дважды: в результате первого соударения $4,9 \text{ эв}$ и в результате второго еще $4,9 \text{ эв}$.

Применим теперь первый (2.47) и второй (2.48) постулаты Бора для построения теории водородоподобного атома. Тогда, подставляя в выражение для радиуса орбиты r [см. (2.43)] и энергии E [см. (2.45)] квантовое значение адиабатического инварианта I , которое согласно (2.47) равно:

$$I = 2\pi n\hbar,$$

имеем:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_0 Z e_0^2}, \quad (2.49)$$

$$E_n = -\frac{m_0 Z^2 e_0^4}{2n^2 \hbar^2}. \quad (2.50)$$

При $n = 1$ получаем энергию низшего (основного) состояния атома:

$$E_1 = -\frac{m_0 Z^2 e_0^4}{2\hbar^2}, \quad (2.51)$$

и соответствующий радиус:

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{m_0 Z e_0^2} = \frac{1}{Z} a_0, \quad (2.52)$$

где *радиус первой боровской орбиты*:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2} \approx 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}. \quad (2.53)$$

На основании второго постулата Бора (2.48) в соответствии с (2.50) для частот излучения $\omega_{nn'}$ находим выражение:

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = \frac{m_0 Z^2 e_0^4}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (2.54)$$

т. е. при $Z = 1$ получаем формулу Бальмера (2.1). Теория Бора позволила связать установленное эмпирически значение для постоянной Ридберга с постоянной Планка \hbar :

$$R = \frac{m_0 e_0^4}{2\hbar^3}. \quad (2.55)$$

Получение формулы Бальмера со значением для постоянной Ридберга, совпадающей с экспериментом, было одним из самых больших успехов теории Бора. Однако, несмотря на указанные успехи, теория Бора обладала рядом существенных недостатков, которые все сильнее сказывались при дальнейшем ее развитии.

Теория Бора, нося явно полуклассический характер, позволяла вычислять только частоты спектральных линий, но не их интенсивности. Для нахождения же интенсивностей приходилось прибегать к классической электродинамике на основе так называемого *принципа соответствия*¹⁾.

Затем с помощью постулатов Бора не удалось построить теорию многоэлектронных атомов, в том числе и атома гелия, обладающего всего лишь двумя электронами.

Поэтому мы не будем более детально рассматривать дальнейшее развитие боровской теории. Последняя явилась лишь переходным этапом от классической теории к квантовой, которая позволяет определить не только частоты, но и интенсивности излучения атомов.

Однако мы сочли целесообразным хотя бы кратко осветить основные положения теории Бора, которые и до настоящего времени сохраняют большое методическое значение. В частности, теория Бора часто является отправным пунктом при анализе многих результатов, связанных с процессом квантования.

Выводы, которые следуют из формулы (2.54), мы рассмотрим в § 13, когда задача о водородоподобном атоме будет решена на основе квантовой механики.

Задача 2.1. Произвести квантование (т. е. найти спектр энергетических уровней) водородоподобного атома в случае эллиптических орбит по боровской теории. Показать, что в нерелятивистском приближении частоты изменения координат r и φ одинаковы, т. е. движение является периодическим. Убедиться, что формула для частоты излучения атомом остается такой же, как и в случае круговых орбит.

Какой новый момент в теорию вносит учет эллиптических орбит?

¹⁾ Согласно принципу соответствия, все результаты предшествующей теории, нашедшие экспериментальное подтверждение, должны следовать, как правило, в предельном случае из последующей, что является важнейшим критерием практики правильности новой теории. На возможных исключениях мы останавливаться не будем.

Например, при $\hbar \rightarrow 0$ результаты квантовой механики должны переходить в классические. Точно так же при $\beta^2 \rightarrow 0$ результаты релятивистской теории должны переходить в нерелятивистские и т. д. В этом отношении принцип соответствия позволяет проследить за процессом развития той или иной теории, которая должна асимптотически приближаться к истине.

В процессе же создания новой теории, когда последняя не дает еще возможности исследовать некоторые явления, принцип соответствия может быть использован для разумного обобщения результатов старой теории на новую. Так, например, боровская теория позволяла вычислить лишь частоту, но не интенсивность излучения. Последняя же была определена Бором из принципа соответствия, допускающего только такие изменения квантового числа n ($\Delta n = n - n'$; правила отбора), которые должны совпадать с возможными классическими гармониками излучения. Проблема излучения света по квантовой теории была полностью разрешена лишь после создания квантовой электродинамики (более подробно см.: И. В. Кузнецов, Принцип соответствия в современной физике и его философское значение, М., 1948).

Решение. Пользуясь условием (2.40) и замечая, что в рассматриваемой задаче обобщенные импульсы, соответствующие координатам φ и r , будут равны соответственно:

$$p_\varphi = m_0 r^2 \dot{\varphi} = \text{const}, \text{ и } p_r = m_0 \dot{r} = \sqrt{2m_0 E - \frac{2m_0 Z e_0^2}{r} - \frac{p_\varphi^2}{r^2}},$$

находим

$$I_\varphi = \int_0^{2\pi} p_\varphi d\varphi = 2\pi p_\varphi, \quad I_r = 2 \int_{r_{\text{мин.}}}^{r_{\text{макс.}}} p_r dr = 2\pi \left\{ -p_\varphi + Z e_0^2 \sqrt{\frac{m_0}{-2E}} \right\}.$$

Последний интеграл был вычислен с помощью формулы:

$$2 \int_{r_{\text{мин.}}}^{r_{\text{макс.}}} \sqrt{-A + \frac{2B}{r} - \frac{C}{r^2}} dr = 2\pi \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - \sqrt{C} \right). \quad (2.56)$$

Отсюда для энергии E получаем выражение:

$$E = -\frac{4\pi^2 m_0 Z^2 e_0^4}{2(I_r + I_\varphi)^2} < 0.$$

Непосредственным дифференцированием этого соотношения по переменным I_φ и I_r нетрудно убедиться, что частоты изменения координат r и φ :

$$\omega_r = \frac{\partial E}{\partial I_r} \quad \text{и} \quad \omega_\varphi = \frac{\partial E}{\partial I_\varphi}$$

будут совпадать друг с другом. Заменяя согласно правилу квантования Бора (2.47) адиабатические инварианты I_r и I_φ соответственно величинами $n_r \hbar$ и $n_\varphi \hbar$, получаем:

$$E_n = -\frac{m_0 Z^2 e_0^4}{2\hbar^2 n^2},$$

где $n = n_r + n_\varphi$, $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$ и $n_\varphi = 1, 2, 3, \dots$. Это выражение полностью совпадает с выражением (2.50), выведенным в случае круговых орбит; поэтому частоты излучения остаются прежними.

Состояния с заданным n и различными n_φ хотя и обладают одинаковой энергией, но отличаются друг от друга эксцентриситетом ϵ :

$$\epsilon = \sqrt{1 - \frac{n_\varphi^2}{n^2}}.$$

В частности, при $n_\varphi = n$ будем иметь круговую траекторию. При уменьшении n_φ эллиптическая траектория становится более вытянутой.

Новым в случае учета эллиптических орбит являются правила отбора $\Delta n_\varphi = \pm 1$, $\Delta n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, объясняющие возникновение серий, которые могут быть найдены из принципа соответствия. В случае же круговых орбит $\Delta n = \Delta n_\varphi = \pm 1$ (см. также § 13).

¹⁾ Более подробные указания о вычислении этого интеграла будут даны в задаче 13.5.

Задача 2.2. Найти классическое уравнение движения и траекторию электрона вокруг ядра по релятивистской теории. Показать, что в этом случае частоты изменения координат r и φ являются различными, т. е. движение будет условно периодическим. Определить угол, на который смещается перигелий электрона за время «одного» оборота. Получить формулу для энергетических уровней и найти величину их расщепления. Сравнить с соответствующей нерелятивистской задачей 2.1.

Решение. Используя релятивистскую функцию Лагранжа:

$$\mathcal{L} = -m_0 c^2 \sqrt{1 - \beta^2} + \frac{Ze_0^2}{r}, \quad (2.57)$$

где

$$\beta^2 = \frac{v^2}{c^2} = \frac{1}{c^2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2),$$

получаем уравнения движения в виде:

$$\frac{d}{dt} \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \beta^2}} = -\frac{Ze_0^2}{r^2} r.$$

Определяя из (2.57) обобщенные импульсы $p_\varphi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}}$ и $p_r = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}}$ и замечая, что $p_r = \frac{p_\varphi}{r^2} r'$, где $r' = \frac{dr}{d\varphi}$, в соответствии с законом сохранения энергии:

$$E = c \sqrt{m_0^2 c^2 + p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2}} - \frac{Ze_0^2}{r} = \text{const},$$

находим:

$$r' = \frac{r^2}{c p_\varphi} \sqrt{\left(E + \frac{Ze_0^2}{r}\right)^2 - m_0^2 c^4 - \frac{c^2 p_\varphi^2}{r^2}}.$$

Отсюда получаем уравнение траектории:

$$r = \frac{q}{1 + \varepsilon \cos \gamma \varphi}, \quad (2.58)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma &= \sqrt{1 - \frac{Z^2 e_0^4}{c^2 p_\varphi^2}}, \\ q &= \frac{\gamma^2 c^2 p_\varphi^2}{Ze_0^2 E}, \\ \varepsilon &= \sqrt{1 + \frac{\gamma^2 \left(1 - \frac{m_0^2 c^4}{E^2}\right)}{1 - \gamma^2}}. \end{aligned}$$

Из (2.58) видно, что движение будет условно периодическим. Для смещения $\Delta\varphi$ перигелия, согласно (2.58), имеем:

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi(1 - \gamma)}{\gamma} \approx \frac{\pi Z^2 e_0^4}{c^2 p_\varphi^2}.$$

С помощью соотношений (2.40) и (2.56) находим:

$$I_{\varphi} = 2\pi p_{\varphi},$$

$$I_r = 2\pi \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - V\bar{C} \right),$$

где

$$A = m_0^2 c^2 \left(1 - \frac{E^2}{m_0^2 c^4} \right),$$

$$B = \frac{Z e_0^3 E}{c^3}, \quad C = p_{\varphi}^2 - \frac{Z^2 e_0^4}{c^2}.$$

Тогда для энергии E получаем выражение:

$$E = m_0 c^2 \left\{ 1 + \frac{Z^2 e_0^4}{c^2 \left[\frac{I_r}{2\pi} + \sqrt{\frac{I_{\varphi}^2}{4\pi^2} - \frac{Z^2 e_0^4}{c^2}} \right]^2} \right\}^{-1/2}. \quad (2.59)$$

Отсюда видно, что частоты $\omega_{\varphi} = \frac{\partial E}{\partial I_{\varphi}}$ и $\omega_r = \frac{\partial E}{\partial I_r}$ будут различными.

Принимая во внимание правила квантования Бора (2.47), преобразуем формулу (2.59) к виду:

$$E_{n_r, n_{\varphi}} = E - m_0 c^2 = m_0 c^2 \left\{ 1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{\left[n_r + \sqrt{n_{\varphi}^2 - Z^2 \alpha^2} \right]^2} \right\}^{-1/2} - m_0 c^2, \quad (2.60)$$

где $\alpha = \frac{e_0^2}{c\hbar} \cong \frac{1}{137}$ — постоянная тонкой структуры.

Разлагая формулу (2.60) в ряд по α^2 и ограничиваясь величинами порядка α^4 , получаем формулу Зоммерфельда:

$$E_{n, n_{\varphi}} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{n_{\varphi}} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (2.61)$$

Из (2.61) следует, что уровень энергии, определяемый главным квантовым числом $n = n_r + n_{\varphi}$, расщепляется на n близко расположенных друг к другу (вследствие малости α^2) подуровней, поскольку n_{φ} изменяется от 1 до n .

Для величины расщепления находим значение:

$$\Delta E_{n, n_{\varphi}} = E_{n, n_{\varphi}} - E_{n, n_{\varphi}-1} = \frac{\alpha^2 Z^4 R\hbar}{n^3 n_{\varphi} (n_{\varphi} - 1)}.$$

Полученное расщепление, или тонкая структура уровней, является характерным результатом релятивистских эффектов, существенно отличающим выводы релятивистской теории от выводов нерелятивистской теории (см. задачу 2.1).

Задача 2.3. Электрон находится в центральном поле:

$$V = -\frac{A}{r^s}, \quad A > 0.$$

Определить, при каких значениях s возможны устойчивые состояния системы.

Ответ. $s < 2$.

Указание. Воспользоваться выражением для эффективной потенциальной энергии:

$$V_{\text{эфф.}} = \frac{p_{\varphi}^2}{2m_0 r^2} - \frac{A}{r^s}$$

и учесть то обстоятельство, что устойчивое движение возможно, если $V_{\text{эфф}}$ имеет минимум.

Задача 2.4. Найти эффективное сечение рассеяния нерелятивистских электронов ядрами (точечным кулоновским центром). Сравнить с сечением рассеяния α -частиц.

О т в е т.

$$d\sigma = \left(\frac{Ze_0^2}{4E_0} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}.$$

Задача 2.5. Показать, что в релятивистском случае в отличие от нерелятивистского электроны при рассеянии могут быть «захвачены» ядрами. Получить полное эффективное сечение «захвата».

Решение. Траектория движения электронов в кулоновском поле ядра, согласно нерелятивистской теории, определяется уравнением:

$$r = \frac{q}{1 + \varepsilon \cos \varphi},$$

где

$$q = \frac{p_\varphi^2}{m_0 Z e_0^2}, \quad \varepsilon = \sqrt{1 + \frac{2E p_\varphi^2}{m_0 Z^2 e_0^4}}.$$

При $E > 0$ это уравнение описывает движение гиперболического типа и поэтому «захват» электронов оказывается невозможным.

Согласно же релятивистской механике, уравнение траектории имеет вид (2.58). Если в этом выражении величина $\frac{Z^2 e_0^4}{c^2 p_\varphi^2} > 1$, то значение γ станет мнимым и поэтому при $\varphi \rightarrow \infty$ $r \rightarrow 0$, т. е. произойдет падение частицы на центр, или «захват».

Поскольку момент количества движения p_φ электрона связан с начальным импульсом p и прицельным расстоянием b соотношением $p_\varphi = pb$, условие «захвата» можно представить в форме $b^2 \leq \frac{Z^2 e_0^4}{c^2 p^2}$, откуда для полного эффективного сечения «захвата» получаем выражение:

$$\sigma_{\text{захв.}} = \pi b^2_{\text{макс.}} = \frac{\pi Z^2 e_0^4}{c^2 p^2}.$$

§ 3. ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ЧАСТИЦ

а. Волны де-Бройля

Как мы уже отмечали (см. § 1), развитие современной квантовой теории началось с того, что у света наряду с волновыми свойствами, характеризующимися длиной волны λ и частотой ω , были обнаружены также и корпускулярные. Значения для энергии ε и импульса π кванта света были установлены Эйнштейном:

$$\varepsilon = \hbar\omega = h\nu, \quad \pi = \hbar k = \frac{h}{\lambda} k^0. \quad (3.1)$$

Анализируя эти соотношения, французский физик де-Бройль выдвинул гипотезу о возможности их обобщения и на обычные частицы и в первую очередь на электроны. Другими словами, де-Бройль предложил, что такой дуализм волна — частица должен быть свойственен не только свету, но и электронам и любым другим частицам¹⁾.

Согласно идее де-Бройля, поток свободных электронов, обладающих релятивистской энергией E и импульсом p , связанных со скоростью v соотношениями²⁾:

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (3.2)$$

должен обладать также и волновыми свойствами.

Соответствующая частота и волновое число определяются при этом соотношениями, подобными эйнштейновским:

$$E = \hbar \omega \quad \text{и} \quad p = \hbar k, \quad (3.3)$$

т. е. длина де-бройлевской волны движущихся частиц будет равна:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p}. \quad (3.4)$$

Таким образом, соотношения Эйнштейна (3.1), полученные им при построении теории фотонов, в результате гипотезы, выдвинутой де-Бройлем, приобрели универсальный характер и стали одинаково применимыми как для анализа корпускулярных свойств света, так и при исследовании волновых свойств движущихся электронов. Следует отметить, что такая двойственность в поведении частиц и света полностью исчезает, если постоянную Планка \hbar стремить к нулю (принцип соответствия).

Беря за основу дальнейших рассуждений предложенные де-Бройлем соотношения (3.3), движение свободных частиц (например, вдоль оси x) будем описывать так называемой волновой функцией, представляющей собой в рассматриваемом частном случае по аналогии со светом плоскую волну:

$$\psi(x, t) = A e^{-2\pi i \left(vt - \frac{x}{\lambda} \right)} = A e^{-i(\omega t - kx)} = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}. \quad (3.5)$$

¹⁾ Эта гипотеза была высказана де-Бройлем, с одной стороны, для физического обоснования квантования по Бору, а с другой — для объяснения первых опытов по дифракции электронов (см. ниже).

²⁾ Здесь и в дальнейшем читатель по смыслу может отличить релятивистскую энергию (включающую в себя, в частности, собственную энергию $m_0 c^2$) от нерелятивистской. Лишь в тех случаях, когда в одно равенство входят обе энергии, мы будем отличать их с помощью какого-нибудь индекса, например:

$$E = E' + m_0 c^2.$$

Если теперь с этой новой точки зрения посмотреть на описание движения частицы и попытаться объяснить постулат устойчивых состояний Бора [см. (2.47)], то последний получает следующую физическую интерпретацию: согласно де-Бройлю, возможными оказываются только те круговые орбиты, на которых укладывается целое число волн де-Бройля, т. е.

$$\frac{2\pi r}{\lambda} = n. \quad (3.6)$$

В самом деле, только при этом условии волновая функция ψ будет однозначной.

Принимая далее во внимание, что в нерелятивистском случае:

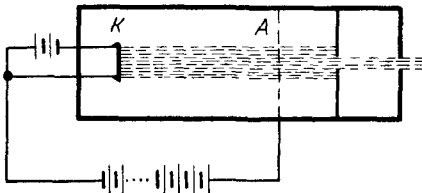
$$\lambda = \frac{h}{m_0 v},$$

из (3.6) получаем боровское условие для определения устойчивых состояний:

$$p_\varphi = m_0 r v = \hbar n. \quad (3.7)$$

б. Экспериментальное обнаружение волновых свойств частиц

Чтобы экспериментально исследовать волновые свойства электронов и доказать существование определенной длины волны λ , необходимо прежде всего получить монохроматический пучок электронов, т. е. пучок электронов, движущихся с одинаковой скоростью.



Фиг. 3.1. Электронная пушка для получения пучка движущихся с определенной скоростью электронов:

К — катод, А — анодная сетка.

Такой пучок может быть получен, например, с помощью так называемой «электронной» пушки (см. фиг. 3.1), испускающей электроны определенной скорости v .

В нерелятивистском случае ($v \ll c$) эта скорость может быть найдена из уравнения:

$$\frac{m_0 v^2}{2} = \frac{e_0 \Phi}{300}, \quad (3.8)$$

где Φ — выраженный в вольтах ускоряющий потенциал анодной сетки А относительно катода К. Следовательно, движению электронов, прошедших сетку А (где они уже перестают ускоряться), соответствует де-бройлевская волна:

$$\lambda = \frac{h}{m_0 v} = \frac{h \sqrt{150}}{\sqrt{m_0 e_0 \Phi}} = \frac{1,2 \cdot 10^{-7}}{\sqrt{\Phi}} \text{ см.} \quad (3.9)$$

Чтобы проявление волновых свойств стало более заметным, необходимо добиваться возможно больших значений длины волны λ , что можно сделать, уменьшая Φ . Однако, в силу того, что на вырывание электронов из металла затрачивается некоторая работа, называемая работой выхода (она имеет величину порядка нескольких электронвольт и приводит к некоторому разбросу электронов по скоростям), наименьшее значение для потенциала Φ , при котором пучок становится сравнительно монохроматическим, должно быть не менее, чем 15—20 в. При этом де-бройлевская волна электронов будет иметь примерно ту же длину волны, ($\lambda \sim 10^{-8}$ см), что и мягкие рентгеновские лучи.

Прежде чем перейти к рассмотрению физической природы волновых свойств пучка электронов, рассмотрим некоторые эксперименты, позволившие непосредственно обнаружить де-бройлевские волны.

Остановимся сначала на опытах по дифракции электронов Дэвиссона и Джермера, впервые экспериментально обнаруживших электронные волны.

Ввиду того что длина де-бройлевской волны λ имеет порядок 10^{-8} см, в качестве дифракционной решетки, так же как и в случае мягких рентгеновских лучей, был выбран кристалл, постоянная решетки которого соизмерима с длиной де-бройлевской волны λ .

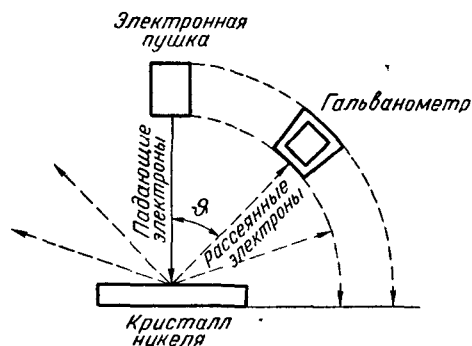
На фиг. 3.2 изображена схема опытов Дэвиссона — Джермера.

От электронной пушки пучок электронов с энергией ~ 50 эв падал перпендикулярно к поверхности кристалла, рассеиваясь затем от поверхностной решетки на различные углы. Поскольку при рассеянии можно пренебречь проникновением электронов в глубь кристалла, рассеяние следует считать происходящим от плоской дифракционной решетки.

В этом случае положение дифракционных максимумов будет определяться условием равенства разности хода $s = d \sin \vartheta$ (d — постоянная плоской решетки, а ϑ — угол рассеяния) целому числу длин волн (см. фиг. 3.3), т. е.

$$d \sin \vartheta_n = n\lambda = n \frac{1,2 \cdot 10^{-7}}{\sqrt{\Phi}}, \quad (3.10)$$

где целое число n характеризует порядок дифракционного мак-



Фиг. 3.2. Схема опытов по дифракции электронов Дэвиссона — Джермера.

симула. Эти дифракционные максимумы были обнаружены экспериментально с помощью гальванометра, фиксировавшего интенсивность пучка рассеянных электронов под различными углами (см. фиг. 3.2).

Был проверен и другой вывод, следующий из теории де-Бройля, а именно вывод о том, что с увеличением потенциала Φ , согласно формуле (3.10), угол ϑ_n , соответствующий n -му дифракционному максимуму, должен уменьшаться.

Проведенные исследования полностью подтвердили справедливость соотношений де-Бройля.

Как известно, для рентгеновских лучей дифракционную картину можно наблюдать не только от монокристаллов, но и от поликристаллических образований. Это было показано, например, в опытах Дебая — Шеррера. Обобщая их методику на случай электронных волн, т. е. пропуская через пленку не рентгеновские лучи, а пучок электронов¹⁾, П. С. Тартаковский и Г. П. Томсон независимо получили аналогичные рентгенограммам так называемые электронограммы.

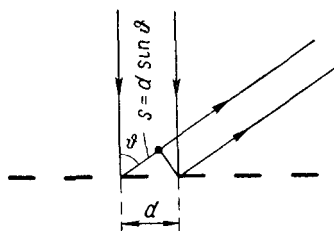
Теоретически дифракционную картину электронов можно объяснить следующим образом. Электронный пучок с энергией несколько тысяч или даже десятков тысяч электронвольт, попадая в поликристаллическую фольгу и встречая на своем пути отдельные монокристаллы, будет отражаться от последних.

В связи с этим разность хода s двух лучей (см. фиг. 3.4) будет связана с постоянной d пространственной кристаллической решетки соотношением:

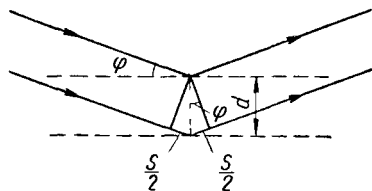
$$s = 2d \sin \varphi, \quad (3.11)$$

где φ — угол, составляемый лучом с плоскостью решетки.

Поскольку отдельные монокристаллы фольги расположены хаотически, луч может выйти из пленки под любым углом по отношению к первоначальному направлению (см. фиг. 3.5). Однако



Фиг. 3.3. Рассеяние электронов от плоской дифракционной решетки.



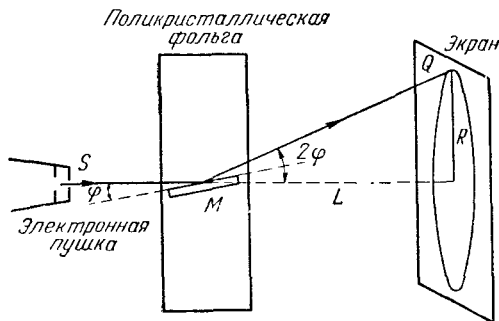
Фиг. 3.4. Отражение от пространственной кристаллической решетки.

¹⁾ Для уменьшения поглощения электронов пленкой толщина последней выбиралась сравнительно малой и достигла порядка 10^{-5} см.

среди всех кристаллов найдутся такие, для которых будет выполнено условие Вульфа — Брэггов:

$$2d \sin \varphi = n\lambda = n \frac{1,2 \cdot 10^{-7}}{\sqrt{\Phi}}, \quad (3.12)$$

где n — целое число. В этом случае должен наблюдаться дифракционный максимум, т. е. на экране получится светлое пятно Q . В силу цилиндрической симметрии установки светлые пятна бу-



Фиг. 3.5. Дифракция электронных волн при прохождении сквозь поликристаллическое тело (опыты Тартаковского — Томсона).

дут образовывать дифракционные кольца, радиусы R_n которых могут быть найдены с помощью соотношения (см. фиг. 3.5):

$$\operatorname{tg} 2\varphi = \frac{R}{L}, \quad (3.13)$$

где L — расстояние от экрана до поликристаллической пленки. Принимая во внимание, что угол φ в этих опытах является малой величиной ($\varphi \approx \sin \varphi \approx \operatorname{tg} \varphi$), из (3.12) и (3.13) находим:

$$R_n = n \frac{L}{d} \frac{1,2 \cdot 10^{-7}}{\sqrt{\Phi}}, \quad (3.14)$$

т. е. при постоянных L , d и n :

$$R \cdot \sqrt{\Phi} = \text{const.} \quad (3.15)$$

Последние соотношения и были целиком подтверждены экспериментами Тартаковского — Томсона.

В настоящее время электронограммы наряду с рентгенограммами Дебая — Шеррера находят большое практическое применение при изучении строения кристаллов¹⁾.

Следует заметить, что формула де-Бройля применима не только к электронам и другим частицам, например, протонам и нейтро-

¹⁾ См. П. С. Тартаковский, Экспериментальные основания волновой механики, ГТТИ, Л.—М., 1932; Э. В. Шпольский, Атомная физика, т. I, М., 1950, глава X.

нам, из которых состоят ядра атомов, но и к сложным ядрам, сложным атомам и даже молекулам. Правда, благодаря сравнительно большой массе этих частиц длина их де-бройлевской волны чрезвычайно мала. Несмотря на это, Штерну и Эстерману удалось наблюдать дифракцию пучков атомов гелия и молекул водорода при отражении от кристаллов LiF.

Весьма эффективным при исследовании структуры вещества оказался метод, основанный на дифракции нейтронов. Дело в том, что нейтроны не обладают электрическим зарядом и поэтому даже в случае очень малых энергий (так называемые тепловые нейтроны), когда де-бройлевская длина волны остается сравнительно большой величиной, свободно проходят сквозь вещество.

Все перечисленные выше факты с полной убедительностью говорят о том, что волновые свойства в той или иной степени должны обнаруживаться у всех частиц, а формула де-Бройля для λ имеет всеобщую значимость.

Опираясь на известную аналогию световых и электронных волн, стала развиваться новая отрасль физики — электронная оптика, изучающая волновые процессы в электронных пучках. На ее основе рассчитывается, в частности, разрешающая способность электронного микроскопа.

Верхний предел разрешающей силы (а значит, и увеличение) обычного микроскопа определяется длиной волны света. Чтобы увеличение сделать по возможности большим, необходимо уменьшить длину волны используемого света. Однако такое уменьшение возможно только до некоторого предела: нельзя, например, построить рентгеновский микроскоп, так как для рентгеновских лучей не существует соответствующих линз.

В отличие от рентгеновских для электронных волн удалось создать соответствующие линзы: «электрические» и «магнитные». Первые представляют собой электрический конденсатор с отверстием в середине обкладок, а вторые конструируются из обычных магнитных катушек¹⁾.

в. Волновые пакеты. Групповая и фазовая скорости

Следуя идеям де-Бройля, движение свободной материальной частицы, обладающей энергией $E = mc^2$ и импульсом $p = mv$, можно описать с помощью плоской волны (3. 5).

¹⁾ Современные оптические микроскопы дают увеличение примерно в одну-две тысячи раз. Электронный же микроскоп позволяет получить увеличение более чем в сто тысяч раз.

В настоящее время, кроме электронного микроскопа, широкое распространение получает протонный микроскоп, разрешающая сила которого может превышать разрешающую силу электронного микроскопа.

При этом скорость u распространения де-бройлевской волны может быть найдена как скорость перемещения постоянной фазы:

$$Et - px = \text{const}, \quad (3.16)$$

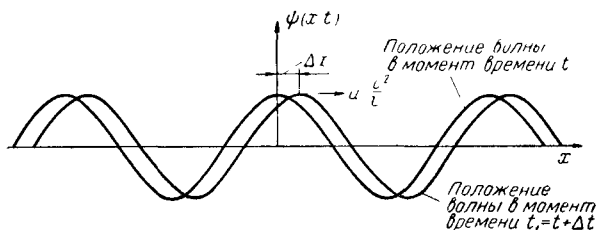
т. е. фазовая скорость будет определяться соотношением¹⁾:

$$u = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v}. \quad (3.17)$$

Поскольку скорость v частицы согласно теории относительности не может быть больше скорости c света в вакууме, для фазовой скорости u волны получается значение, превышающее величину c . Этот результат говорит о том, что монохроматическая волна принципиально не может переносить частицу или какую-либо энергию, поскольку последние согласно теории относительности не могут передвигаться со скоростями, превышающими скорость света.

Чтобы выйти из этого положения и в то же время сохранить за частицами их волновые свойства, нашедшие столь блестящие экспериментальные подтверждения, на первых же порах развития

¹⁾ Эта формула может быть получена из следующих простых соображений. Волновая функция зависит только от фазы $\varphi = (Et - px) \frac{1}{\hbar}$ и поэтому если время t изменится на величину Δt и станет равным $t_1 = t + \Delta t$, то эта



Ф и г. 3.6. Распространение монохроматической волны.

В течение времени Δt волна в целом перемещается на величину

$$\Delta x. \text{ Фазовая скорость волны равна } u = \frac{\Delta x}{\Delta t}.$$

фаза перейдет в точку $x_1 = x + \Delta x$, которая может быть найдена из равенства:

$$Et_1 - px_1 = Et - px = \text{const},$$

т. е.

$$E \Delta t - p \Delta x = 0.$$

Отсюда найдем, что скорость распространения постоянной фазы, а вместе с тем и волны в целом (см. фиг. 3.6) будет равна:

$$u = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{E}{p}.$$

квантовой механики стали сопоставлять частицам не отдельные монохроматические волны, а набор волн, обладающих близкими частотами. Такой подход подсказывался еще и тем обстоятельством, что наблюдаемые на опыте дифракционные линии электронных волн всегда характеризовались вполне определенной шириной, т. е. дифрагировали как бы не одна, а несколько волн, очень близких друг к другу по частоте.

На эту мысль наводили также и спектроскопические исследования, показавшие, что любая спектральная линия всегда характеризуется определенной шириной.

Кроме того, если использовать не одну монохроматическую волну, а набор волн с близкими частотами, то с их помощью всегда можно построить такой волновой пакет, результирующая амплитуда которого окажется заметно отличной от нуля лишь в некоторой небольшой области пространства, которую можно связать с местоположением частицы.

Исходя из этих соображений, построим для описания движения частицы волновой пакет из непрерывной совокупности волн, предполагая, что импульс p' , связанный с волновым числом k' соотношением де-Бройля $k' = p'/\hbar$, изменяется в пределах от $p - \frac{\Delta p}{2}$ до $p + \frac{\Delta p}{2}$, где $\Delta p \ll p$. Амплитуды же $A(p')$ отдельных волн будем при этом считать равными:

$$A(p') = \begin{cases} 0, & p' < p - \frac{\Delta p}{2}, \\ \frac{A}{\Delta p}, & p - \frac{\Delta p}{2} \leq p' \leq p + \frac{\Delta p}{2}, \\ 0, & p' > p + \frac{\Delta p}{2}. \end{cases} \quad (3.18)$$

Тогда результирующая волновая функция ψ принимает вид:

$$\psi = \int_{p - \frac{\Delta p}{2}}^{p + \frac{\Delta p}{2}} \frac{A}{\Delta p} e^{-\frac{i}{\hbar}(E't - p'x)} dp'. \quad (3.19)$$

Перейдем в этом выражении от переменной p' к переменной $p'' = p' - p$ ($-\frac{\Delta p}{2} \leq p'' \leq \frac{\Delta p}{2}$, $dp' = dp''$) и разложим E' в ряд около средней точки $p' = p$:

$$E' = c\sqrt{p'^2 + m_0^2 c^2} \approx E + p'' \frac{\partial E}{\partial p} + \frac{1}{2} p''^2 \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} + \dots \quad (3.20)$$

Ограничиваясь пока что членами первого порядка малости (про-

порциональными $p'' \sim \Delta p$), в результате интегрирования (3.19) по dp'' получаем:

$$\psi = B e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - px)}, \quad (3.21)$$

где амплитуда волнового пакета:

$$B = A \frac{\sin \xi}{\xi},$$

$$\xi = \frac{\Delta p}{2\hbar} \left(x - \frac{\partial E}{\partial p} t \right). \quad (3.22)$$

Из этого выражения следует, что B не остается постоянной ни в пространстве, ни во времени.

Чтобы определить скорость движения волнового пакета в целом, т. е. групповую скорость \bar{u} , соответствующую перемещению определенной амплитуды, поступим так же, как мы поступали при нахождении фазовой скорости. Выбирая некоторое постоянное значение амплитуды так, чтобы

$$\xi = \frac{\Delta p}{2\hbar} \left(x - \frac{\partial E}{\partial p} t \right) = \text{const}, \quad (3.23)$$

для \bar{u} получаем следующую формулу:

$$\bar{u} = \frac{dx}{dt} = \frac{\partial E}{\partial p}. \quad (3.24)$$

Поскольку для свободной частицы $E = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$ и

$$\frac{\partial E}{\partial p} = \frac{c^2 p}{E}, \quad (3.24a)$$

находим:

$$\bar{u} = \frac{c^2}{u} = v, \quad (3.24б)$$

т. е. групповая скорость \bar{u} перемещения волнового пакета как целого оказывается точно совпадающей со скоростью v движения самой частицы.

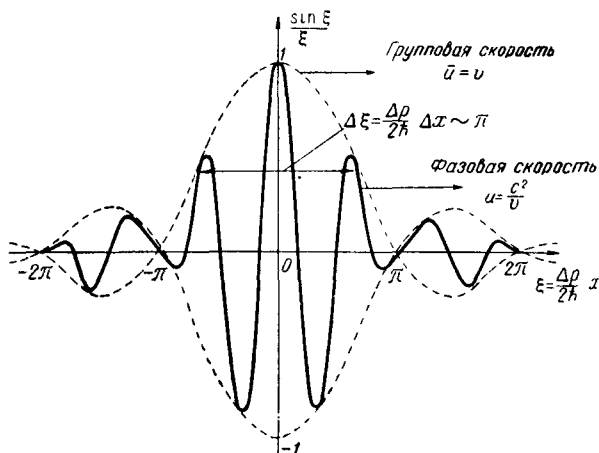
Принимая во внимание выражение для амплитуды $B(\xi) = A \frac{\sin \xi}{\xi}$ волнового пакета, записанного для момента времени $t=0$, т. е. когда $\xi = \frac{\Delta p}{2\hbar} x$ (см. фиг. 3.7), легко видеть, что своего наибольшего значения $B(0) = A$ эта амплитуда достигает в точке $\xi=0$ (при $t=0$ это соответствует $x=0$). Во всех же остальных точках, соответствующих относительным максимумам, она будет

меньше. В частности, придавая аргументу ξ различные значения, будем иметь:

$$B\left(\frac{3}{2}\pi\right) = -\frac{2}{3\pi}A,$$

$$B\left(\frac{5}{2}\pi\right) = \frac{2}{5\pi}A.$$

В точке же $\xi = \pi$ эта амплитуда обращается в нуль: $B(\pi) = 0$. Благодаря этому при $t = 0$ волновой пакет можно считать лока-



Фиг. 3.7. Форма волнового пакета при $t = 0$.

лизованным в области первого максимума, т. е. в области $\Delta\xi = \frac{\Delta p}{2\hbar} \Delta x \sim \pi$. Отсюда следует соотношение:

$$\Delta p \Delta x \sim h, \quad (3.25)$$

получившее название *соотношения неопределенности*.

Так как центр тяжести волнового пакета (т. е. его главный максимум) движется со скоростью частицы ($\tilde{u} = v$), то волновой пакет будет описывать локализацию частицы.

В частности, положение частицы согласно выдвинутым гипотезам характеризуется квадратом модуля амплитуды ψ -волны, т. е. величиной:

$$|B|^2 = \psi^* \psi.$$

В силу этого величины Δx и Δp можно рассматривать как неточности, с которыми мы можем вычислить по волновой теории импульс и положение частицы в пространстве.

Далее, необходимо было выяснить, можно ли отождествить ψ -волны со структурой частиц, или эти волны характеризуют только их движение.

Первая интерпретация связи между корпускулой и волной была предложена Шредингером. Согласно его гипотезе, частица должна представлять собой образование из волн, причем плотность ее «размазывания» по пространству равна $\psi^*\psi$.

Теоретически всегда возможно с помощью группы волн образовать волновой пакет с размерами порядка радиуса частицы (например, электрона). Однако такая частица будет неустойчивой. Это связано с тем обстоятельством, что, как следует из формулы (3.17), фазовая скорость каждой из монохроматических волн, образующих в совокупности волновой пакет, зависит от волнового числа, или от импульса p , и поэтому каждая из этих волн будет распространяться со своей фазовой скоростью ¹⁾:

$$u = \frac{E}{p} = c \frac{\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}}{p}.$$

Благодаря этому волновой пакет должен с течением времени постепенно расплзаться. Время расплзания будет определяться, очевидно, тем промежутком, за который отбрасываемая первоначально часть фазы ψ в (3.21) [согласно (3.20) она пропорциональна $p'^2 \sim (\Delta p)^2$] станет соизмеримой с π . Иными словами, в согласии с (3.20) от начала образования волнового пакета до его расплзания должно пройти время Δt , определяемое из равенства:

$$\Delta t \frac{(\Delta p)^2}{2\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} \sim \pi.$$

Отсюда для времени, через которое уже нельзя будет пренебрегать расплзанием волнового пакета, находим выражение:

$$\Delta t \sim \frac{2\pi\hbar}{(\Delta p)^2 \frac{\partial^2 E}{\partial p^2}}. \quad (3.26)$$

Подставим сюда вместо Δp его значение из соотношения (3.25) и примем во внимание, что, согласно (3.24 а), в нерелятивистском случае ($p \ll m_0 c$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial p} &= \frac{p}{m_0}, \\ \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} &= \frac{1}{m_0}. \end{aligned}$$

¹⁾ Отсюда видно, что только для движущихся в вакууме частиц с массой покоя, равной нулю: $m_0 = 0$ (например, для фотона), возможно образование устойчивого волнового пакета, поскольку только в этом случае фазовые скорости всех составляющих волнового пакета независимо от волнового числа будут одни и те же.

Тогда для времени расползания волнового пакета получаем выражение:

$$\Delta t \sim \frac{m_0}{\hbar} (\Delta x)^2. \quad (3.27)$$

Для макрочастицы с $m_0 \sim 1$ г и $\Delta x \sim 0,1$ см время расползания $\Delta t \sim 10^{25}$ сек, т. е. волновой пакет фактически не будет расплываться.

В случае же электронов $m_0 \sim 10^{-27}$ г, $\Delta x \sim 10^{-13}$ см и поэтому через $\Delta t \sim 10^{-26}$ сек, т. е. практически мгновенно, волновой пакет начнет расплываться. Таким образом, по теории размазанного электрона Шредингера, электрон не может представлять собой устойчивого образования. Это, однако, находится в явном противоречии с экспериментальными фактами. Кроме того, невозможно объяснить явление дифракции, если монохроматическую волну, описывающую движение многих электронов, заменить множеством волновых пакетов.

В настоящее время принята другая, а именно статистическая интерпретация волновой функции, предложенная Максом Борном.

Согласно этой интерпретации, квадрат модуля волновой функции, т. е. величина $|\psi|^2 = \psi^* \psi$, характеризует плотность вероятности нахождения электрона в различных точках пространства. Статистическая интерпретация Борна не затрагивает структуры электрона. Электрон может оставаться точечным (точнее, его радиус r_0 может быть не более, чем 10^{-13} см).

При изменении волновой функции ψ со временем изменяется только вероятность нахождения электрона в различных точках пространства. Строение же электрона при этом совершенно не затрагивается.

При наличии многих электронов, находящихся в одинаковом квантовом состоянии, исследования квантовой механики с точки зрения статистической интерпретации Борна в методическом отношении напоминают собой исследования с помощью функции распределения Максвелла различных вопросов кинетической теории газов (хотя следует отметить, что в квантовой механике функция распределения $f = \psi^* \psi$ не содержит температуру). Дифракционную картину пучка электронов можно интерпретировать согласно Борну следующим образом: светлые пятна соответствуют максимуму $f = |\psi|^2$, а вместе с тем и наибольшему числу электронов, которые пойдут по направлению этого светлого пятна. Вероятность же движения электронов по направлению темных пятен, наоборот, будет наименьшей.

Большие трудности в интерпретации волновой функции, данной Борном, возникли в связи с трактовкой $f = \psi^* \psi$ в применении к движению одного электрона.

Развивая опыты С. И. Вавилова с квантовыми флуктуациями фотонов (см. § 1), советские физики Л. Биберман, Н. Сушкин и В. Фабрикант¹⁾ показали, что по мере уменьшения интенсивности пучка электронов дифракционная картина начинает становиться менее отчетливой и, наконец, когда пучок будет состоять из отдельно летящих электронов, на экране возникнет не дифракционная картина, а изображение отдельных точек.

Однако, если вслед за одним электроном в течение достаточно длительного времени пропускать и другие, то одиночные точки на экране будут постепенно сливаться, образуя в совокупности дифракционную картину, совпадающую с дифракционной картиной, возникающей от пучка электронов²⁾. Этот опыт еще раз демонстрирует несостоятельность гипотезы «размазанного» электрона, поскольку в них отдельный электрон сохраняет свои корпускулярные свойства, а волновая теория может предсказать лишь вероятность его пребывания в том или ином месте пространства.

Отметим также, что волновая теория не может объяснить, почему электрон попадает именно в точку M дифракционного кольца, а не в точку N , если вероятности попадания в обе эти точки, вычисленные по волновой теории, оказываются одинаковыми. Вокруг этого вывода разгорелись большие методологические дискуссии.

Одна из попыток объяснить некоторую «свободу поведения» электрона основана на введении так называемого *принципа дополнительнойности* (Гейзенберг, Бор и др.) (см. также § 7).

Согласно принципу дополнительнойности наши познания микромира должны быть принципиально ограничены некоторым, пусть малым, но конечным пределом, поскольку измерительная установка вносит элементы неконтролируемого воздействия на объект (т. е. на электрон). В частности, для канонически сопряженных величин (координата — импульс) точность измерения определяется соотношением неопределенности.

Гейзенберг пытался более точно обосновать принцип дополнительнойности с помощью следующего мысленного эксперимента. Допустим, что мы хотим определить положение электрона с помощью ультрамикроскопа, т. е. такого прибора, который позволяет

¹⁾ Л. Биберман, Н. Сушкин, В. Фабрикант, ДАН СССР 66, 185 (1949). Недавно аналогичные опыты по дифракции отдельных фотонов были выполнены венгерским физиком Л. Яноши (см. «Вопросы философии», № 4, стр. 98, 1958).

²⁾ Это напоминает до некоторой степени стрельбу по мишени, когда попадание одной пули дает как будто бы случайную отметку. Однако при большом числе выстрелов можно выявить некоторый закон попадания (гаусово распределение), который в применении к отдельному выстрелу дает лишь вероятность попадания в ту или другую точку (см. также примечание на стр. 98).

фиксировать положение электрона, используя для этого пучок света с соответствующей длиной волны (реально такой оптический микроскоп пока что построить невозможно, и поэтому подобный эксперимент следует рассматривать как мысленный).

Если электрон будет двигаться на таком расстоянии от объектива микроскопа, что угол между падающим и рассеянным пучком света с длиной волны λ окажется равным φ , то согласно законам оптики его координату в направлении, лежащем в плоскости, параллельной плоскости объектива, можно измерить с точностью до величины:

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \varphi}. \quad (3.28)$$

Однако в силу того, что свет обладает импульсом $p = \frac{h}{\lambda}$, часть последнего будет передаваться электрону (эффект Комптона), и поэтому импульс электрона в том же направлении можно также определить лишь с некоторой точностью:

$$\Delta p_x \sim \frac{h}{\lambda} \sin \varphi, \quad (3.29)$$

которая в произведении с Δx и дает соотношение неопределенности (3.25).

Из равенства (3.28) видно, что для более точного определения координаты электрон следует освещать светом с возможно меньшей длиной волны λ . Однако, как видно из (3.29), чем меньше λ , тем больший импульс (канонически сопряженная с координатой величина) будет получать электрон при таком освещении.

Таким образом, согласно принципу дополнительности должны существовать два класса экспериментальных установок. Один класс допускает измерение с любой точностью пространственных координат (в приведенном примере это приборы с $\lambda \rightarrow 0$), а другой класс — соответствующих составляющих импульса (приборы с $\lambda \rightarrow \infty$). Поскольку наблюдатель, использовавший первый класс установок, вносит неконтролируемую часть воздействия на импульс, а использовавший второй класс, наоборот, — на координату, то, по мнению представителей копенгагенской школы, мы никогда не сможем для заданного момента времени узнать значение координаты и импульса, хотя по отдельности каждая из этих величин может быть измерена с любой точностью.

Таким образом, сторонники принципа дополнительности рассматривают соотношение неопределенности не как объективное проявление волновых свойств микрочастиц, а связывают его с воздействием наблюдателя. Основная методологическая ошибка, которую они совершают при анализе квантовой механики,

связана с тем обстоятельством, что они абсолютизируют ее выводы, например, соотношение неопределенности вместо того, чтобы попытаться найти объективное объяснение проявления статистических закономерностей в микромире¹⁾.

В свое время это делалось также сторонниками механического мировоззрения, абсолютизовавшими законы классической механики. Механисты считали, что все высшие формы движения материи могут быть сведены к элементарным движениям атомов, совершаемым по законам механики. Наивысшего развития механистическое мировоззрение достигло в учении Лапласа, который считал, что на основе законов классической механики и знания начальных условий в принципе можно однозначно предсказать развитие того или иного явления, если удастся при этом преодолеть сложность математических расчетов.

В учении Лапласа содержатся две принципиальные ошибки. Первая ошибка заключается в утверждении, что с помощью классической механики можно до конца познать движение отдельной частицы. В действительности же законы классической механики позволяют получить правильное представление лишь о простейшем, механическом движении частиц и то лишь в определенных границах. Точно так же другие, более совершенные теории (например, квантовая механика) позволяют точнее выявить новые свойства движения микрочастиц. С развитием наших знаний можно сколь угодно точно и глубоко познать любые отдельные формы движения материи, постепенно приближаясь к истине. Однако при этом следует учитывать, что даже простейшие законы движения частиц не могут быть познаны до конца.

Как мы уже отмечали в предисловии, в начале XX века были открыты такие явления, которые не укладывались в рамки классической механики. На этом основании последователи механистического мировоззрения стали говорить о «кризисе» в физике и о конце материализма. Анализируя этот вопрос, В. И. Ленин в своем знаменитом труде «Материализм и эмпириокритицизм», написанном еще в 1908 г., показал, что «кризис» в физике связан с незнанием диалектики. На самом деле новые открытия привели не к «кризису», а к дальнейшему развитию физики, что позволило более точно исследовать явления природы. В связи с этим мы еще раз хотим напомнить высказывание В. И. Ленина о неисчерпаемости даже простейшей из частиц — электрона.

Вторая ошибка, сделанная Лапласом, заключается в том, что более сложные формы движения материи он пытался целиком

¹⁾ Критические замечания относительно анализа этого мысленного эксперимента Гейзенберга сделаны также Л. И. Мандельштамом (см. Полн. собр. трудов, т. V, М., 1950, стр. 397).

свести к простейшим; но, как было замечено Энгельсом в его известном труде «Диалектика природы», это в принципе невозможно сделать. Сокрушительный удар по идее Лапласа был нанесен фактически еще в период господства механистического мировоззрения так называемой Н-теоремой Больцмана, согласно которой необратимость процессов в кинетической теории газов представляет собой специфическую закономерность коллектива частиц и никоим образом не может быть полностью получена из уравнений, определяющих элементарные движения.

Заметим также, что вторая ошибка механистической концепции повторяется и в настоящее время. В связи с развитием квантовой химии некоторые теоретики пытались целиком свести химические процессы к элементарным, заменив лишь при этом классические законы движения квантовыми. Подобного рода попытки свести химию только к квантовой механике были заранее обречены на неудачу. Конечно, как мы увидим в дальнейшем, квантовая механика правильно объяснила многие химические закономерности, например, образование простейших гомеополарных молекул. Однако все многообразие химических явлений, помимо простейших, должно содержать в еще большей степени, чем кинетическая теория газов, свои специфические закономерности.

Таким образом, квантовую механику следует рассматривать как весьма важный последующий, но не последний этап познания движения отдельных микрочастиц.

Если квантовая механика не дает ответа на некоторые вопросы, то это не означает, например, что ее вероятностный характер, приводящий к соотношению неопределенности, связан с проявлением индетерминизма (т. е. с отсутствием причинных связей) в микромире. Явления же, которые в настоящее время остаются еще непонятными, когда-нибудь должны найти свое объяснение, что вовсе не означает возвращения к другой крайности, а именно к теории с однозначной предсказуемостью ¹⁾.

Как указывал В. И. Ленин, основной теоретико-познавательный вопрос, разделяющий философские направления, состоит не в том, могут ли причинные связи быть выражены в точной математической формуле, а в том, являются ли источником познания внешнего мира свойства нашего ума или объективная закономерность природы.

За последнее время появилось много работ как советских, так и зарубежных авторов, в которых делаются различные по-

¹⁾ Кстати заметим, что простота и цельность лапласовского детерминизма, как будто позволяющего до конца вскрыть все причины возникновения того или иного явления и отождествить хотя бы в принципе причинность с однозначной предсказуемостью, в действительности оказались ограниченными областью применимости классической механики.

пытки найти объяснение статистического характера движения отдельного электрона, не связывая это с воздействием на него прибора. Хотя многие из этих попыток оказались неудачными, но в конце концов должна появиться такая теория, по всей вероятности выходящая за рамки квантовой механики ¹⁾, которая, как нам кажется, должна дать объективное объяснение статистического характера науки о микромире. На одном из возможных вариантов новой интерпретации соотношения неопределенности мы кратко остановимся в § 7, где мы еще раз вернемся к этому вопросу.

Отметим, наконец, что в последнем издании монографии известного английского физика П. Дирака «Принципы квантовой механики» взгляды автора на принципиальные вопросы квантовой механики претерпели изменение. Если первое издание монографии Дирака было написано в духе «копенгагенских воззрений», то в четвертом издании он постепенно начинает отходить от этих воззрений. Дирак пишет, что наши представления об основах физического мира меняются последовательными этапами, и современный этап не является последним. Главное же, что само понятие состояния Дирак считает принадлежащим исключительно атомным объектам и не требующим введения наблюдателя.

Задача 3.1. Показать, что в случае эллиптических орбит число волн де-Бройля на электронной орбите равно целому числу.

Решение. Отбор устойчивых эллиптических орбит согласно Бору производится при помощи двух условий:

$$\oint p_r dr = n_r h \quad \text{и} \quad \oint p_\varphi d\varphi = n_\varphi h,$$

где

$$p_r = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}}, \quad \text{а} \quad p_\varphi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}}.$$

Учитывая, что

$$2T = \sum_k \dot{q}_k p_k,$$

т. е.

$$2 \int_0^\tau T dt = \sum_k \int_0^\tau p_k \dot{q}_k dt = \sum_k \oint p_k dq_k = nh,$$

где

$$n = n_\varphi + n_r, \quad \text{а} \quad 2T dt = m_0 v ds = \frac{h}{\lambda} ds,$$

¹⁾ Как известно, Эйнштейн не раз высказывал критические замечания о копенгагенской интерпретации квантовой механики. Однако сделанные им попытки найти более точное, чем допускаемое соотношением неопределенности, значение координаты и импульса электрона оказались неудачными. Иначе не могло и быть, так как в своем анализе он ограничивался рамками квантовой механики.

находим искомый результат:

$$\oint \frac{ds}{\lambda} = n.$$

Задача 3.2. Показать, что волна:

$$\varphi(x) = \begin{cases} e^{ik_0 x} & |x| < \frac{l}{2}, \\ 0 & |x| > \frac{l}{2}, \end{cases}$$

при конечных значениях l не является монохроматической. Найти интервал волновых чисел $\Delta k = k - k_0$, в котором амплитуды отдельных гармоник можно считать отличными от нуля.

Решение. Представим $\varphi(x)$ в виде интеграла Фурье:

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx} dk,$$

где амплитуды $A(k)$ даются формулой:

$$A(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) e^{-ikx} dx.$$

Подставляя сюда заданное выражение для $\varphi(x)$, находим:

$$A(k) = l \frac{\sin \frac{1}{2}(k - k_0)l}{\pi(k - k_0)l}.$$

Отсюда следует, что наибольшая амплитуда, соответствующая $k = k_0$, равна $A(k_0) = l/2\pi$. Хотя все остальные амплитуды не равны нулю, однако практически отличными от нуля можно считать только те амплитуды, которые будут иметь тот же порядок, что и $A(k_0)$. Эти амплитуды будут заключены в интервале $\Delta k = |k - k_0| \sim \frac{2\pi}{l}$. Величину $\Delta k \approx 2\pi/l$ можно рассматривать как размытие волнового вектора вследствие конечной ширины волнового пакета. Полагая $\Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar}$, а $l \sim \Delta x$, из последнего условия снова можно получить соотношение неопределенности:

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar.$$

Задача 3.3. Найти среднюю скорость движения, а также время расплывания волнового пакета:

$$\varphi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{-i(\omega t - kx)} dk, \quad (3.30)$$

если амплитуда $A(k)$ имеет вид гауссовой кривой:

$$A(k) = e^{-\frac{(k-k_0)^2}{q^2}}.$$

Решение. Подставляя заданное выражение для $A(k)$ в (3.30) и интегрируя, находим при $t=0$:

$$\varphi(x, 0) = \sqrt{\pi} q e^{-\frac{q^2 x^2}{4}} e^{ik_0 x}.$$

Отсюда следует, что в начальный момент времени частица была локализована в области $\Delta x \sim \frac{2}{q}$, что, в сущности, эквивалентно соотношению неопределенности (3.25).

Чтобы получить форму волнового пакета в любой другой момент времени, учтем, что

$$\hbar^2 \omega^2 = m_0^2 c^4 + c^2 \hbar^2 k^2;$$

тогда в нерелятивистском приближении ($k \ll m_0 c / \hbar$) находим:

$$\omega \approx \frac{m_0 c^2}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2m_0}.$$

Подставляя это выражение в (3.30), после интегрирования получаем:

$$\varphi(x, t) = \frac{q \sqrt{\pi}}{\left(1 + \frac{i\hbar q^2 t}{2m_0}\right)^{1/2}} e^{-\frac{q^2 \left(x - \frac{\hbar k_0}{m_0} t\right)^2}{4 \left(1 + \frac{i\hbar q^2 t}{2m_0}\right)}} e^{+i(k_0 x - \omega_0 t)}$$

где

$$\omega_0 = \frac{m_0 c^2}{\hbar} + \frac{\hbar k_0^2}{2m_0}.$$

Отсюда для плотности вероятности находим:

$$|\varphi(x, t)|^2 = \frac{\pi q^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar q^2 t}{2m_0}\right)^2}} e^{-\frac{q^2 (x - v_0 t)^2}{2 \left[1 + \left(\frac{\hbar q^2 t}{2m_0}\right)^2\right]}};$$

здесь $v_0 = \frac{\hbar k_0}{m_0}$ — скорость центра тяжести волнового пакета. Из последней формулы видно, что максимум волнового пакета, т. е. точка $x = v_0 t$ движется со скоростью частицы v_0 .

Эффективная ширина волнового пакета в момент времени t оказывается равной:

$$\Delta x_t \approx \frac{2}{q} \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar q^2 t}{2m_0}\right)^2}.$$

Полагая в последней формуле $q \sim \frac{1}{\Delta x}$, получаем для времени расплывания волнового пакета выражение, совпадающее с формулой (3.27).

Задача 3.4. Показать, что учет затухания в колебательном движении:

$$x(t) = e^{-\gamma t} \cos \omega_0 t$$

приводит к уширению спектральной линии.

Решение. Затухающее колебание представим в виде интеграла Фурье:

$$x(t) = \int_0^{\infty} a(\omega) \cos \omega t d\omega,$$

где

$$a(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} x(t) \cos \omega t dt \approx \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{\gamma^2 + (\omega - \omega_0)^2}.$$

Для наибольшей амплитуды находим значение:

$$a(\omega_0) = \frac{1}{\pi\gamma}.$$

Тот же порядок будут иметь амплитуды, которым соответствуют частоты, лежащие в интервале:

$$\Delta\omega = |\omega - \omega_0| \sim \gamma.$$

Последнее выражение и принимается за уширение линии, поскольку только амплитуды, соответствующие этим частотам, будут практически отличны от нуля.

Если принять во внимание, что коэффициент затухания γ связан со средним временем жизни затухающих колебаний соотношением $\Delta t \sim 1/\gamma$, из последнего условия получим известную из оптики связь между уширением спектральных линий и средним временем жизни атома:

$$\Delta t \Delta\omega \sim 1.$$

Отсюда, учитывая соотношение $\Delta\omega = \Delta E/\hbar$, получаем так называемое четвертое соотношение неопределенности:

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar.$$

§ 4. СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Теория квант Планка, постулаты Бора, а затем и гипотеза де-Бройля были важнейшими этапами в процессе развития теоретических основ физики атома. Однако эти работы явились лишь предварительным этапом для получения основного дифференциального уравнения, описывающего движение электрона с учетом волновых свойств, а также построения теории излучения света с учетом его квантовой структуры.

Фундаментальный шаг в этом направлении сделал Шредингер (1926). Он предложил дифференциальное волновое уравнение в частных производных, с помощью которого оказалось возможным описать движение, как правило, заряженных частиц в нерелятивистском случае ($v \ll c$). Это уравнение представляет собой обобщение классического уравнения Гамильтона — Якоби на случай, когда де-бройлевская длина волны отлична от нуля.

Уравнение Шредингера находится примерно в таком же отношении к уравнению Гамильтона — Якоби, в каком находится волновая оптика к геометрической.

а. Получение стационарного уравнения Шредингера

Покажем, как можно наиболее просто получить уравнение Шредингера. Сразу же заметим, что ни о каком строгом или сколько-нибудь общем выводе этого уравнения не может быть и речи, поскольку, вообще говоря, любую новую теорию нельзя построить, базируясь лишь на старых представлениях. Излагаемый ниже метод по существу представляет собой разумное обобщение волнового уравнения, известного, например, в классической электродинамике или оптике:

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0, \quad (4.1)$$

на случай распространения де-бройлевских волн. Здесь φ — функция, описывающая волновой процесс, распространяющийся со скоростью u . Если волна является монохроматической, то решение уравнения (4.1) можно искать в виде:

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\omega t} \psi(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

где $\omega = 2\pi\nu$ — круговая частота, а пространственная часть $\psi(\mathbf{r})$ волновой функции подчиняется уравнению:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \frac{\omega^2}{u^2} \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.3)$$

В последнем уравнении вместо двух параметров ω и u мы можем ввести только один, а именно длину волны:

$$\lambda = \frac{2\pi u}{\omega}. \quad (4.4)$$

Тогда будем иметь:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.5)$$

Для того чтобы из этого волнового уравнения, имеющего, вообще говоря, универсальный характер, получить волновое уравнение, позволяющее описывать волновое движение электронов, подставим сюда вместо λ выражение для де-бройлевской длины волны:

$$\lambda = \frac{h}{m_0 v} = \frac{2\pi h}{p}. \quad (4.6)$$

Учитывая далее закон сохранения энергии:

$$\frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) = E = \text{const},$$

находим:

$$\frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - V(\mathbf{r})]. \quad (4.7)$$

Подставляя это выражение в уравнение (4.5), получаем *стационарное* (т. е. не зависящее от времени) *уравнение Шредингера*:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - V(\mathbf{r})] \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.8)$$

Определив из уравнения (4.8) пространственную часть волновой функции $\psi(\mathbf{r})$, мы можем воспользоваться соотношением (4.2), имеющим место для любых монохроматических волн, и получить полную волновую функцию, зависящую как от пространственных, так и от временной координат. Полагая $\omega = \frac{E}{\hbar}$, имеем¹⁾:

$$\psi(t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \psi. \quad (4.9)$$

Для комплексно сопряженного уравнения, пространственная часть волновой функции которого также удовлетворяет уравнению (4.8), будем иметь:

$$\psi^*(t) = e^{i \frac{E}{\hbar} t} \psi^*. \quad (4.9a)$$

б. Условия, налагаемые на волновые функции. Собственные значения и собственные функции

Функции $\psi(t)$, применяемой для описания поведения частицы, в теории Шредингера может быть дана статистическая интерпретация. В частности, величина $\psi^*(t) \psi(t) = \psi^* \psi$, играющая роль функции распределения, характеризует *плотность вероятности нахождения частицы в том или ином месте пространства*.

Если плотность вероятности $\psi^* \psi$ отлична от нуля только в некоторой, пусть сколько угодно большой, но конечной области пространства Ω , то мы с достаточной степенью точности можем сказать, что частица находится где-то в этой области, т. е. вероятность обнаружить частицу в области Ω должна равняться единице. Математически это можно записать в виде:

$$\int_{\Omega} \psi^* \psi d^3x = 1. \quad (4.10)$$

Выражение (4.10) в квантовой механике носит название *условия нормировки*.

¹⁾ Здесь и в дальнейшем волновые функции, зависящие от координат и от времени, будем записывать в виде $\psi(t)$, а волновые функции, содержащие в качестве аргумента только координаты, — в виде ψ .

Следует, однако, заметить, что не всегда область отличной от нуля плотности вероятности бывает ограниченной. Есть такие случаи (простейший из них — свободное движение частицы, которое мы рассмотрим ниже), когда во *всем* пространстве величина $\psi^*\psi$ не обращается в нуль. В таких примерах $\int \psi^*\psi d^3x$ расходится, и условие нормировки требует несколько другой формулировки.

Перейдем теперь к общему анализу уравнения Шредингера. Уравнение Шредингера (4.8) представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных. Его решение должно напоминать решение некоторых классических задач математической физики, например, уравнения колебания струны и т. д.

Прежде всего заметим, что на волновую функцию ψ , как на решение, удовлетворяющее уравнению второго порядка типа Штурма — Лиувилля, должны быть наложены следующие условия. Она должна быть *непрерывной и иметь непрерывную производную*; кроме того, она должна быть *однозначной и конечной во всем пространстве*, а также удовлетворять определенным *граничным условиям*.

Эти требования приводят к тому, что решения волновых уравнений, удовлетворяющие перечисленным выше условиям, существуют, вообще говоря, не при любых, а только при некоторых значениях параметра, получивших название *собственных значений*; в данном случае таким параметром является энергия E с собственными значениями:

$$E_1, E_2, E_3, \dots \quad (4.11)$$

Соответствующие же этим собственным значениям решения волнового уравнения:

$$\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots \quad (4.12)$$

называются *собственными функциями*.

Возможные значения энергии образуют так называемый *энергетический спектр*. Ниже мы увидим, что если движение частицы не ограничено в пространстве, то ее энергетический спектр будет *непрерывным*. Если же положение частицы в пространстве ограничено, то энергетический спектр будет *дискретным*.

Покажем, что собственные функции ψ_n будут удовлетворять условию *ортонормированности*:

$$\int \psi_n^* \psi_{n'} d^3x = \delta_{nn'}, \quad (4.13)$$

где $\delta_{nn'}$ — символ Кронекера — Вейерштрасса, равный единице при $n' = n$ (условие нормировки) и равный нулю при $n' \neq n$ (усло-

вие ортогональности). Чтобы показать это, напишем уравнение Шредингера для ψ_n и $\psi_{n'}^*$:

$$\nabla^2 \psi_n + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E_n - V) \psi_n = 0, \quad (4.8a)$$

$$\nabla^2 \psi_{n'}^* + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E_{n'} - V) \psi_{n'}^* = 0. \quad (4.8б)$$

Умножая первое из них на $\psi_{n'}^*$, а второе на $(-\psi_n)$ и складывая затем первое со вторым, получаем:

$$\psi_{n'}^* \nabla^2 \psi_n - \psi_n \nabla^2 \psi_{n'}^* + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E_n - E_{n'}) \psi_{n'}^* \psi_n = 0. \quad (4.14)$$

Отсюда, учитывая, что

$$\psi_{n'}^* \nabla^2 \psi_n - \psi_n \nabla^2 \psi_{n'}^* = \operatorname{div} \mathbf{B},$$

где

$$\mathbf{B} = \psi_{n'}^* \nabla \psi_n - \psi_n \nabla \psi_{n'}^*,$$

после интегрирования (4.14) по всему пространству находим:

$$\int \operatorname{div} \mathbf{B} d^3x + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E_n - E_{n'}) \int \psi_{n'}^* \psi_n d^3x = 0. \quad (4.15)$$

Принимая во внимание стремление ψ -функции на бесконечности к нулю, получаем¹⁾:

$$\int \operatorname{div} \mathbf{B} d^3x = \oint B_n dS = 0,$$

т. е. вместо (4.15) будем иметь:

$$(E_n - E_{n'}) \int \psi_{n'}^* \psi_n d^3x = 0. \quad (4.16)$$

Предположим теперь, что $E_n \neq E_{n'}$ (т. е. $n' \neq n$); тогда согласно (4.16) должно выполняться равенство (условие ортогональности):

$$\int \psi_{n'}^* \psi_n d^3x = 0. \quad (4.17)$$

¹⁾ Поверхность $S = 4\pi r^2$ стремится к бесконечности при $r \rightarrow \infty$. Поэтому данный интеграл обращается в нуль, когда волновая функция ψ при $r \rightarrow \infty$ стремится к нулю быстрее, чем r^{-1} . Для дискретного спектра это условие всегда выполняется, так как волновая функция ψ на бесконечности обращается в нуль, как правило, по экспоненциальному закону. Случай же непрерывного спектра мы исследуем особо.

Если же $n' = n$ (или $E_n = E_{n'}$), то последний интеграл будет отличен от нуля; мы можем потребовать, чтобы он равнялся единице (условие нормировки):

$$\int \psi_n^* \psi_n d^3x = 1^1. \quad (4.18)$$

Таким образом, собственные функции ψ_1, ψ_2, ψ_3 , соответствующие собственным значениям E_1, E_2, E_3 , действительно обладают свойством ортонормированности (4.13), являющимся одним из важнейших свойств собственных функций.

в. Частица в потенциальной яме

В качестве примера определения собственных значений и собственных функций рассмотрим движение частицы в одномерной потенциальной яме.

Поскольку эта задача имеет главным образом методическое значение, мы выберем простейшую зависимость потенциальной энергии от расстояния (см. фиг. 4.1):

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{при } -\infty < x < 0 \text{ (область I),} \\ 0 & \text{при } 0 < x < l \text{ (область II),} \\ V_0 & \text{при } l < x < \infty \text{ (область III).} \end{cases} \quad (4.19)$$

¹⁾ Условия ортонормированности (4.17) и (4.18) получены в предположении, что каждому собственному значению энергии E_n соответствует только одно собственное значение волновой функции ψ_n . Этот случай носит название невырожденного.

При наличии же вырождения, когда одному и тому же значению энергии E_n соответствуют несколько волновых функций (например, две) ψ_n' и ψ_n'' , мы всегда можем их нормировать на единицу. Однако, как видно из (4.16), они могут оказаться и неортогональными друг к другу, т. е.

$$\int \psi_n'^* \psi_n'' d^3x = S \neq 0.$$

Тем не менее мы всегда можем составить из них такие линейные комбинации (в данном случае две), что новые волновые функции будут ортогональными друг к другу.

Например, в случае вещественности величины S такими комбинациями являются следующие:

$$\psi_{n_1} = \frac{\psi_n' + \psi_n''}{\sqrt{2(1+S)}}; \quad \psi_{n_2} = \frac{\psi_n' - \psi_n''}{\sqrt{2(1-S)}}.$$

Поэтому при наличии вырождения мы можем всегда выбрать волновые функции таким образом, что условие ортонормированности примет вид:

$$\int \psi_{n'm'}^* \psi_{nm} d^3x = \delta_{nn'} \delta_{mm'}.$$

Один из наиболее важных примеров вырожденных функций будет рассмотрен нами более подробно в § 12 (задача о ротаторе).

Тогда уравнение Шредингера для области II ($E > V = 0$, потенциальная яма) принимает вид:

$$\psi'' + k^2 \psi = 0, \quad (4.20)$$

где

$$\psi'' = \frac{d^2 \psi}{dx^2}, \quad \text{а}$$

$$k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E = \frac{p^2}{\hbar^2} > 0. \quad (4.20a)$$

Заметим, что в данной задаче случай $E < 0$ не имеет физического смысла.

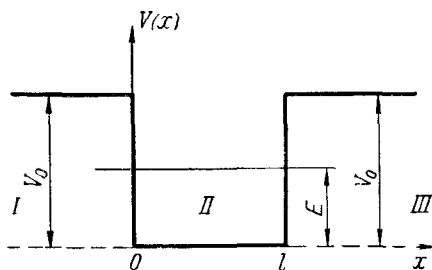
Общее решение уравнения (4.20), носящее колебательный характер, будет:

$$\psi_{II} = B_{II} \cos kx + A_{II} \sin kx. \quad (4.21)$$

Что касается уравнения Шредингера для областей I и III, то оно имеет там вид:

$$\psi'' + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - V_0) \psi = 0. \quad (4.22)$$

Фиг. 4.1. Движение частицы в потенциальной яме.



Здесь следует различать два случая. В первом случае ($E > V_0$) решение в этих областях также будет носить колебательный характер (уравнение эллиптического типа), определяемый уравнением (4.21), причем величина k имеет значение:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_0(E - V_0)}.$$

Каких-либо ограничений на бесконечности для волновой функции при этом вводить не следует, и поэтому энергия E может принимать любые непрерывные значения. Однако случай непрерывного спектра лучше исследовать не на этом примере (наличие потенциальной ямы только усложнит в математическом отношении задачу, но не изменит общего характера решения), а на примере свободного движения частицы (см. ниже).

Во втором случае ($E < V_0$, потенциальный барьер) решение уравнения (4.22) имеет экспоненциальный характер (уравнение гиперболического типа), и поэтому его общее решение может быть представлено в виде:

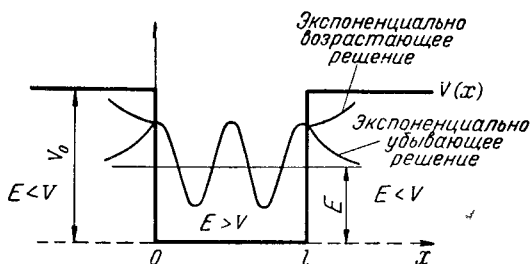
$$\psi_{I,III} = A_{I,III} e^{xx} + B_{I,III} e^{-xx}, \quad (4.23)$$

где

$$\kappa^2 = \frac{1}{\hbar^2} 2m_0 (V_0 - E) = \frac{|p|^2}{\hbar^2} > 0. \quad (4.24)$$

Заметим, что волновая функция при произвольном значении энергии ($0 < E < V_0$) внутри потенциального барьера будет содержать как экспоненциально возрастающее, так и экспоненциально убывающее решения (см. фиг. 4.2). Поэтому мы должны выбрать такие значения E , при которых экспоненциально возрастающие решения внутри потенциального барьера будут отсутствовать.

Для этого мы должны потребовать, чтобы в области I ($x < 0$) коэффициент $B_I = 0$, а в области III ($x > l$) коэффициент $A_{III} = 0$ ¹⁾.



Фиг. 4.2. Волновая функция при некотором значении E .

За ось абсцисс для волновой функции взят энергетический уровень.

Тогда будем иметь:

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_I e^{x\kappa} = A_I e^{-\kappa|x|}, \\ \psi_{III} &= B_{III} e^{-x\kappa} = B e^{-\kappa(x-l)}, \end{aligned} \quad (4.25)$$

причем в последней формуле ради простоты мы положили:

$$B_{III} = B e^{\kappa l}.$$

Сшивая решения²⁾ на границах областей I и II ($x=0$), а также II и III ($x=l$) при условии, что экспоненциально возрастающее решение обращается в нуль, находим уравнение для определения собственных значений энергии E .

¹⁾ Заметим, что при $E < V_0$ число неизвестных коэффициентов у волновых функций становится меньше, чем число налагаемых условий. Поэтому решения будут возможны лишь при некоторых значениях E , что приводит к дискретности спектра.

²⁾ При сшивании решений мы должны в соответствующей точке приравнять сами функции, а также их первые производные.

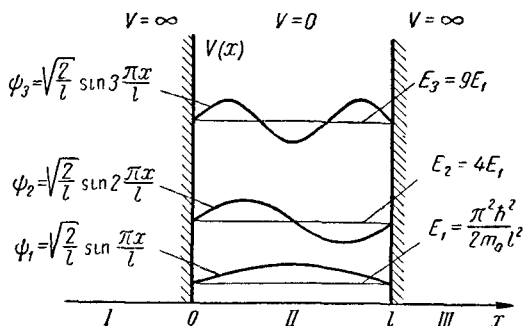
В дальнейшем мы еще несколько упростим нашу задачу, а именно потребуем, чтобы потенциал V_0 , а вместе с тем и величина x обратились в бесконечность (см. фиг. 4.3).

Тогда, как видно из (4.25), $\psi_I = \psi_{III} = 0$ и поэтому граничные условия для решения (4.21) внутри потенциальной ямы (область II) принимают вид:

$$\psi_{II} = 0 \text{ при } x = 0 \quad (4.26)$$

и

$$\psi_{II} = 0 \text{ при } x = l. \quad (4.27)$$



Фиг. 4.3. Частица в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Отсюда, из общего решения (4.21) в области II находим, что $V_{II} = 0$, а для определения собственных значений будем иметь соотношение:

$$\sin kl = 0, \quad (4.28)$$

из которого следует:

$$kl = \pi n, \quad (4.29)$$

где $n = 1, 2, 3, 4, \dots$. Значение $n = 0$ мы исключаем из рассмотрения, так как при этом волновая функция тождественно обращается в нуль. Точно так же отрицательные значения n могут быть опущены, поскольку волновые функции при отрицательных значениях n будут равны волновым функциям для положительных n , взятым с обратным знаком. Учитывая, что $k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E$, получаем следующее выражение, определяющее спектр энергии (собственные значения):

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_0 l^2}; \quad (4.30)$$

соответствующие этим значениям энергии волновые функции (собственные функции) будут равны:

$$\psi_n = A_n \sin \pi n \frac{x}{l}. \quad (4.31)$$

Коэффициент A_n может быть найден из условия нормировки:

$$\int_0^l \psi_n^2 dx = A_n^2 \int_0^l \sin^2 \pi n \frac{x}{l} dx = \frac{l}{2} A_n^2 = 1,$$

откуда

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Подставляя это значение для коэффициентов A_n в (4.31), окончательно находим:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \pi n \frac{x}{l}. \quad (4.32)$$

Волновые функции (4.32), представляющие собой собственные функции уравнения Шредингера, согласно общей теореме о собственных функциях [см. (4.17)], должны удовлетворять условию ортогональности:

$$\int_0^l \psi_{n'}^* \psi_n dx = 0 \text{ при } n' \neq n, \quad (4.33)$$

в чем нетрудно убедиться простым интегрированием, подставляя сюда вместо волновой функции ψ_n ее выражение (4.32).

Выпишем теперь некоторые конкретные собственные значения E_n и собственные функции ψ_n , которые изображены на фиг. 4.3:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 l^2}, \quad \psi_1 = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi x}{l}, \quad (4.34)$$

$$E_2 = 4E_1, \quad \psi_2 = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin 2\pi \frac{x}{l}, \quad (4.35)$$

$$E_3 = 9E_1, \quad \psi_3 = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin 3\pi \frac{x}{l}. \quad (4.36)$$

Приведенные здесь решения очень похожи на известные решения для колебания струны с закрепленными концами, которые образуют стоячие волны. Случай $n=1$ [см. (4.34)] соответствует основному тону, случай $n=2$ [см. (4.35)] — первой гармонике и т. д.

г. Свободное движение частиц. Нормировка волновых функций в случае непрерывного спектра

Рассмотрим свободное движение частицы (сначала одномерный случай), когда во всем пространстве ($-\infty < x < \infty$) уравнение Шредингера (4.8) может быть записано в форме:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad (4.37)$$

где

$$k^2 = \frac{2m_0E}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}. \quad (4.38)$$

Его решение имеет вид:

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (4.39)$$

Чтобы в последнем равенстве выяснить физический смысл каждого члена, напомним полную волновую функцию:

$$\psi(t) = e^{-i\omega t}\psi = Ae^{-i(\omega t - kx)} + Be^{-i(\omega t + kx)}. \quad (4.40)$$

Отсюда видно, что первое решение $Ae^{-i(\omega t - kx)}$ описывает движение частицы в положительном направлении оси x , а второе $Be^{-i(\omega t + kx)}$ — в противоположном направлении. Ограничиваясь одной бегущей волной, распространяющейся вдоль оси x , находим:

$$\psi = Ae^{ikx}. \quad (4.41)$$

Нетрудно убедиться, что выражение $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\psi dx$ расходится, и, следовательно, прежний способ нормировки [см. (4.10)] на единицу требует пересмотра.

Существуют два основных способа нормировки таких ψ -функций. Разберем более подробно первый из них, предложенный Борном. Этот способ заключается в том, что вместо граничных условий на волновую функцию ψ накладывается условие периодичности:

$$\psi(x) = \psi(x + L), \quad (4.42)$$

где длина L получила название длины периодичности. Эта длина может быть выбрана сколь угодно большой ($L \rightarrow \infty$). Она, как правило, не входит в конечный результат.

Согласно условию (4.42), которое в нашем случае можно переписать в виде:

$$Ae^{ikx} = Ae^{ikx + ikL},$$

мы получаем, что $e^{ikL} = 1$. Отсюда находим:

$$k = \frac{2\pi n}{L}, \quad (4.43)$$

где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. При этом для уровней энергии согласно (4.38) и (4.43) имеем:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = \frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2}{m_0 L^2}. \quad (4.44)$$

Так как функция ψ является периодической на отрезке L , то условие нормировки принимает вид:

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi^* \psi dx = 1. \quad (4.45)$$

Подставляя сюда выражение (4.41) для ψ , получаем:

$$A = \frac{1}{\sqrt{L}}. \quad (4.46)$$

Поэтому нормированные решения будут равны:

$$\psi_n = L^{-1/2} e^{ikx} = L^{-1/2} e^{i \frac{2\pi n}{L} x}. \quad (4.47)$$

Легко показать, что функции (4.47) будут не только нормированными, но и ортогональными, в чем легко убедиться путем непосредственного интегрирования:

$$\begin{aligned} \int_{-L/2}^{L/2} \psi_{n'}^* \psi_n dx &= \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} e^{-\frac{2\pi i x}{L}(n' - n)} dx = \\ &= \frac{\sin \pi(n - n')}{\pi(n - n')} = \begin{cases} 0 & \text{при } n' \neq n, \\ 1 & \text{при } n' = n. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.48)$$

Таким образом, вводя искусственным путем длину периодичности, мы делаем тем самым непрерывный спектр дискретным. Однако если в конечном результате длину L стремить к бесконечности, то этот дискретный спектр станет непрерывным. В самом деле, учитывая, что $k = \frac{p}{\hbar} = \frac{m_0 v}{\hbar}$ и $\Delta n = 1$, для разности ΔE соседних энергетических уровней находим значение:

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k}{m_0} \frac{2\pi}{L} = v \frac{2\pi \hbar}{L}. \quad (4.49)$$

Отсюда непосредственно следует, что, если $L \rightarrow \infty$, то $\Delta E \rightarrow 0$, т. е. спектр энергии будет непрерывным.

Обобщим рассмотренную задачу на трехмерный случай движения свободной частицы. Уравнение Шредингера при этом следует записать в виде:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2 \right) \psi = 0. \quad (4.50)$$

Здесь, как и в одномерном случае, k^2 определяется формулой (4.20 а).

Решение уравнения (4.50) будем искать методом разделения переменных, т. е. в виде:

$$\psi = \psi(x) \psi(y) \psi(z). \quad (4.51)$$

Подставляя это выражение для ψ в уравнение (4.50) и умножая полученное соотношение на:

$$\frac{1}{\psi} = \frac{1}{\psi(x) \psi(y) \psi(z)},$$

находим:

$$\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + \frac{\psi''(y)}{\psi(y)} + \frac{\psi''(z)}{\psi(z)} + k^2 = 0, \quad (4.52)$$

где штрихи обозначают производные по аргументу соответствующей ψ -функции.

Замечая, что такое уравнение может удовлетворяться только в том случае, когда каждая из дробей не зависит от координат и равна некоторой постоянной, для функции $\psi(x)$, $\psi(y)$ и $\psi(z)$ получаем уравнения:

$$\begin{aligned} \psi''(x) + k_1^2 \psi(x) &= 0, & \psi''(y) + k_2^2 \psi(y) &= 0, \\ \psi''(z) + k_3^2 \psi(z) &= 0, \end{aligned} \quad (4.53)$$

причем

$$k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = k^2. \quad (4.54)$$

Выбирая в качестве решений полученных уравнений (4.53) бегущие волны в некотором определенном направлении, будем иметь:

$$\psi(x) = A e^{ik_1 x}, \quad \psi(y) = B e^{ik_2 y}, \quad \psi(z) = C e^{ik_3 z}. \quad (4.55)$$

Определяя неизвестные коэффициенты A , B и C из условия нормировки, а также считая, как и в одномерном случае, функции $\psi(x)$, $\psi(y)$ и $\psi(z)$ периодическими на некотором отрезке L , находим:

$$\psi(x) = L^{-\frac{1}{2}} e^{ik_1 x}, \quad \psi(y) = L^{-\frac{1}{2}} e^{ik_2 y}, \quad (4.56)$$

$$\psi(z) = L^{-\frac{1}{2}} e^{ik_3 z}$$

Здесь

$$k_1 = n_1 \frac{2\pi}{L}, \quad k_2 = n_2 \frac{2\pi}{L}, \quad k_3 = n_3 \frac{2\pi}{L}, \quad (4.57)$$

$$\text{а } n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Для значений энергии частицы в этом случае будем иметь:

$$E_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_0 L^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = \frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2}{m_0 L^2}, \quad (4.58)$$

где

$$n^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2. \quad (4.59)$$

Подставляя в (4.51) соотношения (4.56), находим:

$$\psi_k = L^{-\frac{3}{2}} e^{ik \cdot r}. \quad (4.60)$$

Эти волновые функции будут удовлетворять условию ортонормированности:

$$\int \psi_{n'_1 n'_2 n'_3}^* \psi_{n_1 n_2 n_3} d^3x = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \delta_{n_3 n'_3}. \quad (4.61)$$

Полная же волновая функция $\psi(t)$, зависящая как от координат, так и от времени, запишется в виде:

$$\psi(t) = L^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p \cdot r)}, \quad (4.62)$$

где

$$p = \hbar k, \quad E = \frac{p^2}{2m_0}. \quad (4.63)$$

Отметим попутно, что энергетический спектр в данном случае, как и при одномерном движении, оказывается непрерывным. В этом нетрудно убедиться, если по аналогии с линейной задачей найти разность энергий двух соседних уровней и положить затем $L \rightarrow \infty$.

д. Основные свойства δ -функции. Нормировка непрерывного спектра на δ -функцию

Одно из основных свойств собственных функций состоит, как мы уже указывали [см. (4.13)], в том, что они являются ортонормированными. Это позволяет любую функцию $F(x)$, если она не обладает какими-либо специфическими особенностями, разложить в ряд по полной системе ортонормированных функций:

$$F(x) = \sum_n C_n \psi_n(x). \quad (4.64)$$

Умножая последнее равенство $\psi_{n'}^*(x) dx$ и интегрируя по всей области изменения переменной x , получаем:

$$\int \psi_{n'}^*(x) F(x) dx = \sum_n C_n \int \psi_{n'}^*(x) \psi_n(x) dx.$$

Отсюда, учитывая условие ортонормированности, будем иметь:

$$C_n = \int \psi_n^*(x) F(x) dx. \quad (4.65)$$

Подставляя в разложение (4.64) это значение для коэффициента C_n , предварительно заменив переменную интегрирования x через x' , чтобы функцию $\psi_n(x)$ можно было подвести под знак интеграла, находим:

$$F(x) = \sum_n \int dx' F(x') \psi_n^*(x') \psi_n(x). \quad (4.66)$$

Последнее разложение представляет собой обобщенный ряд Фурье. Чтобы получить из него обычный ряд Фурье, мы должны вместо ψ_n подставить гармонические функции (4.47).

Заметим, что сумма по n в (4.66) представляет собой δ -функцию:

$$\sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) = \delta(x - x'), \quad (4.67)$$

так как она переводит функцию $F(x')$ в $F(x)$.

В этом отношении δ -функция напоминает собой δ -символ Кронекера — Вейерштрасса, который обладает аналогичным свойством в отношении индексов n и n' .

$$\sum_{n'} f_{n'} \delta_{nn'} = f_n.$$

Отсюда следует, что δ -функция отлична от нуля только в очень узкой области $x' \sim x$, так же как и δ -символ отличен от нуля лишь при $n' = n$. В частности, полагая в (4.66) функцию $F(x') = 1$, мы получаем одно из основных свойств δ -функции:

$$\int \delta(x - x') dx' = 1. \quad (4.68)$$

Интересно отметить, что соотношения (4.66) и (4.68) совершенно не зависят от того, из каких ортонормированных функций построена δ -функция.

В наиболее простом случае можно построить δ -функцию из ортонормированных функций (4.47), по которым производится разложение в ряд Фурье:

$$\delta(x - x') = \frac{1}{L} \sum_n e^{\frac{2\pi n}{L} i(x - x')}. \quad (4.69)$$

Вводя далее новую переменную $k = \frac{2\pi n}{L}$ и учитывая, что $\Delta k = \frac{2\pi}{L} \Delta n = \frac{2\pi}{L}$ (так как $\Delta n = 1$), вместо (4.69) будем иметь:

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \sum \Delta k e^{ik(x - x')}.$$

Если теперь длину L стремить к бесконечности ($\Delta k \rightarrow 0$), то последняя сумма превратится в интеграл:

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(x - x')}. \quad (4.70)$$

Здесь пределы интегрирования по k следует взять от $-\infty$ до $+\infty$. Отметим, что δ -функция относится к числу так называемых несобственных функ-

ций. Это проявляется в том, что интеграл (4.70) мы не можем вычислить непосредственно, так как при $x = x'$ он вообще расходится. Поэтому чтобы получить представление о δ -функции, мы должны несколько «размазать» подынтегральное выражение (4.70). Размазывание δ -функции можно произвести, например, следующим образом:

$$\begin{aligned} \delta(x - x', \alpha) &= \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-\alpha |k| + i(x - x')k} = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\alpha k} \cos k(x - x') dk = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{\alpha^2 + (x - x')^2}. \end{aligned} \quad (4.71)$$

График размазанной δ -функции изображен на фиг. 4.4. В пределе $\alpha \rightarrow 0$ δ -функция должна обладать следующими свойствами:

$$\begin{aligned} \delta(x - x') &= 0 \text{ при } x \neq x', \\ \delta(x - x') &= \infty \text{ при } x = x', \end{aligned} \quad (4.72)$$

причем в случае предельного перехода $\alpha \rightarrow 0$ площадь между δ -функцией и осью x остается неизменной:

$$\begin{aligned} \int \delta(x - x') dx' &= \\ = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int dx' \frac{\alpha}{\alpha^2 + (x' - x)^2} &= 1. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Аналогичным способом можно определить трехмерную δ -функцию:

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x) \delta(y) \delta(z) = \frac{1}{8\pi^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (4.74)$$

Она удовлетворяет следующим условиям:

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{r}) &= 0, \text{ если } \mathbf{r} \neq 0, \\ \int \delta(\mathbf{r}) d^3x &= 1, \end{aligned} \quad (4.75)$$

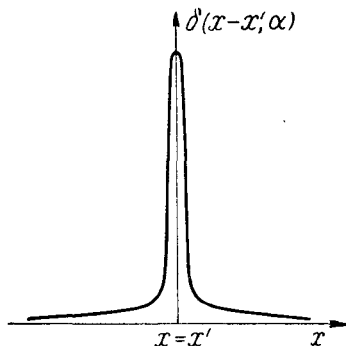
причем интегралы (4.74) и (4.75) являются трехмерными и их следует распространить соответственно по всему объему пространства волновых чисел (\mathbf{k}) или обычного координатного пространства (\mathbf{r}).

Трехмерной δ -функцией очень удобно задавать плотность точечного заряда:

$$\rho(\mathbf{r}) = e\delta(\mathbf{r}). \quad (4.76)$$

Используя эту запись в уравнении Пуассона:

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi e\delta(\mathbf{r}) = -\frac{e}{2\pi^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$



Фиг. 4.4. График размазанной δ -функции.

мы можем определить потенциал точечного заряда ¹⁾:

$$\Phi = \frac{e}{2\pi^2} \int d^3k \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{k^2} = \frac{2e}{\pi r} \int_0^\infty dk \frac{\sin kr}{k} = \frac{e}{r}. \quad (4.77)$$

Таким образом, трехмерная δ -функция позволяет описывать особенность в точке $r \rightarrow 0$ оператора Лапласа, действующего на $1/r$:

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(r). \quad (4.78)$$

Мы не будем останавливаться более подробно на свойствах δ -функции ²⁾ и лишь используем ее для нормировки непрерывного спектра в случае одномерного свободного движения, когда волновые функции согласно (4.41) имеют вид:

$$\psi(p) = Ae^{i\frac{p}{\hbar}x}, \quad \psi^*(p') = Ae^{-i\frac{p'}{\hbar}x}. \quad (4.79)$$

Тогда нормировку этих функций мы можем связать с δ -функцией соотношением:

$$\begin{aligned} \int \psi^*(p') \psi(p) dx &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ix\left(\frac{p}{\hbar} - \frac{p'}{\hbar}\right)} = \\ &= A^2 2\pi\hbar \delta(p - p') = \delta(p - p'). \end{aligned} \quad (4.80)$$

Отсюда находим, что

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}},$$

т. е.

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}. \quad (4.81)$$

Сравним обычную нормировку волновых функций с нормировкой на δ -функцию. С этой целью условие ортонормированности функций, нормированных обычным способом, представим в виде:

¹⁾ При определении потенциала Φ мы воспользовались правилом деления показательной функции на оператор:

$$(\nabla^2)^{-1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{-k^2}.$$

В этом нетрудно убедиться, если учесть, что

$$\nabla^2 (\nabla^2)^{-1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \nabla^2 \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{-k^2} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}.$$

²⁾ Основные свойства δ -функции изложены, например, в монографии Д. Д. Иваненко и А. А. Соколова «Классическая теория поля», М., 1951, § 1—7.

$$\sum_{n'=n_1}^{n_2} \int \psi_{n'}^* \psi_n dx = \begin{cases} 1, & \text{если } n \text{ лежит внутри интервала } n_1 < n_2, \\ 0, & \text{если } n \text{ лежит вне интервала } n_1 < n_2. \end{cases} \quad (4.82)$$

Аналогично, для волновых функций, нормированных на δ -функцию, мы получим следующее обобщение:

$$\int_{p_1}^{p_2} dp' \int \psi^*(p') \psi(p) dx = \begin{cases} 1, & \text{если } p \text{ лежит внутри интервала } p_1 < p_2, \\ 0, & \text{если } p \text{ лежит вне интервала } p_1 < p_2. \end{cases} \quad (4.83)$$

Анализируя найденные решения в случае потенциальной ямы, а также в случае свободного движения, мы приходим к следующему заключению. Если во всех точках пространства, находящихся на бесконечности, будет выполнено условие $V > E$, то спектр энергии будет дискретным; если же на бесконечности существуют такие области, для которых $V < E$, то спектр будет непрерывным.

Этот вывод фактически сделан на основании анализа решений, полученных в случае прямоугольной потенциальной ямы. Однако если потенциальная энергия является непрерывной функцией x, y, z , то это не изменит ни общего характера решения (более подробно см. следующий параграф), ни тех признаков появления дискретности спектра, на которые мы только что указали.

§ 5. ПОЛНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Как было показано в предыдущем параграфе, решение стационарного (т. е. независящего от времени) уравнения Шредингера (4.8) сводится к определению собственных значений, т. е. спектра уровней энергии E_n , и соответствующих им собственных функций ψ_n . Волновая же функция некоторого состояния $\psi_n(t)$, зависящая как от координат, так и от времени, получалась при этом умножением ψ_n на величину $e^{- (i/\hbar) E_n t}$. Поэтому функция $\psi_n(t)$ могла описывать лишь процессы, протекающие строго монохроматически (т. е. с одной энергией).

Наряду со стационарным существует также явно зависящее от времени (полное, или нестационарное) уравнение Шредингера, позволяющее исследовать более широкий круг вопросов.

а. Переход к полному уравнению Шредингера

Чтобы получить полное уравнение Шредингера, необходимо в стационарном уравнении исключить энергию E , играющую роль постоянного параметра. Представим для этого стационарное уравнение Шредингера (4.8) в виде:

$$E \psi(t) + \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 - V \right) \psi(t) = 0. \quad (5.1)$$

Тогда, исключая из него параметр E с помощью соотношения:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = E \psi(t), \quad (5.2)$$

получаем полное уравнение Шредингера:

$$\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 - V\right) \psi(t) = 0. \quad (5.3)$$

Это уравнение имеет более общий характер и пригодно, в частности, для описания процессов, в которых потенциальная энергия V является функцией не только координат, но и времени.

Если потенциальная энергия V от времени не зависит, то нам достаточно решить стационарное уравнение Шредингера и определить все возможные собственные значения энергии E_n и принадлежащие им собственные функции ψ_n . Волновая функция, удовлетворяющая уравнению (5.3), будет связана с этими частными решениями линейным соотношением:

$$\psi(t) = \sum_n C_n e^{-i(E_n/\hbar)t} \psi_n. \quad (5.4)$$

В самом деле, подставляя (5.4) в (5.3) и учитывая, что C_n являются постоянными коэффициентами, а ψ_n удовлетворяют уравнению:

$$\nabla^2 \psi_n + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E_n - V) \psi_n = 0, \quad (5.5)$$

нетрудно убедиться, что $\psi(t)$ является общим решением уравнения (5.3), так как

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 - V\right) \psi(t) = \\ & = \sum_n C_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \left(E_n + \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 - V\right) \psi_n = 0. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Случай монохроматической волны является частным случаем общего решения (5.4). Для этого мы должны положить в (5.4):

$$C_{n_0} = 1 \text{ и } C_n = 0 \text{ (если } n \neq n_0\text{)}.$$

Следует также заметить, что переход от стационарного уравнения (5.1) к полному (5.3) эквивалентен в сущности простой замене энергии E величиной $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, называемой в квантовой механике *оператором энергии*¹⁾:

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (5.7)$$

¹⁾ В дальнейшем операторные величины будем обозначать буквами, напечатанными прямым шрифтом.

Действие этого оператора на какую-либо функцию сводится к обычному дифференцированию этой функции по времени, т. е. E является так называемым *линейным дифференциальным оператором*.

Для монохроматической волны, когда

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n,$$

имеем:

$$E \psi(t) = E_n \psi(t).$$

Отсюда видно, что энергия E_n является собственным значением оператора энергии E .

Кроме оператора энергии в квантовой механике есть и другие операторы, наиболее важным из которых является *оператор импульса*:

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \quad (5.8)$$

который носит такое название потому, что его собственное значение для свободного движения совпадает с классическим импульсом.

Например, действуя оператором \mathbf{p} на волновую функцию свободной частицы [см. (4.62)], получаем:

$$\mathbf{p} \psi(t) = \frac{\hbar}{i} \nabla \left\{ L e^{-3/2} e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \right\} = \mathbf{p} \psi(t).$$

В данном случае собственным значением оператора \mathbf{p} является классический импульс \mathbf{p} .

Пользуясь операторной символикой, полезной в том отношении, что она более наглядно иллюстрирует связь между квантовыми и классическими законами движения, уравнение Шредингера (5.3) можно представить в виде:

$$\left(E - \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} - V \right) \psi(t) = 0. \quad (5.9)$$

Таким образом, чтобы совершить формальный переход от классической теории к квантовой, следует в классическое выражение закона сохранения энергии¹⁾:

$$E - \frac{p^2}{2m_0} - V = 0,$$

¹⁾ Если электрон находится не только в электрическом, но и в магнитном поле, характеризуемом вектор-потенциалом \mathbf{A} , то, учитывая классическое выражение (1.15) для гамильтониана, стационарное уравнение Шредингера можем записать в виде:

$$\left\{ E - \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2}{2m_0} - e\Phi \right\} \psi = 0. \quad (5.9a)$$

вместо энергии E и импульса \mathbf{p} подставить соответствующие операторные значения и подействовать ими на волновую функцию.

Оператор $\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}$ называют *оператором кинетической энергии* T , а $T + V$ — *оператором* функции Гамильтона H , который ради краткости в дальнейшем мы будем называть просто *гамильтонианом*.

Учитывая значения этих операторов, уравнение (5.9) можно записать еще в виде:

$$(E - H)\psi(t) = 0. \quad (5.10)$$

В случае, когда потенциальная энергия V не зависит от времени, в силу соотношения:

$$E\psi_n(t) = E_n\psi_n(t) \quad (5.11)$$

стационарное уравнение Шредингера приводится к форме:

$$(E_n - H)\psi_n = 0. \quad (5.12)$$

Отсюда видно, что для стационарных процессов собственное значение гамильтониана равняется собственному значению энергии, точно так же, как и в классическом стационарном случае, функция Гамильтона равняется энергии частицы.

6. Плотность заряда и плотность тока. Квантовые ансамбли

В классической электродинамике большую роль играет уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad (5.13)$$

которому подчиняются плотность заряда ρ и плотность тока \mathbf{j} .

Соотношение (5.13) представляет собой по существу универсальную запись закона сохранения заряда. Чтобы это показать, умножим соотношение (5.13) на d^3x и проинтегрируем его по всему пространству:

$$\int \frac{\partial \rho}{\partial t} d^3x + \int \operatorname{div} \mathbf{j} d^3x = 0. \quad (5.14)$$

Изменяя в первом интеграле порядок дифференцирования и интегрирования (это возможно, так как время здесь играет роль параметра), а во втором переходя от объемного интеграла к поверхностному, получаем:

$$\frac{d}{dt} \int \rho d^3x + \oint \mathbf{j}_n dS = 0. \quad (5.15)$$

Если на бесконечности заряды, а также и токи отсутствуют, то

поверхностный интеграл обращается в нуль, и мы будем иметь закон сохранения заряда:

$$e = \int \rho d^3x = \text{const.} \quad (5.16)$$

Найдем теперь по волновой теории выражения для плотности заряда и плотности тока. Обратимся с этой целью к уравнению Шредингера (5.3), которое запишем в виде:

$$\frac{\partial \psi(t)}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m_0} \nabla^2 \psi(t) + \frac{iV}{\hbar} \psi(t) = 0. \quad (5.17)$$

Аналогично для комплексно сопряженного уравнения имеем:

$$\frac{\partial \psi^*(t)}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m_0} \nabla^2 \psi^*(t) - \frac{iV}{\hbar} \psi^*(t) = 0. \quad (5.18)$$

Умножая первое из них на $\psi^*(t)$, а второе на $\psi(t)$, а затем складывая оба уравнения, получаем:

$$\frac{\partial \psi^*(t) \psi(t)}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m_0} \nabla \{ \psi(t) \nabla \psi^*(t) - \psi^*(t) \nabla \psi(t) \} = 0. \quad (5.19)$$

Сравнивая последнее уравнение с уравнением непрерывности (5.13) и учитывая, что плотность заряда должна равняться произведению заряда отдельной частицы e на плотность числа частиц, которая в данном случае равняется плотности вероятности, будем иметь:

$$\rho = e \psi^*(t) \psi(t). \quad (5.20)$$

Учитывая два последних соотношения, для плотности тока находим следующее выражение:

$$\mathbf{j} = \frac{ie\hbar}{2m_0} \{ \psi(t) \text{grad} \psi^*(t) - \psi^*(t) \text{grad} \psi(t) \}. \quad (5.21)$$

Следует заметить, что для монохроматической волны, т. е. когда

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi,$$

плотность заряда:

$$\rho = e \psi^* \psi, \quad (5.22)$$

и плотность тока:

$$\mathbf{j} = \frac{ie\hbar}{2m_0} (\psi \text{grad} \psi^* - \psi^* \text{grad} \psi) \quad (5.23)$$

не будут зависеть от времени.

В случае вещественных волновых функций ($\psi^* = \psi$) плотность тока всегда будет равной нулю. Например, для электрона, находящегося в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме (см. фиг. 4.3), выражение для плотности тока обращается в нуль

($\mathbf{j}=0$), что является вполне естественным, так как колебания в потенциальной яме, описываемые вещественными волновыми функциями, представляют собой по существу стоячие волны, а стоячие волны не могут образовывать потока частиц.

Иное положение вещей мы будем иметь при исследовании свободного движения частицы, когда волновая функция согласно (4.60) задается бегущей волной:

$$\psi = L^{-3/2} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}. \quad (5.24)$$

Подставляя это выражение для ψ в (5.22) и (5.23), для плотности заряда и плотности тока соответственно находим:

$$\begin{aligned} \rho &= e\psi^*\psi = L^{-3}e, \\ \mathbf{j} &= \frac{e}{m_0L^3} \mathbf{p} = \rho\mathbf{v}. \end{aligned}$$

Отсюда видно, что если заряд распределен по всему объему с равной вероятностью, то его плотность, как и следовало ожидать, будет равна величине этого заряда, деленной на весь объем, а плотность тока будет связана с плотностью заряда таким же соотношением, какое имеет место в классической электродинамике.

Выясним теперь физический смысл коэффициентов C_n , входящих в полное решение $\psi(t)$ волнового уравнения [см. (5.4)]. Подставим для этого значение $\psi(t)$ в соотношение (5.16), определяющее сохранение полного заряда. Тогда, учитывая (5.20), получаем:

$$\sum_{n'} \sum_n C_n^* C_n e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_{n'})t} \int \psi_{n'}^* \psi_n d^3x = 1.$$

Поскольку волновые функции должны удовлетворять условию ортонормированности:

$$\int \psi_{n'}^* \psi_n d^3x = \delta_{nn'},$$

имеем:

$$\sum_n C_n^* C_n = \sum_n |C_n|^2 = 1. \quad (5.25)$$

Отсюда непосредственно следует физический смысл коэффициентов C_n как величин, характеризующих вероятность пребывания частицы в квантовом состоянии n . Действительно, если нам точно известно, что частица находится в состоянии n_0 ($E = E_{n_0}$), то все коэффициенты C_n , за исключением C_{n_0} , должны быть равными нулю, т. е. мы должны положить $C_n = \delta_{nn_0}$. Если частица имеет отличную от нуля вероятность нахождения не в одном, а в двух и более состояниях, то отличными от нуля будут соответственно два и более коэффициентов. При этом вероятность пребывания

в том или ином состоянии будет характеризоваться величиной $|C_n|^2$, в то время как плотность вероятности распределения их по пространству определяется $|\psi_n|^2$.

В тех случаях, когда в пространстве имеется большое число, например N , частиц, то вместо (5.25) будем иметь:

$$\sum_n |C_n|^2 = N.$$

При этом коэффициенты C_n будут характеризовать распределение частиц по различным квантовым состояниям.

В связи с этим в квантовой механике вводится понятие *квантовых ансамблей*, объединяющих совокупность тождественных квантовых состояний, описываемых одной и той же волновой функцией ψ . С помощью квантового ансамбля можно описать электронный пучок, поток фотонов и т. д.¹⁾

Характерным отличием квантового ансамбля от классического является его когерентность, связанная с принципом суперпозиции. Допустим, что частицы имеют определенное распределение по различным квантовым состояниям:

$$|C_{n_1}|^2 = N_{n_1}, \quad |C_{n_2}|^2 = N_{n_2}, \quad |C_{n_3}|^2 = N_{n_3}, \dots, \quad (5.26)$$

причем

$$\sum_i N_{n_i} = N.$$

В последнем случае движение частиц, находящихся, например, в состояниях $n = n_1$ и $n = n_2$, нельзя рассматривать независимо друг от друга, потому что, если возможны состояния ψ_{n_1} и ψ_{n_2} , то общая волновая функция линейного уравнения Шредингера будет представлять собой суперпозицию (наложение) отдельных состояний, т. е.

$$\psi(t) = C_{n_1}\psi_{n_1}(t) + C_{n_2}\psi_{n_2}(t) + \dots$$

Это существенно при определении полной вероятности состояния, пропорциональной произведению $\psi^*(t)\psi(t)$. В этом произведении наряду с $\psi_{n_1}^*(t)\psi_{n_1}(t)$ должны появляться также и смешанные члены вида $\psi_{n_1}^*(t)\psi_{n_2}(t)$. Иными словами, каждая частица будет обладать определенной вероятностью нахождения в обоих квантовых состояниях.

Наличие смешанных членов, которые будут отличны от нуля для когерентных ψ -волн (чистый ансамбль), ведет к интерферен-

¹⁾ Анализ волновой природы частиц с помощью квантовых ансамблей был произведен рядом советских физиков. (К. В. Никольский, Квантовые процессы, М. — Л., 1940, стр. 35; см. также Д. И. Блохинцев, Основы квантовой механики, М. — Л., 1961, стр. 51.)

ции де-бройлевских волн, что не имеет места для некогерентных волн (смешанный ансамбль), т. е. в чистом ансамбле складываются волны, а в смешанном — интенсивности. Исследование квантовых ансамблей интересно еще и в том отношении, что оно дает статистическую интерпретацию результатов волновой теории. В самом деле, при наличии большого числа частиц или большого числа повторяющихся с одиночными частицами состояний вероятность того или иного процесса, вычисленного по квантовой механике, согласно закону больших чисел, должна совпадать (так же, как и в классической статистической физике независимо от природы «скрытых» параметров) с реальным распределением, которое можно наблюдать экспериментально (более подробно см. § 7)¹⁾.

в. Связь между теорией Шредингера и классическим уравнением Гамильтона—Якоби

Уравнение Гамильтона — Якоби, описывающее в классической механике движение материальной точки в поле потенциальных сил, является нелинейным дифференциальным уравнением первого порядка. Напомним вкратце его вывод.

Будем исходить из классического закона сохранения энергии:

$$E = \frac{p^2}{2m_0} + V = T + V. \quad (5.27)$$

Введем функцию действия:

$$S(t) = \int_0^t \mathcal{L} dt = \int_0^t (2T - E) dt = S - Et, \quad (5.28)$$

где

$$S = \int_0^t 2T dt. \quad (5.29)$$

Покажем, что в формуле (5.29) зависимость S от t будет неявной, а именно $S = S(x(t), y(t), z(t))$, и поэтому в отличие от полной функции действия $S(t)$ эту стационарную функцию действия S мы будем писать так же, как и стационарную волновую функцию ψ , без аргумента (в скобках) t .

¹⁾ Если при рассмотрении стрельбы по мишени (см. примечание 2 на стр. 67; смешанный ансамбль) мы получили просто гауссово распределение с одним максимумом попадания (в центре), то попадание на экран поочередно летящих электронов, предварительно прошедших сквозь щель, дает дифракционную картину (чистый или когерентный ансамбль). В последней максимумы будут расположены и в центре, и на концентрических окружностях, радиусы которых зависят от соотношения между де-бройлевской длиной волны и размерами дифракционной щели. Классическая теория вероятностей, очевидно, применима только к смешанным ансамблям.

Чтобы показать это, возьмем полный дифференциал величины S , определяемой (5.29):

$$dS = 2T dt.$$

Учитывая равенства:

$$dS = \frac{\partial S}{\partial t} dt + \frac{\partial S}{\partial x} dx + \frac{\partial S}{\partial y} dy + \frac{\partial S}{\partial z} dz, \quad (5.30)$$

$$2T dt = m_0 (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) dt = p_x dx + p_y dy + p_z dz,$$

находим, что

$$\frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

(т. е. S не зависит от t явно), а

$$\mathbf{p} = \text{grad } S. \quad (5.31)$$

С помощью уравнений (5.31) и (5.27) находим стационарное уравнение Гамильтона — Якоби:

$$\frac{1}{2m_0} (\text{grad } S)^2 + V - E = 0. \quad (5.32)$$

Если ввести в это уравнение полную функцию действия, явно зависящую от времени:

$$S(t) = S - Et,$$

и принять во внимание, что $\mathbf{p} = \text{grad } S = \text{grad } S(t)$, а $E = -\frac{\partial S(t)}{\partial t}$, то, исключая параметр E из уравнения (5.32), находим полное уравнение Гамильтона — Якоби, пригодное для описания нестационарных процессов:

$$\frac{1}{2m_0} (\text{grad } S(t))^2 + V + \frac{\partial S(t)}{\partial t} = 0. \quad (5.33)$$

Стационарное и полное уравнения Гамильтона — Якоби соответствуют стационарному и полному уравнениям Шредингера.

В частности, нетрудно показать, что в случае свободного движения частицы ($V = 0$, $\mathbf{p} = \text{const}$, $E = \text{const}$) функция действия определяется выражением:

$$S(t) = -Et + \mathbf{p}\mathbf{r}. \quad (5.34)$$

В этом легко убедиться, подставляя $S(t)$ из (5.34) в (5.33).

Заметим, что функция $\psi(t)$ для свободного движения равна [см. (4.60)]:

$$\psi(t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(-Et + \mathbf{p}\mathbf{r})} = Ae^{\frac{i}{\hbar} S(t)}. \quad (5.35)$$

При переходе от уравнения Шредингера к классическому уравнению Гамильтона — Якоби связь (5.35) волновой функции с функцией действия следует сохранить также и в общем случае.

Ограничимся при этом переходе рассмотрением стационарной задачи, когда

$$\psi = Ae^{i\hbar S}. \quad (5.36)$$

Будем исходить из уравнения Шредингера, записанного в операторном виде:

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V - E \right) \psi = 0. \quad (5.37)$$

Принимая во внимание конкретный вид оператора $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, согласно (5.36) имеем:

$$\mathbf{p}\psi = (\text{grad } S)\psi, \quad (5.38)$$

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}\psi = \frac{1}{2m_0}((\text{grad } S)^2 - i\hbar\nabla^2 S)\psi. \quad (5.39)$$

Из уравнения (5.38) мы видим, что соотношение (5.36) приводит к той же связи между оператором импульса \mathbf{p} и функцией действия S , какая была установлена в классической теории, если при этом оператор импульса заменить классическим импульсом \mathbf{p} . Подставляя (5.39) в (5.37), получаем уравнение:

$$\frac{1}{2m_0}(\text{grad } S)^2 + V - E - \frac{i\hbar}{2m_0}\nabla^2 S = 0, \quad (5.40)$$

которое является преобразованным уравнением Шредингера.

Чтобы получить уравнение Гамильтона — Якоби, мы должны пренебречь последним членом, т. е. положить $\hbar = 0$. Как известно, при $\hbar = 0$ квантовые уравнения должны переходить точно в классические. Если же $\hbar \neq 0$, то при соблюдении условия:

$$(\text{grad } S)^2 \gg \hbar |\nabla^2 S|$$

квантовые члены дадут небольшие поправки к классическому уравнению. Соответствующее приближение носит название *квазиклассического*.

Принимая во внимание, что $\mathbf{p} = \text{grad } S$, последнее условие можно записать в виде:

$$\frac{\hbar}{p^2} |\text{div } \mathbf{p}| \ll 1.$$

В частности, для одномерного случая будем иметь:

$$\frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| = \left| \frac{d(\hbar/p)}{dx} \right| = \left| \frac{d\lambda}{2\pi dx} \right| \ll 1. \quad (5.41)$$

Таким образом, квазиклассическое приближение оказывается достаточно точным в том случае, когда де-бройлевская длина волны будет либо постоянной, либо мало меняющейся на расстояниях порядка этой длины волны.

Принимая во внимание, что

$$p = \sqrt{2m_0(E - V)},$$

последнее условие мы можем записать в виде:

$$\frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| = \left| \frac{m_0 F \hbar}{p^3} \right| \ll 1, \quad (5.42)$$

где $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$ — классическая сила, действующая на частицу.

Отсюда, в частности, следует, что квазиклассическое приближение становится неприменимым при малых значениях импульса частицы и в особенности в тех точках, где по классической теории частица должна остановиться ($E = V$, $p = 0$). Такое положение имеет место, например, в случае, когда частица, находясь в потенциальной яме, в результате отражения от потенциального барьера начинает возвращаться обратно (точки поворота). Этот вывод может найти простое объяснение, если учесть, что при $p \rightarrow 0$ де-Бройлевская длина волны стремится к бесконечности, и поэтому волновые свойства частицы будут проявляться особенно сильно.

г. Приближенный метод Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна (Метод ВКБ)

Как было отмечено, уравнение (5.40) совершенно эквивалентно уравнению Шредингера. Поэтому можно попытаться в основу волновой теории положить именно уравнение (5.40), рассматривая дополнительный к классическому уравнению член, пропорциональный \hbar , как некую новую квантовую потенциальную энергию:

$$V^{кв.} = -\frac{i\hbar}{2m_0} \nabla^2 S, \quad (5.43)$$

которой следует дополнить уравнение Гамильтона — Якоби.

Однако в общем случае решение нелинейного уравнения (5.40) значительно сложнее, чем решение линейного уравнения Шредингера, и поэтому многочисленные попытки повести развитие квантовой теории по пути дальнейшего анализа уравнения (5.40) успеха не имели. Тем не менее Вентцелю, Крамерсу и Бриллюэну удалось найти приближенное решение уравнения (5.40), ограничиваясь членами порядка \hbar , которое оказалось пригодным для исследования ряда задач квантовой механики. Этот метод решения, применимый лишь к одномерным задачам, получил название приближенного метода ВКБ.

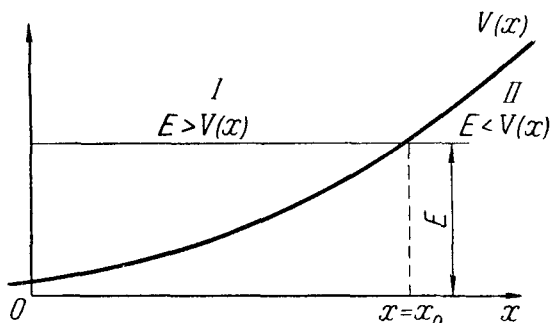
Будем считать, что потенциальная энергия является сравнительно гладкой функцией x (см. фиг. 5.1).

Для частиц с энергией E весь промежуток изменения x мы можем разделить на две области. В первой области ($x < x_0$) энергия E больше потенциальной энергии: $E > V$, а во второй области ($x > x_0$), наоборот, $E < V$. Очевидно, что на границе этих двух областей ($x = x_0$) мы будем иметь $E = V(x_0)$. Исходное уравнение (5.40) в одномерном случае принимает вид:

$$S'^2 - i\hbar S'' = 2m_0(E - V) = p^2. \quad (5.44)$$

Сначала найдем решение этого уравнения для первой области ($E > V$), когда величина $p^2 > 0$ будет играть роль квадрата классического импульса. Решение будем искать в виде ряда:

$$S = S_0 + S_1 + S_2 + \dots, \quad (5.45)$$



Фиг. 5.1. К решению волнового уравнения по методу ВКБ.

где величина S_0 не зависит от \hbar , S_1 пропорциональна \hbar , S_2 пропорциональна \hbar^2 и т. д. Подставляя ряд (5.45) в уравнение (5.44) и пренебрегая величинами, пропорциональными \hbar^2 и выше, получаем¹⁾:

$$S_0'^2 + 2S_0'S_1' - i\hbar S_0'' = p^2. \quad (5.46)$$

Приравнявая друг другу члены в левой и правой частях, не зависящие от \hbar , а также пропорциональные \hbar (при этом необходимо учитывать, что величина S_1 пропорциональна \hbar), будем иметь:

$$S_0'^2 = p^2, \quad 2S_0'S_1' = i\hbar S_0''. \quad (5.47)$$

Отсюда следует, что

$$S_0 = \pm \int_x^{x_0} p dx, \quad S_1 = i\hbar \ln \sqrt{p}. \quad (5.48)$$

¹⁾ Этот приближенный метод решения задачи является по существу методом возмущений, успешно применяемым также для решения уравнения Шредингера (см. ниже § 14).

Поэтому, ограничиваясь членами порядка \hbar , имеем:

$$S = S_0 + S_1 = \pm \int_x^{x_0} p dx + i\hbar \ln \sqrt{p}. \quad (5.49)$$

Подставляя (5.49) в (5.36), находим следующее выражение для волновой функции в первой области ($x < x_0$):

$$\psi_{x < x_0} = \frac{1}{\sqrt{p}} \left(A \cos \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx + B \sin \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx \right). \quad (5.50)$$

Точно так же для второй области ($x > x_0$), в которой $p^2 < 0$, получаем:

$$\psi_{x > x_0} = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left(D e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p| dx} + C e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p| dx} \right), \quad (5.51)$$

где

$$|p| = \sqrt{2m_0(V - E)}.$$

Волновые функции (5.50) и (5.51) и представляют собой искомые приближенные решения по методу ВКБ. Из этих решений видно, что при $E > V$ волновая функция будет изменяться как в случае потенциальной ямы [см. (4.21)] или как при свободном движении [см. (4.47)] по закону косинуса или синуса, а при $V > E$ — как в случае прохождения через потенциальный барьер, т. е. по экспоненциальному закону [см. (4.23)].

Сравнивая решения, найденные при $V = \text{const}$, с решениями, полученными в том случае, когда потенциальная энергия является функцией x , мы видим, что переход от одних решений к другим заключается в замене площади прямоугольного барьера, образуемого осью x и осью, на которой отложена величина $\kappa = \frac{\sqrt{2m_0(V-E)}}{\hbar} = \frac{|p|}{\hbar}$, соответствующей площади, заключенной между абсциссой x и кривой $V(x)$. Схематически этот переход можно изобразить следующим образом:

$$\frac{|p|}{\hbar} x \rightarrow \frac{1}{\hbar} \int_0^x |p| dx. \quad (5.52)$$

Аналогичный переход можно сделать также и в случае потенциальной ямы.

Таким образом, конкретный вид зависимости потенциальной энергии от x не изменяет характера решения; последний определяется лишь знаком разности между E и V , о чем было указано в конце предыдущего параграфа.

Решения (5.50) и (5.51) дают хорошее приближение лишь для областей, сравнительно удаленных от особой точки x_0 , где величина $|p|$ относительно велика. Вблизи же особой точки ($x \rightarrow x_0$) величина $p^2 \rightarrow 0$, и поэтому знаменатель в выражениях (5.50) и (5.51) обращается в нуль, а само решение становится расходящимся.

Если бы мы могли выразить коэффициенты C и D через A и B , то найденное приближение было бы вполне достаточным для многих задач, так как область $|x - x_0| \rightarrow 0$ является сравнительно узкой. Однако соотношение между этими коэффициентами может быть найдено только в результате сшивания функций, которое следует производить именно на границе областей, т. е. в точке $x = x_0$ (под сшиванием мы будем понимать приравнение на границе области $x = x_0$ волновых функций и их первых производных).

Поэтому приближенное выражение для ψ необходимо представить в таком виде, чтобы при больших p^2 имело место соотношение (5.50), а при $x \rightarrow x_0$, когда

$$p^2 = -(x - x_0) 2m_0 V'(x_0) = -\alpha \hbar^2 (x - x_0),$$

приближенное решение удовлетворяло бы уравнению:

$$\psi'' - \alpha (x - x_0) \psi = 0. \quad (5.53)$$

Как известно, при больших z косинус асимптотически выражается через функции Бесселя порядка n при помощи соотношения:

$$\cos\left(z - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \cong \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_n(z). \quad (5.54)$$

Поэтому, если положить:

$$z = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx, \quad (5.55)$$

$$\psi_{x < x_0} = \frac{A'}{\sqrt{p}} \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_n(z). \quad (5.56)$$

При больших z (и любых n) решение (5.56) в силу асимптотической формулы (5.54) переходит в решение (5.50), найденное по методу ВКБ. Попробуем подобрать порядок бесселевой функции n таким образом, чтобы решение (5.56) удовлетворяло уравнению Шредингера не только при больших z , когда $x \ll x_0$, но и вблизи особой точки $x \rightarrow x_0$, т. е. при

$$p \cong \hbar \sqrt{\alpha(x_0 - x)} \rightarrow 0 \quad \text{и} \quad z = \frac{2\sqrt{\alpha}}{3} (x_0 - x)^{3/2} \rightarrow 0. \quad (5.57)$$

В этом случае ($x \rightarrow x_0 - 0$) асимптотическое выражение для ψ принимает вид:

$$\psi_{x=x_0-0} = A' \sqrt{\frac{\pi(x_0 - x)}{3\hbar}} J_n\left(\frac{2\sqrt{\alpha}}{3} (x_0 - x)^{3/2}\right). \quad (5.58)$$

Подставляя (5.58) в (5.53), получаем, что J_n должно удовлетворять уравнению:

$$\frac{d^2 J_n}{dx^2} - \frac{1}{x_0 - x} \frac{dJ_n}{dx} + \left(\alpha(x_0 - x) - \frac{1}{4(x_0 - x)^2} \right) J_n = 0.$$

Наконец, вводя в последнем уравнении новый аргумент $z = \frac{2\sqrt{\alpha}}{3}(x_0 - x)^{3/2}$, от которого зависит бесселева функция, и обозначая штрихом производную по этому аргументу, получаем:

$$J_n'' + \frac{1}{z} J_n' + \left(1 - \frac{1}{9z^2} \right) J_n = 0. \quad (5.59)$$

Чтобы бесселева функция удовлетворяла уравнению (5.59), а вместе с тем волновая функция подчинялась асимптотическому уравнению (5.53), мы должны положить $n = \pm \frac{1}{3}$. В этом случае вместо приближенного решения (5.50) мы будем иметь:

$$\psi_{x < x_0} = \sqrt{\frac{\pi}{2\hbar p} \int_x^{x_0} p dx} \left\{ A J_{1/3} \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx \right) + B J_{-1/3} \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx \right) \right\}. \quad (5.60)$$

Аналогично для второй области $E < V$ вместо (5.51) получаем:

$$\begin{aligned} \psi_{x > x_0} = & \sqrt{\frac{\pi}{2\hbar |p|} \int_{x_0}^x |p| dx} \left\{ C I_{1/3} \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p| dx \right) + \right. \\ & \left. + D I_{-1/3} \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p| dx \right) \right\}, \quad (5.61) \end{aligned}$$

где $I_{1/3}$ и $I_{-1/3}$ — бесселевы функции мнимого аргумента.

Для того чтобы сшить оба решения, мы должны найти асимптотические выражения (5.60) и (5.61) в области $x \rightarrow x_0$. Значения z и p при этом будут определяться равенством (5.57); для бесселевой функции мы можем ограничиться лишь первым членом разложения:

$$J_n(z) = I_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n+1)} \left(\frac{z}{2} \right)^n. \quad (5.62)$$

Тогда решения (5.60) и (5.61) принимают соответственно вид:

$$\begin{aligned} \psi_{x=x_0-0} &= \frac{A \sqrt{\pi} (3\alpha)^{1/6}}{\hbar^{1/2} \Gamma(1/3)} (x_0 - x) + \frac{B \sqrt{\pi}}{\hbar^{1/2} (3\alpha)^{1/6} \Gamma(2/3)}, \\ \psi_{x=x_0+0} &= \frac{C \sqrt{\pi} (3\alpha)^{1/6}}{\hbar^{1/2} \Gamma(1/3)} (x - x_0) + \frac{D \sqrt{\pi}}{\hbar^{1/2} (3\alpha)^{1/6} \Gamma(2/3)}. \end{aligned} \quad (5.63)$$

Сшивая оба решения в точке $x = x_0$, находим:

$$D = B, \quad C = -A.$$

Учитывая асимптотические выражения как для обыкновенной бesselевой функции [см. (5.54)], так и для бesselевой функции мнимого аргумента¹⁾:

$$I_n(z) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} \left(e^z + e^{-z} \cos \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \right), \quad (5.64)$$

¹⁾ Как известно, функция Бесселя мнимого аргумента связана с функцией Бесселя первого рода соотношением:

$$I_n(z) = i^{-n} J_n(iz) = e^{-\frac{n\pi i}{2}} J_n(x),$$

где

$$x = ze^{i\frac{\pi}{2}}.$$

Асимптотическое же выражение для функции Бесселя при $x = |x| e^{i\varphi}$ может быть вычислено либо для $\varphi = \frac{\pi}{2} + 0$:

$$J_n(x) \approx e^{i\pi(n+1/2)} \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos \left(x + \frac{1}{2} \pi (n+1/2) \right), \quad \text{при } \frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{3}{2} \pi, \quad (5.64a)$$

либо для $\varphi = \frac{\pi}{2} - 0$:

$$J_n(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos \left(x - \frac{1}{2} \pi (n+1/2) \right) \quad \text{при } -\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{\pi}{2}, \quad (5.64b)$$

(см., например, Ф. Морс и Г. Фешбах, Методы теоретической физики, том I, ИЛ, 1958, стр. 583). Поэтому асимптотическое выражение для I_n при вещественных z претерпевает разрыв (явление Стокса). В самом деле, пользуясь формулами (5.64a) и (5.64b), соответственно находим:

$$I_n(z) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} \left(e^z + e^{-z} e^{\pi i \left(n + \frac{1}{2} \right)} \right) \quad \text{при } \varphi = \frac{\pi}{2} + 0, \quad (5.64в)$$

$$I_n(z) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} \left(e^z + e^{-z} e^{-\pi i \left(n + \frac{1}{2} \right)} \right) \quad \text{при } \varphi = \frac{\pi}{2} - 0. \quad (5.64г)$$

Многие авторы, в том числе Морс и Фешбах (см. «Методы теоретической физики», том II, стр. 95), используют при исследовании прохождения частиц сквозь потенциальный барьер выражение (5.64в), т. е. берут тем самым для функции $I_n(z)$ комплексное асимптотическое выражение. Однако при $\varphi = \frac{\pi}{2}$ (когда функция претерпевает разрыв) следует взять полусумму двух последних выражений, чтобы получить наше асимптотическое выражение (5.64), которое, как и следовало ожидать, вещественно.

а также принимая во внимание связь между коэффициентами, находим, что формулы (5.60) и (5.61) при больших z принимают вид:

$$\begin{aligned} \psi_{x < x_0} = & \frac{1}{\sqrt{p}} \left\{ A \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p \, dx - \frac{5\pi}{12} \right) + \right. \\ & \left. + B \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p \, dx - \frac{\pi}{12} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (5.65)$$

$$\begin{aligned} \psi_{x > x_0} = & \frac{1}{2\sqrt{|p|}} \left\{ (B - A) e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p| \, dx} + \right. \\ & \left. + (B + A) \cos \frac{\pi}{6} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p| \, dx} \right\}. \end{aligned}$$

Полагая в последнем равенстве $B = A = \frac{a}{\sqrt{3}}$, находим первую пару шитых решений:

$$\psi_{x < x_0} = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p \, dx + \frac{\pi}{4} \right), \quad (5.66)$$

$$\psi_{x > x_0} = \frac{a}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p| \, dx}, \quad (5.67)$$

для которых экспоненциально убывающее решение (5.67) в области $x > x_0$ представляет собой аналитическое продолжение синусоидального решения (5.66) для области $x < x_0$.

Чтобы определить аналитическое продолжение экспоненциально возрастающего решения ($x > x_0$), мы должны положить:

$$B = -A = b.$$

Тогда получим вторую пару шитых решений:

$$\psi_{x < x_0} = \frac{b}{\sqrt{p}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p \, dx + \frac{\pi}{4} \right), \quad (5.68)$$

$$\psi_{x > x_0} = \frac{b}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p| \, dx}. \quad (5.69)$$

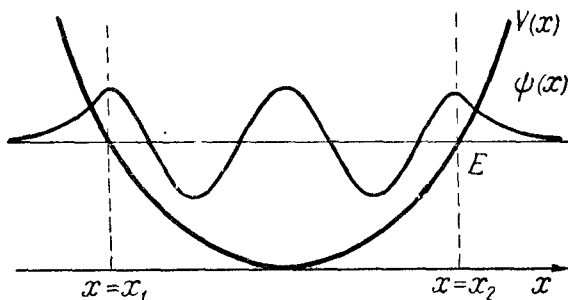
Выражение для ψ при $x < x_0$, представленное равенствами (5.66) и (5.68) в виде стоячих волн, можно записать также в виде бегущих волн. Действительно, полагая:

$$b = (g + h), \quad a = i(g - h),$$

будем иметь:

$$\psi_{x < x_0} = \frac{1}{\sqrt{p}} \left[g e^{i \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx + \frac{\pi}{4} \right)} + h e^{-i \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx + \frac{\pi}{4} \right)} \right]. \quad (5.70)$$

Появление множителя \sqrt{p} в знаменателе (5.70) означает, что вероятность пребывания частицы в единице объема, пропорциональная $|\psi|^2$, будет тем меньше, чем больше скорость ее движе-



Фиг. 5.2. Квантование потенциальной ямы по методу ВКБ.

ния. Соответствующее шитое с ним экспоненциальное решение внутри потенциального барьера принимает вид:

$$\psi_{x > x_0} = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[(g + h) e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p| dx} + \frac{i(g - h)}{2} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p| dx} \right]. \quad (5.71)$$

В случае, если потенциальный барьер будет *слева от особой точки*, мы должны будем поменять местами пределы интегрирования так, чтобы *нижний предел всегда был меньше верхнего*.

Полученные формулы позволяют произвести квантование (т. е. найти энергетические уровни частицы) потенциальной ямы в приближении ВКБ. Допустим, что мы имеем потенциальную яму произвольной формы, изображенную на фиг. 5.2.

Очевидно, что процесс квантования по методу ВКБ будет заключаться в том, чтобы найти такие условия, при которых экспоненциально возрастаю-

щее решение с обеих сторон потенциального барьера ($x < x_1$ и $x > x_2$) обращалось бы в нуль.

В этом случае, согласно (5.66), волновая функция в области потенциальной ямы, прилегающей к границе барьера (точка $x = x_2$), внутри которого должно иметь место только экспоненциально убывающее решение, имеет вид:

$$\psi_{x < x_2} = \frac{a'}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p dx + \frac{\pi}{4}\right). \quad (5.72)$$

Ограничение лишь экспоненциально убывающим решением в области потенциального барьера ($x < x_1$) приводит в области $x > x_1$ потенциальной ямы к следующему решению:

$$\psi_{x > x_1} = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx + \frac{\pi}{4}\right). \quad (5.73)$$

Оба решения должны быть тождественны между собой в любой точке $x_1 < x < x_2$ потенциальной ямы, лежащей на достаточно большом расстоянии от границ потенциального барьера.

Произведя в одной из точек x сшивание обоих решений (5.72) и (5.73), т. е. приравняв в этой точке волновые функции и их производные, будем иметь:

$$\begin{aligned} a' \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p dx + \frac{\pi}{4}\right) - a \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx + \frac{\pi}{4}\right) &= 0, \\ a' \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p dx + \frac{\pi}{4}\right) + a \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx + \frac{\pi}{4}\right) &= 0. \end{aligned}$$

Чтобы эта система однородных уравнений имела ненулевое решение для a и a' , необходимо потребовать обращения в нуль ее определителя. Тогда получим соотношение:

$$\sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p dx + \frac{\pi}{2}\right) = 0.$$

Отсюда, учитывая, что $\int_{x_1}^{x_2} p dx$ не может быть отрицательной величиной, так

как $p = \sqrt{2m_0(E - V)} \geq 0$, находим:

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p dx + \frac{\pi}{2} = (n + 1)\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.74)$$

Таким образом, правила квантования, полученные с помощью приближенного метода ВКБ, т. е. с точностью до членов порядка \hbar , принимают вид:

$$\oint p dx = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (5.75)$$

Эти правила квантования отличаются от правил квантования Бора наличием отличного от нуля члена $\frac{1}{2}2\pi\hbar$, соответствующего наимизшему состоянию

($n=0$). Более точное решение подобной задачи по волновой теории (например, задачи о гармоническом осцилляторе) показывает, что нулевая энергия обязательно должна присутствовать, хотя на спектре излучения она и не сказывается.

Найдем теперь нормировочный коэффициент волновой функции при наличии потенциальной ямы.

При нормировке рассматриваемой функции достаточно ограничиться интегрированием по интервалу $x_1 < x < x_2$ (потенциальная яма), поскольку вне его ψ экспоненциально убывает.

Тогда нормировочный коэффициент может быть найден из равенства:

$$a^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p} \sin^2 \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx + \frac{\pi}{4} \right] = 1. \quad (5.76)$$

Учитывая, что синус представляет собой быстро осциллирующую функцию, его квадрат с достаточной степенью точности можно заменить средним значением, т. е. $\frac{1}{2}$. Тогда будем иметь:

$$\frac{1}{2} a^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p} = 1. \quad (5.77)$$

Как известно, период колебаний $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$ (ω — круговая частота) равен:

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = 2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{v} = 2m_0 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p},$$

где $v = \frac{p}{m_0}$ — скорость частицы.

Отсюда для нормировочного коэффициента получаем выражение:

$$a = \sqrt{\frac{2\omega m_0}{\pi}}.$$

Следовательно, собственная функция (5.73) в приближении ВКБ будет иметь вид:

$$\psi \cong \sqrt{\frac{2\omega}{\pi v}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx + \frac{\pi}{4} \right). \quad (5.78)$$

Задача 5.1¹⁾. Определить собственные функции и собственные значения энергии частицы, находящейся в трехмерной потенциальной яме, ограниченной бесконечно высоким потенциальным барьером:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < x < l_1, \quad 0 < y < l_2, \quad 0 < z < l_3, \\ \infty & \text{вне ямы.} \end{cases}$$

1) Эти задачи относятся к § 4 и 5.

Найти условия, при которых различным волновым функциям будет соответствовать одно и то же значение энергии E , т. е. при которых уровни энергии будут вырожденными.

$$\begin{aligned} \text{Ответ. } E_{n_1 n_2 n_3} &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0} \left(\frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2} + \frac{n_3^2}{l_3^2} \right), \\ \psi_{n_1 n_2 n_3} &= \sqrt{\frac{8}{l_1 l_2 l_3}} \sin \frac{\pi n_1 x}{l_1} \sin \frac{\pi n_2 y}{l_2} \sin \frac{\pi n_3 z}{l_3}, \\ &(n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots). \end{aligned}$$

В частности, при $l_2 = l_1$ для различных волновых функций $\psi_{n_1 n_2 n_3}$ и $\psi_{n_2 n_1 n_3}$ имеем вырождение:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = E_{n_2 n_1 n_3}.$$

Задача 5.2. Найти два класса решений (симметричные и антисимметричные) для частицы в одномерной симметричной потенциальной яме:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{при } x < -l \quad (\text{область I}), \\ 0 & \text{при } -l < x < l \quad (\text{область II}), \\ V_0 & \text{при } x > l \quad (\text{область III}). \end{cases} \quad (5.79)$$

Показать, что при любых значениях V_0 только симметричное решение обязательно будет иметь хотя бы один энергетический уровень. Найти условие, при котором возможно антисимметричное решение. Показать, что антисимметричные решения, соответствующие $x > 0$, будут описывать также полное решение системы в том случае, когда $V(x)$ изменяется по закону:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } 0 < x < l, \\ V_0 & \text{при } x > l. \end{cases} \quad (5.80)$$

Построить графики для потенциальной энергии, а также симметричной и антисимметричной волновых функций.

Решение. Выражения для волновых функций в областях I, II и III имеют соответственно вид:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}} &= D_1 e^{x(x+l)} \quad (x < -l), \\ \psi_{\text{II}} &= A_2 \sin kx + B_2 \cos kx \quad (-l < x < l), \\ \psi_{\text{III}} &= C_3 e^{-x(x-l)} \quad (x > l), \end{aligned}$$

где

$$k = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (V_0 - E)},$$

а экспоненциально возрастающие решения в силу их расходимости были отброшены. Это обстоятельство в конечном счете и дает дискретные значения энергии.

Из граничных условий при $x = \mp l$ следует, что $\psi_{\text{I, III}}(x) = \psi_{\text{II}}(x)$ и $\frac{d\psi_{\text{I, III}}(x)}{dx} = \frac{d\psi_{\text{II}}(x)}{dx}$. Отсюда находим, что возможно или симметричное решение, когда $\psi(x) = \psi(-x)$, или антисимметричное, когда $\psi(x) = -\psi(-x)$.

Для симметричного решения $A_2 = 0$ и $C_3 = D_1$, а энергетические уровни находятся из равенства:

$$\operatorname{tg} \alpha = \sqrt{\frac{\beta^2 - \alpha^2}{\alpha^2}}, \quad (5.81)$$

где

$$\alpha = l \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}, \quad \beta = l \sqrt{\frac{2m_0 V_0}{\hbar^2}}.$$

Поскольку $\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}/\alpha > 0$, то минимальное значение для угла α должно лежать в первой четверти и может быть найдено из условия:

$$\cos \alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \alpha}} = \frac{\alpha}{\beta}.$$

Последнее уравнение при любых значениях β в области $0 < \alpha < \frac{\pi}{2}$ всегда будет иметь хотя бы один корень, что легко показать графически, так как $\beta = \text{const} > 0$.

Для антисимметричного решения $[\psi(x) = -\psi(-x)]$ имеем $B_2 = 0$, $C_3 = -D_1$, а энергетические уровни определяются из соотношения:

$$\operatorname{tg} \alpha = -\frac{\alpha}{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}. \quad (5.82)$$

Поскольку правая часть последнего выражения имеет отрицательный знак, минимальное значение угла α должно лежать уже во второй четверти и может быть найдено из условия:

$$\sin \alpha = -\frac{\operatorname{tg} \alpha}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \alpha}} = \frac{\alpha}{\beta}.$$

Вводя обозначение

$$\alpha = \frac{\pi}{2} + \gamma,$$

где угол γ лежит уже в первой четверти, находим:

$$\cos \gamma = \frac{\pi}{2\beta} + \frac{\gamma}{\beta}.$$

Отсюда видно, что последнее уравнение будет иметь хотя бы один корень только при

$$\beta > \frac{\pi}{2}, \quad \text{т. е. при } V_0 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m_0 l^2}.$$

Так как волновая функция антисимметричного решения обращается при $x = 0$ в нуль, то антисимметричное решение при $x > 0$ является также решением для частицы в потенциальном поле вида (5.80).

Задача 5.3. Найти коэффициент прохождения D частицы сквозь потенциальный барьер прямоугольной формы (см. фиг. 5.3), если энергия частицы E меньше высоты потенциального барьера V_0 .

Решение. Решение уравнения Шредингера для различных областей имеет вид:

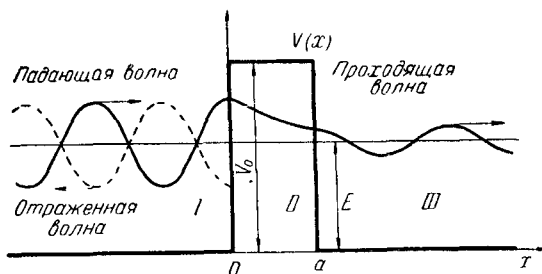
$$\begin{aligned} \psi_I &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} && \text{при } x < 0 \text{ (область I),} \\ \psi_{II} &= A_2 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x} && \text{при } 0 < x < a \text{ (область II),} \\ \psi_{III} &= A_3 e^{ik(x-a)} + B_3 e^{-ik(x-a)} && \text{при } x > a \text{ (область III).} \end{aligned}$$

Здесь $k^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}$, $\kappa^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} (V_0 - E)$, $A_1 e^{ikx}$ и $B_1 e^{-ikx}$ характеризуют соответственно падающую и отраженную волны, $A_3 e^{ik(x-a)}$ — прошедшую, а $B_3 e^{-ik(x-a)}$ — отраженную, идущую из бесконечности. Поскольку последняя в нашем случае отсутствует, необходимо положить $B_3 = 0$.

Для определения коэффициента прохождения воспользуемся граничными условиями при $x = a$ и $x = 0$ и выразим сначала A_2 и B_2 через A_3 , учитывая, что $\kappa a \gg 1$,

$$A_2 = \frac{1 - in}{2} A_3 e^{\kappa a},$$

$$B_2 = \frac{1 + in}{2} A_3 e^{-\kappa a} \approx 0,$$



Фиг. 5.3. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер.

а затем A_1 через A_3 :

$$A_1 = \frac{(1 - in) \left(1 + \frac{i}{n}\right)}{4} e^{\kappa a} A_3.$$

Тогда для коэффициента прохождения (диффузии) D получаем выражение:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \approx \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-2\kappa a},$$

где

$$n = \frac{k}{\kappa} = \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}.$$

Вводя величину: $D_0 = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2}$, получаем:

$$D \approx D_0 e^{-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m_0(V_0 - E)}},$$

где D_0 порядка единицы.

При $\hbar = 0$ получаем классический результат $D = 0$:

Задача 5.4. Частица находится в потенциальном поле вида:

$$\begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < l \text{ (область I)}, \\ V_0, & l < x < l_1 \text{ (область II)}, \\ 0, & l_1 < x \text{ (область III)}. \end{cases} \quad (5.83)$$

Показать, что хотя в этом случае мы будем иметь непрерывный спектр, однако при $\kappa l \gg 1$ и $\kappa(l_1 - l) = \kappa a \gg 1$ ($0 < E < V_0$) должны существовать квазиуровни, т. е. такие состояния, когда в области III будет распространяться только прошедшая волна (см. предыдущую задачу).

Построить график волновой функции, соответствующей квазиуровню. Найти квадрат модуля волновой функции внутри потенциальной ямы и объяснить экспоненциальное спадание его со временем.

Решение. Волновая функция для различных областей будет иметь соответственно вид (см. обозначения предыдущей задачи):

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_1 \sin kx, \\ \psi_{II} &= C_2 e^{-\kappa(x-l)} + D_2 e^{\kappa(x-l)}, \\ \psi_{III} &= C_3 e^{ik(x-l_1)} + D_3 e^{-ik(x-l_1)}. \end{aligned}$$

Из граничных условий находим:

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} C_3 \\ D_3 \end{aligned} \right\} &= \frac{1}{2} C_2 e^{-\kappa a} \left(1 \pm \frac{ix}{k} \right) + \frac{1}{2} D_2 e^{\kappa a} \left(1 \mp \frac{ix}{k} \right), \\ \left. \begin{aligned} C_2 \\ D_2 \end{aligned} \right\} &= \frac{1}{2} A_1 \left(\sin kl \mp \frac{k}{\kappa} \cos kl \right). \end{aligned}$$

Последние соотношения имеют место при любых значениях E , т. е. спектр будет непрерывным.

Квазиуровни мы получим, если потребуем, чтобы во внешнем пространстве (область III) существовала только прошедшая волна, т. е. волна, движущаяся в положительном направлении оси x . Полагая при этом $D_3 = 0$, для определения энергии квазиуровней получаем следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \alpha + \frac{\alpha}{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}} &= e^{-\frac{2\alpha}{l} \sqrt{\beta^2 - \alpha^2}} \times \\ &\times \frac{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2} + i\alpha}{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2} - i\alpha} \left(\operatorname{tg} \alpha - \frac{\alpha}{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}} \right). \end{aligned} \quad (5.84)$$

Следует заметить, что амплитуда C_3 будет в этом случае много меньше амплитуды A_1 :

$$|C_3| \sim A_1 e^{-\frac{\alpha}{l} \sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}.$$

Уравнение (5.84) при $\alpha = \infty$ точно переходит в уравнение (5.82) для определения энергетических уровней потенциальной ямы (5.80).

Обозначая через E_0 выражение для энергии частицы в потенциальной яме, найденное из уравнения (5.82), и отбрасывая дополнительные вещественные добавки к E_0 , не имеющие принципиального значения, из уравнения (5.84) найдем следующее выражение для энергии:

$$E \approx E_0 - \frac{1}{2} i \hbar \lambda, \quad (5.85)$$

где

$$\lambda = D_0 \frac{v}{2l} e^{-2\alpha \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (V_0 - E_0)}}, \quad E_0 = \frac{m_0 v^2}{2},$$

а величина:

$$D_0 \approx \frac{16n^2}{(1+n^2)^2}, \quad n = \sqrt{\frac{E_0}{V_0 - E_0}},$$

при условии, что $\kappa l \gg 1$.

Наличие мнимой части в выражении энергии (5.85) говорит нам о том, что волновая функция в потенциальной яме будет со временем убывать по экспоненциальному закону. Коэффициент прохождения сквозь потенциальный барьер в нашем случае может быть найден также из (5.85).

В самом деле, для квадрата модуля волновой функции внутри ямы будем иметь:

$$|\psi|^2 = \text{const} \cdot e^{-\lambda t},$$

т. е. λ — так называемая постоянная распада — будет характеризовать убывание вероятности нахождения частицы внутри потенциальной ямы. Величина λ связана с коэффициентом прохождения частицы D сквозь потенциальный барьер, соответствующим одному соударению с барьером, соотношением:

$$\lambda \approx \frac{v}{2l} D,$$

где $\frac{v}{2l}$ — число соударений с барьером в единицу времени.

Отсюда для D находим выражение:

$$D \approx D_0 e^{-2\alpha \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (V_0 - E_0)}}.$$

Это же значение для D было получено нами иным путем (см. задачу 5.3) и будет в дальнейшем обобщено на случай, когда потенциальная энергия является произвольной функцией координат (см. § 6).

Постоянная λ определяет также длительность излучения $t_{\text{изл.}} = \frac{1}{\lambda}$ (см. также задачу 3.4) и поэтому величина $\Delta E \sim \hbar \lambda$ должна также характеризовать ширину энергетического квазиуровня.

Задача 5.5. Определить уровни энергии частицы, находящейся в двух связанных потенциальных ямах:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a - b \\ 0 & -a - b < x < -b \quad (\text{область I}), \\ V_0 & -b < x < b \quad (\text{область II}), \\ 0 & b < x < a + b \quad (\text{область III}), \\ \infty & a + b < x \end{cases}$$

когда ее энергия $0 < E < V_0$. Показать, что по сравнению со случаем изолированных потенциальных ям ($b = \infty$) в случае связанных потенциальных ям (b — конечно) каждый уровень энергии должен расщепляться на два подуровня.

Решение. В областях I, II и III волновые функции имеют соответственно вид:

$$\begin{aligned}\psi_I &= A_1 \sin k(x+a+b) + B_1 \cos k(x+a+b), \\ \psi_{II} &= A_2 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x}, \\ \psi_{III} &= A_3 \sin k(x-a-b) + B_3 \cos k(x-a-b),\end{aligned}$$

где

$$k^2 = 2m_0 E / \hbar^2, \quad \kappa^2 = 2m_0 (V_0 - E) / \hbar^2.$$

Из граничных условий находим: $B_1 = B_3 = 0$,

$$\frac{\kappa}{k} \operatorname{tg} ka = \frac{B_2 e^{-\kappa b} + A_2 e^{\kappa b}}{B_2 e^{-\kappa b} - A_2 e^{\kappa b}}; \quad \frac{\kappa}{k} \operatorname{tg} ka = \frac{A_2 e^{-\kappa b} + B_2 e^{\kappa b}}{A_2 e^{-\kappa b} - B_2 e^{\kappa b}}.$$

Требую обращения в нуль определителя системы двух последних уравнений, получаем для нахождения собственных значений следующее приближенное выражение ($\kappa b \gg 1$):

$$\operatorname{tg} ka \approx -\frac{k}{\kappa} (1 \mp 2e^{-2\kappa b}). \quad (5.86)$$

Отсюда видно, что в случае изолированных потенциальных ям ($b = \infty$) мы для определения уровней энергии будем иметь уравнение:

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{\kappa},$$

которое в нулевом приближении ($V_0 \rightarrow \infty$) дает следующий спектр энергий ($ka = \pi n$):

$$E_n^0 = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}.$$

Как видно из (5.86), при конечных b и V_0 каждый уровень должен расщепляться на два.

§ 6. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПРОВОДИМОСТИ

а. Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер (туннельный эффект)

Согласно классической теории, частица может находиться только в тех точках пространства, в которых потенциальная энергия V меньше ее полной энергии E . Это следует из того обстоятельства, что кинетическая энергия частицы:

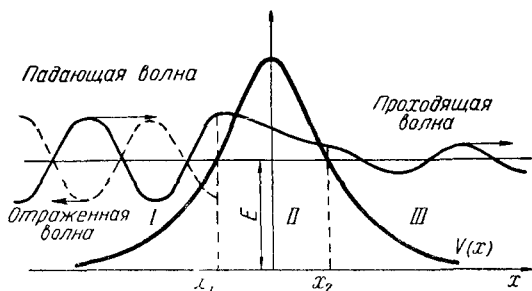
$$\frac{p^2}{2m_0} = E - V \quad (6.1)$$

всегда должна быть положительной величиной. В области $V > E$ (потенциальный барьер) импульс имеет мнимое значение и присутствие там частицы в рамках классической теории является совершенно недопустимым.

Поэтому, если две области пространства, для которых $E > V$, отделены друг от друга потенциальным барьером, внутри кото-

рого $V > E$, то по классической теории просачивание частицы из одной области в другую область сквозь потенциальный барьер невозможно. По волновой же теории мнимое значение импульса (см. § 5, приближенный метод ВКБ) соответствует лишь экспоненциальной зависимости волновой функции от координат. Поскольку волновая функция внутри потенциального барьера в нуль не обращается, то вполне возможно и просачивание частицы сквозь потенциальный барьер. Для микрочастиц это явление может стать даже вполне наблюдаемым.

Прохождение сквозь потенциальный барьер получило название *туннельного эффекта*. Оно является специфическим лишь



Фиг. 6.1. Схема потенциального барьера произвольной, но достаточно гладкой формы.

Падающая и проходящая волны изображены сплошной кривой; отраженная — пунктирной.

для волновой теории и не имеет какого-либо аналога в классической механике.

Метод ВКБ позволяет сравнительно просто определить вероятность просачивания микрочастицы сквозь потенциальный барьер, имеющий произвольную, но достаточно гладкую форму (см. фиг. 6.1).

Допустим, что частица, движущаяся в положительном направлении оси x в области I ($-\infty < x < x_1$), где $E > V(x)$, встречает на своем пути в точке $x = x_1$ потенциальный барьер ($x_1 < x < x_2$), где $E < V(x)$, а затем попадает в область III ($x > x_2$), в которой снова $E > V(x)$. Начальная и конечная точки потенциального барьера могут быть найдены из условия:

$$V(x) = E. \quad (6.2)$$

Де-бройлевские волны, соответствующие движению этой частицы, частично отразятся от этого потенциального барьера, а частично пройдут сквозь него и будут распространяться в области III ($x > x_2$).

Определение вероятности просачивания частицы сквозь потенциальный барьер начнем с исследования волны в области III, где решение будет иметь наиболее простой вид, поскольку там волна, движущаяся в отрицательном направлении оси x (т. е. в направлении $-x$), должна отсутствовать.

Согласно (5.70) решение в области III должно иметь вид:

$$\psi_{III} = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[g_{III} e^{i\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p \, dx + \frac{\pi}{4}\right)} + h_{III} e^{-i\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p \, dx + \frac{\pi}{4}\right)} \right], \quad (6.3)$$

где

$$p = \sqrt{2m_0(E - V(x))}. \quad (6.4)$$

Под коэффициентом прозрачности будем понимать модуль отношения плотности потока частиц, прошедших через барьер, к плотности потока падающих частиц:

$$D = \left| \frac{j_{III}}{j_{пад.}} \right|. \quad (6.4a)$$

Для определения же потока частиц воспользуемся формулой (5.23). Полагая в ней постоянные e и m_0 равными единице (это возможно сделать, так как нас интересует только отношение потоков частиц), будем иметь:

$$j = \frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right). \quad (6.5)$$

Подставляя (6.3) в (6.5), находим:

$$j_{III} = |g_{III}|^2 \quad \text{при} \quad h_{III} = 0, \quad (6.6)$$

$$j_{III} = -|h_{III}|^2 \quad \text{при} \quad g_{III} = 0. \quad (6.7)$$

Отсюда видно, что амплитуда g_{III} будет характеризовать волну, распространяющуюся в направлении x , а амплитуда h_{III} — в направлении $-x$.

Поскольку волна, распространяющаяся в направлении $-x$, в области III должна, как мы только что указали, отсутствовать, следует положить $h_{III} = 0$.

Тогда

$$j_{III} = |g_{III}|^2, \quad (6.8)$$

а соответствующее шитое решение внутри потенциального барьера (область II) может быть найдено по формуле (5.71). Полагая в последней $\hbar = 0$ и $g = g_{III}$, находим:

$$\psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[g_{III} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_2} p \, dx} + \frac{i}{2} g_{III} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_2} p \, dx} \right], \quad (6.9)$$

где

$$|p| = \sqrt{2m_0(V - E)}. \quad (6.10)$$

Воспользовавшись равенством:

$$\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p| dx = \gamma - \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p| dx, \quad (6.11)$$

где

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p| dx = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_0(V - E)} dx, \quad (6.12)$$

решение (6.9) можно преобразовать к такому виду, который позволил бы с помощью формулы (5.70) сшить его с решением в области I. Тогда будем иметь:

$$\psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[g_{III} e^{\gamma} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p| dx} + \frac{i}{2} g_{III} e^{-\gamma} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p| dx} \right]. \quad (6.13)$$

Решение для области I ($x < x_1$) согласно (5.70) должно иметь вид:

$$\psi_I = \frac{1}{\sqrt{p}} \left[g_1 e^{i \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p dx + \frac{\pi}{4} \right)} + h_1 e^{-i \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p dx + \frac{\pi}{4} \right)} \right]. \quad (6.14)$$

Подставляя это решение в (6.5), находим для падающей и отраженной волн соответственно выражения:

$$j_{\text{пад.}} = |h_1|^2, \quad (6.15)$$

$$j_{\text{отр.}} = -|g_1|^2. \quad (6.16)$$

Формулы (5.70) и (5.71) позволяют связать коэффициенты:

g_1 и h_1 с коэффициентами $g_{III} e^{\gamma}$ и $\frac{1}{2} i g_{III} e^{-\gamma}$:

$$g_1 + h_1 = \frac{i}{2} g_{III} e^{-\gamma}, \quad (6.17)$$

$$g_1 - h_1 = -2i g_{III} e^{\gamma}. \quad (6.18)$$

Отсюда находим:

$$h_1 = i g_{III} \left(e^{\gamma} + \frac{1}{4} e^{-\gamma} \right), \quad (6.19)$$

$$g_1 = -i g_{III} \left(e^{\gamma} - \frac{1}{4} e^{-\gamma} \right). \quad (6.20)$$

В соответствии с определением (6.4а) для коэффициента прозрачности имеем:

$$D = \frac{|j_{\text{прох.}}|}{|j_{\text{пад.}}|} = \frac{|g_{\text{III}}|^2}{|\hbar|^2} = \frac{1}{\left(e^\gamma + \frac{1}{4} e^{-\gamma}\right)^2} \approx e^{-2\gamma}. \quad (6.21)$$

Точно так же для коэффициента отражения находим:

$$R = \frac{|j_{\text{отр.}}|}{|j_{\text{пад.}}|} = \frac{\left(e^\gamma - \frac{1}{4} e^{-\gamma}\right)^2}{\left(e^\gamma + \frac{1}{4} e^{-\gamma}\right)^2} \approx 1 - e^{-2\gamma}. \quad (6.22)$$

Из последних формул следует, что сумма коэффициента прозрачности и коэффициента отражения равна единице:

$$R + D = 1. \quad (6.23)$$

Для случаев, когда величина γ значительно больше единицы (заметим, что рассмотрение этих случаев только и представляет практический интерес), для коэффициента прозрачности (6.21) получаем следующее выражение¹⁾:

$$D \cong e^{-2\gamma} = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_0(V-E)} dx}. \quad (6.24)$$

Отсюда видно, что, как и следовало ожидать, при переходе к классическому случаю ($\hbar \rightarrow 0$) коэффициент прозрачности обращается в нуль, т. е. прохождение частиц сквозь потенциальный барьер становится невозможным.

6. Туннельный эффект как проявление волновых свойств

Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер есть типичное проявление волновых свойств микрочастиц. Поэтому он должен иметь какой-то свой аналог в любой волновой теории.

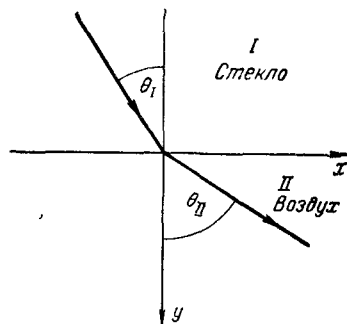
В оптике этим аналогом может служить хорошо известное явление полного внутреннего отражения, которое может наблюдаться при отражении света от оптически менее плотной среды.

¹⁾ Решая аналогичную задачу при прохождении частицы сквозь потенциальный барьер прямоугольной формы (см. задачу 5.3), мы нашли, что помимо выражения, стоящего в экспоненте, которое может быть получено из (6.24), перед показательной функцией должен стоять еще множитель $\frac{16n^2}{(1+n^2)^2}$, где $n = \sqrt{\frac{E}{(V_0-E)}}$ порядка единицы; последний в случае сглаженного барьера обращается точно в единицу.

Допустим, что луч света распространяется в стекле и попадает на границу стекла с воздухом (оптически менее плотной среды) (см. фиг. 6.2). Тогда величина, характеризующая волновое поле (в качестве нее можно выбрать вектор напряженности электрического или магнитного поля) в стекле (показатель преломления $n > 1$) и в воздухе ($n = 1$), принимает соответственно вид:

$$\varphi_I = A_I e^{-i\omega_I t + \frac{i\omega_I n}{c} (x \sin \theta_I + y \cos \theta_I)}, \quad (6.25)$$

$$\varphi_{II} = A_{II} e^{-i\omega_{II} t + \frac{i\omega_{II}}{c} (x \sin \theta_{II} + y \cos \theta_{II})}. \quad (6.25a)$$



Фиг. 6.2. Распространение света из оптически более плотной среды в оптически менее плотную.

Приравнивая эти функции ¹⁾ на границе раздела (плоскость $y=0$), находим известные законы преломления:

$$\begin{aligned} \omega_{II} &= \omega_I; \quad \sin \theta_{II} = n \sin \theta_I; \\ \cos \theta_{II} &= \sqrt{1 - n^2 \sin^2 \theta_I}. \end{aligned}$$

Подставляя эти значения в выражение (6.25a), для преломленной волны будем иметь:

$$\varphi_{II} = A_{II} e^{-i\omega_I t + \frac{i\omega_I}{c} (x n \sin \theta_I + y \sqrt{1 - n^2 \sin^2 \theta_I})}.$$

Отсюда видно, что если $n \sin \theta_I < 1$, то в области II будет распространяться обычная волна. В случае же $n \sin \theta_I > 1$ мы будем иметь полное внутреннее отражение, физический анализ которого геометрическая оптика не может дать.

С точки зрения волновой оптики в этом случае будет иметь место экспоненциальное убывание электрического и магнитного полей:

$$\varphi_{II} = e^{-\frac{\omega_I}{c} \sqrt{n^2 \sin^2 \theta_I - 1} y - i\omega_I t + \frac{i\omega_I}{c} x n \sin \theta_I}.$$

Если в случае полного внутреннего отражения луч света опять на своем пути встречает стекло (область III), т. е. два стекла отделены друг от друга воздушной прослойкой, то в области III опять начнет распространяться волна по закону (6.25),

¹⁾ Выражения для отраженной волны мы не будем здесь записывать.

но с убывающей по экспоненциальному закону с увеличением ширины прослойки l амплитудой:

$$A_{III} = A_I e^{-\frac{\omega l}{c} \sqrt{n^2 \sin^2 \theta_1 - 1}}. \quad (6.26)$$

На фиг. 6.3 изображена схема туннельного эффекта в оптике.

В заключение физического анализа прохождения частиц сквозь потенциальный барьер следует остановиться еще на так называемом парадоксе туннельного эффекта. Он заключается в том, что с первого взгляда может показаться, якобы внутри потенциального барьера реальные частицы находятся в каком-то непонятном состоянии, характеризуемом мнимым импульсом.

Фактически в этом чисто квантовом явлении по экспоненциальному закону будет убывать лишь вероятность нахождения частицы по мере удаления ее от границы в глубь потенциального барьера.

Внутри же потенциального барьера микрочастица обладает реальным импульсом и координатой в рамках обычного соотношения неопределенности. Чтобы

Фиг. 6.3. Схема туннельного эффекта в оптике (полное внутреннее отражение).

это показать, рассмотрим потенциальный барьер с постоянным V .

Тогда в первом приближении волновая функция внутри потенциального барьера будет изменяться по закону:

$$\varphi_{II} = Ae^{-\kappa x}, \quad (6.27)$$

где

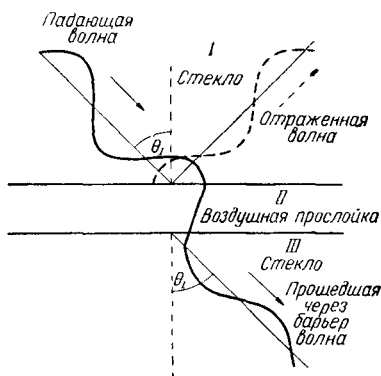
$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_0(V - E)} = \text{const}. \quad (6.28)$$

Однако правую часть (6.27) можно представить в виде интеграла Фурье:

$$e^{-\kappa x} = \int_0^{\infty} f(k) \cos kx dk, \quad (6.29)$$

где

$$f(k) = \frac{2\kappa}{\pi(\kappa^2 + k^2)}, \quad (6.29a)$$



т. е. представить как набор волновых функций, обладающих вещественными импульсами. Амплитуды $f(k)$, очевидно, практически будут отличными от нуля при изменении k лишь в области от 0 до κ .

Таким образом, неопределенность в значении импульса по порядку величины будет равна:

$$\Delta p \sim \hbar \kappa.$$

Принимая во внимание, что согласно волновой механике положение микрочастицы внутри потенциального барьера определено лишь с точностью до величины порядка его ширины:

$$l = x_2 - x_1, \quad \Delta x \sim l,$$

получаем:

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar \kappa l.$$

Поскольку наши формулы пригодны лишь для случая $\kappa l \gg 1$, точность определения импульса и положения частицы внутри потенциального барьера не будет противоречить соотношению неопределенности.

в. Движение электронов в металле ¹⁾

Теория туннельного эффекта имеет ряд весьма важных приложений как в теории металлов, так и в ядерной физике. С помощью этой теории удалось понять ряд явлений, которые, как уже отмечалось, не нашли своего объяснения в классической физике, например, удалось объяснить холодную эмиссию, т. е. вырывание электронов из металла под действием электрического поля, или возникновение контактной разности потенциалов и т. д. Однако прежде чем приступить к анализу этих явлений, скажем несколько слов о теории «электронного газа», лежащей в основе электронной теории проводимости металлов.

Высокая электропроводность металлов говорит о том, что электроны способны сравнительно свободно перемещаться внутри всей кристаллической решетки металла. Затруднен лишь их выход из металла в вакуум, требующий затраты некоторой энергии, так называемой «работы выхода». Это наводит на мысль рассматривать металл в первом приближении просто как потенциальную яму, внутри которой (т. е. в металле) потенциальная энергия электрона равна нулю: $V=0$, а вне металла, т. е. в вакууме, $V=V_0 > 0$.

Подобная упрощенная модель позволяет уяснить многие явления в металлах и поэтому в некоторых пределах является

¹⁾ См. Г. Бете и А. Зоммерфельд, Электронная теория металлов, М.—Л., 1938.

вполне разумной, тем более, что основные результаты, полученные для свободных электронов, в известной мере можно перенести затем с помощью волновой механики на тот случай, когда учитывается еще периодическое поле кристалла (см., например, ниже простейшую одномерную модель Кронига — Пенни, описывающую хотя бы с качественной стороны многие результаты).

Модель металла как «электронного газа» рассматривалась еще в классической теории (теория Друде, Лоренца и т. д.). В этом случае к электронам применялась классическая статистика Максвелла — Больцмана, которая до этого с успехом объяснила многие явления кинетической теории газов.

Однако в классической теории модель «электронного газа» встретила большие затруднения при построении теории теплоемкости. В самом деле, согласно известной теореме классической статистической механики о равномерном распределении энергии по степеням свободы, на одну степень свободы в среднем должна приходиться энергия¹⁾:

$$\frac{1}{3} E_{\text{ср.}} = \frac{1}{2} kT, \quad (6.30)$$

где k — постоянная Больцмана.

Отсюда видно, что доля каждого свободного электрона в общей теплоемкости будет такая же, как и свободного атома:

$$c_v^{\text{э.л.}} = \frac{\partial E_{\text{ср.}}}{\partial T} = \frac{3}{2} k.$$

Это противоречит экспериментальным фактам, согласно которым теплоемкость одноатомного металла должна быть такой же, как и теплоемкость атомов решетки, т. е. свободные электроны в первом приближении никакого вклада в теплоемкость металла не дают.

Это противоречие было разрешено Зоммерфельдом, который показал, что к электронам в металле необходимо было применять не классическую статистику, характеризующую классической функцией распределения:

$$f = Ae^{-\frac{E}{kT}},$$

а квантовую статистику Ферми — Дирака с функцией распределения:

$$f_{\text{Ф-Д}} = \frac{1}{A e^{E/kT} + 1}.$$

В основе квантовой статистики Ферми — Дирака лежит принцип Паули, согласно которому на каждом энергетическом уровне

¹⁾ Более подробно теплоемкость одноатомных веществ будет рассмотрена в § 12 [см. формулу (12.67)].

может находиться максимум два электрона (два квантовых состояния, отличающиеся направлениями спинов).

Если нам задана трехмерная потенциальная яма кубической формы с длиной стороны, равной L , то составляющие импульса $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ согласно (4.57) будут связаны с целыми числами n_1, n_2, n_3 , характеризующими энергетический уровень, соотношениями:

$$p_x = \frac{2\pi\hbar n_1}{L}, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar n_2}{L}, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar n_3}{L}.$$

Учтем, что на единичный интервал квантовых чисел:

$$\begin{aligned} (\Delta n_1 = \Delta n_2 = \Delta n_3 = 1) \\ \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \frac{L^3}{8\pi^3 \hbar^3} d^3 p \end{aligned} \quad (6.30a)$$

приходится лишь один уровень, на котором могут находиться два электрона.

Поэтому, если в единице объема находится ρ_0 электронов, то максимальный импульс, которым может обладать электрон при абсолютном нуле температуры ($T=0$), определяется соотношением:

$$\rho_0 = \frac{2}{L^3} \sum \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \frac{2 \cdot 4\pi}{8\pi^3 \hbar^3} \int_0^{p_{\text{макс.}}} p^2 dp = \frac{p_{\text{макс.}}^3}{3\pi^2 \hbar^3} \quad (6.31)$$

или

$$p_{\text{макс.}} = \hbar (3\pi^2 \rho_0)^{1/3}. \quad (6.32)$$

Соответствующая максимальная кинетическая энергия электронов будет равна:

$$F^0 = \frac{p_{\text{макс.}}^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 \rho_0)^{2/3}. \quad (6.33)$$

Эта максимальная энергия при $T=0$ соответствует уровню Ферми.

Оценим значение этой энергии, например, для серебра. Плотность серебра равна 10,5, атомный вес 107,9. Считая, что число свободных электронов равно числу атомов серебра в единице объема, будем иметь:

$$\rho_0 = \frac{10,5}{107,9} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} = 5,8 \cdot 10^{22};$$

здесь мы использовали число Авогадро, т. е. число атомов в одном грамм-атоме, равное $6,02 \cdot 10^{23}$. Отсюда по формуле (6.33) находим, что

$$F^0 = 8,5 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} = 5,3 \text{ эв.}$$

Поскольку для серебра работа выхода $W = 3,7$ эв, то глубина потенциальной ямы в серебре оказывается равной 9 эв. Схема заполнения электронных уровней в металле изображена на фиг. 6.4.

Средняя энергия электрона в металле будет определяться выражением:

$$E_{\text{ср.}}^0 = \frac{2}{\rho_0} \int_0^{p_{\text{макс.}}} \frac{p^2}{2m_0} \frac{d^3\rho}{8\pi^3\hbar^3} = \frac{3}{5} F^0. \quad (6.33a)$$

Отсюда видно, что при сравнительно низких температурах электронный газ в согласии с экспериментом никакого вклада в теплоемкость не должен вносить, так как

$$c_v^{\text{эл.}} = \frac{\partial E_{\text{ср.}}^0}{\partial T} = 0.$$

Если температура отлична от нуля, то часть электронов будет переходить на более высокие энергетические уровни. Распределение электронов по более высоким уровням будет характеризоваться не максвелловской функцией распределения, а функцией распределения Ферми:

$$f = \frac{1}{A e^{E/kT} + 1}. \quad (6.34)$$

Фиг. 6.4. Модель потенциальной ямы для металла.

$E_{\text{макс.}} = F^0$ — верхняя граница заполненных уровней при $T = 0$ (уровень Ферми).

Эта функция при $T = 0$ (этот случай мы только что рассматривали) равна единице, если $E < F^0$, и нулю, если $E > F^0$. При $T \neq 0$ для средней энергии можно получить выражение:

$$E_{\text{ср.}}^T = \frac{3}{5} F^0 + \frac{\pi^2 k^2 T^2}{4F^0} + O(T^4)^1. \quad (6.34a)$$

Отсюда для доли теплоемкости каждого электрона находим:

$$c_v^{\text{эл.}} = \frac{\partial E_{\text{ср.}}^T}{\partial T} = \frac{\pi^2 k^2 T}{2F^0} \ll \frac{3}{2} k. \quad (6.35)$$

Эта теплоемкость при $T \rightarrow 0$ обращается в нуль. При высоких температурах, когда величина $\frac{1}{A} e^{E/kT}$ становится много больше единицы, функция распределения (6.34) переходит в классическую:

$$f = A e^{-E/kT}, \quad (6.36)$$

¹⁾ См. примечание на стр. 127.

которая, как известно, дает следующее значение для средней энергии свободного электрона:

$$E_{\text{ср.}}^{\text{кл.}} = \frac{3}{2} kT. \quad (6.37)$$

Сопоставляя это выражение со средней энергией, найденной при низких температурах [см. формулу (6.33а)], из условия:

$$E_{\text{ср.}}^{\text{кл.}} > E_{\text{ср.}}^0, \quad (6.38)$$

можно определить так называемую *температуру вырождения*:

$$T_{\text{выр.}} \sim \frac{\hbar^2}{km_0} (3\pi^2 \rho_0)^{2/3}, \quad (6.39)$$

выше которой ($T > T_{\text{выр.}}$) для электронов в металле можно пользоваться классической статистикой.

Если подставить сюда значение ρ_0 , например, для серебра, то найдем, что $T_{\text{выр.}} \sim 10 - 20$ тысяч градусов, т. е. при всех температурах, при которых металлы вообще могут существовать в твердом состоянии, имеет место так называемое вырождение, когда следует применять только статистику Ферми и когда основной член кинетической энергии свободных электронов от температуры не зависит.

Заметим, что столь большое значение температуры вырождения связано с малой массой электрона m_0 . Для ионов и молекул масса в тысячи раз больше массы электрона, и поэтому к ним при обычных температурах вполне применима классическая статистика.

Примечание.

Для получения формулы (6.34 а) прежде всего необходимо воспользоваться значениями для:

$$\rho_0 = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty f p^2 dp,$$

$$E_{\text{ср.}}^T = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3 \rho_0} \int_0^\infty E f p^2 dp$$

при $T \neq 0$.

Выражая постоянную A в функции распределения (6.34) через уровень Ферми F :

$$A = e^{F/kT}$$

и вводя новую переменную:

$$\varepsilon = \frac{E - F}{kT} = \frac{p^2}{2m_0} - \frac{F}{kT},$$

мы найдем после интегрирования по частям:

$$\rho_0 = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_0 F}{\hbar^2} \right)^{3/2} I_{3/2}, \quad E_{\text{ср.}}^T = \frac{3}{5} F \frac{I_{5/2}}{I_{3/2}},$$

где

$$I_{n/2} = \int_{-1/a}^{\infty} (1 + a\varepsilon)^{n/2} \frac{e^\varepsilon}{(1 + e^\varepsilon)^2} d\varepsilon.$$

В случае малых значений:

$$a = \frac{kT}{F} \ll 1,$$

ограничиваясь членами порядка a^2 , найдем:

$$I_{n/2} \approx A_0 + \frac{n}{2} A_1 a + \frac{n(n-2)}{8} A_2 a^2 + \dots,$$

где

$$A_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^\varepsilon d\varepsilon}{(1 + e^\varepsilon)^2} = \int_0^\infty \frac{dx}{(1+x)^2} = 1.$$

$$A_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varepsilon e^\varepsilon d\varepsilon}{(1 + e^\varepsilon)^2} = 0,$$

поскольку подынтегральное выражение в A_1 является нечетной функцией ε и, наконец,

$$A_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon^2 e^\varepsilon d\varepsilon}{(1 + e^\varepsilon)^2} = 4 \int_0^\infty \frac{\varepsilon d\varepsilon}{1 + e^\varepsilon} = 4 \int_0^\infty \varepsilon (e^{-\varepsilon} - e^{-2\varepsilon} + e^{-3\varepsilon} \dots) d\varepsilon = \frac{\pi^2}{3}.$$

При вычислении последнего интеграла принято во внимание, что

$$\int_0^\infty \varepsilon e^{-n\varepsilon} d\varepsilon = \frac{1}{n^2} \quad \text{и} \quad \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{12}.$$

В этом приближении мы будем иметь:

$$I_{n/2} = 1 + \frac{n(n-2)\pi^2}{24} a^2.$$

Отсюда, учитывая (6.33), получаем зависимость уровня Ферми от температуры:

$$F = F^0 \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{F^0} \right)^2 \right),$$

где F^0 — величина уровня Ферми при $T=0$ [см. (6.33)]. Отсюда для $E_{\text{ср.}}^T$ получаем соотношение (6.34a).

г. Вырывание электронов из металла. Холодная эмиссия

Исходя из модели движения электронов в металле (см. фиг. 6.4), мы видим, что для вырывания электрона из металла необходимо сообщить ему энергию не меньшую, чем работа выхода:

$$W = V_0 - E_{\text{макс.}} \quad (6.40)$$

Как известно, в случае внешнего фотоэффекта электрон получает от поглощенного фотона энергию $\hbar\omega$. При этом электрон может покинуть металл с кинетической энергией:

$$\frac{1}{2} m_0 v^2 = \hbar\omega - W \quad (6.41)$$

(уравнение Эйнштейна). Отсюда следует, что работа выхода есть минимальная энергия, которую нужно затратить, чтобы энергия электрона стала больше высоты потенциального барьера.

Если электроны в металле (электронный газ) имеют температуру выше абсолютного нуля, то часть электронов заполняет энергетические уровни выше уровня Ферми. Если увеличить кинетическую энергию электронного газа путем нагревания металла, то некоторая часть электронов может иметь энергию, превышающую энергию потенциального барьера, благодаря чему возникает ток из металла. Это явление, получившее название термоэлектронной эмиссии, используется, в частности, для получения пучка электронов в электронных лампах. Однако возникновение тока электронов возможно и при низких температурах под влиянием внешнего электростатического поля. Рассмотрим влияние постоянного внешнего электрического поля \mathcal{E} , приложенного к поверхности проводника и направленного против оси x . В этом случае потенциальная энергия имеет вид:

$$V(x) = V_0 - e_0 \mathcal{E} x, \quad (6.42)$$

где $e = -e_0$ — заряд электрона, \mathcal{E} — напряженность электрического поля (см. фиг. 6.5).

Помимо внешнего электрического поля, на электрон действует так называемая «сила электрического изображения». Дело в том, что электрон, обладая зарядом $-e_0$, создает на поверхности металла индуцированный заряд e_0 (см. фиг. 6.6).

Таким образом, полная сила, действующая на электрон, равна:

$$F(x) = e_0 \mathcal{E} - \frac{e_0^2}{4x^2}. \quad (6.43)$$

Эффективная потенциальная энергия, учитывающая силы электрического изображения, имеет вид:

$$V_{\text{эфф.}} = V_0 - e_0 \mathcal{E} x - \frac{e_0^2}{4x}. \quad (6.44)$$

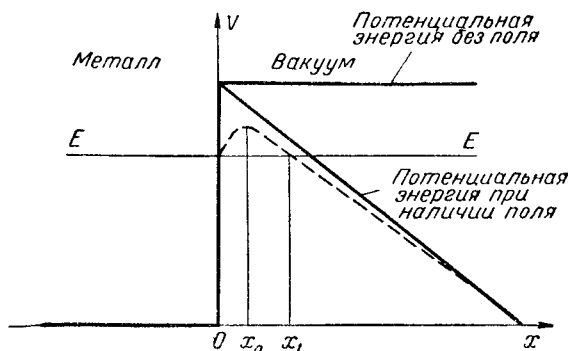
Величина $V_{\text{эфф.}}$ имеет максимум в точке x_0 :

$$\frac{\partial V_{\text{эфф.}}}{\partial x} = -e_0 \mathcal{E} + \frac{e_0^2}{4x_0^2} = 0;$$

$$x_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{e_0}{\mathcal{E}}}, \quad (6.45)$$

причем максимальное значение $V_{\text{эфф.}}$ меньше V_0 , так как

$$V_{\text{макс.}} = V_0 - \sqrt{e_0^3 \mathcal{E}}. \quad (6.46)$$



Фиг. 6.5. Потенциальная энергия электрона в металле без поля и при наличии внешнего электрического поля.

Пунктирной линией показан ход потенциальной кривой с учетом сил электрического изображения.

Учет сил электрического изображения показывает, таким образом, что при наложении внешнего поля работа выхода уменьшается и становится равной:

$$W' = W - \sqrt{e_0^3 \mathcal{E}}. \quad (6.47)$$

Однако силы электрического изображения не в состоянии объяснить холодную эмиссию. Действительно, оценка максимального тока (при $W' = 0$) приводит, например, для вольфрама к значению:

$$\mathcal{E} = \frac{W^2}{e_0^3} \cong 2 \cdot 10^8 \text{ в/см}, \quad (6.48)$$

между тем как на опыте достаточно сильный ток появляется уже при поле $\mathcal{E} \cong 4 \cdot 10^6 \text{ в/см}$ (Милликен).

Таким образом, в рамках классической теории невозможно объяснить с количественной стороны явление холодной эмиссии.

В квантовой теории, когда допустимо прохождение электронов сквозь потенциальный барьер, для потенциальной энергии можно ограничиться выражением (6.42) и не учитывать сил электрического изображения, поскольку учет последних лишь весьма незначительно изменит окончательный результат. Из графика потенциальной энергии (см. фиг. 6.5) видно, что внешнее электрическое поле создает потенциальный барьер конечной ширины. Благодаря туннельному эффекту электрон может преодолеть этот барьер, причем коэффициент прозрачности равен:

$$D = e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m_0} \int_0^{x_1} \sqrt{V(x) - E} dx} \quad (6.49)$$

Интеграл в экспоненте должен быть взят по всей ширине барьера от точки $x = 0$ до точки $x = x_1$, которая определяется из условия:

$$V_0 - e_0 \mathcal{E} x_1 = E, \text{ т. е. } x_1 = \frac{V_0 - E}{e_0 \mathcal{E}}. \quad (6.50)$$

Тогда

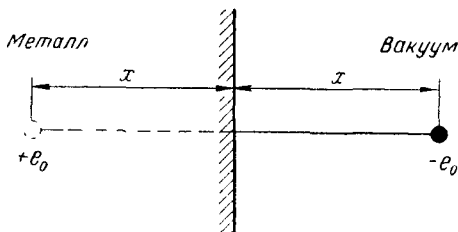
$$\begin{aligned} \int_0^{x_1} \sqrt{V(x) - E} dx &= \int_0^{x_1} \sqrt{V_0 - e_0 \mathcal{E} x - E} dx = \\ &= \sqrt{e_0 \mathcal{E}} \int_0^{x_1} \sqrt{x_1 - x} dx = \frac{2}{3} \sqrt{e_0 \mathcal{E}} x_1^{3/2}. \end{aligned} \quad (6.51)$$

Окончательно для коэффициента прозрачности D получаем выражение:

$$D = e^{-\frac{4}{3} \sqrt{2m_0} \frac{(V_0 - E)^{3/2}}{e_0 \hbar \mathcal{E}}} = e^{-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}}, \quad (6.52)$$

где величина \mathcal{E}_0 зависит от работы выхода из металла свободных электронов. Ток холодной эмиссии пропорционален коэффициенту прозрачности:

$$J = J_0 D = J_0 e^{-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}}. \quad (6.53)$$



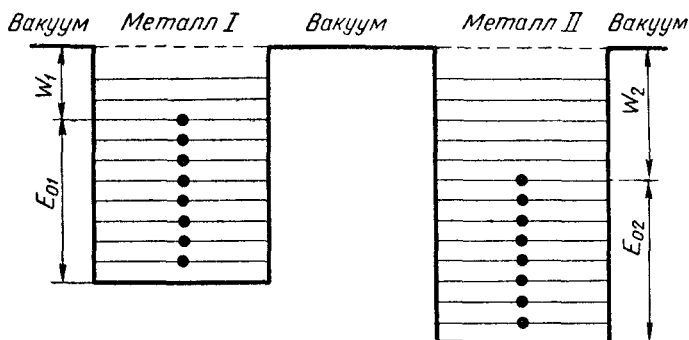
Фиг. 6.6. Силы электрического изображения: на находящийся вне металла электрон действуют силы притяжения индуцированным зарядом.

Отсюда следует, что холодная эмиссия должна наблюдаться при напряженности электрического поля $\mathcal{E} \sim 10^6$ в/см, что хорошо согласуется с экспериментальными данными.

д. Контактная разность потенциалов

На основе туннельного эффекта можно объяснить и явление так называемой *контактной разности потенциалов*, которое было открыто еще Вольта.

Рассмотрим два металла различной природы, обладающих различными работами выхода, а вместе с тем и уровнями Ферми



Фиг. 6.7. Два металла до сближения.

W_1 и W_2 — работы выхода; E_{01} и E_{02} — верхние границы заполненных уровней (уровни Ферми).

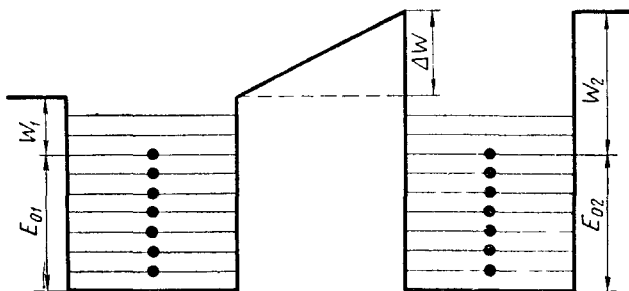
(см. фиг. 6.7). Если привести их в соприкосновение, то они оказываются разделенными потенциальным барьером конечной ширины. Поскольку часть занятых электронами энергетических уровней в металле I лежит выше границы заполненных уровней металла II, возможен туннельный переход электронов на свободные уровни металла II. Обратный переход, как видно из фиг. 6.7, исключен, поскольку электроны металла II при таком переходе будут иметь энергию, соответствующую заполненным уровням металла I. Очевидно, далее, что возникший электрический ток прекратится только в том случае, когда верхние заполненные уровни металлов сравняются.

В результате туннельного эффекта металл II, получив избыток электронов, заряжается отрицательно и соответственно металл I заряжается положительно. При этом начало отсчета энергетических уровней металла II поднимется вверх по отношению к началу отсчета уровней металла I (см. фиг. 6.8). После того

как наступит термодинамическое равновесие, при котором уровни Ферми в обоих металлах должны сравняться, электрический ток прекратится, но зато между металлами возникает разность потенциалов, пропорциональная разности работ выхода:

$$\Delta\Phi = \Phi_1 - \Phi_2 = \frac{W_2 - W_1}{e_0}. \quad (6.54)$$

Эта величина и получила название *контактной разности потенциалов*.



Фиг. 6.8. Два металла после сближения. Возникновение контактной разности потенциалов.

е. Движение электронов в периодическом электрическом поле (одномерная модель Кронига—Пенни)¹⁾

Как мы упоминали, представление о движении электрона в металле как в потенциальной яме является приближенным и соответствует некоторому усреднению периодического потенциала.

Ряд весьма характерных особенностей движения электронов в кристаллах выявляется лишь при учете периодического изменения потенциала. В общем случае подобная задача решается сложно; поэтому, чтобы выяснить некоторые особенности этого движения хотя бы с качественной стороны, рассмотрим движение электронов в простейшей модели кристаллического тела.

В одномерной модели Кронига—Пенни периодическое электрическое поле положительных ионов кристалла аппроксимируется потенциалом типа «зубчатой стенки», изображенным на фиг. 6.9. Ширину каждой ямы обозначим через a , а ширину барьера между двумя последовательными ямами — через b . Таким образом, период потенциала, соответствующий в данной модели постоянной решетки, равен $c = a + b$. Высоту барьера полагаем равной V_0 .

¹ См. Я. И. Френкель, Волновая механика, т. I, М.—Л., 1935.

Тогда решение уравнения Шредингера для n -го участка будет иметь вид:

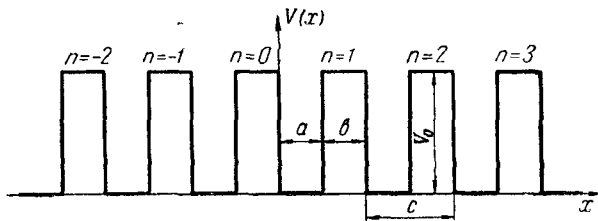
для потенциальной ямы:

$$\psi_n = A_n \sin kx_n + B_n \cos kx_n, \quad (6.55)$$

для потенциального барьера:

$$\psi'_n = A'_n \operatorname{sh} \kappa (x_n - c) + B'_n \operatorname{ch} \kappa (x_n - c). \quad (6.56)$$

Здесь $k = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}$, $\kappa = \sqrt{\frac{2m_0 (V_0 - E)}{\hbar^2}}$, $x_n = x - cn$; координата x_n отсчитывается от начала n -го участка (т. е. n -й ямы).



Ф и г. 6.9. Одномерная модель кристаллического тела Кронига — Пенни.

Аналогично, для $(n+1)$ -го участка можно написать:

$$\psi_{n+1} = A_{n+1} \sin kx_{n+1} + B_{n+1} \cos kx_{n+1}. \quad (6.57)$$

Произведем прежде всего «сшивание» решений (6.55) и (6.56) в точке $x = cn + a$, т. е. при $x_n = a$. Тогда будем иметь:

$$A_n \sin ka + B_n \cos ka = -A'_n \operatorname{sh} \kappa b + B'_n \operatorname{ch} \kappa b, \quad (6.57a)$$

$$A_n \cos ka - B_n \sin ka = \frac{\kappa}{k} (A'_n \operatorname{ch} \kappa b - B'_n \operatorname{sh} \kappa b).$$

Сшивая далее решения (6.56) и (6.57) в точке $x = c(n+1)$ и учитывая при этом, что $x_n = c$, $x_{n+1} = 0$, получаем:

$$\begin{aligned} B'_n &= B_{n+1}, \\ A'_n &= \frac{k}{\kappa} A_{n+1}. \end{aligned} \quad (6.58)$$

Подставляя (6.58) в (6.57a) и переходя ради упрощения задачи к предельному случаю Кронига — Пенни, когда ширина «зубца» (т. е. барьера между двумя ямами) стремится к нулю ($b \rightarrow 0$), а высота V_0 к бесконечности, в то время как величина, характеризующая площадь «зубца», остается неизменной:

$$\frac{\kappa^2 b a}{2} = P = \text{const},$$

и учитывая, что при этом $\operatorname{ch} kb \rightarrow 1$, $\operatorname{sh} kb \rightarrow kb$, находим:

$$\begin{aligned} A_n \sin ka + B_n \cos ka &= B_{n+1}, \\ A_n \cos ka - B_n \sin ka &= A_{n+1} - \frac{2P}{ka} B_{n+1}. \end{aligned} \quad (6.59)$$

Равенства (6.59) представляют собой линейные разностные уравнения, решения которых следует искать в виде:

$$A_n = C_1 r^n, \quad B_n = C_2 r^n. \quad (6.60)$$

Подставляя (6.60) в (6.59) и сокращая оба равенства на r^n , получаем уравнение для определения величины r и соотношения между коэффициентами C_1 и C_2 :

$$\begin{aligned} C_1 \sin ka &= C_2 (r - \cos ka), \\ C_2 \left(\frac{2P}{ka} r - \sin ka \right) &= C_1 (r - \cos ka). \end{aligned} \quad (6.61)$$

Перемножая левые и правые части последних уравнений и сокращая обе части равенства на произведение $C_1 C_2$, получаем уравнение для определения величины r :

$$r^2 - 2r \cos k'a + 1 = 0, \quad (6.62)$$

где $\cos k'a$ определяется выражением:

$$\cos k'a = \frac{P}{ka} \sin ka + \cos ka. \quad (6.63)$$

Как мы увидим ниже, равенство (6.63) представляет собой основное уравнение для определения энергетических уровней в периодическом поле кристалла.

Решение уравнения (6.62) имеет вид:

$$r = \cos k'a \pm i \sin k'a = e^{\pm ik'a}. \quad (6.64)$$

Заметим, что если правая часть равенства (6.63) будет больше единицы, то величина k' будет мнимой, и в этом случае будем иметь экспоненциальное решение:

$$r = e^{\pm |k'|a}. \quad (6.65)$$

Рассмотрим более подробно решение в случае вещественных значений k' :

$$r = e^{ik'a}.$$

Тогда, согласно (6.61) и (6.60), будем иметь:

$$\begin{aligned} C_1 &= C_0 \frac{r - \cos ka}{\sin ka}, & A_n &= C_0 \frac{(e^{ik'a} - \cos ka) e^{ik'an}}{\sin ka}, \\ C_2 &= C_0, & B_n &= C_0 e^{ik'an}. \end{aligned}$$

Подставляя найденные значения A_n и B_n в (6.55) и принимая во внимание, что в результате предельного перехода ($b \rightarrow 0$) $x_n = x - an$, находим выражение для волновой функции в кристалле:

$$\psi = C_0 e^{ik'x} U_n, \quad (6.66)$$

где U_n — функция, обладающая периодом потенциала в кристалле:

$$U_n = \frac{1}{\sin ka} [e^{-ik'(x_n - a)} \sin kx_n - e^{-ik'x_n} \sin k(x_n - a)]. \quad (6.67)$$

В частности, если $P = 0$, т. е. барьера нет, то из (6.63) найдем, что $k' = k$; в этом случае функция U_n обращается в единицу.

Из формулы (6.66) следует, что электрон сможет свободно двигаться в кристалле, если k' является вещественной величиной, т. е. когда правая часть равенства (6.63) меньше единицы.

ж. Основы электронной теории проводимости кристаллов

Квантовая теория движения электронов в кристаллической решетке дает ключ к пониманию различия между проводниками и диэлектриками, а также полупроводниками, которые занимают в некотором смысле промежуточное положение. Мы не собираемся здесь останавливаться на количественной стороне вопроса, а ограничимся, основываясь на выводах одномерной модели Кронига—Пенни, некоторыми качественными замечаниями.

В основу нашего краткого анализа положим формулу (6.63) для определения возможных энергий электрона в кристаллической решетке. Эта формула имеет вид:

$$\cos k'a = \frac{P}{ka} \sin ka + \cos ka, \quad (6.63)$$

где a — постоянная решетки, а величина $k = \frac{\sqrt{2m_0E}}{\hbar}$ определяет энергию электрона. Возможные значения энергии электрона могут быть найдены из условия вещественности величины k' . Последнее означает, что правая часть равенства (6.63) должна быть меньше единицы.

Положив $P = \infty$, мы получим энергетический спектр изолированных атомов (в этом случае атомы будут отделены друг от друга непроницаемым барьером). Тогда энергетический спектр будет представлять собой изолированные для каждой ямы уровни:

$$\begin{aligned} k' &= k = \pi n/a, \\ E_n &= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}, \end{aligned} \quad (6.68)$$

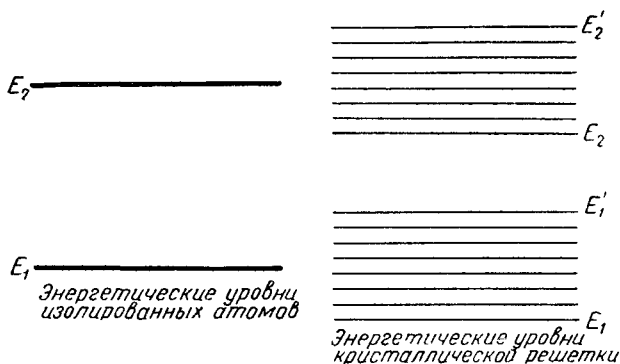
где $n = 1, 2, 3, \dots$.

Мы не будем рассматривать отрицательные значения n , так как они дадут те же значения для энергии, но будут соответствовать движению электрона в обратном направлении, т. е. в направлении — x . Первые два уровня ($n = 1, 2$):

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}, \quad E_2 = 4E_1 \quad (6.69)$$

изолированных атомов изображены на фиг. 6.10.

Если величина P [см. (6.63)] является конечной, то возможные энергетические уровни проще всего определить графически (см. фиг. 6.11). Разрешенные значения для величины k , т. е. для энергии, будут соответствовать таким значениям правой части равенства (6.63), которые будут лежать в пре-

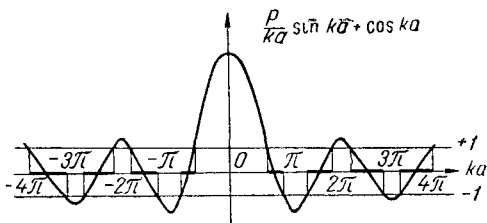


Фиг. 6.10. Схема образования энергетических зон в кристаллической решетке.

делах от -1 до $+1$. На фиг. 6.11 эти возможные значения изображены жирной линией. Таким образом, изолированные уровни N атомов при образовании кристаллической решетки расщепляются на N уровней (см. также (5.86)), образуя так называемые *зоны*. Эти расщепленные уровни изображены также на фиг. 6.10.

Электроны, находясь в кристалле, будут стремиться занять энергетически более низкие состояния, причем, как уже указывалось, согласно принципу Паули на каждом уровне не может быть более двух электронов с противоположными направлениями спинов.

Если мы имеем, например, кристаллическую решетку щелочного металла, то на N атомов будет приходиться N валентных электронов. Они займут только половину нижней зоны (так как на каждом уровне может быть максимум два электрона). В основном состоянии половина электронов будет двигаться в одном направлении, другая половина — в противоположном, и поэтому ток в среднем будет равняться нулю. Если включить электрическое поле, то некоторая часть электронов сможет двигаться преимущественно в одном направлении, создавая тем самым электрический ток и переходя на более высокие энергетические уровни. Поэтому в металле должно быть достаточное количество незаполненных уровней в основной зоне, являющейся в то же самое время и *зоной проводимости*.

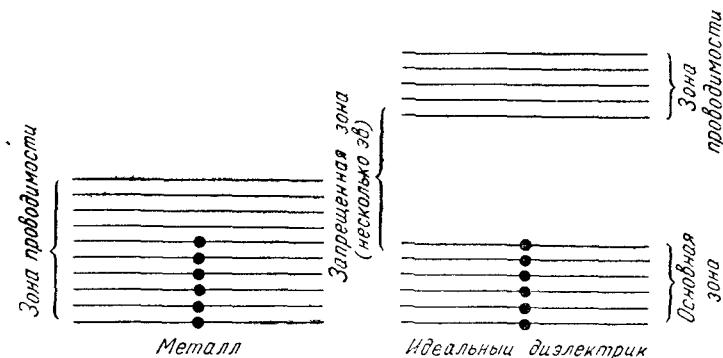


Фиг. 6.11. Определение возможных энергетических уровней в кристаллической решетке.

Жирной линией по оси абсцисс отмечены возможные значения ka (разрешенные зоны).

В идеальном диэлектрике, наоборот, все уровни основной зоны заняты, а уровни зоны проводимости свободны. Энергетическое расстояние между этими зонами, как правило, составляет несколько электрон-вольт. Поэтому при включении поля электроны не могут приобрести преимущественное направление движения¹⁾.

В самом деле, если один из электронов изменит направление своего движения на противоположное, это будет означать, что он перейдет в другое энергетическое состояние. Но так как все энергетические уровни заняты, то это возможно лишь в том случае, когда электрон, занимающий это другое энергетическое состояние, перейдет обратно в то состояние, которое первоначально занимал первый электрон. Поэтому в среднем преимущественное направление движения электронов даже при включении поля



Фиг. 6.12. Схема энергетических уровней металла и диэлектрика.

не может возникнуть. Схема энергетических уровней металла и диэлектрика изображена на фиг. 6.12.

Тем не менее любой диэлектрик все же при комнатной температуре обладает некоторой (правда, весьма небольшой) проводимостью. Особенно сильно эта проводимость возрастает у полупроводников, где расстояние между зонами значительно меньше, чем у диэлектриков (около 1 эВ, а иногда и меньше; так, например, для германия при $T = 300^\circ \text{K}$ ширина запрещенной зоны составляет всего 0,66 эВ). При абсолютном нуле полупроводники ведут себя как диэлектрики; однако их проводимость возрастает с повышением температуры и в особенности при наличии примесей других элементов. При комнатной температуре удельное сопротивление полупроводников оказывается порядка $10^{-2} - 10^3 \text{ ом} \cdot \text{см}$. В то же время удельное сопротивление диэлектриков лежит в пределах $10^3 - 10^{18} \text{ ом} \cdot \text{см}$, а металлов — $10^{-5} - 10^{-6} \text{ ом} \cdot \text{см}$.

Проводимость диэлектриков и полупроводников может носить двойной характер.

¹⁾ Заметим, что кристаллическая решетка может обладать не одной, а несколькими целиком заполненными зонами, лежащими ниже зоны проводимости. Эти зоны (кроме основной для диэлектрика или полупроводника) при простейшем анализе теории проводимости можно вообще и не учитывать. Например, в кристаллической решетке лития наполовину заполненной зоной является зона 2s (см. ниже § 25), ниже которой лежит целиком заполненная зона 1s.

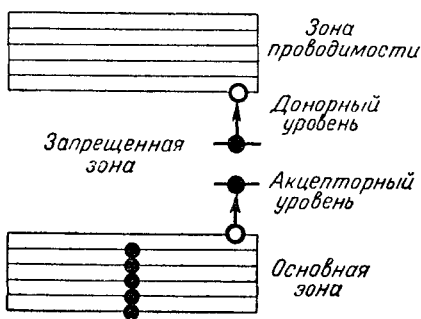
С одной стороны, часть электронов под действием теплового возбуждения или внутреннего фотоэффекта (поглощение электронами света) переходит из основной зоны в зону проводимости. В основной зоне при этом остаются вакантные состояния, так называемые «дырки». Электроны, попавшие в зону проводимости, в полной мере приобретают способность переносить электрический заряд, т. е. создавать ток. С другой стороны, роль скоро в основной зоне некоторые состояния оказались свободными, появляется возможность создания электрического тока и за счет движения электронов в самой основной зоне. Можно показать, что движение системы электронов в основной (почти целиком заполненной) зоне можно рассматривать как движение совокупности вакантных состояний — «дырок». Последнее, очевидно, перемещаются в направлении, противоположном перемещению электронов, т. е. ведут себя как положительно заряженные частицы. Таким образом, можно говорить о двух способах переноса заряда и, следовательно, о двух типах носителей электрического тока в твердом теле — электронах и дырках.

Исходя из зонной теории, можно сразу с качественной стороны объяснить ряд эффектов.

Например, проводимость металлов с понижением температуры должна возрастать, поскольку их сопротивление связано с взаимодействием свободных электронов с колебаниями решетки. С понижением температуры колебания последних уменьшаются, а число носителей тока не зависит от температуры. Проводимость же полупроводников, наоборот, с понижением температуры должна уменьшаться, так как число носителей тока будет становиться все меньше и меньше. Существование дырочной проводимости в полупроводниках было доказано при исследовании эффекта Холла и термо-э.д.с. Знак разности потенциалов, возникающей в этих случаях, определяется знаком носителей тока. Опыт показывает, что в то время как в одних полупроводниках знаки эффекта Холла и термо-э.д.с. соответствуют случаю, когда носителями тока являются электроны, в других полупроводниках знаки обратные, т. е. носителями тока являются как бы положительно заряженные частицы. Представление о дырках дает этому естественное объяснение.

Эти выводы о проводимости, связанной с переходом электронов из основной зоны в зону проводимости и движением дырки в основной зоне, относятся к идеальному кристаллу, и этот тип проводимости носит название *собственной проводимости*.

Помимо собственной проводимости, в полупроводниках существенную роль играет так называемая *примесная проводимость*. Она связана с наличием в решетке посторонних примесей или иных структурных дефектов. Подобного рода нарушения идеальной периодической структуры решетки приводят к локальным отклонениям поля от чисто периодического. В результате в энергетическом спектре электронов могут появиться дискретные уровни, лежащие в запрещенной зоне (см. фиг. 6.13). Волновые функции, соответствующие этим уровням, практически отличны от нуля лишь в некоторой области вблизи данного дефекта, благодаря чему дискретные уровни иногда называются локальными. Сами по себе дискретные уровни непо-



Фиг. 6.13. Схема энергетических зон полупроводника с примесью проводимостью.

средственно не дают вклада в ток (электроны, их заполняющие, не свободны). Благодаря им, однако, может изменяться число электронов как в зоне проводимости, так и в основной зоне.

Примесные состояния (короткие стрелки справа на фиг. 6.13) можно разделить на два типа: донорные и акцепторные. Донор способен отдавать свои электроны в зону проводимости, благодаря чему в последней появляются свободные электроны. Акцептор, в противоположность донору, принимает электроны; тогда в заполненной зоне образуется «дырка» и электроны этой зоны получают возможность перейти в более высокое энергетическое состояние (дырочная проводимость).

Если локальные уровни расположены достаточно близко от границ соответствующих зон, то ионизация (или другой эффект) за счет энергии теплового движения решетки осуществляется сравнительно легко. Поэтому в зонах может оказаться заметное число свободных электронов (или дырок) даже в условиях, когда непосредственное возбуждение электронов из основной зоны в зону проводимости весьма маловероятно.

При этом величина и тип проводимости определяются в основном природой и концентрацией примесей. Варьируя их, можно в широких пределах управлять величиной проводимости, а также задавать ее тип (электронный или дырочный)¹⁾. Это обстоятельство широко используется в полупроводниковой электронике. Именно на нем основана работа современных высококачественных кристаллических диодов и триодов — полупроводниковых приборов, способных выпрямлять переменный ток, а также усиливать и генерировать электрические колебания (транзисторы).

В заключение обратим внимание на две важные аппроксимации, которыми мы молчаливо воспользовались в электронной теории твердого тела. Первых, до сих пор, говоря о теории металлов и полупроводников, мы рассматривали по существу лишь задачу об одном электроне, благодаря чему соответствующая теория получила название одноэлектронной. Свойства же коллектива электронов в твердом теле принимались во внимание лишь в связи с заполнением свободными электронами энергетических уровней, что было нами использовано при вычислении некоторых статистических величин (уровни Ферми, теплоемкости и т. д.). Однако и при этом мы полностью пренебрегли взаимодействием между электронами. В то же время фактически они испытывают, например, взаимное кулоновское отталкивание. Нетрудно убедиться, что при реально наблюдаемой плотности электронов в металле средняя энергия этого отталкивания отнюдь не обязательно мала по сравнению с уровнем Ферми. Возникает естественный вопрос: в какой мере подобная грубая одноэлектронная модель передает свойства реального металла и передает ли она их вообще?

Ответ на этот вопрос дается в многоэлектронной теории твердого тела, на которой мы не можем здесь сколько-нибудь подробно останавливаться, поскольку эта теория, получившая свое развитие сравнительно недавно, пока что носит сравнительно узкоспециальный характер. Отметим лишь, что основные качественные представления об электронном газе как свободном носителе тока, подчиняющемся статистике Ферми (одноэлектронная теория), сохраняются и в многоэлектронной теории. Соответственно остаются в силе полученные в одноэлектронной теории закономерности чисто статистического характера, например, линейная связь электронной теплоемкости

¹⁾ Так, четырехвалентный германий в чистом виде обладает большим сопротивлением (собственный полупроводник: число электронов равно числу дырок). Небольшие же примеси пятивалентной сурьмы (донорная примесь) придают ему электронную проводимость (полупроводник *n*-типа), а трехвалентного галлия (акцепторная примесь) — дырочную проводимость (полупроводник *p*-типа).

с температурой (при этом могут несколько измениться лишь численные коэффициенты, связанные с конкретным видом волновых функций системы электронов; однако эти уточнения связаны с исключительно большими вычислительными трудностями).

С другой стороны, в задачах динамического характера, где учет взаимодействия между электронами необходим по существу, изложенный выше упрощенный подход (одноэлектронная теория) оказывается недостаточным. К числу таких задач относится, например, проблема прочности металла.

Во-вторых, кристаллическая решетка в одноэлектронной теории рассматривалась просто как источник некоторого статического поля. Фактически, однако, дело обстоит сложнее, ибо ионы решетки испытывают колебательное движение, не прекращающееся, как мы знаем, даже при абсолютном нуле температуры (нулевые колебания). Желая принять во внимание это обстоятельство, следует рассматривать решетку кристалла не просто как источник поля, а как квантовомеханическую систему (см. § 12, г). Существовавшее, что она не является изолированной, а связана с системой электронов, так как последние взаимодействуют с ионами решетки. Энергию этого взаимодействия можно однозначно представить в виде суммы двух слагаемых. Первое из них есть потенциальная энергия взаимодействия электронов с неподвижной решеткой. Движение электронов в таком поле рассматривалось на простом примере модели Кронига—Пенни. Второе слагаемое связано с отклонениями ионов от положений равновесия. Оно называется энергией взаимодействия электронов с колебаниями решетки. Средняя энергия этого взаимодействия весьма мала по сравнению с энергией электронов, находящихся на уровне Ферми, так как малы амплитуды колебаний ионов решетки (исключая область, близкую к точке плавления).

Однако наличие колебаний решетки может начать играть принципиальную роль при низких температурах. А именно, через взаимодействие каждого электрона с колебаниями решетки возникает дополнительное взаимодействие между парой электронов, причем последнее взаимодействие (в отличие от электростатического), когда спины электронов направлены противоположно, может носить характер притяжения. В результате эта пара электронов начинает двигаться в известной степени коррелированно.

Оказывается, что подобная система обладает свойством сверхпроводимости¹⁾. Малость взаимодействия, ответственного за корреляцию, объясняет, почему сверхпроводимость наблюдается лишь при весьма низких температурах²⁾.

§ 7. СТАТИСТИЧЕСКОЕ ТОЛКОВАНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

а. Некоторые сведения из теории линейных операторов

При общем исследовании уравнения Шредингера (см. § 5) мы видели, что классическому импульсу p частицы в квантовой теории сопоставляется оператор импульса $p = -i\hbar\nabla$, энергии E —

¹⁾ Теория сверхпроводимости, основанная на изложенных представлениях, была развита независимо советским физиком Н. Н. Боголюбовым, а также зарубежными физиками Бардиным, Купером и Шриффером. (См. Н. Боголюбов, В. Толмачев, Д. Ширков, Новый метод в теории сверхпроводимости, М., 1958.)

²⁾ Более подробно см. Р. Пайерлс, Квантовая теория твердых тел, М., 1957; В. Шокли, Электронная теория полупроводников, М., 1952.

оператор энергии $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, функции Гамильтона H — оператор функции Гамильтона или гамильтониан H и т. д.

В связи с этим, прежде чем перейти к анализу физического смысла величин, изображаемых операторами в квантовой теории, рассмотрим некоторые общие вопросы, связанные с теорией операторов.

Подобно тому как функция переводит каждое число x в другое $y = f(x)$, оператор M позволяет каждому значению одной функции $f(x)$ сопоставить другую функцию:

$$\psi(x) = Mf(x), \quad (7.1)$$

вычисленную по тому или иному заданному правилу.

Для того чтобы в квантовой механике не нарушался принцип суперпозиции, необходимо использовать только линейные операторы, обладающие следующими двумя основными свойствами:

$$\begin{aligned} M(f_1 + f_2) &= Mf_1 + Mf_2, \\ MCf &= CMf, \end{aligned} \quad (7.2)$$

где C — произвольная постоянная.

В качестве линейных операторов выбирают чаще всего символ дифференцирования, например $M = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ (оператор импульса), $M = \nabla^2$ (оператор Лапласа) и т. д., а также символ интегрирования.

В уравнении Пуассона:

$$\nabla^2 f(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) \quad (7.3)$$

в качестве оператора выбирается оператор Лапласа, который переводит функцию $f(\mathbf{r})$ в другую функцию $\rho(\mathbf{r})$.

Обратно, мы можем разрешить уравнение Пуассона и найти:

$$f(\mathbf{r}) = \nabla^{-2} \rho(\mathbf{r}) = - \int \rho(\mathbf{r}') K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d^3x'. \quad (7.3a)$$

Здесь оператор ∇^{-2} представлен в виде определенного интеграла, причем ядром оператора ∇^{-2} является функция:

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = - \frac{1}{4\pi \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}}.$$

Операторы ∇^2 и ∇^{-2} , последовательное действие которых дает единицу, называются обратными друг другу.

Если взять оператор функции Гамильтона:

$$H = T + V,$$

то он состоит из суммы оператора кинетической энергии $T = - \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2$, пропорциональной оператору Лапласа, и потенци-

альной энергии V , представляющей собой просто функцию координат.

Действие потенциальной энергии $V(x)$ на волновую функцию мы можем также рассматривать как действие некоторого линейного оператора, так как при этом будут выполнены условия (7.2). Поэтому в квантовой механике наряду с дифференцированием и интегрированием в качестве линейного оператора может быть выбрана некоторая функция координат, действие которой на другую функцию сводится просто к их перемножению.

Например, в квантовой механике наряду с оператором импульса $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, представляющим собой операцию дифференцирования, координату \mathbf{r} можно также назвать оператором координаты¹⁾.

В связи с этим интересно отметить, что \mathbf{r} уже не определяет собой координату частицы, а является аргументом волновой функции и определяет значение последней в координатном пространстве.

Величина же, которая должна играть роль координаты, может быть найдена из оператора \mathbf{r} и функции $\psi(\mathbf{r})$ примерно тем же способом, как и импульс частицы находится по оператору импульса, т. е. путем усреднения (см. ниже).

б. Элементы теории представлений

Очевидно, что все операторы координат x , y , z являются коммутирующими между собой, так как их действие эквивалентно действию обычных чисел, и поэтому $xy = yx$, $xz = zx$ и т. д. Аналогично и операторы $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$, $p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ оказываются коммутирующими друг с другом, поскольку результат дифференцирования не зависит от того порядка, в котором оно ведется:

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2}{\partial y \partial x}, \quad \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} = \frac{\partial^2}{\partial z \partial y} \text{ и т. д.}$$

Нетрудно также видеть, что операторы p_x и y , p_y и x и т. д. также коммутируют друг с другом:

$$p_x y \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} y \psi = -i\hbar y \frac{\partial \psi}{\partial x} = y p_x \psi,$$

т. е.

$$p_x y = y p_x.$$

¹⁾ Особенно отчетливо это видно, если написать уравнение Шредингера в импульсном пространстве (см. ниже), когда волновая функция зависит от p . В этом случае оператору импульса \mathbf{p} соответствует обычная функция (число), а оператору координаты x соответствует производная по p .

Некоммутирующими операторами являются, например, x и p_x . Действительно:

$$xp_x\psi = -i\hbar x \frac{\partial\psi}{\partial x}, \quad (7.4)$$

в то же время:

$$p_x x \psi = -i\hbar \frac{\partial x \psi}{\partial x} = -i\hbar \left(1 + x \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi. \quad (7.5)$$

Следовательно,

$$(p_x x - x p_x) \psi = -i\hbar \psi, \quad (7.6)$$

т. е.

$$p_x x - x p_x = -i\hbar. \quad (7.7)$$

Аналогичным образом легко убедиться, что

$$p_y y - y p_y = p_z z - z p_z = -i\hbar. \quad (7.8)$$

Некоммутативность этих операторов, выраженная соотношениями (7.7) и (7.8), является фундаментальной особенностью, характерной для всей квантовой механики.

Наш конкретный выбор вида операторов x и $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, который удовлетворяет соотношениям (7.7) и (7.8), соответствует так называемому координатному представлению, когда волновая функция считается зависящей только от координат r [$\psi = \psi(r)$].

Уравнение Шредингера можно записать также в импульсном представлении. Для этого рассмотрим ради простоты одномерный случай и, пользуясь δ -функцией [см. (4.70)], разложим $\psi(x)$ в интеграл Фурье:

$$\psi(x) = \int \psi(x') \delta(x - x') dx' = \frac{1}{2\pi} \int dk dx' \varphi(k) e^{ik(x-x')}.$$

Учитывая, что $k = \frac{p}{\hbar}$, где $p = p_x$, последнее равенство можно записать в виде:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp, \quad (7.9)$$

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x') e^{-i\frac{p}{\hbar}x'} dx'. \quad (7.10)$$

Фурье-образ функции $\psi(x)$ — функция $\varphi(p)$, зависящая от импульса, носит название волновой функции в импульсном представлении. Соотношения (7.9) и (7.10) связывают между собой волновые функции в координатном и импульсном представлениях.

Найдем, чему будет соответствовать оператор координаты x в импульсном представлении. Заметим, что теперь p можно не писать в виде оператора, т. е. прямым шрифтом.

Для этого в формулу (7.10) вместо $\psi(x)$ подставим $x\psi(x)$. Тогда для последней функции в импульсном представлении будем иметь:

$$x\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int x\psi(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx = i\hbar \frac{\partial\varphi(p)}{\partial p}, \quad (7.11)$$

т. е. в импульсном представлении оператор x имеет вид:

$$x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}.$$

Нетрудно проверить, что соотношение (7.7) сохраняет свою силу и в импульсном представлении. В самом деле:

$$(xp - px)\varphi(p) = i\hbar \left(\frac{\partial p\varphi(p)}{\partial p} - p \frac{\partial\varphi(p)}{\partial p} \right) = i\hbar\varphi(p).$$

Точно так же основному соотношению (7.7) можно удовлетворить, если вместо x и p ввести соответствующие матрицы, которые также могут не коммутировать друг с другом. Последнее представление можно назвать матричным¹⁾. Оно было введено Гейзенбергом несколько раньше появления уравнения Шредингера.

Дальнейшее рассмотрение операторов мы поведем, как правило, в координатном представлении.

в. Средние значения операторов

Как известно, в классической теории движение отдельной материальной точки вполне точно определяется зависимостью координат от времени, что однозначно может быть найдено из основного дифференциального уравнения движения механики (динамическая закономерность):

$$m_0\ddot{r} = -\text{grad } V(r).$$

Определив r как функцию времени, можно определить также импульс и энергию материальной точки.

Несколько иначе обстоит дело при наличии многих частиц, например, в кинетической теории газов. В этом случае проявляются новые присущие большому коллективу частиц статистические закономерности.

Оказывается, что частицы такого коллектива имеют определенный закон распределения, вообще говоря, как в координатном, так и в импульсном пространстве (т. е. по скоростям, а вместе с тем и по энергиям). Функция f , характеризующая эти распределения, называется функцией распределения. При этом

¹⁾ Вообще говоря, при исследовании реальных процессов важно знать не волновую функцию, а средние значения (см. ниже § 8), которые совершенно не зависят от того, в каком представлении выбрана волновая функция.

Матричное представление называют также энергетическим или E -представлением, поскольку матричные элементы являются функциями энергетических состояний (см. задачу 10.8).

можно говорить только о вероятности того или иного значения координаты или импульса частицы. Функция распределения позволяет найти, например, средние значения координаты и импульса:

$$\bar{x} = \int x f d^3x d^3p, \quad \bar{p}_x = \int p_x f d^3x d^3p,$$

средние квадраты этих величин:

$$\overline{x^2} = \int x^2 f d^3x d^3p \text{ и т. д.,}$$

которые и должны совпадать согласно закону больших чисел с соответствующими экспериментальными значениями.

Обратим внимание на одну особенность статистической закономерности. Эта статистическая закономерность в классической физике появляется в результате усреднения по так называемым скрытым параметрам, определяющим точное движение каждой частицы согласно уравнениям Ньютона. В окончательные же результаты эти скрытые параметры не входят. Вообще, классическая теория по крайней мере в принципе позволяет указать (хотя это и очень сложно математически), почему в каждый момент времени координаты и импульсы отдельных частиц имеют соответствующие наблюдаемые отклонения от средних значений.

Поведение частиц в микромире описывается волновой функцией $\psi(\mathbf{r}, t)$, которая носит вероятностный характер, причем даже в том случае, когда описываемая ею система состоит всего лишь из одной-единственной частицы. В связи с этим квантовая механика позволяет определить лишь средние значения физических величин независимо от того, имеется много или одна микро-частица. Следует подчеркнуть, что в квантовой теории даже в принципе нельзя объяснить отклонение наблюдаемых величин от средних¹⁾. Вычисляются же эти средние значения в квантовой механике подобно тому, как это делается в статистической теории, т. е. по формуле²⁾:

$$\bar{M} = \int \psi^*(t) M \psi(t) d^3x, \quad (7.12)$$

¹⁾ Как доказал Нейман, в основе статистических закономерностей квантовой механики не могут лежать скрытые параметры. Однако доказательство Неймана ограничено рамками самой же квантовой механики, и если последней не придавать значение абсолютной теории, то теорема Неймана не может претендовать на общность.

²⁾ В настоящее время средние квантовомеханические величины все чаще начинают обозначать с помощью угловых скобок. Эти обозначения мы и примем в дальнейшем.

Тогда формула (7.12) будет иметь следующую запись:

$$\langle M \rangle = \int \psi^*(t) M \psi(t) d^3x. \quad (7.12a)$$

Чертой же в дальнейшем мы будем обозначать классические усреднения

где M может быть любым оператором (равно как и числом), а величина $\psi^*(t)\psi(t)$ играет роль функции распределения f , при условии, что волновые функции $\psi(t)$ являются нормированными:

$$\int \psi^*(t)\psi(t) d^3x = 1.$$

Средние значения координаты и импульса, как мы уже отмечали, будут определяться фактически по одному и тому же закону:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \psi^*(t) x \psi(t) d^3x, \\ \langle p_x \rangle &= \int \psi^*(t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(t) d^3x. \end{aligned} \quad (7.13)$$

При этом $\langle x \rangle$ будет координатой центра тяжести волнового пакета, соответствующего функции $\psi(t)$, а $\langle p_x \rangle$ — импульсом этого центра тяжести.

Для того чтобы средние значения являлись реальными величинами, они должны быть вещественными, т. е. должно иметь место равенство:

$$\langle M \rangle^* = \langle M \rangle. \quad (7.14)$$

Когда это требование выполняется, соответствующие операторы называются *самосопряженными* (или *эрмитовыми*).

Покажем, в частности, что оператор p_x удовлетворяет условию (7.14), несмотря на то, что по внешнему виду он является чисто мнимым.

Докажем для этого прежде всего важную для дальнейшего теорему о «перебросе» производной. Заключается она в следующем. Допустим, что мы имеем интеграл:

$$G = \int_{-\infty}^{\infty} u v^{(n)} dx, \quad (7.15)$$

где $v^{(n)} = \frac{d^n v}{dx^n}$. Тогда, если все подстановки пределов типа:

$$\left[u v^{(n-1)} \right]_{-\infty}^{\infty}, \left[u^{(1)} v^{(n-2)} \right]_{-\infty}^{\infty}, \dots, \left[u^{(n-1)} v \right]_{-\infty}^{\infty} \quad (7.16)$$

обращаются в нуль, то результат интегрирования G не изменится, если мы в (7.15) n -ю производную с функции v «перебросим» на функцию u и поставим при этом перед интегралом множитель $(-1)^n$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} u v^{(n)} dx = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} u^{(n)} v dx. \quad (7.17)$$

В самом деле, производя в (7.15) n -кратное интегрирование по частям и учитывая нулевые значения подстановок (7.16), прихо-

дим к соотношению (7.17). В случае дискретного спектра условия (7.16) будут всегда выполнены, так как волновая функция убывает на бесконечности по экспоненциальному закону. В случае же свободного движения (непрерывный спектр) эти выражения обращаются в нуль вследствие условия периодичности. Физически выполнение условий (7.16) означает, что на бесконечности нет никаких частиц и никаких токов.

Возвращаясь к доказательству самосопряженности оператора p_x , в равенстве (7.17) мы должны положить:

$$u = \psi^*(t), \quad v = -i\hbar\psi(t) \quad \text{и} \quad n = 1.$$

Отсюда автоматически следует, что:

$$\langle p_x \rangle = - \int \psi^*(t) i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(t) dx = \int \psi(t) i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(t) dx = \langle p_x \rangle^*,$$

т. е. условие самосопряженности (7.14) для p_x оказывается выполненным. Заметим, что в противоположность оператору $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ вещественный оператор $\frac{\partial}{\partial x}$ не является самосопряженным и его среднее значение не имеет физического смысла.

Если оператор M имеет только одно собственное значение λ (и одну собственную функцию ψ), то оно, как нетрудно видеть, будет совпадать со средним значением этого оператора. Действительно, следуя общему правилу (7.12) определения среднего значения оператора и учитывая, что

$$M\psi(t) = \lambda\psi(t), \quad (7.18)$$

для $\langle M \rangle$ получаем:

$$\langle M \rangle = \int \psi^*(t) M\psi(t) d^3x = \lambda \int \psi^*(t) \psi(t) d^3x = \lambda. \quad (7.19)$$

Если оператор M [уравнение (7.18)] имеет несколько собственных значений: $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$, соответствующих функциям $\psi_1(t), \psi_2(t), \dots, \psi_n(t), \dots$ (например, это может иметь место для оператора энергии $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $\lambda_n = E_n$), то, принимая во внимание, что общее решение $\psi(t)$ может быть записано в виде:

$$\psi(t) = \sum_n C_n \psi_n(t), \quad (7.20)$$

для среднего значения оператора энергии $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ находим:

$$\langle E \rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n. \quad (7.21)$$

Здесь $|C_n|^2$ суть вероятности осуществления того или иного квантового состояния микрочастицы. Если все C_n за исключением

одного, C_{n_0} , равны нулю, то $\langle E \rangle = E_{n_0}$, т. е. средняя энергия совпадет с собственным значением E_{n_0} и, следовательно, последнее будет соответствовать той энергии, которую можно наблюдать на опыте. В том же случае, когда отличны от нуля несколько коэффициентов C_n : $C_{n_1}, C_{n_2}, \dots, C_{n_i}, \dots$, в результате экспериментального измерения мы уже будем получать либо то, либо другое значение энергии. При многократном повторении опытов число случаев, когда обнаруживаются частицы с энергией E_{n_i} , должно быть пропорционально соответствующим теоретическим вероятностям $|C_{n_i}|^2$.

г. Статистическая интерпретация волновой функции

Итак, в настоящее время окончательно установлено, что квантовая механика является статистической наукой. Исходя из этого положения возникает другой вопрос: будут ли вскрыты причины, которые позволяют лишь с некоторой вероятностью предсказать значение координаты и импульса электрона? В связи с этим напомним, что в основе классической статистики должны лежать «скрытые параметры», к числу которых можно отнести, например, динамические закономерности, т. е. уравнения Ньютона, определяющие движения отдельных частиц¹⁾. В отличие от этого в основе статистических закономерностей квантовой механики не лежат подобные динамические закономерности, поскольку квантовая механика описывает одними и теми же волновыми уравнениями как поведение отдельного электрона, так и квантового ансамбля. Поэтому, оставаясь в рамках самой квантовой механики, нельзя ввести никаких «скрытых параметров», объясняющих ее статистический характер (теорема Неймана). Однако если не придавать квантовой механике абсолютного значения, то можно надеяться, что статистический характер явлений микромира будет объяснен с помощью более совершенных теорий. Этот вопрос является далеко еще не разрешенным и поэтому мы ограничимся некоторыми возможными высказываниями в связи с его постановкой.

Сторонники интерпретации квантовой механики в духе принципа дополнительности считают, что причины, приводящие к статистическому характеру явлений микромира, никогда не будут вскрыты. В связи с этим необходимо прежде всего подчеркнуть

¹⁾ Как было указано в § 3, хотя динамические закономерности не могут полностью объяснить даже в классическом случае всех статистических закономерностей, например необратимости процессов (H-теорема Больцмана), однако там отсутствует какой-либо принципиальный предел познания того или иного явления.

различие между соотношением неопределенности и принципом дополнителности.

Соотношение неопределенности следует из волновой теории (строгий его вывод мы дали в § 8). Из соотношения неопределенности вытекает, что в рамках квантовой механики невозможно точно теоретически предсказать для одного и того же момента времени и координату, и импульс электрона. Сторонники интерпретации квантовой механики в духе принципа дополнителности пытаются это объяснить особым влиянием на микромир макроприборов, воздействие которых при одновременном измерении двух канонически сопряженных величин (например, координаты и импульса электрона) нельзя сделать сколь угодно малым. Возводя это в особый принцип, они приходят к выводу, что должен существовать некий конечный предел познания микромира. Таким образом, принцип дополнителности скорее носит мировоззренческий характер и имеет примерно такое же отношение к квантовой механике, какое в свое время имело механистическое мировоззрение к классической механике.

Как известно, механистическое мировоззрение на сравнительно ранней ступени развития классической физики дало ряд положительных результатов. Однако в дальнейшем, будучи абсолютизированным, оно начало тормозить развитие науки. Точно так же принцип дополнителности на первых этапах появления квантовой механики, бесспорно, сыграл некоторую положительную роль. Например, с помощью принципа дополнителности было установлено, что статистические закономерности микромира имеют особую природу и, во всяком случае, они не должны сводиться к динамическим. В дальнейшем выяснилось, что принцип дополнителности может быть использован лишь для интерпретации поведения квантового ансамбля, где причины, приводящие к статистическим закономерностям, не существенны. Однако если его абсолютизировать, то можно прийти к выводу, что никакая будущая теория о микромире не сможет не только предсказать, но даже вскрыть причин, почему, например, отдельный электрон при попадании на экран дает не дифракционную картину, как предсказывает теория, а какую-то определенную точку, по которой можно судить о координате и импульсе электрона (хотя бы для прошедшего момента времени), значительно точнее, чем с помощью вычислений по квантовой механике.

Более того, введение элементов микромира принципиально непознаваемых неминуемо в конце концов должно начать тормозить развитие науки о микромире, которая в настоящее время вплотную подошла к изучению структуры элементарных частиц и их флуктуационному взаимодействию с другими частицами и полями.

Квантовая механика должна прежде всего отражать объективные закономерности микромира, не зависящие от приборов, с помощью которых производятся наблюдения. Следует также учитывать, что наши представления о внешнем мире складываются не только на основе показаний приборов, от которых может зависеть лишь быстрота нашего познания микромира. Человек способен обобщать результаты своих наблюдений путем установления взаимосвязи между различными явлениями. В связи с этим напомним, что различные свойства атомов были познаны задолго до непосредственного их обнаружения на основе анализа ряда экспериментов, относящихся к изучению макроскопических свойств вещества.

Другая точка зрения заключается в том, что хотя причины, приводящие к статистическому характеру квантовой механики, еще не вскрыты, однако нельзя считать, что они не могут быть вскрыты и в будущих более совершенных, чем квантовая механика, теориях. В качестве примера остановимся на одном из возможных объяснений (далеко еще не апробированном) статистического характера науки о микромире.

Если проводить аналогию с классическими явлениями, то движение отдельного электрона до некоторой степени должно напоминать собой движение броуновской частицы.

Для описания поведения броуновской частицы, движущейся благодаря флуктуационным ударам со стороны молекул вещества, классическая теория также использует статистический метод, причем, как и в случае движения электрона, теоретически можно найти лишь вероятность нахождения броуновской частицы в том или ином месте пространства, хотя экспериментально мы можем проследить за всей ее траекторией движения. Вместе с тем здесь следует подчеркнуть различие между движением броуновской частицы и движением электрона. Это различие сводится к тому, что статистическая теория броуновского движения получается как результат усреднения по скрытым параметрам хаотического движения молекул, в то время как обычная квантовая теория таких скрытых параметров не содержит.

Однако если выйти за рамки квантовой механики и воспользоваться, например, результатами квантовой теории поля, то тогда становится возможным провести более глубокую параллель между этими двумя видами движения. В самом деле, согласно современной квантовой теории поля, электрон всегда окружен облаком виртуальных фотонов, со стороны которых он и испытывает хаотические «удары», напоминающие те, которые испытывает броуновская частица, хотя полной аналогии здесь все же нет. В самом деле, в случае броуновского движения частица сохраняет свои индивидуальные свойства, в то время как при

движении электрона в вакууме наряду с взаимодействием электрона с флуктуациями электромагнитного поля, к тому же не зависящего от температуры, необходимо также еще учитывать взаимодействие электрона с электронно-позитронным вакуумом, что может привести к аннигиляции первоначального электрона и появлению вторичного (более подробно см. § 22).

Флуктуационные удары со стороны виртуального поля фотонов, а также электронно-позитронного вакуума могут быть наблюдаемы. Они приводят, в частности, согласно Вельтону¹⁾, к лэмбовскому сдвигу уровней в атоме водорода и дополнительному собственному магнитному моменту электрона (подробнее см. § 21).

Более того, как было показано нами совместно с В. С. Тумановым²⁾, если в уравнении движения для классического электрона (конкретно это было сделано для гармонического осциллятора) учесть флуктуации со стороны фотонного вакуума, а также силу лучистого трения Планка (это необходимо для учета силы самодействия), то мы автоматически получаем соотношение неопределенности.

Таким образом, если в классической теории можно выбрать некоторую замкнутую область, содержащую конечное число материальных точек (или конечное число степеней свободы), для которых принципиально можно сформулировать точные классические уравнения движения (динамическая закономерность), то в квантовой теории этого сделать уже невозможно, поскольку даже конечная область с конечным числом электронов будет содержать с учетом флуктуационных ударов со стороны виртуального поля бесконечное число степеней свободы. Иными словами, если в классической теории на базе поведения отдельных частиц изучают движение их совокупности (классическая статистическая физика), то в квантовой механике, наоборот, на базе статистических закономерностей пытаются судить о движении отдельной частицы.

При учете же флуктуационных сил, появляющихся в рамках квантовой теории поля, статистические закономерности квантовой механики следует рассматривать как результат усреднения по другим более «элементарным» движениям, не зависящим (в противоположность утверждению последователь принципам дополнительности) от наблюдателя (например, флуктуационные взаимодействия электрона с электромагнитным вакуумом). Последние описываются также статистическими закономерностями и только в некоторых частных случаях, когда влиянием этих флуктуационных ударов на движение элементарной частицы можно пренебречь, они переходят в динамические. Подобная гипотеза представляет собой одну из возможных предварительных интерпретаций соотношения неопределенности, с выходом за рамки волновой механики. Во всяком случае мы можем утверждать, что непознаваемых закономерностей в природе нет. Их надо только суметь познать. В будущих теориях по существующим данным, возможно, нельзя будет предсказывать точные значения для координаты и импульса электрона одновременно, но

¹⁾ Перевод статьи Вельтона напечатан в сборнике «Вопросы причинности в квантовой механике», ИЛ, М., 1955.

²⁾ А. А. Соколов и В. С. Туманов, Соотношение неопределенности и теория флуктуаций, ЖЭТФ, **30**, 802, 1956, см. также А. А. Соколов, Введение в квантовую электродинамику, М., 1958, стр. 190 (см. также заочу 31.3).

в них, бесспорно, будет дано физическое объяснение тому факту, почему в микромире имеют место статистические закономерности.

Оставаясь же в рамках квантовой механики, наиболее объективное истолкование появления волновых свойств частиц можно дать с помощью введения квантовых ансамблей (см. § 5), согласно которым волновые свойства должны наблюдаться либо при одновременном наличии большого числа частиц, либо при многократном повторении одинаковых состояний с отдельными не взаимодействующими частицами. Этот вывод, если угодно, можно рассматривать как обобщение на квантовый случай эргодической гипотезы, играющей большую роль в классической статистике, поскольку при этом для стационарного состояния средние по времени заменяются средними по пространственной совокупности.

Объяснить же вероятностный характер теории в применении к элементарному акту квантовые ансамбли не позволяют, и этот вероятностный характер может быть объяснен, как нам кажется, только с помощью теории, выходящей за рамки квантовой механики.

Мы только что указали, что в качестве такой предварительной теории может быть взята теория, учитывающая вакуумные флуктуации. Возможно, что это будет объяснено и с помощью других гипотез¹⁾. В частности, не исключено, что причины вероятностного характера квантовой механики будут вскрыты с помощью создаваемой нелинейной теории поля, в которой в настоящее время фактически учитывается структура элементарных частиц.

§ 8. СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ ОПЕРАТОРОВ. ИЗМЕНЕНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН СО ВРЕМЕНЕМ

а. Вывод соотношения неопределенности

Как мы указывали в предыдущем параграфе, наблюдаемые физические величины, которым сопоставляются операторы, независимо от того, коммутируют эти операторы с гамильтонианом или нет, т. е. являются ли соответствующие физические величины интегралами движения или нет, можно характеризовать лишь средним значением, вычисляемым по формуле (7.12).

¹⁾ Более подробно различные точки зрения на принципиальные вопросы квантовой механики изложены в журнале «Вопросы философии» № 2, 72 (1959) (общая дискуссия); № 10, 31 (1959); № 7, 108 (1963) (статья Д. И. Блохинцева); № 4, 57 (1959) (статья Я. П. Терлецкого); № 6, 74 (1959) (статья Д. Д. Иваненко); № 6, 155 (1959) (статья Г. А. Свечникова); № 4, 98 (1958) (статья Г. Я. Мякишева); № 12, 83 (1963) (статья Дирака) и т. д. Философские взгляды В. Гейзенберга изложены в сборнике статей «Философские проблемы атомной физики», М., 1953. Критические замечания к этим работам даны во вступительной статье, написанной И. В. Кузнецовым. См. также статьи: Н. Бор, УФН, 66, 571 (1958); 67, 37 (1959); В. А. Фок, УФН, 66, 599 (1958); М. Борн, УФН, 69, 173 (1959). Попытки зарубежных авторов дать новое обоснование квантовой механики даны в цитированном выше сборнике «Вопросы причинности в квантовой механике». См. также сборник «Философские проблемы физики элементарных частиц», изд. АН СССР, 1963 г. (доклады на Всесоюзной конференции по философским вопросам естествознания, Москва, апрель 1962 г.).

Покажем, что, если физическим величинам соответствуют некоммутирующие друг с другом операторы, в рамках квантовой механики они не могут быть одновременно вычислены точно. Наиболее важным в этом отношении является вычисление отклонения от средних значений операторов двух канонически сопряженных величин: координаты x и импульса p_x .

Дальнейшее исследование будем проводить в координатном представлении и ограничимся рассмотрением случая, когда волновая функция не зависит от времени (стационарный случай). Тогда средние значения координаты и импульса могут быть найдены соответственно из соотношений¹⁾:

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi d^3x, \quad (8.1)$$

$$\langle p_x \rangle = - \int \psi^* i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} d^3x. \quad (8.2)$$

Прежде всего заметим, что, хотя средняя ошибка, или отклонение от среднего, вычисляемая по формуле:

$$\langle \Delta x \rangle = \int \psi^* (x - \langle x \rangle) \psi d^3x = \langle x \rangle - \langle x \rangle = 0, \quad (8.3)$$

и равна нулю, это все же никоим образом не означает отсутствия других возможных положений частицы, отличных от $\langle x \rangle$, поскольку отклонения могут иметь относительно центра тяжести $\langle x \rangle$ различные знаки и, следовательно, в среднем взаимно компенсировать друг друга.

Поэтому отклонение от среднего значения следует характеризовать средней квадратичной ошибкой, которая при любом отклонении от $\langle x \rangle$ имеет положительный знак. Эта средняя квадратичная ошибка для координаты может быть вычислена по формуле:

$$\begin{aligned} \langle (\Delta x)^2 \rangle &= \int \psi^* (x - \langle x \rangle)^2 \psi d^3x = \\ &= \langle x^2 \rangle - 2 \langle x \rangle^2 + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Заметим, кстати, что если средняя квадратичная ошибка, например, $\langle (\Delta x)^2 \rangle = 0$, то это означает, что вероятность пребывания

¹⁾ Как было указано в § 7, средние значения не зависят от выбора представления для ψ -функции. Формула (8.1) написана в x -представлении. В p -представлении вместо (8.1) будем иметь:

$$\langle x \rangle = \int \varphi^*(p) i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \varphi(p) d^3p,$$

а в E -представлении координата x будет характеризоваться матрицей, элементы которой равны:

$$x_{n,m} = \int \psi_n^* x \psi_m d^3x.$$

Более подробно см. задачу (10.8).

электрона в пространстве отлична от нуля лишь при $x = \langle x \rangle$. В этом случае среднее значение равняется точному, т. е. соответствующая вероятность пребывания частицы будет описываться δ -образной функцией.

Аналогично для средней квадратичной ошибки по импульсу имеем:

$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle = \int \psi^* (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \psi d^3x = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2. \quad (8.5)$$

Чтобы установить связь между $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ и $\langle (\Delta p_x)^2 \rangle$, мы можем без ограничения общности доказательства выбрать систему координат с началом в центре тяжести волнового пакета ($\langle x \rangle = 0$), причем так, что она будет двигаться вместе с последним ($\langle p_x \rangle = 0$). В этом случае получаем:

$$\begin{aligned} \langle (\Delta x)^2 \rangle &= \langle x^2 \rangle = \int \psi^* x^2 \psi d^3x, \\ \langle (\Delta p_x)^2 \rangle &= \langle p_x^2 \rangle = \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi d^3x. \end{aligned} \quad (8.6)$$

Рассмотрим следующий интеграл:

$$I(\alpha) = \int \left(\alpha x \psi^* + \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \left(\alpha x \psi + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) d^3x, \quad (8.7)$$

где α — некоторая произвольная вещественная величина, не зависящая от x . Последнее выражение можно представить в виде:

$$I(\alpha) = A\alpha^2 - B\alpha + C, \quad (8.7a)$$

где

$$\begin{aligned} A &= \int \psi^* x^2 \psi d^3x = \langle x^2 \rangle > 0, \\ B &= - \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi + x \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) d^3x = \\ &= - \int x \frac{\partial \psi^* \psi}{\partial x} d^3x = \int \psi^* \psi d^3x = 1, \\ C &= \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} d^3x = \frac{1}{\hbar^2} \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi d^3x = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{\hbar^2} > 0. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Так как подынтегральное выражение в (8.7) — существенно положительная величина, то

$$I(\alpha) \geq 0. \quad (8.9)$$

Условие (8.9) накладывает определенное ограничение на коэффициенты A , B и C . В самом деле, это соотношение будет иметь место для любых вещественных значений α , если оно выполняется при $\alpha = \alpha_0$, отвечающем минимуму функции $I(\alpha)$. Значение α_0 может быть найдено из условия:

$$I'(\alpha_0) = 2A\alpha_0 - B = 0, \text{ т. е. } \alpha_0 = \frac{B}{2A},$$

а

$$I''(\alpha) = 2A > 0.$$

Поэтому минимальное значение $I(\alpha)$ будет равно:

$$I_{\text{мин.}} = I(\alpha_0) = -\frac{B^2}{4A} + C \geq 0.$$

Отсюда следует, что неравенство (8.9) будет иметь место для любых вещественных значений α , если выполняется условие:

$$B^2 \leq 4AC. \quad (8.10)$$

Подставляя сюда значения для A , B и C из (8.8) и принимая во внимание (8.6), находим соотношение между $\langle(\Delta p_x)^2\rangle$ и $\langle(\Delta x)^2\rangle$:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle \langle(\Delta p_x)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (8.11)$$

Это неравенство и представляет собой строгую формулировку соотношения неопределенности.

Если учесть, что $p_x x - x p_x = -i\hbar$ [см. (7.7)], то последнее соотношение можно записать в виде:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle \langle(\Delta p_x)^2\rangle \geq \frac{1}{4} \langle(p_x x - x p_x)^2\rangle. \quad (8.12)$$

Обобщая последний результат, мы можем вообще сказать, что если два оператора M_1 и M_2 не коммутируют друг с другом, то для них всегда имеет место соотношение неопределенности:

$$\langle(\Delta M_1)^2\rangle \langle(\Delta M_2)^2\rangle \geq \frac{1}{4} \langle(M_1 M_2 - M_2 M_1)^2\rangle, \quad (8.13)$$

где

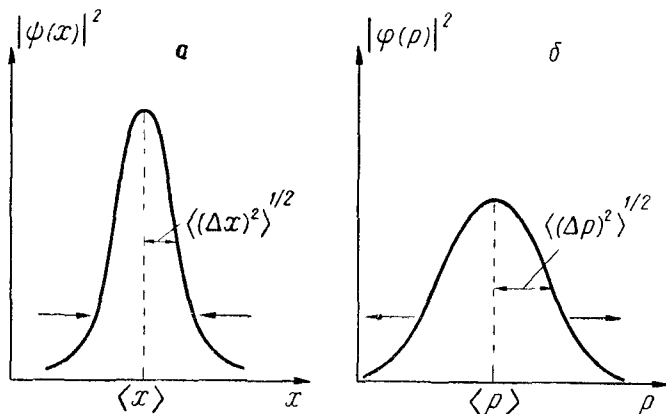
$$\langle(\Delta M_i)^2\rangle = \int \psi^* (M_i - \langle M_i \rangle)^2 \psi d^3x, \quad (i = 1, 2). \quad (8.14)$$

Как мы уже указывали, соотношение неопределенности является следствием корпускулярно-волнового дуализма, лежащего в основе квантовой механики, и никоим образом не связано с субъективной стороной опыта, т. е. с наблюдением. Соотношение неопределенности является объективным, т. е. независимым от внешних условий следствием теории, и эксперименты могут только подтвердить те выводы, которые из него следуют.

Смысл соотношения неопределенности заключается в том, что распределения плотности по переменным, которым соответствуют некоммутирующие операторы, принципиально не могут одновременно иметь вид δ -функции (см. фиг. 8.1). Более того, чем ближе к δ -функции распределение вероятности по одной переменной, тем более размытым становится распределение по другой. В пределе, когда, например, распределение по x , т. е. $|\psi(x)|^2$, примет вид

δ -функции [$\langle(\Delta x)^2\rangle=0$], по импульсу p_x оно станет таким, что для всех значений p_x величина $|\varphi(p_x)|^2$ будет постоянной, т. е. $\langle(\Delta p_x)^2\rangle=\infty$.

Условие коммутативности двух операторов является необходимым условием того, чтобы соответствующие им физические переменные могли быть точно вычислены одновременно.



Фиг. 8.1. Распределение плотности вероятности в координатном (а) и импульсном (б) пространствах:

$$[\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle]^{1/2} = \frac{\hbar}{2}.$$

Если распределение в координатном пространстве (а) сужается, то распределение в импульсном пространстве (б) расплывается.

б. Классические и квантовые скобки Пуассона

Как известно, состояние системы в классической механике определяется так называемыми динамическими переменными. Величины, фигурирующие в классической механике в канонической (гамильтоновой) форме, зависят, как правило, от координат x_i , импульса p_i и времени t , т. е.

$$f = f(p_i, x_i, t). \quad (8.15)$$

Например, в одномерной стационарной задаче функция Гамильтона зависит лишь от x и p_x :

$$H = \frac{p_x^2}{2m_0} + V(x). \quad (8.16)$$

Отсюда с помощью канонических уравнений (уравнений Гамильтона) находим:

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{p_x}{m_0} \quad \text{и} \quad \dot{p}_x = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad (8.17)$$

или

$$m_0 \ddot{x} = - \frac{\partial V(x)}{\partial x}.$$

При наличии n степеней свободы ($i = 1, 2, \dots, n$) уравнения (8.17) принимают вид:

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = - \frac{\partial H}{\partial x_i}. \quad (8.17a)$$

Отсюда изменение величины f [см. (8.15)] со временем определяется выражением:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \dot{x}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right).$$

Учитывая далее канонические уравнения (8.17a), будем иметь:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + [H, f], \quad (8.18)$$

где выражение:

$$[H, f] = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} - \frac{\partial H}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right) \quad (8.19)$$

получило название *классических скобок Пуассона*.

Если f не зависит явно от t , то $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ и поэтому ее изменение будет полностью определяться скобками Пуассона:

$$\frac{df}{dt} = [H, f], \quad (8.20)$$

а при обращении последних в нуль ($[H, f] = 0$) величина f не будет зависеть от времени, т. е. будет сохраняться:

$$f = \text{const.}$$

Например, если энергия явно от времени не зависит, то $\partial H / \partial t = 0$ и в силу очевидного равенства $[H, H] = 0$ мы найдем, что функция Гамильтона (т. е. в данном случае энергия) будет величиной постоянной ($H = \text{const}$). Заметим также, что, подставляя в (8.20) вместо f координату x_i , а затем p_i , находим равенства (8.17a), т. е. канонические уравнения Гамильтона.

Произведем обобщение классических скобок Пуассона, позволяющих найти изменение во времени любой динамической переменной, на квантовый случай.

Прежде всего заметим, что в квантовой механике физический смысл имеют, как мы указали в предыдущем параграфе, только средние значения операторов (координаты, импульса и т. д.), изменение со временем которых мы и должны исследовать.

В общем случае среднее значение произвольного оператора f дается в квантовой механике формулой (7.12), причем время t входит в нее как параметр. Учитывая эту формулу, найдем полную производную от $\langle f \rangle$ по времени:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle f \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \int \psi^*(t) f \psi(t) d^3x = \int \psi^*(t) \frac{\partial f}{\partial t} \psi(t) d^3x + \\ &+ \int \frac{\partial \psi^*(t)}{\partial t} f \psi(t) d^3x + \int \psi^*(t) f \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} d^3x. \end{aligned} \quad (8.21)$$

Подставляя сюда вместо $\frac{\partial \psi^*(t)}{\partial t}$ и $\frac{\partial \psi(t)}{\partial t}$ соответственно выражения $(\frac{i}{\hbar} H \psi^*)$ и $(-\frac{i}{\hbar} H \psi)$, приводим (8.21) к виду:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle f \rangle}{dt} &= \int \psi^*(t) \frac{\partial f}{\partial t} \psi(t) d^3x + \\ &+ \frac{i}{\hbar} \int [(H \psi^*(t)) (f \psi(t)) - \psi^*(t) f (H \psi(t))] d^3x, \end{aligned} \quad (8.22)$$

где

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V.$$

Пользуясь теперь теоремой о перебросе производной [см. формулу (7.17)] и принимая во внимание, что потенциальная энергия V является обычной функцией, легко получаем:

$$\int (H \psi^*(t)) (f \psi(t)) d^3x = \int \psi^*(t) H f \psi(t) d^3x.$$

Вследствие этого изменение $\langle f \rangle$ со временем будет определяться выражением:

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \int \psi^*(t) (H f - f H) \psi(t) d^3x = \left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle + \langle \{H, f\} \rangle. \quad (8.23)$$

Выражение:

$$\{H, f\} = \frac{i}{\hbar} (H f - f H) \quad (8.24)$$

представляет собой обобщение классических скобок Пуассона (8.19) на квантовый случай и поэтому носит название *квантовых скобок Пуассона*.

Очевидно, в том случае, когда $\left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle = 0$ (как правило оператор f явно не содержит времени), уравнение (8.23) принимает вид:

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \langle \{H, f\} \rangle = \left\langle \frac{d}{dt} f \right\rangle \quad (8.25)$$

Отсюда следует, что изменение $\langle f \rangle$ со временем в этом случае полностью определяется квантовыми скобками Пуассона. Если к тому

же оператор \hat{f} коммутирует с оператором Гамильтона H , то соответствующая оператору \hat{f} физическая величина $\langle f \rangle$, как это видно из (8.25), будет сохраняться.

С помощью (8.25) легко доказать, что энергия частицы, движущейся в потенциальном поле $V(\mathbf{r})$, не зависящем от времени, будет сохраняться. В самом деле, в этом случае выражение $\{H, H\} = \frac{i}{\hbar} (H\dot{H} - \dot{H}H)$ обращается в нуль, и поэтому на основании (8.25) имеем:

$$\langle H \rangle = \text{const.} \quad (8.26)$$

С другой стороны, согласно стационарному уравнению Шредингера $H\psi_n = E_n\psi_n$, и поэтому когда $\psi = \psi(t)$ [см. (7.20)]:

$$\langle H \rangle = \int \psi^* H \psi d^3x = \sum_n |C_n|^2 E_n = E,$$

т. е. (8.26) представляет собой не что иное, как закон сохранения энергии ($E = \text{const}$) для частицы, движущейся в силовом поле, не зависящем от времени.

в. Теоремы Эренфеста

Найдем квантовый аналог классических уравнений движения (8.17); для этого используем квантовые скобки Пуассона. Замечая, что x и p_x не содержат времени явно, воспользуемся для определения производных соотношением (8.25), полагая в нем соответственно $\hat{f} = x$ и $\hat{f} = p_x$. В случае $\hat{f} = x$ находим:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle \{H, x\} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle Hx - xH \rangle, \quad (8.27)$$

где

$$H = \frac{p_x^2}{2m_0} + V(x). \quad (8.28)$$

Учитывая при этом коммутативность x и $V(x)$, можно привести (8.27) к виду:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{2m_0\hbar} \langle p_x^2 x - x p_x^2 \rangle. \quad (8.29)$$

Добавляя в правую часть этого равенства величину $(p_x x p_x - p_x x p_x)$, будем иметь:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{2m_0\hbar} \langle p_x (p_x x - x p_x) + (p_x x - x p_x) p_x \rangle. \quad (8.30)$$

Принимая далее во внимание формулу (7.7), находим:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m_0}. \quad (8.31)$$

Чтобы определить изменение импульса со временем, мы должны в формулу (8.25) вместо оператора \hat{f} подставить оператор импульса p_x . Тогда, замечая, что $p_x p_x^2 - p_x^2 p_x = 0$, для $\langle \hat{p}_x \rangle$ находим:

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \langle \{H, p_x\} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle V p_x - p_x V \rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle; \quad (8.32)$$

отсюда, используя (8.31), получаем:

$$m_0 \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = \langle F(x) \rangle. \quad (8.33)$$

Уравнения (8.31) — (8.33) представляют собой теоремы Эренфеста, согласно которым для обобщения основных уравнений классической механики на квантовый случай мы должны в соответствующие классические соотношения подставить средние значения операторов.

г. Переход от квантовых уравнений движения к классическим

Сравним классические уравнения движения:

$$m_0 \ddot{x} = F(x) \quad (8.34)$$

с соответствующей квантовой формой (8.33).

Как было уже отмечено, роль классической координаты в квантовой теории играет величина $\langle x \rangle$. Поэтому мы могли бы считать, что квантовое уравнение совпадает с классическим, если бы вместо (8.33) имели:

$$m_0 \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = F(\langle x \rangle), \quad (8.35)$$

т. е. если бы в классическое соотношение между силой и координатой было подставлено вместо x его среднее значение $\langle x \rangle$. Однако, согласно теореме Эренфеста в уравнения движения в квантовом случае входит среднее значение самой силы, т. е. $\langle F(x) \rangle$. Поэтому, чтобы перейти от квантовых уравнений движения к классическим, прежде всего следует установить связь между $\langle F(x) \rangle$ и $F(\langle x \rangle)$.

Представим для этого оператор силы $F(x)$ в виде:

$$F(x) = F(\langle x \rangle + \Delta x), \quad (8.36)$$

где $\Delta x = x - \langle x \rangle$, и разложим $F(x)$ в ряд Тейлора вблизи точки $x = \langle x \rangle$. Тогда получаем:

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + (\Delta x) F'(\langle x \rangle) + \frac{(\Delta x)^2}{2} F''(\langle x \rangle) + \dots \quad (8.37)$$

Производя усреднение этого выражения по формуле (7.12) и принимая во внимание, что $\langle \Delta x \rangle = \langle x - \langle x \rangle \rangle = 0$, получаем:

$$\langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle) + \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{2} F''(\langle x \rangle) + \dots \quad (8.38)$$

Поэтому квантовые уравнения движения (8.33) принимают вид:

$$m_0 \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = F(\langle x \rangle) + \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{2} F''(\langle x \rangle). \quad (8.39)$$

Здесь выражение $\frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{2} F''(\langle x \rangle)$ является квантовой поправкой к классическому уравнению Ньютона. Очевидно, критерием перехода квантовых уравнений движения в классические будет неравенство:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \ll 2 \left| \frac{F(\langle x \rangle)}{F''(\langle x \rangle)} \right|. \quad (8.40)$$

Однако следует заметить, что выполнение этого условия еще не означает возможность применимости всех классических понятий для описания движения микрочастицы. В самом деле, в квантовой механике среднее значение кинетической энергии $\langle T \rangle$ определяется выражением:

$$\langle T(p_x) \rangle = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m_0}, \quad (8.41)$$

в то время как классическим аналогом кинетической энергии следует считать величину:

$$T(\langle p_x \rangle) = \frac{\langle p_x \rangle^2}{2m_0}. \quad (8.42)$$

Выразим теперь квантовое определение кинетической энергии $\langle T(p_x) \rangle$ через ее классический аналог $T(\langle p_x \rangle)$. Для этого воспользуемся соотношением:

$$T(p_x) = T(\langle p_x \rangle + \Delta p_x) = \frac{(\langle p_x \rangle + \Delta p_x)^2}{2m_0}, \quad (8.43)$$

где $\Delta p_x = p_x - \langle p_x \rangle$. Раскрывая в последнем равенстве скобки и принимая во внимание, что при усреднении:

$$\langle \Delta p_x \rangle = \langle (p_x - \langle p_x \rangle) \rangle = 0$$

будем иметь:

$$\langle T(p_x) \rangle = T(\langle p_x \rangle) + \frac{1}{2m_0} \langle (\Delta p_x)^2 \rangle. \quad (8.44)$$

Отсюда имеем условие перехода от квантового выражения кинетической энергии (8.41) к классическому:

$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle \ll \langle p_x \rangle^2 = 2m_0 T(\langle p_x \rangle). \quad (8.45)$$

Умножая равенство (8.45) на (8.40), находим общее условие возможности использования классического приближения в микромире:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \ll 4m_0 T \langle \langle p_x \rangle \rangle \left| \frac{F \langle \langle x \rangle \rangle}{F' \langle \langle x \rangle \rangle} \right|. \quad (8.46)$$

Если к тому же учесть еще соотношение неопределенности:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4},$$

то последнее условие принимает вид:

$$m_0 T \langle \langle p_x \rangle \rangle \left| \frac{F \langle \langle x \rangle \rangle}{F' \langle \langle x \rangle \rangle} \right| \geq \frac{\hbar^2}{16}. \quad (8.47)$$

Применим это условие к атому водорода, когда:

$$V = -\frac{e_0^2}{r}, \quad T = -\frac{1}{2} V = \frac{e_0^2}{2r}, \\ F = -\frac{e_0^2}{r^2}, \quad F' = -\frac{6e_0^2}{r^3}.$$

Подставляя последние равенства в (8.47), получаем неравенство:

$$r \geq \frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2}. \quad (8.48)$$

Отсюда, замечая, что $\frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2} = a_0$, где a_0 — радиус первой боровской орбиты, и $r = n^2 a_0$, вместо (8.48) находим:

$$n \geq \sqrt{\frac{3}{4}}, \quad (8.49)$$

т. е. в области больших квантовых чисел результаты квантовой теории должны совпадать с классическими.

Задача 8.1¹⁾. Определить в p -представлении волновую функцию свободно движущегося электрона. Записать условие нормировки в p -представлении.

Найти средние значения операторов импульса и энергии частицы. Решить задачу в одномерном случае, обобщить на трехмерный случай.

Решение. Выберем ось x по направлению движения электрона. Волновая функция свободного электрона в x -представлении, нормированная на $\delta(p'_0 - p_0)$, будет иметь вид [см. (4.81)]:

$$\psi(p_0, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i \frac{p_0}{\hbar} x}.$$

Используя при переходе к p -представлению формулу (7.10):

¹⁾ Задачи, помещенные в настоящем параграфе, относятся также к § 6 и 7.

$$\varphi(p_0, p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(p_0, x') e^{-i \frac{p}{\hbar} x'} dx', \quad (8.50)$$

получаем:

$$\varphi(p_0, p) = \delta(p - p_0).$$

Условие нормировки как в x -, так и в p -представлениях будет иметь одинаковый вид:

$$\begin{aligned} \int \psi^*(p'_0, x) \psi(p_0, x) dx &= \\ = \int \varphi^*(p'_0, p) \varphi(p_0, p) dp &= \delta(p'_0 - p_0). \end{aligned}$$

Среднее значение операторов следует вычислять по формулам:

$$\begin{aligned} \langle M \rangle &= \\ = \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} dp'_0 \int \psi^*(p'_0, x) M(x) \psi(p_0, x) dx &= \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} dp'_0 \int \varphi^*(p'_0, p) M(p) \varphi(p_0, p) dp. \end{aligned}$$

Отсюда находим:

$$\langle p \rangle = p_0, \quad \langle E \rangle = \frac{p_0^2}{2m_0}.$$

В трехмерном случае будем иметь:

$$\varphi(p_0, p) = \delta(p - p_0).$$

Задача 8.2. Определить вероятность различных значений импульса частицы в основном состоянии, находящейся в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Проверить нормировку в p -представлении.

Решение. С помощью формулы (8.50) и значения волновой функции (см. § 4)

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi}{l} x$$

имеем:

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi l \hbar}} \int_0^l \sin \frac{\pi}{l} x e^{-i \frac{p}{\hbar} x} dx.$$

Вычисляя последний интеграл и определяя квадрат его модуля, получаем искомое распределение вероятности:

$$|\varphi(p)|^2 = \frac{4\pi l \hbar^3}{(\pi^2 \hbar^2 - p^2 l^2)^2} \cos^2 \frac{pl}{2\hbar},$$

удовлетворяющее условию нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(p)|^2 dp = 1.$$

При вычислении последнего интеграла можно воспользоваться соотношением:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos ap \, dp}{b^2 - p^2} = \pi \frac{\sin |a| b}{b},$$

которое следует затем продифференцировать по параметру b .

Задача 8.3. Исследовать движение заряженной частицы в постоянном и однородном электрическом поле \mathcal{E} .

Решение. Эту задачу проще всего решать в пространстве импульсов. Учитывая, что в пространстве импульсов потенциальную энергию согласно (7.11) можно представить в виде:

$$V = -e\mathcal{E}x = -Fx = -i\hbar F \frac{\partial}{\partial p},$$

соответствующее уравнение Шредингера, записанное также в пространстве импульсов, будет иметь вид:

$$\left(E - \frac{1}{2m_0} p^2 + i\hbar F \frac{\partial}{\partial p} \right) \varphi(E, p) = 0.$$

Решение последнего уравнения будет:

$$\varphi(E, p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}} e^{i\hbar F \left(Ep - \frac{p^3}{6m_0} \right)};$$

учитывая непрерывность спектра, нормировочный коэффициент был найден из условия нормировки на δ -функцию:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(E', p) \varphi(E, p) dp = \delta(E' - E).$$

Волновую функцию в обычном пространстве можно определить с помощью (7.9):

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{4m_0^3}{\hbar^4 F} \right)^{1/6} \Phi(-\xi),$$

где

$$\Phi(-\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{u^3}{3} - u\xi\right) du$$

— функция Эйри, пропорциональная функциям Бесселя порядка $1/3$ (см. § 5), а $\xi = \left(x + \frac{E}{F}\right) \left(\frac{2m_0 F}{\hbar^2}\right)^{1/3}$. Учитывая асимптотическое поведение функции Эйри:

$$\Phi(-\xi) \approx \begin{cases} \frac{1}{2|\xi|^{1/4}} e^{-2/3|\xi|^{3/2}} & \text{при } \xi < 0, \\ \frac{1}{(\xi)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & \text{при } \xi > 0, \end{cases}$$

легко показать, что область больших отрицательных значений x , когда $-Fx > E$, представляет собой потенциальный барьер, а область, где $E > -Fx$, — квазиклассична, так как:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} S &= \frac{1}{\hbar} \int p dx = \frac{1}{\hbar} \int \sqrt{2m_0(E + Fx)} dx + \text{const} = \\ &= \frac{2}{3} \xi^{3/2} + \text{const}. \end{aligned}$$

Задача 8.4. Электрон движется в постоянном и однородном магнитном поле. Найти производную по времени от среднего значения координаты и

импульса электрона, т. е. обобщить теорему Эренфеста на случай движения в магнитном поле.

Решение е. Гамильтониан электрона в магнитном поле согласно (5.9а) равен:

$$H = \frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2.$$

Выбрав направление однородного магнитного поля по оси z ($H_z \neq 0$, $H_x = H_y = 0$), можно задать его вектор-потенциалом:

$$A_x = A_z = 0, \quad A_y = xH_z.$$

Чтобы определить изменение координаты электрона со временем, воспользуемся квантовым уравнением движения:

$$\mathbf{v} = \frac{i}{\hbar} \{ H\mathbf{r} - \mathbf{r}H \}.$$

Подставляя сюда H , легко находим:

$$\mathbf{v} = \frac{1}{m_0} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) = \frac{\mathbf{P}}{m_0}. \quad (8.51)$$

Для производной от проекции оператора импульса на ось x получаем:

$$\frac{dP_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} \{ HP_x - P_x H \} = \frac{e}{m_0 c} \left(p_y - \frac{e}{c} A_y \right) H_z = \frac{e}{c} v_y H_z.$$

Аналогично можно показать, что

$$\frac{dP_y}{dt} = -\frac{e}{c} v_x H_z, \quad \frac{dP_z}{dt} = 0.$$

Обобщая последние соотношения, имеем:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}H]. \quad (8.52)$$

Соотношения (8.51) и (8.52) и представляют собой искомый результат.

Задача 8.5. Известно, что поведение электрона в металле ($x < 0$) с достаточной степенью точности можно описывать следующей потенциальной энергией (см. § 6):

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0 > 0, & x > 0. \end{cases}$$

Определить коэффициент отражения электронов, находящихся внутри металла ($x < 0$), от его поверхности в двух случаях: а) при $E < V_0$ и б) при $E > V_0$. Показать, что, хотя в случае «а» электроны и попадают в область $x > 0$, в конечном счете они все же возвращаются обратно в металл. Построить график изменения потенциальной энергии, а также волновой функции движущихся электронов.

О т в е т.

а) При $E < V_0$, $R = 1$, хотя $\psi(x > 0) \neq 0$.

б) При $E > V_0$, $R = \frac{V_0^2}{(\sqrt{E - V_0} + \sqrt{E})^2}$.

Указание. При выборе решения при $x > 0$ (внешнее пространство) в случае «а» следует оставить только экспоненциально убывающее решение, а в случае «б» — только решение, соответствующее волне, движущейся по направлению оси x .

Задача 8.6. Найти коэффициенты отражения R и прохождения D падающих частиц энергии E , когда потенциальная энергия имеет вид:

$$V(x) = \frac{V_0}{\operatorname{ch}^2 \frac{x}{a}},$$

где V_0 и a — положительные константы.

Рассмотреть случаи отражения от потенциального барьера ($E < V_0$) и надбарьерного прохождения ($E > V_0$), а также предельный случай

$$E = V_0.$$

Решение. Переходя в уравнении Шредингера к новому аргументу

$$z = -\operatorname{sh}^2 \frac{x}{a}$$

и функции

$$u = \left(\operatorname{ch} \frac{x}{a} \right)^{2\alpha} \psi,$$

где

$$\alpha = \frac{1}{4} \left(\sqrt{1 - \frac{8m_0 V_0 a^2}{\hbar^2}} - 1 \right),$$

находим:

$$z(1-z) \frac{d^2 u}{dz^2} + \left[\frac{1}{2} - (1-2\alpha)z \right] \frac{du}{dz} - \left(\alpha^2 + \frac{k^2 a^2}{4} \right) u = 0,$$

где

$$k^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}, \quad k_0^2 = \frac{2m_0 V_0}{\hbar^2}.$$

Общее решение этого уравнения имеет вид:

$$u = C_1 F \left(-\alpha + \frac{ika}{2}, -\alpha - \frac{ika}{2}, \frac{1}{2}; z \right) + \\ + C_2 \frac{x}{|x|} V^{-z} F \left(-\alpha + \frac{ika}{2} + \frac{1}{2}, -\alpha - \frac{ika}{2} + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; z \right).$$

Здесь гипергеометрическая функция $F(\beta, \gamma, \delta; z)$ определяется рядом:

$$F(\beta, \gamma, \delta; z) = 1 + \frac{\beta\gamma}{1 \cdot \delta} z + \frac{\beta(\beta+1)\gamma(\gamma+1)}{1 \cdot 2 \cdot \delta(\delta+1)} z^2 + \dots \\ \dots + \frac{\beta(\beta+1) \dots (\beta+n) \cdot \gamma(\gamma+1) \dots (\gamma+n)}{1 \cdot 2 \dots (n+1) \delta(\delta+1) \dots (\delta+n)} z^{n+1} + \dots = \\ = \frac{\Gamma(\delta)\Gamma(\gamma-\beta)}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\delta-\beta)} (-z)^\beta \cdot F \left(\beta, \beta+1-\delta, \beta+1-\gamma; \frac{1}{z} \right) + \\ + \frac{\Gamma(\delta)\Gamma(\beta-\gamma)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\delta-\gamma)} (-z)^\gamma F \left(\gamma, \gamma+1-\delta, \gamma+1-\beta; \frac{1}{z} \right), \text{ а знаковая функция } \\ \frac{x}{|x|} \text{ сшивает решения в точке } x=0.$$

В асимптотическом приближении ($x \rightarrow -\infty$ и $x \rightarrow +\infty$) находим:

$$\psi(x \rightarrow -\infty) \sim (-1)^{2\alpha} \left\{ (C_1 A_1 - C_2 A_2) \left(-\frac{1}{2}\right)^{-ika} e^{ikx} + \right. \\ \left. + (C_1 B_1 - C_2 B_2) \left(-\frac{1}{2}\right)^{ika} e^{-ikx} \right\},$$

$$\psi(x \rightarrow +\infty) \sim \left\{ (C_1 A_1 + C_2 A_2) \left(\frac{1}{2}\right)^{-ika} e^{-ikx} + (C_1 B_1 + C_2 B_2) \left(\frac{1}{2}\right)^{ika} e^{ikx} \right\},$$

где

$$A_1 = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma(-ika)}{\Gamma\left(-\alpha - \frac{ika}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \alpha - \frac{ika}{2}\right)}, \quad A_2 = \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma(-ika)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \alpha - \frac{ika}{2}\right) \Gamma\left(1 + \alpha - \frac{ika}{2}\right)}, \\ B_1 = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma(ika)}{\Gamma\left(-\alpha + \frac{ika}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \alpha + \frac{ika}{2}\right)}, \quad B_2 = \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma(ika)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \alpha + \frac{ika}{2}\right) \Gamma\left(1 + \alpha + \frac{ika}{2}\right)}.$$

Требую далее отсутствие отраженной из $z = \infty$ волны ($C_1 A_1 + C_2 A_2 = 0$) для коэффициента прохождения, получаем следующее выражение:

$$D = \frac{|j_{\text{прош.}}|}{|j_{\text{пад.}}|} = \frac{|C_1 B_1 + C_2 B_2|^2}{|C_1 A_1 - C_2 A_2|^2} = \frac{\text{sh}^2 \pi ka}{\text{sh}^2 \pi ka + \text{ch}^2(\pi \sqrt{k_0^2 a^2 - 1/4})}. \quad (8.53)$$

Ограничиваясь в (8.53) первым членом разложения, получаем ($k_0 a \gg 1$):

а) при $E < V_0$ (потенциальный барьер)

$$D = e^{-\frac{2\pi a \sqrt{2m_0}}{\hbar} (\sqrt{V_0} - \sqrt{E})} \ll 1 \quad \text{и} \quad R = 1 - D \approx 1, \quad (8.54)$$

б) при $E > V_0$ (надбарьерное прохождение)

$$R = e^{-\frac{2\pi a \sqrt{2m_0}}{\hbar} (\sqrt{E} - \sqrt{V_0})} \ll 1 \quad \text{и} \quad D = 1 - R \approx 1, \quad (8.55)$$

в) при $E = V_0$

$$D = R = \frac{1}{2}. \quad (8.56)$$

Отсюда видно, что в случае потенциального барьера основная часть волны будет отражаться, а в условиях надбарьерного прохождения, наоборот, основная часть волны будет проходить.

Заметим, что формула (8.54) может быть получена из приближенной формулы (6.24), найденной методом ВКБ.

Выражение же (8.55) эквивалентно формуле:

$$R = e^{-\left| \frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_0 (E - V(x))} dx \right|}, \quad (8.57)$$

вывод которой требует обобщения метода ВКБ для гладко меняющегося потенциала на случай мнимых корней (x_1 и x_2) уравнения $E - V(x) = 0$. Формула (8.56) может быть получена с помощью метода ВКБ, если в особой точке решение экстраполировать функциями Бесселя с индексом $1/4$.

Эта задача поучительна в том отношении, что позволяет хотя бы на данном конкретном потенциале оценить точность обобщенного метода ВКБ в применении к гладкому потенциалу.

§ 9. ЭЛЕМЕНТАРНАЯ ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

а. Спонтанные и вынужденные переходы

Согласно классической электродинамике, источником излучения света может быть, например, ускоренно движущийся заряд, причем количество излучаемой энергии в единицу времени определяется известной формулой¹⁾:

$$W_{\text{кл.}} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \ddot{\mathbf{r}}^2, \quad (9.1)$$

где $\ddot{\mathbf{r}} = \boldsymbol{\omega}$ — ускорение частицы.

Если источником излучения является одномерный гармонический осциллятор:

$$x = a \cos \omega t, \quad (9.2)$$

то частота излучения будет совпадать с механической частотой колебания осциллятора, а интенсивность излучения будет пропорциональна a^2 .

В том случае, когда движение заряда происходит по более сложному периодическому закону $x = f(t)$ с периодом $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$, функцию $f(t)$ можно разложить в ряд Фурье:

$$x = \sum_k a_k \cos \omega k t, \quad (9.2a)$$

и рассматривать излучение так, как будто оно порождается системой осцилляторов с частотами $\omega_k = k\omega$, где $k = 1, 2, 3, \dots$. При этом излучаться будет как основной тон ($k = 1$), так и гармоники $k\omega$, причем интенсивность излучения соответствующей гармоники будет пропорциональна a_k^2 .

Таким образом, согласно классической теории, излучение системы полностью определяется ее механическими свойствами. А именно, частота излучения оказывается либо равной, либо кратной механической частоте колебаний системы, а интенсивность соответствующей гармоники пропорциональна квадрату амплитуды.

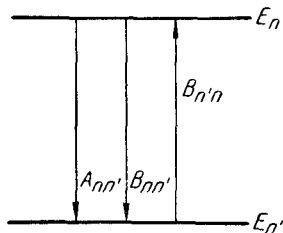
В квантовой механике к вопросу об излучении следует подходить несколько иначе, поскольку само излучение по квантовой

¹⁾ Чтобы отличить квантовомеханические средние [см. (7.12a)] от величин, усредненных по времени, последние будем писать в этом параграфе с чертой. Квантовомеханические же средние будем по-прежнему обозначать угловыми скобками.

теории происходит только при переходе частицы (или системы) из одного квантового состояния в другое, энергетически более низкое состояние, или, как говорят, «сверху вниз».

Впервые квантовое рассмотрение проблемы излучения было предложено в 1917 г. Эйнштейном, который ввел коэффициенты A и B (называемые теперь *коэффициентами Эйнштейна*), характеризующие соответственно *спонтанные* (самопроизвольные) и *вынужденные* (происходящие под действием каких-либо внешних причин) переходы системы с одного энергетического уровня на другой, а также установил связь между этими коэффициентами.

Основные идеи квантовой теории излучения заключаются в следующем. Пусть один из электронов какой-либо атомной системы находится на возбужденном уровне n с энергией E_n . Тогда для такого электрона существует определенная вероятность $A_{nn'}$, отнесенная к единице времени, спонтанного перехода в более низкое энергетическое состояние n' с энергией $E_{n'}$. При этом происходит испускание фотона с энергией $\hbar\omega = E_n - E_{n'}$. Если число подобных возбужденных атомов равно N_n , то энергия излучения в единицу времени, обусловленная спонтанными переходами, может быть записана в виде:



Фиг. 9.1. Переходы сверху вниз (спонтанные и вынужденные) и снизу вверх (вынужденные).

$$W_{\text{исп.}}^{\text{спонт.}} = N_n A_{nn'} \hbar\omega. \quad (9.3)$$

Если же атомы подвергнуть воздействию со стороны внешнего электромагнитного излучения, то последнее будет в свою очередь вызывать так называемые вынужденные переходы как сверху вниз, так и снизу вверх, причем переходы снизу вверх будут происходить, конечно, с поглощением фотонов.

Обозначим, следуя Эйнштейну, вероятности вынужденного перехода с уровня n на n' через $B_{nn'}$, а с уровня n' на n через $B_{n'n}$. Тогда, считая, что число вынужденных переходов должно быть пропорционально еще спектральной плотности ρ_ω этого излучения, находим соответственно для энергии излучения и поглощения, обусловленной этими вынужденными переходами:

$$W_{\text{исп.}}^{\text{вынужд.}} = N_n B_{nn'} \rho_\omega \hbar\omega, \quad (9.4)$$

$$W_{\text{погл.}}^{\text{вынужд.}} = N_{n'} B_{n'n} \rho_\omega \hbar\omega, \quad (9.5)$$

где $N_{n'}$ — число атомов в состоянии n' .

Рассмотрим случай, когда число переходов сверху вниз и обратно будет одинаковым (см. фиг. 9.1):

$$N_n A_{nn'} + N_n \rho_\omega B_{nn'} = N_{n'} \rho_\omega B_{n'n}, \quad (9.6)$$

т. е. когда должно наступить состояние термодинамического равновесия между нагретыми атомами и излучаемым ими светом (черное излучение), обратным воздействующим на эти атомы; при этом атомы и излучаемый свет образуют в совокупности замкнутую систему.

Учитывая, что распределение электронов по энергиям задается распределением Максвелла:

$$N_n = Ce^{-E_n/kT}, \quad N_{n'} = Ce^{-E_{n'}/kT},$$

получаем:

$$A_{nn'}e^{-E_n/kT} + \rho_\omega B_{nn'}e^{-E_n/kT} = \rho_\omega B_{n'n}e^{-E_{n'}/kT}. \quad (9.7)$$

Отсюда, сокращая на множитель $e^{-E_n/kT}$ и принимая во внимание, что $E_n - E_{n'} = \hbar\omega$, будем иметь:

$$\rho_\omega = \frac{\frac{A_{nn'}}{B_{nn'}}}{\frac{B_{n'n}}{B_{nn'}} e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (9.8)$$

Поскольку спектральное распределение черного излучения совершенно не зависит от конкретного строения атомов или молекул, можно сопоставить (9.8) с формулой Планка [см. (1.42)]:

$$\rho_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (9.9)$$

Тогда из сравнения (9.8) и (9.9) находим:

$$B_{nn'} = B_{n'n} = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} A_{nn'}. \quad (9.10)$$

Отсюда видно, что вероятности вынужденных переходов как сверху вниз, так и снизу вверх оказываются равными и пропорциональными коэффициенту спонтанного перехода $A_{nn'}$. Поэтому для описания излучения атомов или молекул нам достаточно определить лишь один из этих коэффициентов.

б. Определение вероятностей спонтанных и вынужденных переходов

Согласно квантовой механике, вынужденные переходы объясняются взаимодействием электронов атома с внешним электромагнитным излучением. Вопрос же о выяснении причин, которые заставляют электроны спонтанно переходить с возбужденных энергетических состояний на более низкие, в теории Шредингера остался фактически открытым.

Ответ был дан лишь после создания теории излучения, где был использован аппарат квантования электромагнитного поля (вторичное квантование). В общих чертах последняя теория сводится к следующему: электроны взаимодействуют не только с реально существующими фотонами, но и с так называемыми *виртуальными* (пока еще не появившимися) фотонами, или, как говорят, с *электромагнитным вакуумом* (более подробно об электромагнитном вакууме см. § 22). Это взаимодействие и обуславливает спонтанные переходы. Классическим аналогом взаимодействия электронов с полем виртуальных фотонов является действие на движущийся электрон силы лучистого трения Планка:

$$F_{\text{изл.}} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \ddot{x},$$

представляющей собой своеобразное самодействие на ускоренно движущийся электрон электромагнитного поля, создаваемого им же самим. При некоторых условиях это электромагнитное поле может отрываться от электрона в виде светового излучения. На языке квантовой электродинамики это означает переход фотонов из виртуального состояния в реальное.

Следуя квантовой электродинамике, можно найти точное выражение для коэффициентов A и B , а значит, полностью решить задачу об излучении¹⁾.

В настоящем же параграфе найдем коэффициент A с помощью соответствующих обобщений результатов классической теории излучения на квантовый случай. Следует подчеркнуть, что указанное обобщение приводит к такому же результату, что и строгий аппарат вторичного квантования.

Наш вывод будет основан на обобщении классического выражения для энергии излучения (9.1) (с помощью принципа соответствия) на квантовый случай. Для этого мы должны классическую величину r заменить квантовомеханической:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \psi^*(t) \mathbf{r} \psi(t) d^3x. \quad (9.11)$$

С другой стороны, следует учесть, что в соответствии с квантовой теорией энергия излучения в единицу времени равна:

$$W_{\text{кв.}} = g_n g_{n'} \hbar \omega A_{nn'}, \quad (9.12)$$

где коэффициенты g_n и $g_{n'}$ характеризуют наличие электронов в состояниях n и n' , так как, согласно принципу Паули, в одном квантовом состоянии не может быть двух электронов (более подробно см. § 24).

¹⁾ См. также § 30, где коэффициент A будет найден с помощью методов квантовой электродинамики.

Сопоставляя равенство (9.12) с (9.1) и учитывая (9.11), находим:

$$g_n g_{n'} \hbar \omega A_{nn'} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \langle \mathbf{r} \rangle^2. \quad (9.13)$$

Заметим, что в последней формуле мы имеем два усреднения: одно — квантовомеханическое, обозначаемое угловыми скобками, а другое — усреднение по времени, обозначаемое чертой.

Предположим теперь, что электрон имеет только два возможных состояния: с энергиями E_n и $E_{n'}$. Тогда волновая функция может быть записана в виде:

$$\psi(t) = C_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n + C_{n'} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n'} t} \psi_{n'}. \quad (9.14)$$

В соответствии с этим для среднего (по квантовомеханическим состояниям) значения радиус-вектора находим:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = |C_n|^2 \mathbf{r}_{nn} + |C_{n'}|^2 \mathbf{r}_{n'n'} + C_n^* C_{n'} e^{i\omega t} \mathbf{r}_{nn'} + C_n C_{n'}^* e^{-i\omega t} \mathbf{r}_{n'n}, \quad (9.15)$$

где

$$\omega = \omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}, \quad (9.15a)$$

а матричные элементы:

$$\mathbf{r}_{n'n} = \int \psi_{n'}^* \mathbf{r} \psi_n d^3x^1) \quad (9.16)$$

образуют некоторую бесконечную матрицу:

$$(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{00} & \mathbf{r}_{01} & \mathbf{r}_{02} & \dots \\ \mathbf{r}_{10} & \mathbf{r}_{11} & \mathbf{r}_{12} & \dots \\ \mathbf{r}_{20} & \mathbf{r}_{21} & \mathbf{r}_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (9.17)$$

которая, как видно из (9.16), при замене строк столбцами, а столбцов строками переходит в комплексно-сопряженную матрицу:

$$\mathbf{r}_{nn'}^* = \mathbf{r}_{n'n}.$$

Матрицы, удовлетворяющие этому условию, называются эрмитовыми, или самосопряженными. В квантовой механике рассматриваются только эрмитовы матрицы. Подчеркнем также, что матричные элементы (9.16) не зависят от времени, и поэтому после подстановки (9.15) в (9.13) будем иметь:

$$g_n g_{n'} \hbar \omega A_{nn'} = \frac{4e^2}{3c^3} \omega^4 |C_n|^2 |C_{n'}|^2 |\mathbf{r}_{n'n}|^2. \quad (9.18)$$

¹⁾ См. примечание на стр. 174.

Здесь мы приняли во внимание, что среднее по времени значение периодической функции обращается в нуль, так как

$$\overline{e^{\pm 2i\omega t}} = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} e^{\pm 2i\omega t} dt = 0.$$

При дальнейшем анализе формулы (9.18) нам придется ввести одно дополнительное предположение, строгое обоснование которого дается лишь в квантовой электродинамике. В самом деле, квантовая механика рассматривает стационарные процессы, и поэтому никаких недоразумений с трактовкой величины $|C_n|^2 = \text{const}$, как вероятности нахождения электрона на уровне n , не возникает.

Как же быть в случае излучения, когда коэффициенты C_n изменяются скачкообразно? На этот вопрос обычная квантовая механика ответа не дает. Поэтому мы будем исходить из простых физических соображений, которые получают строгое обоснование лишь в квантовой электродинамике (более подробно см. § 30).

Примечание.

В современной квантовой механике часто пользуются записью матричных элементов в форме, предложенной Дираком. Дирак воспользовался тем обстоятельством, что условие ортонормированности волновых функций:

$$\int \psi_{n'}^* \psi_n d^3x = \delta_{nn'}$$

напоминает собой условие ортонормированности для ортов J_s ($s = 1, 2, 3$) обычных декартовых координат:

$$(J_{s'}, J_s) = \delta_{ss'}$$

При таком подходе волновые функции ψ_n можно рассматривать как систему своеобразных ортов в обобщенном n -мерном пространстве с бесконечным числом степеней свободы. Дирак сопоставил им систему «кет-векторов», обозначаемых через $|n\rangle$. Кроме «кет-векторов», следует ввести еще «бра-векторы» $\langle n'|$, сопоставленные сопряженной волновой функции $\psi_{n'}^*$. Термины «бра» и «кет» (так сокращенно называют эти обобщенные векторы) происходят соответственно от первого и второго слога английского слова *bracket*, что означает *скобка*.

«Бра» и «кет», очевидно, связаны между собой простым соотношением:

$$\langle n'|^* = |n'\rangle.$$

Под скалярным произведением «бра» и «кет»-векторов будем понимать выражение:

$$\langle n'|n\rangle = \int \psi_{n'}^* \psi_n d^3x,$$

которое в данном случае представляет собой запись условия ортонормированности:

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{nn'}.$$

Матричный элемент может быть представлен в обозначениях Дирака в следующем виде:

$$r_{n'n} = \langle n'|r|n\rangle = \int \psi_{n'}^* r \psi_n d^3x.$$

Для сопряженного же значения мы будем иметь:

$$(r_{n'n})^* = \langle n | r | n' \rangle = r_{nn'}.$$

Подставим в формулу (9.18) начальные значения для коэффициентов C_n^0 , учитывая при этом, что, согласно принципу Паули, переход будет возможным только в том случае, когда в начальный момент времени квантовое состояние n будет занято, а квантовое состояние n' — свободно.

Полагая тогда:

$$g_n g_{n'} = |C_n|^2 |C_{n'}|^2 = |C_n^0|^2 (1 - |C_{n'}^0|^2), \quad (9.19)$$

находим, что при $C_n^0 = 1$ и $C_{n'}^0 = 0$ произведение $g_n g_{n'} = 1$, и поэтому:

$$A_{nn'} = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} |r_{n'n}|^2, \quad (9.20)$$

$$B_{nn'} = B_{n'n} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |r_{n'n}|^2, \quad (9.21)$$

$$W_{nn'} = \hbar \omega A_{nn'} = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^4}{c^3} |r_{n'n}|^2. \quad (9.22)$$

В последних формулах:

$$|r_{n'n}|^2 = |x_{n'n}|^2 + |y_{n'n}|^2 + |z_{n'n}|^2, \quad (9.23)$$

где

$$x_{n'n} = \int \psi_n^* x \psi_{n'} d^3x,$$

и т. д.

Таким образом, собственные значения энергии позволяют найти частоту, а собственные функции — интенсивность излучения. Следовательно, теория Шредингера позволяет полностью обобщить все основные классические характеристики излучения на квантовый случай.

Из последней формулы видно, что интенсивность излучения будет отличной от нуля только при таких переходах, для которых хотя бы один из матричных элементов $x_{nn'}$, $y_{nn'}$ или $z_{nn'}$ не обращается в нуль. Такие переходы в квантовой механике называются *разрешенными*.

Следует заметить, что во многих задачах квантовой механики достаточно ограничиться вычислением лишь матричных элементов, с помощью которых можно установить так называемые *правила отбора*, т. е. установить такие изменения квантовых чисел, при которых переход является разрешенным. Зная правила отбора, можно ответить на вопрос, какие частоты излучения возможны. На языке классической электродинамики правила отбора соответствуют нахождению различных гармоник, которые может излучать данная система. Если же при данном изменении квантового числа матричные элементы равны нулю, то излучение будет отсутствовать, а о переходах говорят, что они являются *запрещенными*.

Заметим, что термин *запрещенный переход* в данном случае относится к так называемым дипольным переходам, пропорциональным матричным элементам:

$$r_{n'n} = \int \psi_n^* \mathbf{r} \psi_n d^3x.$$

Однако наряду с дипольными возможны также квадрупольные переходы и переходы с более высокой мультиплетностью или магнитные переходы. Интенсивность последних оказывается во много раз меньше интенсивности разрешенных дипольных переходов.

Так, например, если интенсивность дипольного перехода пропорциональна:

$$W_{\text{дипольн.}} = \frac{2}{3} \frac{\dot{p}^2}{c^3} \sim \frac{\omega^4}{c^3} (ea)^2,$$

где a — размеры атома, то интенсивность квадрупольного излучения будет пропорциональна¹⁾:

$$W_{\text{квадр.}} \sim W_{\text{дипольн.}} \cdot \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2. \quad (9.24)$$

В частности для атома $a \sim 10^{-8}$ см, $\lambda \sim 10^5$ см, т. е. интенсивность квадрупольного излучения будет в 10^6 раз меньше интенсивности дипольного излучения. Тем не менее квадрупольное излучение в ряде явлений играет весьма большую роль.

В самом деле, если при некотором изменении квантового числа дипольный переход запрещен, то не исключено наличие пусть весьма слабого квадрупольного излучения, которое можно обнаружить с помощью весьма чувствительного спектрографа. Заметим, что дипольное излучение отсутствует в системе, состоящей из частиц, которые обладают одинаковым отношением заряда к массе. Действительно, электрический дипольный момент такой системы будет пропорционален координате центра тяжести $\mathbf{r}_{\text{ц.т.}}$ [$\mathbf{p} = e(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) = 2e\mathbf{r}_{\text{ц.т.}}$], и поэтому производная от него по времени обращается в нуль.

Это условие должно иметь место для гравитационного излучения, поскольку гравитационный заряд (точнее, гравитационная масса) пропорционален инертной массе m_0 . Поэтому, если гравитационное излучение вообще существует, то оно должно иметь лишь квадрупольный характер. Квадрупольное излучение имеет также большое значение в физике атомного ядра, поскольку заряженные частицы последнего (протоны) обладают одинаковым зарядом и массой²⁾.

¹⁾ На примере гармонического осциллятора этот вопрос будет более подробно рассмотрен в § 10 (см. задачу 10.4).

²⁾ Более подробно о магнитном и квадрупольном излучении см. А. А. Соколов, Введение в квантовую электродинамику, М., 1958, § 50, п. в.

Задача 9.1. Путем обобщения классической формы для квадрупольного излучения, т. е. с помощью принципа соответствия, найти вероятность квадрупольного излучения в квантовом случае.

Решение. В классическом случае интенсивность квадрупольного излучения определяется выражением:

$$W = \frac{1}{180c^5} \overline{(\ddot{D}_{ab})^2}, \quad (9.25)$$

где квадрупольный момент:

$$D_{ab} = e(3x_a x_b - r^2 \delta_{ab}) \quad (a, b = 1, 2, 3).$$

Чтобы соотношение (9.25) обобщить на квантовый случай, необходимо учесть, что, согласно квантовой теории, излучение происходит вследствие перехода системы из одного квантового состояния n в другое — n' . В результате повторения вычислений (9.13) — (9.18) классическое выражение для квадрупольного момента D_{ab} мы должны заменить матричным элементом:

$$(D_{n'n})_{ab} = \int \psi_{n'}^* D_{ab} \psi_n d^3x.$$

Далее, принимая во внимание формулу (9.3), связывающую интенсивность $W_{n'n}$ излучения с вероятностью $A_{n'n}$ излучения, получаем:

$$A_{nn'} = \frac{\omega_{nn'}^5}{90c^5 \hbar} (D_{n'n})_{ab}^* (D_{n'n})_{ab}; \quad (9.26)$$

при этом частота ω излучения будет определяться равенством (9.15а).

Задача 9.2. Найти правила отбора для дипольного и квадрупольного излучения частицы, находящейся в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Ответ. Для дипольного излучения Δn должно быть равно нечетному числу, а для квадрупольного излучения — четному числу.

Указание. С помощью волновой функции (4.32) можно показать, что среднее значение координаты равно:

$$\int \psi_n^* x \psi_n dx = \frac{l}{2}.$$

Поэтому матричные элементы, соответствующие дипольному ($j=1$) и квадрупольному ($j=2$) излучению, следует вычислять по формуле:

$$(x^j)_{n'n} = \int \psi_{n'}^* \left(x - \frac{l}{2}\right)^j \psi_n dx.$$

§ 10. ЛИНЕЙНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Задача об одномерном гармоническом осцилляторе является одной из важных задач теоретической физики. Она находит свое применение при построении простейшей теории колебаний, которая имеет большое значение в самых разнообразных областях физики (в механике, классической электродинамике, радиофизике, оптике, атомной физике и т. д.). Новые теории, которые за последнее время появлялись в атомной физике, как правило, «испытывались» на ряде простейших задач, в том числе и на построении теории гармонического осциллятора.

Часто оказывается возможным свести излучение движения сложных систем к рассмотрению совокупности нормальных колебаний, эквивалентных колебаниям гармонических осцилляторов. Для нас построение теории гармонического осциллятора интересно еще и в методическом отношении. В самом деле, эту задачу можно решить точно и тем самым проиллюстрировать на наиболее простом примере применение уравнения Шредингера для исследования конкретных задач. Задача о гармоническом осцилляторе сыграла большую роль также при создании квантовой теории поля (вторичного квантования) и при анализе так называемой нулевой энергии электромагнитного вакуума.

Конкретное применение задача о гармоническом осцилляторе нашла в теории равновесного излучения, а также при построении теории спектров и теории теплоемкости двухатомных молекул (см. § 12).

а. Осциллятор в теории Бора

Рассмотрим сначала классическую теорию гармонического осциллятора¹⁾. Для этого представим себе, что на некоторую материальную точку с массой m_0 действует упругая сила:

$$F = -kx, \quad (10.1)$$

где k — коэффициент упругости. Тогда уравнение движения гармонического осциллятора запишется в форме:

$$m_0 \ddot{x} = -kx, \quad (10.2)$$

описывающей обычный колебательный процесс.

Решение этого уравнения имеет вид:

$$x = a \cos \omega t, \quad (10.3)$$

где $\omega = \frac{2\pi}{\tau} = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$ — круговая частота, а a — амплитуда колебания. Из (10.3), в частности, видно, что ускорение:

$$\omega = \ddot{x} = -a\omega^2 \cos \omega t \quad (10.4)$$

отлично от нуля и, следовательно, колебание заряженной частицы должно сопровождаться излучением, интенсивность (излучаемая энергия) которого будет, согласно (10.4) и (2.2), определяться выражением:

$$W_{\text{кл.}} = \frac{2e^2}{3c^3} \ddot{x}^2 = \frac{e^2 a^2 \omega^4}{3c^3}. \quad (10.5)$$

¹⁾ В данном параграфе мы рассмотрим случай одномерного движения и в дальнейшем будем вместо выражения «линейный гармонический осциллятор» говорить просто «гармонический осциллятор».

При выводе (10.5) мы нашли среднее значение $\cos^2 \omega t$ по формуле:

$$\frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} \cos^2 \omega t dt = \frac{1}{2}. \quad (10.6)$$

Выразим теперь интенсивность излучения $W_{\text{кл.}}$ через полную энергию $E = T + V$ гармонического осциллятора. Воспользовавшись известными выражениями для потенциальной энергии:

$$V(x) = - \int_0^x F(x) dx = \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2} = \frac{m_0 \omega^2 a^2}{2} \cos^2 \omega t \quad (10.7)$$

и кинетической энергии:

$$T = \frac{m_0 \dot{x}^2}{2} = \frac{m_0 \omega^2 a^2}{2} \sin^2 \omega t \quad (10.8)$$

гармонического осциллятора, находим:

$$E = V(x) + T = \frac{m_0 \omega^2 a^2}{2} = \text{const.} \quad (10.9)$$

Исключая с помощью последнего соотношения величину a^2 из (10.5), будем иметь:

$$W_{\text{кл.}} = \frac{2e^2 \omega^2 E}{3m_0 c^3}. \quad (10.10)$$

Итак, с помощью классической теории определяется как интенсивность, так и частота излучения, причем последняя совпадает с механической частотой колебания гармонического осциллятора. Энергия же гармонического осциллятора может принимать любые непрерывные значения.

Ряд новых моментов в теорию гармонического осциллятора был введен квантовой теорией Бора. Например, энергетические уровни этой теории должны быть дискретными и могут быть найдены из правил квантования:

$$\oint p_x dx = 2\pi \hbar n, \quad (10.11)$$

где

$$p_x = \frac{\partial T}{\partial \dot{x}} = m_0 \dot{x}. \quad (10.12)$$

Подставляя в (10.11) выражение для $p_x dx = m_0 \dot{x} \frac{dx}{dt} dt = m_0 \omega^2 a^2 \sin^2 \omega t dt$ и учитывая равенство (10.9), в результате интегрирования по всему периоду находим:

$$E_n = n \hbar \omega, \quad (10.13)$$

причем квантовое число $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Таким образом, согласно теории Бора, энергия гармонического осциллятора может принимать лишь дискретные значения, а излучение будет происходить лишь при переходах осциллятора с одного энергетического уровня на другой.

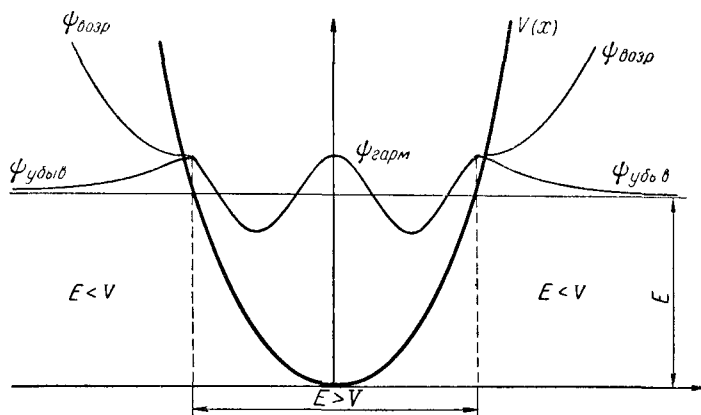
Как известно, доказательство существования дискретного спектра энергетических уровней гармонического осциллятора дает, в частности, обоснование формуле Планка для черного излучения, которая впервые была получена из гипотезы, что осциллятор может испускать и поглощать свет лишь порциями $\hbar\omega$.

б. Собственные функции и собственные значения энергии

Чтобы определить характер волновой функции ψ в задаче о гармоническом осцилляторе, прежде всего представим графически зависимость потенциальной энергии V от x :

$$V = \frac{m_0\omega^2 x^2}{2}$$

(см. фиг. 10.1). Из графика видно, что в области потенциальной ямы, где полная энергия E гармонического осциллятора больше V



Фиг. 10.1. Волновая функция гармонического осциллятора при произвольном значении энергии.

($E > V$), решения для ψ будут типа гармонических функций. В области же потенциального барьера ($E < V$) эти решения будут содержать две части: экспоненциально убывающую и экспоненциально возрастающую (см. фиг. 10.1). Очевидно, что решение задачи сводится к нахождению таких условий, при которых экспоненциально возрастающее решение будет отсутствовать.

Это возможно, так же как и в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (см. § 4), лишь при некоторых дискретных значениях энергии, которые мы и должны здесь определить.

Так как потенциальная энергия V гармонического осциллятора зависит лишь от координаты x , то уравнение Шредингера для него можно записать в виде:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E - \frac{m_0\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0. \quad (10.14)$$

Полагая здесь:

$$\alpha = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}, \quad \beta = \frac{1}{x_0^2} = \frac{m_0\omega}{\hbar}, \quad \frac{\alpha}{\beta} = \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega},$$

и вводя новую переменную:

$$\xi = x\sqrt{\beta} = \frac{x}{x_0}, \quad (10.15)$$

получаем:

$$\psi'' + (\lambda - \xi^2) \psi = 0, \quad (10.16)$$

где

$$\psi'' = \frac{d^2\psi}{d\xi^2}. \quad (10.17)$$

Прежде всего найдем асимптотическое поведение волновой функции при $\xi \rightarrow \pm\infty$, когда постоянной величиной λ по сравнению с ξ^2 можно пренебречь. Тогда

$$\psi'' - \xi^2 \psi = 0. \quad (10.18)$$

Решение этого уравнения будем искать в виде:

$$\psi_\infty = e^{\varepsilon\xi^2}. \quad (10.19)$$

Учитывая, что

$$\psi_\infty'' = (4\varepsilon^2\xi^2 + 2\varepsilon) e^{\varepsilon\xi^2} \approx 4\varepsilon^2\xi^2 e^{\varepsilon\xi^2},$$

находим:

$$\varepsilon = \pm \frac{1}{2} \quad (10.20)$$

и, следовательно,

$$\psi_\infty = C_1 e^{-1/2\xi^2} + C_2 e^{1/2\xi^2}. \quad (10.21)$$

Поскольку при $\xi \rightarrow \pm\infty$ волновая функция должна быть ограниченной, коэффициент C_2 необходимо положить равным нулю; коэффициент же C_1 можно считать равным единице, так как волновая функция не является еще нормированной. Таким образом,

асимптотическое поведение волновой функции ψ будет характеризоваться функцией:

$$\psi_{\infty} = e^{-1/2\xi^2}. \quad (10.21a)$$

Общее решение волновой функции будем искать в виде:

$$\psi = \psi_{\infty} u = e^{-1/2\xi^2} u, \quad (10.22)$$

учитывающем уже особенности поведения на бесконечности. Подставляя последнее выражение в (10.16) и учитывая, что

$$(e^{-1/2\xi^2} u)'' = [u'' - 2\xi u' + (\xi^2 - 1)u] e^{-1/2\xi^2},$$

получаем следующее уравнение для u :

$$u'' - 2\xi u' + (\lambda - 1)u = 0. \quad (10.23)$$

Решение этого уравнения будем искать в виде ряда:

$$u = \sum_{k=0} b_k \xi^k; \quad (10.24)$$

подставляя последнее выражение для u в уравнение (10.23), находим:

$$\sum_{k=0} b_k [k(k-1)\xi^{k-2} - (2k+1-\lambda)\xi^k] = 0.$$

Производя преобразование индекса суммирования таким образом, чтобы сгруппировать члены с одинаковыми степенями ξ , получаем:

$$\sum_{k=0} \xi^k [(k+2)(k+1)b_{k+2} - b_k(2k+1-\lambda)] = 0.$$

Отсюда, приравнявая нулю коэффициенты при ξ^k , найдем рекуррентное соотношение для определения коэффициентов b_k :

$$b_{k+2} = b_k \frac{(2k+1-\lambda)}{(k+2)(k+1)}. \quad (10.25)$$

Последнее соотношение связывает коэффициент b_k с b_{k+2} , и поэтому ряд (10.24) будет либо с четными (если максимальный индекс k — четный), либо с нечетными (если максимальный индекс k — нечетный) степенями ξ .

Заметим, что если ряд (10.24) не ограничить некоторой максимальной степенью, то, начиная с $k > \frac{\lambda-1}{2}$, он перестает быть знакопеременным и, следовательно, при больших ξ будет расходиться, приводя тем самым при $\xi \rightarrow \infty$ ко второму асимптотическому решению $\psi_{\text{ас.}} \sim e^{1/2\xi^2}$, которое мы отбросили, поскольку

оно является расходящимся¹⁾. Поэтому, чтобы удовлетворить граничным условиям для волновой функции на бесконечности (где она должна обращаться в нуль), мы должны потребовать, чтобы ряд (10.24) обрывался при некотором $k_{\text{макс.}} = n$, т. е. должны потребовать, чтобы

$$b_n \neq 0, \quad b_{n+2} = 0. \quad (10.26)$$

Принимая во внимание последние соотношения, с помощью равенства (10.25) находим:

$$\lambda = 2n + 1, \quad (10.27)$$

т. е.

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (10.28)$$

где n может принимать любые целые положительные значения, включая нуль. Только при этих значениях энергии волновая функция обращается в нуль на бесконечности.

Сравнивая это выражение с тем, которое было найдено по теории Бора [см. (10.13)], мы видим, что здесь появляется так называемая *нулевая* энергия:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (10.29)$$

Ниже мы покажем, что появление нулевой энергии связано с соотношением неопределенности, т. е. с волновыми свойствами частиц. Однако нулевая энергия не скажется на частоте излучения, поскольку при вычислении $\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}$ она просто исключается.

Найдем теперь волновую функцию гармонического осциллятора. Рекуррентное соотношение (10.25) для коэффициентов b_k при $\lambda = 2n + 1$ принимает вид:

$$b_{k-2} = -b_k \frac{k(k-1)}{2(n-k+2)},$$

¹⁾ Это следует из того обстоятельства, что при больших k соотношение между коэффициентами $\left(\frac{b_k}{b_{k+2}} \right)_{k \rightarrow \infty} \approx \frac{k}{2}$ будет таким же, как и у функции e^{ξ^2} , разложенной в ряд:

$$e^{\xi^2} = \sum_{k=0, 2, 4, \dots} \frac{1}{\left(\frac{k}{2} \right)!} \xi^k,$$

т. е.

$$\psi_{\text{н.с.}} \rightarrow e^{\xi^2} \psi_{\infty} \rightarrow e^{1/2 \xi^2}.$$

Последняя формула относится и ко второму решению уравнения (10.14), составленному из коэффициентов типа b_{k+1} .

где $k \leq n$. Полагая коэффициент при максимальной степени $k_{\text{макс.}} = n$ равным¹⁾:

$$b_n = 2^n, \quad (10.30)$$

находим:

$$b_{n-2} = -2^{n-2} \frac{n(n-1)}{1!},$$

$$b_{n-4} = 2^{n-4} \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} \text{ и т. д.} \quad (10.31)$$

Конечный степенной ряд для функции u образует так называемый полином Эрмита:

$$u = H_n(\xi) = (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2\xi)^{n-2} +$$

$$+ \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2\xi)^{n-4} + \dots + \begin{cases} b_1 \xi & \text{при } n \text{ нечетном} \\ b_0 & \text{при } n \text{ четном} \end{cases}. \quad (10.32)$$

Отсюда, в частности, следует, что

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi. \quad (10.33)$$

Полиномы Эрмита $H_n(\xi)$ можно записать в замкнутой форме²⁾:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \quad (10.34)$$

¹⁾ Заметим, что этот коэффициент всегда можно выбрать произвольно, поскольку нормировочный множитель волновой функции ψ_n еще не определен.

²⁾ Чтобы это показать, введем функцию $v = e^{-\xi^2}$, удовлетворяющую уравнению:

$$v' + 2\xi v = 0.$$

Дифференцируя последнее уравнение $n+1$ раз, используя при этом формулу Лейбница:

$$(yz)^{(n)} = y^{(n)}z + ny^{(n-1)}z' +$$

$$+ \frac{n(n-1)}{2!} y^{(n-2)}z'' + \dots,$$

находим:

$$v^{(n+2)} + 2\xi v^{(n+1)} + 2(n+1)v^{(n)} = 0.$$

Производя далее замену:

$$v^{(n)} = e^{-\xi^2} w,$$

находим, что функция w будет удовлетворять уравнению (10.35), т. е. будет пропорциональна полиному Эрмита:

$$w = e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} = A_n H_n.$$

Множитель пропорциональности A_n может быть найден путем приравнивания друг другу коэффициентов при ξ^{2n} . В результате оказывается $A_n = (-1)^n$, откуда мы и получаем формулу (10.34).

Из (10.32) видно, что $H_n(\xi)$ будут подчиняться уравнению (10.23), если в последнем положить $\lambda = 2n + 1$:

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0. \quad (10.35)$$

Решение уравнения Шредингера для гармонического осциллятора согласно (10.22) и (10.32) имеет вид:

$$\psi_n = C_n e^{-1/2\xi^2} H_n(\xi), \quad (10.36)$$

причем ξ связано с координатой x соотношением (10.15). Коэффициент C_n можно определить из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_n dx = x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_n(\xi) d\xi = 1. \quad (10.37)$$

Подставляя сюда вместо одного полинома $H_n(\xi)$ замкнутый вид (10.34), находим:

$$(-1)^n x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} d\xi = 1. \quad (10.38)$$

Учитывая далее правило переброса производной с одной функции на другую [см. (7.17)], т. е. совершая n раз интегрирование по частям, получаем:

$$x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} d\xi = 1. \quad (10.39)$$

Принимая во внимание, что согласно (10.32):

$$\frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi) = 2^n n!, \quad (10.40)$$

а

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}, \quad (10.41)$$

находим:

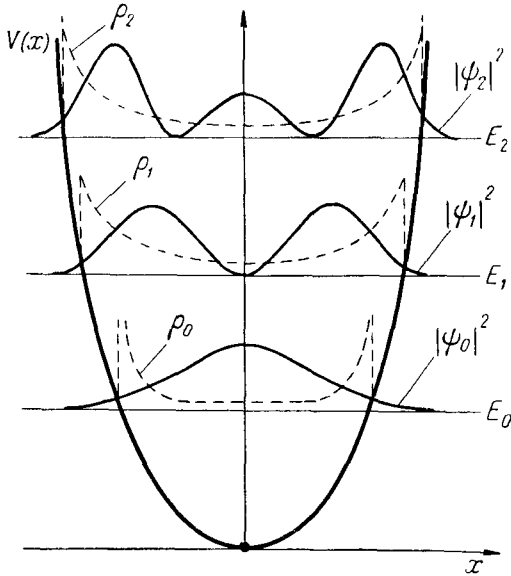
$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi x_0}},$$

т. е.

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi x_0}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right). \quad (10.42)$$

Аналогичным путем легко доказать и условие ортогональности для волновых функций. Для этого достаточно один из полиномов Эрмита, а именно с большим n , представить в свернутом

виде (10.34). Условие ортогональности вытекает также и из общего исследования уравнения Шредингера, согласно которому собственные функции должны быть ортогональны друг другу.



Ф и г. 10.2. Собственные значения энергии, ход собственных функций гармонического осциллятора при малых значениях квантовых чисел ($n=0, 1, 2$) и сравнение с классической теорией (см. пунктирные линии для ρ_n).

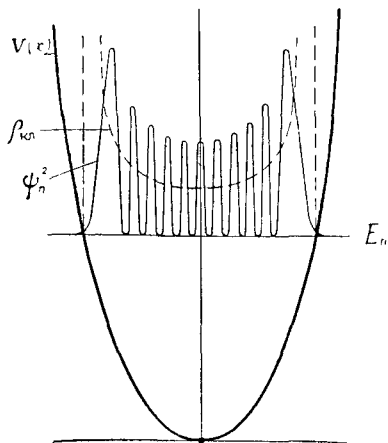
В случае гармонического осциллятора условие ортонормированности принимает вид:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n'}^* \psi_n dx = \delta_{nn'}. \quad (10.43)$$

Заметим, что в области малых квантовых чисел, например, для $n=0, 1, 2, \dots$, когда

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2} \hbar \omega, & \psi_0 &= C_0 e^{-\frac{1}{2} \xi^2}, \\ E_1 &= \frac{3}{2} \hbar \omega, & \psi_1 &= C_1 2\xi e^{-\frac{1}{2} \xi^2}, \\ E_2 &= \frac{5}{2} \hbar \omega, & \psi_2 &= C_2 (4\xi^2 - 2) e^{-\frac{1}{2} \xi^2}, \end{aligned} \quad (10.44)$$

распределения плотности вероятности (см. фиг. 10.2) $|\psi_n|^2$ будут значительно отличаться от соответствующих плотностей вероятности пребывания частицы в различных точках пространства в классической теории гармонического осциллятора [последние пропорциональны времени пребывания частицы в данной точке и, следовательно, обратно пропорциональны ее скорости, т. е. величине¹⁾ $(a^2 - x^2)^{-1/2}$, где a — наибольшее отклонение классического осциллятора от положения равновесия], и только в области больших квантовых чисел, как и следовало ожидать, их совпадение в среднем будет сравнительно близким (см. фиг. 10.3).



Фиг. 10.3. Сравнение результатов квантовой и классической теории для осциллятора в области больших значений квантовых чисел (здесь $n = 10$).

в. Нулевая энергия гармонического осциллятора и соотношение неопределенности

Выше мы нашли, что минимальная энергия гармонического осциллятора, согласно квантовой теории, определяется формулой (10.29) и не может обратиться в нуль, в то время как в классической теории или в теории Бора она равна нулю.

Покажем, что появление в теории Шредингера нулевой энергии (10.29) самым тесным образом связано, как мы упомина-

¹⁾ В этом нетрудно убедиться, исходя из следующих простых качественных соображений. Плотность вероятности ρ нахождения частицы в той или иной точке, грубо говоря, можно характеризовать модулем обратной величины ее скорости, так как в тех областях, где скорость меньше, пребывание будет более продолжительным, нежели в областях с большими скоростями. Следовательно, вероятность обнаружить частицу в области с большей скоростью будет меньше, чем в области с меньшей скоростью. Для гармонического осциллятора согласно (10.3) $\frac{x}{a} = \cos \omega t$, $\frac{\dot{x}}{\omega a} = -\sin \omega t$, откуда, возводя оба равенства в квадрат и затем складывая, находим:

$$|\dot{x}| \sim (a^2 - x^2)^{\frac{1}{2}},$$

т. е.

$$\rho \sim \frac{1}{|\dot{x}|} \sim (a^2 - x^2)^{-\frac{1}{2}},$$

нали, с соотношением неопределенности (8.11), которое в нашем случае можно представить в виде:

$$\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (10.45)$$

При этом сделана замена $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ на $\langle x^2 \rangle$ и $\langle (\Delta p)^2 \rangle$ на $\langle p^2 \rangle$. Это следует из условия, что волновые функции вещественны и являются либо четными, либо нечетными. В самом деле, в силу нечетности выражения $\psi^* x \psi = x \psi^2$ имеем:

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi dx = 0.$$

Отсюда

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle.$$

Точно так же, используя граничные условия на бесконечности, находим:

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \int \psi \frac{d\psi}{dx} dx = \frac{\hbar}{2i} \psi^2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0,$$

т. е.

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle.$$

Подставляя значение для $\langle p^2 \rangle$ из (10.45) в выражение для полной энергии:

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2 \langle x^2 \rangle}{2}, \quad (10.46)$$

получаем:

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8m_0 \langle x^2 \rangle} + \frac{m_0 \omega^2 \langle x^2 \rangle}{2}. \quad (10.47)$$

Отсюда видно, что ни при каких значениях $\langle x^2 \rangle$ энергия E не может обратиться в нуль. В самом деле, хотя при $\langle x^2 \rangle = 0$ второй член обращается в нуль, но зато первый обращается в бесконечность. Точно так же, наоборот, при $\langle x^2 \rangle = \infty$ первый член обращается в нуль, а второй в бесконечность.

Таким образом, отличное от нуля E_{\min} непосредственно связано с соотношением неопределенности (10.45), т. е. с тем, что координата и импульс одновременно не могут быть точно вычислены.

Найдем, при каких $\langle x^2 \rangle$ выражение (10.47) будет минимальным. Приравнявая производную от этой функции по $\langle x^2 \rangle$ нулю, получаем:

$$\frac{m_0 \omega^2}{2} - \frac{\hbar^2}{8m_0 \langle x^2 \rangle^2} = 0,$$

или

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m_0 \omega} = \frac{1}{2} x_0^2.$$

Подставляя это значение в (10.47), будем иметь:

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (10.48)$$

Отсюда $E_{\min.} = \frac{\hbar\omega}{2}$, что точно совпадает со значением для E_0 , найденным по волновой теории [см. (10.29)].

Существование конечной нулевой энергии гармонического осциллятора является одним из наиболее характерных проявлений волновых свойств частиц. В связи с этим экспериментальное подтверждение нулевых колебаний имело большое значение для всей квантовой механики.

Впервые нулевая энергия E_0 была обнаружена экспериментально в опытах по рассеянию рентгеновских лучей в кристаллах при низких температурах. Если бы никаких колебаний решетки при низких температурах не было ($E_0 = 0$), как это, например, следует из теории Бора, то взаимодействие рентгеновских лучей с кристаллической решеткой, а следовательно, и рассеяние, не имело бы места. Наоборот, если при $T \rightarrow 0$ минимальная энергия будет отличной от нуля ($E_0 \neq 0$), то эффективное сечение рассеяния при низких температурах должно стремиться к некоторому конечному пределу. Эксперимент доказал последнее, т. е. подтвердил правильность выводов волновой теории Шредингера.

г. Правила отбора. Интенсивность излучения

Рассмотрим проблему излучения гармонического осциллятора на основе квантовой механики. Для этого нужно, как мы показали в § 9 [см. (9.22)], вычислить матричные элементы:

$$x_{n'n} = \int \psi_n^* x \psi_n dx, \quad (10.49)$$

где ψ_n определяется формулой (10.36).

Выведем предварительно одно рекуррентное соотношение между полиномами Эрмита, которым мы воспользуемся в дальнейшем. Из определения (10.32) полиномов $H_n(\xi)$ найдем:

$$H'_n(\xi) = 2n \left[(2\xi)^{n-1} - \frac{(n-1)(n-2)}{11} (2\xi)^{n-3} + \dots \right] = 2n H_{n-1}(\xi),$$

откуда следует, что

$$H''_n(\xi) = 2n H'_{n-1}(\xi) = 2n \cdot 2(n-1) H_{n-2}(\xi). \quad (10.50)$$

Далее, подставляя эти значения для производных в (10.35) и производя замену $n \rightarrow n' + 1$, находим рекуррентное соотношение между полиномами Эрмита:

$$\xi H_{n'}(\xi) = n' H_{n'-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n'+1}(\xi). \quad (10.51)$$

Используя это соотношение, матричный элемент (10.49) можно привести к виду:

$$x_{n'n} = x_0^2 C_n C_{n'} \left\{ \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_{n'+1}(\xi) H_n(\xi) d\xi + n' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_{n'-1}(\xi) H_n(\xi) d\xi \right\}.$$

Возвращаясь обратно к волновым функциям ψ , получаем:

$$x_{n'n} = x_0 \left\{ \frac{1}{2} \frac{C_n}{C_{n'+1}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n'+1} \psi_n dx + n' \frac{C_{n'}}{C_{n'-1}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n'-1} \psi_n dx \right\}. \quad (10.52)$$

Отсюда, принимая во внимание, что функции ψ_n ортонормированы, находим:

$$x_{n'n} = x_0 \left\{ \frac{1}{2} \frac{C_{n-1}}{C_n} \delta_{n'+1, n} + (n+1) \frac{C_{n+1}}{C_n} \delta_{n'-1, n} \right\}. \quad (10.53)$$

Из этого выражения следует, что отличными от нуля будут *только* те матричные элементы, для которых $n' = n - 1$ или $n' = n + 1$, т. е. *правила отбора* для квантового числа n будут определяться формулой:

$$\Delta n = n - n' = \pm 1, \quad (10.54)$$

свидетельствующей о возможности переходов лишь между соседними уровнями.

Пользуясь выражением (10.42) для волновой функции, в соответствии с (10.53) получаем:

$$\begin{aligned} x_{n-1, n} &= x_0 \sqrt{\frac{n}{2}}, \\ x_{n+1, n} &= x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}, \end{aligned} \quad (10.55)$$

где x_0 определяется из (10.15), а для частоты излучения находим выражение, точно совпадающее с классическим:

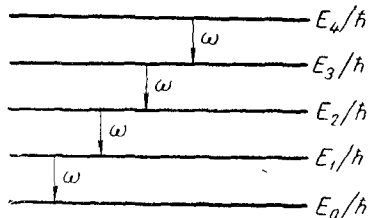
$$\omega_{n, n-1} = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar} = \omega. \quad (10.56)$$

Энергетические уровни и разрешенные переходы изображены на фиг. 10.4.

Поскольку спонтанное излучение возможно только в том случае, когда переходы совершаются сверху вниз ($E_n > E_{n-1}$), согласно (9.22), для интенсивности излучения гармонического осциллятора $W = W_{n, n-1}$ находим следующее выражение:

$$W_{n, n-1} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega^2}{m_0 c^3} n \hbar \omega = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega^2}{m_0 c^3} (E_n - E_0). \quad (10.57)$$

Сравнивая это выражение с выражением (10.10), полученным по классической теории, можно сказать, что только в области больших квантовых чисел ($n \gg 1$), когда $E_n \gg E_0$, они будут практически давать один и тот же результат. Переходы на более высокие энергетические уровни $n \rightarrow n + 1$ возможны или при вынужденных переходах, или даже при спонтанных, когда потеря энергии в гармоническом осцилляторе одновременно компенсируется большей энергией, освобождающейся, например, при переходах электронов в атомах (см. § 12, спектры двухатомных молекул).



Фиг. 10.4. Разрешенные переходы гармонического осциллятора.

Задача 10.1. Найти с помощью метода ВКБ собственные значения гармонического осциллятора.

Решение. Согласно (10.14), волновое уравнение для гармонического осциллятора имеет вид:

$$\psi'' + (\alpha - \beta^2 x^2) \psi = 0,$$

$$\alpha = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}, \quad \beta^2 = \frac{m_0^2 \omega^2}{\hbar^2}.$$

где

Отсюда, согласно (5.75), для определения собственных значений имеем уравнение:

$$\int_{-\sqrt{\alpha/\beta}}^{\sqrt{\alpha/\beta}} \sqrt{\alpha - \beta^2 x^2} dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Вычисляя последний интеграл, находим для энергии собственные значения, совпадающие с (10.28), т. е. учитывающие нулевую энергию.

Задача 10.2. Построить теорию гармонического осциллятора в p -представлении (в одномерном случае). Найти уравнение движения, собственные значения и собственные функции.

Решение. Учитывая, что в p -представлении $x^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dp^2}$, занисываем уравнение Шредингера в виде:

$$\left(E - \frac{p^2}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2 \hbar^2}{2} \frac{d^2}{dp^2} \right) \varphi(p) = 0,$$

т. е. для гармонического осциллятора при переходе от x -представления к p -представлению волновое уравнение при введении новых масштабов:

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar \omega}, \quad \eta = \frac{p}{p_0},$$

где

$$p_0 = \sqrt{m_0 \hbar \omega},$$

тождественно переходит само в себя:

$$\varphi'' + (\lambda - \eta^2) \varphi = 0$$

(здесь штрихом обозначена производная по η). Поэтому мы можем воспользоваться решениями (10.28) и (10.42) и написать в p -представлении:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

и

$$\varphi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi} \rho_0} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{p}{\rho_0} \right)^2} H_n \left(\frac{p}{\rho_0} \right).$$

Легко проверить, что последняя волновая функция удовлетворяет условию нормировки:

$$\int |\varphi_n(p)|^2 dp = 1.$$

Задача 10.3. Найти собственные функции и спектр энергии электрона ($e = -e_0 < 0$), движущегося в постоянном и однородном магнитном поле. Показать, что «электронный газ» по квантовой теории должен быть диамагнитным.

Решение. Направим магнитное поле по оси z ($H_x = H_y = 0$, $H_z = \mathcal{H}$). Тогда для вектор-потенциала можем записать $A_y = x\mathcal{H}$, $A_x = A_z = 0$. Для описания движения электрона имеем уравнение Шредингера (см. также задачу 8.4):

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \psi + i \frac{e_0 \hbar \mathcal{H}}{m_0 c} x \frac{\partial \psi}{\partial y} + \left(E - \frac{e_0^2 \mathcal{H}^2}{2m_0 c^2} x^2 \right) \psi = 0.$$

Замечая, что координаты y и z в последнее уравнение явно не входят, решение будем искать в виде:

$$\psi = \frac{1}{L} e^{i(k_2 y + k_3 z)} f(x).$$

Для определения функции $f(x)$ получаем уравнение:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E' - \frac{e_0^2 \mathcal{H}^2}{2m_0 c^2} (x + \delta)^2 \right) f = 0,$$

где

$$E' = E - \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_0}, \quad \delta = \frac{c \hbar k_2}{e_0 \mathcal{H}},$$

которое, как нетрудно видеть, совпадает с уравнением (10.14) для гармонического осциллятора.

Следовательно, для определения собственных функций и собственных значений можно использовать решения (10.27) и (10.36). В результате находим:

$$\psi_{nk_2 k_3} = \frac{C_n}{L} e^{i(k_2 y + k_3 z)} e^{-\frac{1}{2} \xi^2} H_n(\xi), \quad (10.58)$$

где $H_n(\xi)$ — полиномы Эрмита, $\omega = \frac{e_0 \mathcal{H}}{2m_0 c}$ — частота ларморовой прецессии,

$C_n = \left[\frac{2m_0 \omega}{\pi \hbar^2 2^n (n!)^2} \right]^{1/4}$ — нормировочный коэффициент, а

$$\xi = \sqrt{\frac{2m_0 \omega}{\hbar}} \left(x + \frac{k_2 c \hbar}{e_0 \mathcal{H}} \right),$$

$$E_{nk_3} = \frac{e_0 \hbar \mathcal{H}}{2m_0 c} (2n + 1) + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_0}.$$

Последний член представляет собой кинетическую энергию электронов, свободно движущихся вдоль оси z , и особого интереса не представляет. Первый же член, равный:

$$E_n = \mu_0 \mathcal{H} (2n + 1), \quad (10.59)$$

где μ_0 — магнетон Бора, соответствует дополнительной энергии, которую приобретает электрон, будучи помещенным в магнитное поле. Эта дополнительная энергия представляет собой энергию движения электрона в плоскости x, y , перпендикулярной к магнитному полю.

Последний вывод вполне согласуется с классической теорией, согласно которой электрон, помещенный в магнитное поле, должен вращаться с ларморовой частотой ω в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

Однако в классической теории энергия электрона, помещенного в магнитное поле, целиком определяется его некантованной кинетической энергией. Поэтому по классической теории диамагнетизм «электронного газа» должен вообще отсутствовать.

В квантовой же теории энергию (10.59) можно интерпретировать как проявление дополнительного магнитного момента электрона μ_z , который даст следующий добавок к энергии:

$$E^{\text{магн.}} = -\mu_z \mathcal{H}. \quad (10.60)$$

Сопоставляя (10.60) с (10.59), находим:

$$\mu_z = -\mu_0 (2n + 1).$$

Поскольку число $2n + 1$ принимает лишь положительные значения ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$), у каждого электрона этот дополнительный момент будет направлен в отрицательном направлении оси z , что естественно должно привести к диамагнетизму свободных электронов в металле.

Следует заметить, что в квантовой механике решение (10.58) соответствует гармоническим колебаниям лишь вдоль оси x , в то время как в классической теории круговая траектория означает гармонические колебания не только по оси x , но и по оси y с разностью фаз, равной $\frac{\pi}{2}$.

Это связано с тем обстоятельством, что энергия не зависит от импульса $\hbar k_y$. Благодаря этому имеет место вырождение, и решение при заданной энергии имеет вид:

$$\psi_{n_1 k_3} = 0 = \sum_{k_2} C_{k_2} \psi_{n k_2, k_3 = 0}, \quad (10.61)$$

где C_{k_2} — произвольные амплитуды, удовлетворяющие условию нормировки:

$$\sum_{k_2} |C_{k_2}|^2 = 1.$$

В классической теории мы также имеем неоднозначность, поскольку центр круговой траектории не фиксируется.

Общее решение (10.61) соответствует набору круговых траекторий, обладающих различными центрами, расположенными вдоль оси y .

Таким образом, решение (10.61) включает в себя не только гармонические колебания вдоль оси x , но и вдоль оси y . Это видно также из выражения энергии (10.59), которая при учете равенства $\mu_0 \mathcal{H} = \omega \hbar$ представляет собой сумму энергии двух гармонических осцилляторов:

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

Задача 10.4. Показать, что матричный элемент произведения двух операторов $M(x)$ и $N(x)$, не зависящих от квантовых чисел, равен сумме произведений матричных элементов этих операторов, т. е.

$$(MN)_{n'n} = \sum_k M_{n'k} N_{kn}. \quad (10.62)$$

Решение. Можно записать:

$$(MN)_{n'n} = \iint \psi_{n'}^*(x) M(x) \delta(x-x') N(x') \psi_n(x') dx dx'.$$

Далее, учитывая соотношение (см. § 4):

$$\delta(x-x') = \sum_k \psi_k^*(x') \psi_k(x),$$

а также то, что операторы $M(x)$ и $N(x')$ не зависят от квантовых чисел, легко доказываем равенство (10.62).

Задача 10.5. Найти правила отбора для квадрупольного излучения гармонического осциллятора. Найти интенсивность спонтанного квадрупольного излучения и сравнить с дипольным. Показать, что в этом случае имеет место соотношение (9.24), связывающее интенсивность квадрупольного излучения с дипольным.

Решение. Согласно соотношению, полученному в задаче 9.1, квадрупольное излучение пропорционально матричному элементу, который в соответствии с результатами предыдущей задачи может быть представлен в виде:

$$(x^2)_{n'n} = \sum_{k=0}^{\infty} x_{n'k} x_{kn}.$$

Принимая во внимание значения (10.55) для матричных элементов $x_{n'k}$, найдем следующие отличные от нуля матричные элементы квадрупольного излучения:

$$(x^2)_{n-2,n} = \frac{x_0^2}{2} \sqrt{n(n-1)}; \\ (x^2)_{n+2,n} = \frac{x_0^2}{2} \sqrt{(n+2)(n+1)}, \quad (x^2)_{n,n} = x_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (10.63)$$

т. е. правила отбора для квадрупольного излучения осциллятора будут:

$$\Delta n = 0, \pm 2.$$

Вероятность спонтанного излучения ($n' = n - 2$, $\Delta n = 2$) может быть вычислена по формуле (9.26). В области больших квантовых чисел, когда $E \cong n\hbar\omega$, имеем:

$$W^{\text{квадр.}} = \frac{16}{15} \frac{e^2 \omega^2 E^2}{m_0^2 c^5}.$$

Принимая во внимание, что интенсивность дипольного излучения определяется, согласно (10.57), выражением:

$$W^{\text{дипол.}} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega^2 E}{m_0 c^3} \sim (ea)^2 \frac{\omega^4}{c^3},$$

для искомого отношения находим:

$$\frac{W_{\text{квадр.}}}{W_{\text{дипол.}}} = \frac{4}{5} \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 a^2 \sim \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2,$$

где $a^2 = \frac{2E}{m_0 \omega^2}$ — квадрат классической амплитуды колебаний. Последнее соотношение находится в согласии с (9.24).

Задача 10.6. Показать, что центр тяжести волнового пакета, составленного из решений для гармонического осциллятора, будет двигаться по законам классической механики.

Убедиться, что волновой пакет не расплывается со временем. Сделать переход к квазиклассическому случаю ($n \gg \nu \gg 1$, где $2\nu + 1$ — число волн, образующих волновой пакет).

Решение. Для простоты составим волновой пакет из $2\nu + 1$ собственных функций одинаковой амплитуды:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\nu + 1}} \sum_{j=-\nu}^{\nu} \psi_{n+j} e^{-i\omega\left(n+j+\frac{1}{2}\right)t},$$

где ψ_{n+j} — собственные функции гармонического осциллятора, а ω — механическая частота колебаний.

Для центра тяжести $\langle x \rangle$ волнового пакета имеем:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx = \\ &= \frac{1}{2\nu + 1} \sum_{i, j=-\nu}^{\nu} x_{n+j, n+i} \cdot e^{-i\omega(j-i)t} = A \cdot \cos \omega t, \end{aligned}$$

причем

$$A = \frac{a}{2\nu + 1} \sum_{j=-\nu}^{\nu-1} \sqrt{\frac{2(n+j+1)}{2n+1}},$$

где $a = \sqrt{\frac{\hbar(2n+1)}{m_0 \omega}}$ — классическая амплитуда колебаний.

Отсюда следует, что $\langle \dot{x} \rangle$ точно подчиняется классическому уравнению движения гармонического осциллятора:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle + \omega^2 \langle x \rangle = 0.$$

Вычислив аналогично $\langle x^2 \rangle$, для среднего квадратичного отклонения $\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ получим значение:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \left(C^2 - \frac{A^2}{2}\right) + \left(B^2 - \frac{A^2}{2}\right) \cos 2\omega t,$$

где

$$C^2 = \frac{a^2}{2}, \quad B^2 = \frac{a^2}{2} \frac{1}{2\nu + 1} \cdot \sum_{i=-\nu}^{\nu-2} \frac{\sqrt{(n+j+1)(n+j+2)}}{n + \frac{1}{2}}.$$

Следовательно, величина $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ осциллирует около некоторого среднего значения и поэтому не расплывается со временем.

При переходе к квазиклассическому случаю будем иметь:

$$A \approx a \left(1 - \frac{1}{2\nu + 1}\right), \quad B^2 \approx \frac{a^2}{2} \left(1 - \frac{2}{2\nu + 1}\right),$$

т. е.

$$\langle x \rangle \approx a \cos \omega t, \quad \langle (\Delta x)^2 \rangle \approx \frac{a^2}{2\nu + 1} = \text{const.}$$

Отсюда видно, что, чем больше взято число волн, тем меньше будет ширина пакета и, наконец, при $(2\nu + 1) \gg 1$ она стремится к нулю.

Задача 10.7. Найти в приближении ВКБ собственные функции гармонического осциллятора, а также асимптотические выражения для полиномов Эрмита при малых значениях аргумента.

Решение.

Собственные функции могут быть найдены с помощью соотношений (5.66) и (5.67):

$$\psi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi x_0}} (2n+1 - \xi^2)^{-1/4} \cos \left[\frac{n\pi}{2} - \frac{1}{2} \xi \sqrt{2n+1 - \xi^2} - \frac{2n+1}{2} \times \right. \\ \quad \left. \times \arcsin \frac{\xi}{\sqrt{2n+1}} \right] \text{ при } \xi^2 < 2n+1, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi x_0}} \left(\frac{4e}{2n+1} \right)^{\frac{2n+1}{4}} \xi^n e^{-1/2 \xi^2} \text{ при } \xi^2 > 2n+1, \end{cases}$$

где $\xi = \frac{x}{x_0}$, а $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega}}$.

При $n \gg 1$ воспользуемся формулой Стирлинга, которую мы представим в виде:

$$n! \cong \sqrt{2\pi} \left(\frac{n+1/2}{e} \right)^{n+1/2}.$$

Тогда последнее выражение в случае $\xi \gg \sqrt{2n+1}$ дает старший член точного решения (10.42). В случае же $\xi \ll \sqrt{2n+1}$ с помощью тех же формул можно получить следующее асимптотическое выражение для полиномов Эрмита:

$$H_n(\xi) = \sqrt{\frac{2}{V e}} \left(\frac{2n+1}{e} \right)^{n/2} e^{1/2 \xi^2} \cos \left(\frac{n\pi}{2} - \sqrt{2n+1} \xi \right).$$

Задача 10.8. Наряду с матричным элементом координаты [см. (10.55)] найти также в случае гармонического осциллятора матричный элемент импульса и гамильтониана. Написать также соответствующие матрицы и установить связь между ними (задача о гармоническом осцилляторе в матричном или в E -представлении).

Решение. Для искомого матричных элементов ($n, n' = 0, 1, 2, \dots$) будем иметь:

$$\begin{aligned} p_{n'n} &= - \int \psi_n^* i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_n dx = i m_0 \omega_{n'n} x_{n'n} = i m_0 (n' - n) \omega x_{n'n}, \\ x_{n'n} &= \int \psi_n^* x \psi_n dx, \\ H_{n'n} &= \int \psi_n^* H \psi_n dx = E_n \delta_{n'n} = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega \delta_{n'n}. \end{aligned} \quad (10.64)$$

Отсюда видно, что у матрицы импульса, так же как и у матрицы координаты [см. (10.55)], отличными от нуля будут только окологдиагональные элементы ($n' = n \pm 1$), а у матрицы гамильтониана — только диагональные элементы ($n' = n$).

Для соответствующих бесконечных матриц мы будем иметь выражения:

$$(x) = x_0 \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (10.65)$$

$$(p) = m_0 \omega x_0 \begin{pmatrix} 0 & -i \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ i \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & -i \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & i \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & -i \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix},$$

$$(H) = \hbar \omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (10.66)$$

На языке матричной механики наличие диагональной матрицы эквивалентно оператору, имеющему собственные значения, которые и равны диагональным элементам.

Вспомянув правила умножения матриц (произведение строки на столбец), мы можем написать следующие соотношения:

$$\left. \begin{aligned} (p)(x) - (x)(p) &= -i\hbar I, \\ \text{или для матричных элементов} \\ \sum_k (p_{n'k} x_{kn} - x_{n'k} p_{kn}) &= -i\hbar \delta_{nn'} \end{aligned} \right\} \quad (10.67)$$

$$\left. \begin{aligned} (H) &= \frac{(p)^2}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2}{2} (x)^2, \\ \text{или} \\ H_{n'n} &= \sum_k \left(\frac{p_{n'k} p_{kn}}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2 x_{n'k} x_{kn}}{2} \right), \end{aligned} \right\} \quad (10.68)$$

где I — бесконечная единичная матрица.

Таким образом, некоммутативность величин можно описать не только с помощью операторов дифференцирования (см. § 7), но и с помощью матриц. В частности, матричное соотношение (10.67)

определяет некоммутативность величин p и x [с помощью операторов оно было задано соотношением (7.7)]. Выражение (10.68) представляет собой матричную запись уравнения Шредингера (10.14) для гармонического осциллятора.

§ 11. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦЫ В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

Наряду с гармоническим осциллятором движение частицы в поле центральных сил (потенциал которых есть функция только расстояния, но не зависит от углов) представляет собой также одну из стандартных задач квантовой механики.

Эта задача легла в основу построения квантовой теории ротатора, играющего большую роль при изучении спектра двухатомных молекул, теории атома водорода, нерелятивистской теории дейтрона и т. д. Интересно отметить, что зависимость волновой функции от углов ϑ и φ в поле центральных сил (шаровые функции) совершенно не связана с конкретным выбором потенциальной энергии и поэтому шаровые функции имеют универсальный характер, поскольку они относятся к любому центрально-симметричному полю. Классическим аналогом квантового исследования угловой части является вывод закона сохранения момента количества движения для поля центральных сил в классической механике, который также не зависит от конкретного выбора потенциальной энергии.

а. Уравнение Шредингера в сферических координатах

Задача о движении частицы в поле центральных сил

$$\mathbf{F} = F(r) \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad (11.1)$$

как правило, решается в сферических координатах r , ϑ и φ , связанных с декартовыми (см. фиг. 11.1) при помощи соотношений:

$$x = \rho \cos \varphi, \quad y = \rho \sin \varphi, \quad z = r \cos \vartheta, \quad \rho = r \sin \vartheta. \quad (11.2)$$

Запишем уравнение Шредингера в сферических координатах.

Прежде всего, следуя общему определению потенциальной энергии V как величины, градиент которой равен действующей силе \mathbf{F} , имеем:

$$dV = -(\mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}). \quad (11.3)$$

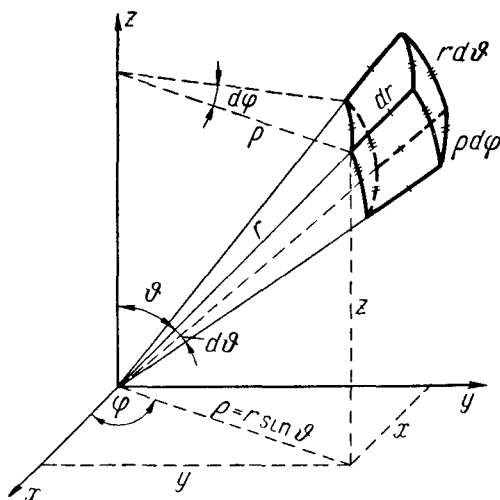
Отсюда в случае центральных сил (11.1) находим:

$$dV = -\frac{F}{r}(x dx + y dy + z dz) = -F dr, \quad (11.3a)$$

т. е.

$$V(r) = - \int_{\infty}^r F(r) dr, \quad (11.4)$$

где нижний предел интегрирования мы выбрали из тех соображений, чтобы на бесконечности величина $V(r)$ обращалась в нуль.



Фиг. 11.1. Сферические координаты. Элемент объема в сферических координатах.

В частности, если центральные силы обязаны кулоновскому взаимодействию, т. е. если

$$F = - \frac{Ze_0^2}{r^3} \mathbf{r},$$

где Ze_0 — заряд ядра ($e = -e_0$ — заряд электрона, вращающегося вокруг ядра), то для потенциальной энергии имеем:

$$V(r) = \int_{\infty}^r \frac{Ze_0^2}{r^2} dr = - \frac{Ze_0^2}{r}. \quad (11.5a)$$

Далее выразим в сферических координатах лапласиан ∇^2 , для чего воспользуемся тождеством:

$$\nabla^2 \psi = \text{div grad } \psi. \quad (11.6)$$

Найдем сначала компоненты вектора:

$$\mathbf{B} = \text{grad } \psi \quad (11.7)$$

в сферических координатах.

Принимая во внимание, что градиент всегда характеризует изменение скалярного поля по некоторому направлению: $B_i = \text{grad}_i \psi = \frac{\partial \psi}{\partial l_i}$, в соответствии с фиг. 11.1 будем иметь:

$$B_r = \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad B_\vartheta = \frac{\partial \psi}{r d\vartheta}, \quad B_\varphi = \frac{\partial \psi}{r \sin \vartheta d\varphi} = \frac{\partial \psi}{r \sin \vartheta \partial \varphi}. \quad (11.8)$$

Воспользуемся общим определением дивергенции:

$$\text{div } \mathbf{B} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{\oint_S (\mathbf{B} d\mathbf{S})}{d^3x} = \frac{1}{d^3x} \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (B_i dS_i) dx_i, \quad (11.9)$$

где d^3x — элемент объема в сферической системе координат:

$$d^3x = r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi \quad (11.10)$$

(x_i — координаты: r , ϑ и φ), а dS_i — элементарные площадки, перпендикулярные соответственно направлениям dr , $r d\vartheta$, $r d\varphi$:

$$\begin{aligned} dS_r &= r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi, \\ dS_\vartheta &= r \sin \vartheta dr d\varphi, \\ dS_\varphi &= r dr d\vartheta. \end{aligned} \quad (11.11)$$

Тогда с помощью (11.8) получим:

$$\begin{aligned} \text{div } \mathbf{B} = \nabla^2 \psi &= \frac{1}{r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \right) dr + \right. \\ &+ \left. \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\frac{\partial \psi}{r \partial \vartheta} r \sin \vartheta dr d\varphi \right) d\vartheta + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \psi}{r \sin \vartheta \partial \varphi} r dr d\vartheta \right) d\varphi \right\}. \end{aligned} \quad (11.12)$$

Отсюда легко найдем выражение оператора Лапласа в сферических координатах:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (11.13)$$

Полагая в (11.13):

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = \nabla_r^2, \quad (11.14)$$

а

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \nabla_{\vartheta, \varphi}^2, \quad (11.15)$$

будем иметь:

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2; \quad (11.16)$$

в результате уравнение Шредингера (4.8) принимает вид:

$$\left(\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 \right) \psi + k^2(r) \psi = 0, \quad (11.17)$$

где

$$k^2(r) = \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - V(r)] \quad (11.18)$$

и, согласно (11.4), зависит только от радиуса r .

б. Разделение переменных. Собственные функции

Будем решать уравнение (11.17), основываясь на методе разделения переменных. Представляя искомую волновую функцию в виде произведения радиальной части на угловую:

$$\psi = R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi), \quad (11.19)$$

и умножая исходное уравнение на $\left(\frac{r^2}{RY}\right)$, получаем:

$$\frac{r^2 \nabla_r^2 R}{R} + r^2 k^2 = - \frac{\nabla_{\vartheta, \varphi}^2 Y}{Y}. \quad (11.20)$$

Так как слева здесь стоит величина, зависящая только от r , а справа — только от углов ϑ и φ , это равенство может иметь место лишь в том случае, когда и левая и правая части равны по отдельности некоторой постоянной величине λ , получившей название постоянной разделения.

Таким образом, для радиальной и угловой частей волновой функции будем иметь соответственно уравнения:

$$\nabla_r^2 R + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right) R = 0, \quad (11.21)$$

$$\nabla_{\vartheta, \varphi}^2 Y + \lambda Y = 0, \quad (11.22)$$

причем весьма важно то обстоятельство, что последнее уравнение для угловой части не содержит переменной r и не зависит от конкретного вида потенциальной энергии V , вследствие чего, как мы уже отмечали в начале параграфа, его решение будет справедливым для любых центральных сил.

Полагая далее:

$$Y = \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi), \quad (11.23)$$

с помощью способа, использованного при отделении радиальной части от угловой, находим для разделенных функций Θ и Φ следующие уравнения:

$$\nabla_{\vartheta}^2 \Theta + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta}\right) \Theta = 0, \quad (11.24)$$

$$\nabla_{\varphi}^2 \Phi + m^2 \Phi = 0. \quad (11.25)$$

Здесь m^2 является постоянной разделения; кроме того, мы ввели обозначения:

$$\nabla_{\vartheta}^2 = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} \right), \quad (11.26)$$

$$\nabla_{\varphi}^2 = \frac{d^2}{d\varphi^2}, \quad (11.27)$$

в которых частные производные заменены полными, поскольку каждая из функций Θ и Φ зависит только от одной переменной.

Таким образом, для определения собственных значений энергии E_i и соответствующих им собственных функций ψ_i мы получили три уравнения: (11.21), (11.24), (11.25), причем, если последнее из них содержит только один параметр m^2 , то второе и первое -- по два.

Принимая во внимание, что при решении одного уравнения можно найти собственные значения только для одного параметра, решение всей задачи мы должны начинать с решения уравнения (11.25), а затем уже, зная m^2 , переходить к решению уравнения (11.24) и, наконец, к решению уравнения (11.21) для радиальной функции.

При нахождении нормировочного коэффициента можно воспользоваться соотношением:

$$\int \psi^* \psi d^3x = \int_0^\infty R^* R r^2 dr \int_0^\pi \Theta^* \Theta \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\varphi,$$

из которого видно, что нормировку можно производить для каждой из функций по отдельности:

$$\int_0^\infty R^* R r^2 dr = 1, \quad (11.28)$$

$$\int_0^\pi \Theta^* \Theta \sin \vartheta d\vartheta = 1, \quad (11.29)$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\varphi = 1. \quad (11.30)$$

Частное решение для азимутальной функции [см. уравнение 11.25)] может быть представлено двояким образом:

$$\Phi = C e^{im\varphi} \quad (11.31)$$

или

$$\Phi = A \cos(m\varphi + \varphi_0). \quad (11.32)$$

Каждое из этих частных решений имеет различную физическую интерпретацию. В самом деле, решение (11.31) соответствует бегущей по окружности волне и отвечает, например, равномерному вращению электронов, в то время как решение (11.32) связано со стоячими волнами и соответствует, например, колебаниям электрона по некоторой дуге. Чтобы функция Φ описывала вращение электрона вокруг ядра, она должна быть выбрана в виде бегущих волн (11.31). Так как второе решение, пропорциональное $e^{-im\varphi}$, может быть получено из первого путем замены (m) на

($-m$), то, не ограничивая общности, решение следует вообще выбрать в виде:

$$\Phi = C e^{im\varphi}, \quad (11.33)$$

где величина m может пробегать как положительные, так и отрицательные значения.

Учитывая, что волновая функция должна удовлетворять условию однозначности (см. § 4, п. „б“), на функцию $\Phi(\varphi)$ необходимо наложить условие периодичности:

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi), \quad (11.34)$$

из которого следует, что

$$e^{2i\pi m} = 1.$$

Отсюда для величины m , получившей название *магнитного квантового числа*, имеем:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (11.35)$$

Из условия нормировки (11.30) находим $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Непосредственным вычислением легко показать, что функции:

$$\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (11.36)$$

будут удовлетворять условию ортонормированности:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^* \Phi_{m'} d\varphi = \delta_{mm'}.$$

Поскольку собственные значения m уже известны, а также найдена волновая функция, зависящая от азимутального угла φ , можно приступить к решению уравнения (11.24). Вводя новую переменную:

$$x = \cos \vartheta \quad (11.37)$$

и обозначая производные по x штрихами, вместо (11.24) получаем уравнение:

$$[(1-x^2)\Theta']' + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0. \quad (11.38)$$

Как нетрудно видеть, последнее уравнение имеет особые точки $x = \pm 1$, т. е. такие точки, в которых один из коэффициентов при Θ обращается в бесконечность. Чтобы исключить указанную расходимость, будем искать решение Θ в виде:

$$\Theta = (1-x^2)^{s/2} u. \quad (11.39)$$

Подставляя (11.39) в (11.38) и сокращая все равенство на $(1-x^2)^{s/2}$, получаем:

$$(1-x^2)u'' - 2x(s+1)u' + \left[\lambda - s^2 - s + \frac{s^2 - m^2}{1-x^2}\right]u = 0. \quad (11.40)$$

Мы исключаем особенность в последнем члене, полагая:

$$s = \pm m.$$

Поскольку основное уравнение зависит лишь от m^2 , решения, отвечающие этим двум значениям s , удовлетворяют одному и тому же уравнению и, следовательно, должны быть связаны между собой простым линейным соотношением:

$$\Theta(m) = A\Theta(-m). \quad (11.41)$$

Учитывая последнее соотношение, будем решать уравнение (11.40), полагая:

$$s = m \geq 0. \quad (11.42)$$

В силу же соотношения (11.41) оно автоматически будет распространено также и на отрицательные значения m .

При условии (11.42) уравнение (11.40) принимает вид:

$$(1 - x^2)u'' - 2x(m + 1)u' + (\lambda - m(m + 1))u = 0. \quad (11.43)$$

Поскольку последнее уравнение не имеет особенностей, его решение может быть представлено в виде полинома:

$$u = \sum_{k=0} a_k x^k, \quad (11.44)$$

в результате подстановки которого в уравнение (11.43) получаем:

$$\sum_{k=0} \{k(k-1)a_k x^{k-2} + a_k [\lambda - (k+m)(k+m+1)]x^k\} = 0.$$

Группируя члены с одинаковыми степенями x , приходим к равенству:

$$\sum_{k=0} \{(k+2)(k+1)a_{k+2} + [\lambda - (k+m)(k+m+1)]a_k\} x^k = 0,$$

из которого следует рекуррентное соотношение:

$$(k+2)(k+1)a_{k+2} = -[\lambda - (k+m)(k+m+1)]a_k, \quad (11.45)$$

связывающее между собой все коэффициенты ряда (11.44). Ввиду того, что коэффициенты a_k связаны лишь с a_{k+2} , т. е. через один, функция u будет либо четной, либо нечетной в зависимости от того, является ли старший (см. ниже) член четным или нечетным.

Требуя, чтобы ряд (11.44) был ограничен некоторой максимальной степенью $k=q$, так, что

$$a_{q+2} = 0, \quad a_q \neq 0,$$

на основании (11.45) получаем:

$$\lambda = (q+m)(q+m+1), \quad (11.46)$$

где
$$q = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (11.47)$$

т. е. равно той степени, на которой мы обрываем ряд. Вводя *орбитальное квантовое число* l :

$$l = q + m, \quad (11.48)$$

находим, что оно может принимать так же, как и числа q и m , лишь положительные целые значения, включая нуль, т. е.:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (11.49)$$

причем в силу (11.48):

$$l \geq m. \quad (11.50)$$

Принимая во внимание, что согласно (11.48) и (11.46):

$$\lambda = l(l + 1), \quad (11.51)$$

уравнение (11.40) можно привести к виду:

$$(1 - x^2)u'' - 2x(m + 1)u' + [l(l + 1) - m(m + 1)]u = 0, \quad (11.52)$$

где

$$u = a_{l-m}x^{l-m} + a_{l-m-2}x^{l-m-2} + \dots + \begin{cases} a_0 \\ a_1x \end{cases}. \quad (11.53)$$

Мы не будем вычислять соотношение между коэффициентами a_q и a_{q+2} с помощью рекуррентного соотношения (11.45), а представим последнее решение в свернутой форме.

Для этого введем функцию:

$$v = (x^2 - 1)^l, \quad (11.54)$$

подчиняющуюся уравнению:

$$(1 - x^2)v' + 2xlv = 0, \quad (11.55)$$

которое нетрудно получить, взяв первую производную от v по x . Дифференцируя (11.55) с помощью правила Лейбница [см. (10.34а)] $(l + m + 1)$ раз и полагая:

$$v^{(l+m)} \equiv \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l = u_1, \quad (11.56)$$

для функции u_1 получаем уравнение:

$$(1 - x^2)u_1'' - 2x(m + 1)u_1' + (l + m + 1)(l - m)u_1 = 0, \quad (11.57)$$

точно совпадающее с дифференциальным уравнением (11.52) для функции u .

Следовательно, функции u и u_1 должны быть пропорциональными друг другу:

$$u = \text{const} \cdot u_1. \quad (11.58)$$

1) Другое решение уравнения (11.52) будет расходящимся при $x \rightarrow \pm 1$.

Поскольку нормировочный коэффициент функции Θ пока еще не определен, эту постоянную мы положим равной $\frac{1}{2^{|l|}}$, исходя из тех соображений, чтобы при $m=0$ последнее решение переходило в полином Лежандра:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^{|l|}} \frac{d^{|l|}(x^2-1)^{|l|}}{dx^{|l|}}. \quad (11.59)$$

Таким образом, мы будем иметь:

$$u = \frac{1}{2^{|l|}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l.$$

Отсюда с помощью (11.39) находим значение для функции Θ :

$$\Theta_l^m = C_l^m P_l^m(x). \quad (11.60)$$

Здесь P_l^m — присоединенный полином Лежандра, определяемый выражением:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} \left[\frac{(x^2-1)^l}{2^{|l|}} \right], \quad (11.61)$$

а C_l^m — нормировочный коэффициент.

Хотя последнее выражение было получено для положительных значений m , в силу известного соотношения¹⁾:

$$P_l^m(x) = (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!} P_l^{-m}(x), \quad (11.62)$$

оно автоматически распространяется также и на отрицательные значения m . Из равенств (11.61) и (11.62) можно окончательно установить область изменения квантового числа m :

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l;$$

¹⁾ Для доказательства выражения (11.62) преобразуем его с помощью равенства (11.61) к форме:

$$(l-|m|)! (x^2-1)^{|m|} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l = (l+|m|)! \frac{d^{l-|m|}}{dx^{l-|m|}} (x^2-1)^l. \quad (11.63)$$

Поскольку же P_l^m и P_l^{-m} должны быть связаны между собой линейным соотношением [см. (11.41)], нам достаточно показать, что коэффициенты при старшей степени x в обеих частях равенства (11.63) совпадают друг с другом, т. е.

$$(l-|m|)! x^{2|m|} \frac{d^{l+|m|} x^{2l}}{dx^{l+|m|}} = (l+|m|)! \frac{d^{l-|m|}}{dx^{l-|m|}} x^{2l};$$

в этом нетрудно убедиться, учитывая, что

$$\frac{d^k x^n}{dx^k} = \begin{cases} \frac{n!}{(n-k)!} x^{n-k} & \text{при } k \leq n, \\ 0 & \text{при } k > n. \end{cases} \quad (11.64)$$

это следует из того факта, что при $|m| > l$ решение P_l^m обращается в нуль.

Коэффициент C_l^m в (11.60) может быть найден из условия нормировки:

$$\int_0^\pi \Theta_l^m \Theta_l^m \sin \vartheta d\vartheta = \int_{-1}^1 \Theta_l^m(x) \Theta_l^m(x) dx = 1.$$

Подставляя сюда решение (11.60) и учитывая (11.62), получаем:

$$\frac{(-1)^m (l+m)!}{(2l!)^2 (l-m)!} |C_l^m|^2 \int_{-1}^1 \left[\frac{d^{l-m}}{dx^{l-m}} (x^2-1)^l \right] \left[\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l \right] dx = 1.$$

Перебрасывая производную со второго множителя на первый $(l+m)$ раз, т. е. раскрывая последний интеграл $l+m$ раз по частям, получаем:

$$\frac{1}{(2l!)^2} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} |C_l^m|^2 \int_{-1}^{+1} (1-x^2)^l \frac{d^{2l}}{dx^{2l}} (x^2-1)^l dx = 1.$$

Принимая во внимание равенство [см. также (11.64)]:

$$\frac{d^{2l}}{dx^{2l}} x^n = \begin{cases} 2l! & (n=2l), \\ 0 & (n < 2l), \end{cases}$$

а также учитывая, что

$$\int_{-1}^{+1} (1-x^2)^l dx = \frac{(l!)^2 2^{2l+1}}{(2l+1)!},$$

находим:

$$C_l^m = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}. \quad (11.65)$$

Тогда

$$\Theta_l^m = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(x). \quad (11.66)$$

Для шаровой функции $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$, удовлетворяющей уравнению (11.22), на основании (11.23), (11.36) и (11.66) имеем:

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \Theta_l^m \Phi_m = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (11.67)$$

причем условие ортонормированности для шаровых функций принимает вид¹⁾:

$$\oint (Y_{l'}^{m'})^* Y_l^m d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (11.68)$$

Определив собственные значения параметров m и λ , можно перейти к решению уравнения (11.21) для радиальной части, в котором остается лишь один неизвестный параметр. Однако, поскольку радиальное решение требует задания потенциальной энергии $V(r)$, нахождение этого решения мы отнесем к следующим параграфам, где будут рассматриваться конкретные проблемы.

в. Физический смысл квантовых чисел l и m . Момент количества движения

Выше мы нашли, что квантовое число l характеризует собственное значение $\lambda = l(l+1)$ оператора $-\nabla_{\vartheta, \varphi}^2$ [см. (11.22) и (11.51)], являющегося частью оператора Гамильтона:

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + V(r) = -\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2 \nabla_{\vartheta, \varphi}^2}{2m_0 r^2} + V(r). \quad (11.69)$$

¹⁾ Чтобы доказать условие ортонормированности (11.68), следует подставить в это равенство для шаровых функций их выражение (11.67). Тогда, интегрируя по углу φ , легко показать, что

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi = \delta_{mm'}.$$

При интегрировании же по углу ϑ в полиномах Лежандра можно уже положить $m' = m$. Тогда, не ограничивая общности, можно выбрать $l' \leq l$. Случай $l' = l$ мы только что рассмотрели при определении нормировочного коэффициента. С помощью аналогичного способа легко показать, что при $l' < l$ в результате переброса производных с функции, характеризваемой индексом l , на функцию с индексом l' интеграл (11.68) обратится в нуль.

²⁾ С помощью соотношения (11.62) мы можем выражение для шаровой функции (11.67) представить в виде:

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = a_m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (11.67a)$$

где

$$a_m = \begin{cases} 1 & \text{при } m \geq 0 \\ (-1)^m & \text{при } m < 0. \end{cases} \quad (11.67b)$$

Замежим, что многие авторы вообще полагают коэффициент $a_m = 1$.

В том случае, когда можно ограничиться нахождением шаровых функций, удовлетворяющих только условию ортонормированности (11.68), оба решения являются совершенно равноправными, поскольку $a_m^2 = 1$. Однако там, где необходимо использовать рекуррентные соотношения между шаровыми функциями с различными индексами m [см. ниже формулы (12.22), (12.23)], например, при нахождении правил отбора для ротора (см. § 12) или при решении задачи ротора с учетом спина электрона (см. § 18), следует брать для коэффициентов a_m значения (11.67b).

Сравнивая последний гамильтониан с классической функцией Гамильтона:

$$H = \frac{m_0 v^2}{2} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m_0} + \frac{L^2}{2m_0 r^2} + V(r), \quad (11.70)$$

где $p_r = m_0 \dot{r}$, а $L = m_0 r^2 \dot{\phi}$, мы видим, что оператору $(-\hbar^2 \nabla_{\phi}^2)$ в классическом случае соответствует квадрат момента количества движения L^2 , а оператору $(-\hbar^2 \nabla_r^2)$ — квадрат радиального импульса p_r^2 .

Исследуем это соответствие более подробно. Как известно из классической механики, момент количества движения L определяется формулой:

$$L = [r p]. \quad (11.71)$$

Заметим, кстати, что если имеется момент $M = [r F]$ внешних сил F , то изменение L со временем будет происходить по закону:

$$\frac{dL}{dt} = M, \quad (11.72)$$

причем в случае центральных сил ($F \parallel r$) момент внешних сил M обращается в нуль и мы имеем:

$$L = \text{const.}$$

Этот результат известен в классической механике как закон сохранения момента количества движения и используется, в частности, в проблеме Кеплера как закон сохранения секториальной скорости.

Чтобы обобщить классическое выражение момента количества движения на квантовый случай, мы должны в выражении (11.71) классический импульс p заменить оператором импульса $p = \frac{\hbar}{i} \nabla$.

Тогда будем иметь:

$$L = [r p] = \frac{\hbar}{i} [r \nabla], \quad (11.73)$$

или

$$\begin{aligned} L_x &= y p_z - z p_y, \\ L_y &= z p_x - x p_z, \\ L_z &= x p_y - y p_x. \end{aligned} \quad (11.74)$$

Прежде всего заметим, что операторы компонент момента количества движения L_x , L_y и L_z не коммутируют между собой. В самом деле, определяя, например, перестановочные соотношения между L_x и L_y , находим:

$$L_x L_y - L_y L_x = (y p_z - z p_y)(z p_x - x p_z) - (z p_x - x p_z)(y p_z - z p_y).$$

Пользуясь далее перестановочными соотношениями между импульсом и соответствующей координатой [см. (7.7) и (7.8)], находим:

$$L_x L_y - L_y L_x = -i\hbar (y p_x - x p_y) = i\hbar L_z. \quad (11.75)$$

Аналогично можно показать, что

$$\begin{aligned} L_y L_z - L_z L_y &= i\hbar L_x, \\ L_z L_x - L_x L_z &= i\hbar L_y. \end{aligned} \quad (11.76)$$

Чтобы выразить в сферических координатах оператор квадрата момента количества движения:

$$\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, \quad (11.77)$$

вычислим сначала в сферических координатах составляющие L_x , L_y и L_z . Принимая во внимание соотношения (11.2) между декартовыми и сферическими координатами, будем иметь:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} &= \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \vartheta} = \\ &= r \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial \psi}{\partial x} + r \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial y} - r \sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial z} = \end{aligned} \quad (11.78)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{xz}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{yz}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial y} - \rho \frac{\partial \psi}{\partial z}, \\ \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} &= \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} = \\ &= -r \sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial x} + r \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial \psi}{\partial y} = -y \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial \psi}{\partial y}. \end{aligned} \quad (11.79)$$

Умножая (11.78) на $\frac{x}{\rho}$, а (11.79) на $\left(-\frac{yz}{\rho^2}\right)$ и учитывая, что $\rho^2 = x^2 + y^2 + z^2$, после сложения этих двух произведений придем к соотношению:

$$z \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial z} = \cos \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} - \sin \varphi \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \varphi}. \quad (11.80)$$

Если же равенства (11.78) и (11.79) умножить соответственно на $\left(-\frac{y}{\rho}\right)$ и $\left(-\frac{xz}{\rho^2}\right)$, то, повторяя только что использованный прием, получаем:

$$y \frac{\partial \psi}{\partial z} - z \frac{\partial \psi}{\partial y} = -\left\{ \sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \cos \varphi \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right\}. \quad (11.81)$$

Отсюда, учитывая равенства (11.79) и (11.74), находим, что:

$$L_x = -\frac{\hbar}{i} \left\{ \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cos \varphi \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}, \quad (11.82)$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i} \left\{ \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \sin \varphi \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}, \quad (11.83)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (11.84)$$

Вводя переменную $x = \cos \vartheta$ (эту переменную не следует путать с декартовой координатой x), выражения (11.82) и (11.83) можно представить в виде:

$$L_x \pm iL_y = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(i \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mp \sqrt{1-x^2} \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (11.85)$$

Чтобы определить действие этих операторов на шаровые функции, воспользуемся тем обстоятельством, что одну и ту же шаровую функцию можно представить двояким образом: либо в виде (11.67), либо в виде:

$$Y_l^m = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} P_l^{-m}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}. \quad (11.86)$$

Действуя оператором L_z непосредственно на шаровую функцию, находим:

$$L_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m. \quad (11.87)$$

Отсюда следует, что квантовое число m характеризует проекцию момента количества движения на ось z .

При определении же действия оператора $L_x + iL_y$ на шаровую функцию подставим вместо Y_l^m ее выражение (11.67), а при действии оператора $L_x - iL_y$ — эквивалентное выражение (11.86).

Тогда из равенства:

$$\begin{aligned} e^{\pm i\varphi} \left(i \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mp \sqrt{1-x^2} \frac{\partial}{\partial x} \right) e^{im\varphi} (1-x^2)^{\pm \frac{m}{2}} f(x) = \\ = \mp e^{i\varphi(m \pm 1)} (1-x^2)^{\frac{1 \pm m}{2}} \frac{df(x)}{dx} \end{aligned}$$

следует, что:

$$(L_x \pm iL_y) Y_l^m = -\hbar \sqrt{(l+1 \pm m)(l \mp m)} Y_l^{m \pm 1}. \quad (11.88)$$

С помощью последних соотношений находим:

$$\begin{aligned} L^2 Y_l^m &= \left[\frac{1}{2} (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) + \frac{1}{2} (L_x - iL_y) \times \right. \\ &\quad \left. \times (L_x + iL_y) + L_z^2 \right] Y_l^m = -\hbar^2 \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 Y_l^m = \\ &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^m. \end{aligned} \quad (11.88a)$$

Отсюда видно, что Y_l^m является собственной функцией операторов L_z и L^2 . Это следует из того, что операторы L_z и L^2

¹) В этом равенстве следует положить:

$$f(x) = \frac{d^{l \pm m}}{dx^{l \pm m}} (x^2 - 1)^l.$$

коммутируют друг с другом, а также с гамильтонианом H . Поскольку же операторы L_x и L_y не коммутируют с L_z , то поэтому нельзя подобрать такую волновую функцию, которая являлась бы собственной функцией как оператора L_z , так и операторов L_x или L_y . Это, однако, не означает, что произвольное направление z является каким-то избранным.

Можно записать шаровую функцию таким образом, что она будет являться собственной функцией операторов L_x и L^2 . Тогда она не будет собственной функцией оператора L_z (см. задачу 12.2).

г. Анализ полученных результатов

Как правило, при анализе квантовых результатов или находят их классические аналоги, или производится сравнение с полуклассической теорией Бора, результаты которой имеют простую физическую интерпретацию.

При исследовании движения в поле центральных сил по теории Бора прежде всего воспользуемся классическим законом сохранения момента количества движения, из которого следует, что движение должно происходить в одной плоскости, а момент, направленный перпендикулярно к этой плоскости, должен иметь значение:

$$L = p_\varphi = \frac{\partial T}{\partial \dot{\varphi}} = m_0 r^2 \dot{\varphi} = \text{const.} \quad (11.89)$$

Применяя правила квантования, находим дискретные значения, которые может принимать этот момент:

$$\oint p_\varphi d\varphi = 2\pi L_B = 2\pi \hbar n_\varphi,$$

откуда

$$L_B^2 = n_\varphi^2 \hbar^2, \quad (11.90)$$

где квантовое число:

$$n_\varphi = 1, 2, 3, \dots \quad (11.91)$$

Кроме того, если ось z направлена не перпендикулярно к плоскости орбиты, то, следуя боровской теории, можно произвести квантование проекции момента на ось z , т. е. произвести так называемое пространственное квантование. Тогда

$$(L_B)_z = \hbar n_\psi, \quad (11.92)$$

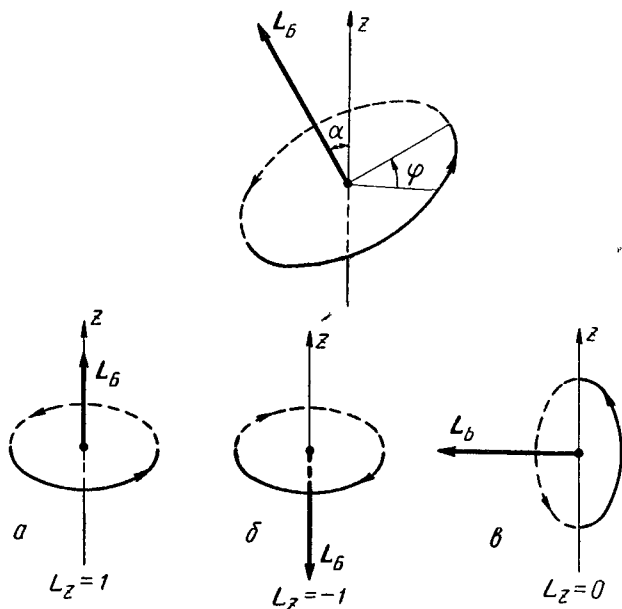
где квантовое число:

$$n_\psi = -n_\varphi, -n_\varphi + 1, \dots, 0, \dots, n_\varphi - 1, n_\varphi. \quad (11.93)$$

Отсюда следует, что угол α между направлениями момента L и осью z определяется формулой:

$$\cos \alpha = \frac{n_\psi}{n_\varphi}, \quad (11.94)$$

т. е. может принимать лишь некоторые дискретные значения.



Фиг. 11.2. Пространственное квантование по Бору (для $L=1$; в единицах \hbar).

Пространственное квантование изображено на фиг. 11.2, откуда видно, что случай $n_\psi = n_\varphi$ отвечает параллельности момента L оси z (см. фиг. 11.2, а), а случай $n_\psi = -n_\varphi$ — их антипараллельности (см. фиг. 11.2, б). Наконец, в случае $n_\psi = 0$ эти векторы будут расположены перпендикулярно друг другу (см. фиг. 11.2, в). Очевидно, что пространственное квантование есть смысл производить, когда имеется какое-то выделенное направление, например направление вектора напряженности магнитного поля¹⁾. В случае отсутствия выделенного направления ось z можно направить перпендикулярно к плоскости орбиты.

¹⁾ Само собой разумеется, что при наличии магнитного поля центральная симметрия будет нарушена.

Произведем сравнение квантовомеханических результатов с результатами боровской теории для квадратов моментов и их проекций на ось z :

$$\begin{aligned} L_{\text{кв.}}^2 &= \hbar^2 l(l+1), & L_{\text{Б}}^2 &= \hbar^2 n_{\varphi}^2, \\ l &= 0, 1, 2, 3, \dots, & n_{\varphi} &= 1, 2, 3, 4, \dots, \\ L_z &= \hbar m, & (L_{\text{Б}})_z &= \hbar n_{\psi}, \\ -l &\leq m \leq l, & -n_{\varphi} &\leq n_{\psi} \leq n_{\varphi}. \end{aligned}$$

Отсюда видно, что $L_{\text{кв.}}^2$ при $l=0$ обращается в нуль, в то время как $L_{\text{Б}}^2$ не может вообще обратиться в нуль. Таким образом, состояние с $l=0$ не имеет классического аналога. Отсюда, в частности, следует, что механический момент атома, находящегося в наименьшем состоянии, вопреки результатам теории Бора, обращается в нуль. Экспериментальные данные из области спектроскопии атомов целиком подтверждают этот квантовомеханический результат.

Далее, согласно боровской теории, за направление орбитального момента можно выбрать направление оси z . В этом случае $n_{\psi} = n_{\varphi}$, и поэтому

$$L_{\text{Б}}^2 = (L_{\text{Б}})_z^2_{\text{макс.}} \quad (11.95)$$

По волновой же теории такой случай соответствует $m=l$, когда

$$L_z^2_{\text{макс.}} = \hbar^2 l^2, \quad (11.96)$$

в то время как

$$L_{\text{кв.}}^2 = \hbar^2 l^2 + \hbar^2 l = L_z^2_{\text{макс.}} + \hbar^2 l. \quad (11.97)$$

Появление дополнительного орбитального момента $\hbar^2 l$ связано с некоммутативностью операторов проекций момента L_x , L_y и L_z друг с другом, благодаря чему их все невозможно задать точно. Поэтому, когда $L_z = L_z_{\text{макс.}} = \hbar l$, проекции L_x и L_y не обращаются в нуль и принимают некоторое минимальное значение, в связи с чем:

$$L_{\text{кв.}}^2 = L_z^2_{\text{макс.}} + (\Delta L_x)_{\text{мин.}}^2 + (\Delta L_y)_{\text{мин.}}^2; \quad (11.98)$$

минимальное значение $(\Delta L_x)_{\text{мин.}}^2$ и $(\Delta L_y)_{\text{мин.}}^2$ может быть получено с помощью соотношения неопределенности [см. (8.13)]:

$$(\Delta L_x)_{\text{мин.}}^2 (\Delta L_y)_{\text{мин.}}^2 = \frac{1}{4} |L_x L_y - L_y L_x|^2 \frac{1}{4} \hbar^2 L_z^2_{\text{макс.}} = \frac{1}{4} \hbar^4 l^2. \quad (11.99)$$

В силу симметрии задачи относительно осей x и y можно положить $(\Delta L_x)_{\text{мин.}}^2 = (\Delta L_y)_{\text{мин.}}^2$, откуда получаем:

$$(\Delta L_x)_{\text{мин.}}^2 = (\Delta L_y)_{\text{мин.}}^2 = \hbar^2 \frac{l}{2}; \quad (11.100)$$

сумма же $(\Delta L_x)_{\text{мин.}}^2$ и $(\Delta L_y)_{\text{мин.}}^2$ как раз будет равна дополнительному моменту $\hbar^2 l$. В результате приходим к соотношению (11.97).

Таким образом, природа этого дополнительного члена та же, что и природа нулевой энергии гармонического осциллятора, т. е. связана с соотношением неопределенности.

Заметим, что в области больших значений орбитального квантового числа l членом $\hbar^2 l$ в (11.97) по сравнению с $\hbar^2 l^2$ можно пренебречь, и мы будем в этом случае иметь фактически полуклассическое боровское решение.

§ 12. РОТАТОР

Шаровые функции, как собственные функции квадрата момента количества движения, находят прежде всего свое применение в квантовой теории ротатора, т. е. при квантовом описании свободного движения материальной точки по сфере.

Результаты теории ротатора могут быть непосредственно использованы при изучении спектров двухатомных молекул. В то же самое время при исследовании движения частицы в поле центральных сил угловая часть волновой функции ψ также описывается шаровыми функциями, и поэтому многие выводы теории ротатора (например, угловая зависимость волновой функции или правила отбора для квантовых чисел l и m) целиком относятся также и к теории движения частицы в центральном поле, в частности в кулоновском поле (теория атома водорода).

а. Собственные функции ротатора

Прежде всего выпишем основные результаты квантования ротатора по теории Бора, которыми мы воспользуемся как отправным пунктом для нашего дальнейшего анализа.

Поместим начало системы координат в центре сферы радиуса $r = a = \text{const}$, по которой движется материальная точка. В этом случае потенциальная энергия $V(r)$ будет постоянна:

$$V(r) = V(a) = \text{const.} \quad (12.1)$$

В силу того, что отсчет потенциальной энергии можно производить от любого значения, принимая его за нулевое, положим:

$$V(a) = 0. \quad (12.1a)$$

Тогда полная энергия ротатора будет равна его кинетической энергии:

$$E = T = \frac{m_0 a^2 \dot{\phi}^2}{2}. \quad (12.2)$$

Отсюда для обобщенного импульса p_φ , имеющего смысл момента количества движения, найдем:

$$p_\varphi = \frac{\partial T}{\partial \dot{\varphi}} = m_0 a^2 \dot{\varphi}. \quad (12.3)$$

Производя квантование по Бору, получаем:

$$p_\varphi = n_\varphi \hbar, \quad (12.4)$$

а, значит,

$$E_{n_\varphi} = \frac{n_\varphi^2 \hbar^2}{2J}, \quad (12.5)$$

где $J = m_0 a^2$ — момент инерции.

Переходя к квантовомеханической теории ротатора, учтем, что эта задача представляет собой частный случай задачи на движение в поле центральных сил. Поэтому для определения радиальной функции $R(r)$ воспользуемся уравнением (11.21):

$$\nabla_r^2 R(r) + \left[\frac{2m_0 E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0. \quad (12.6)$$

Здесь мы положили потенциальную энергию равной нулю и подставили, согласно (11.51), $\lambda = l(l+1)$. Поскольку для ротатора $r = a = \text{const}$, функция $R(r) = R(a) = \text{const}$, т. е. $\nabla_r^2 R(a) = 0$. Отсюда для энергии E_l найдем значение:

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 a^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J}. \quad (12.7)$$

Сравнивая это выражение с (12.5), мы видим, что в боровской теории энергия $E \sim n_\varphi^2$, а в квантовой механике $E \sim l(l+1)$. Это различие обусловлено, как уже говорилось в § 11 (п. „г“), некоммутативностью компонент L_x , L_y и L_z оператора момента количества движения и является характерной особенностью всей квантовой механики. Совпадение обоих решений будет иметь место лишь в области больших значений квантовых чисел l , когда $l^2 \gg l$.

Согласно (12.7), энергия ротатора E_l зависит только от орбитального квантового числа l ; магнитное же квантовое число m , характеризующее проекцию момента L на ось z (т. е. ориентацию момента в пространстве), в выражение для E_l не входит. Однако соответствующие собственному значению E_l собственные функции Y_l^m [см. (11.67)] зависят еще и от m . Поскольку m может изменяться от $-l$ до $+l$ [см. (11.50)], каждому значению энергии E_l будет соответствовать $(2l+1)$ взаимно ортогональных собственных функций, описывающих состояния ротатора, отличающиеся лишь ориентацией момента L относительно оси z . В этом случае говорят, что уровень энергии E_l является $(2l+1)$ -кратно вырожденным.

Вообще, состояние системы (или данный уровень) называют N -кратно вырожденным, если одному и тому же собственному значению энергии соответствует N линейно независимых собственных функций.

Вырождение энергетических уровней ротатора физически связано с тем обстоятельством, что ротатор представляет собой систему, обладающую центральной симметрией, вследствие которой все направления, проходящие через начало координат, оказываются равноценными. Из этих же соображений следует, что вырождение должно иметь место для любых центрально-симметричных систем.

Если же существует какое-то выделенное направление, определяемое, например, направлением магнитного поля, то центральная симметрия нарушается и возможные направления для момента \mathbf{L} становятся уже неравнозначными, благодаря чему вырождение либо снимается полностью, либо кратность его уменьшается.

Различные уровни энергии в спектроскопической терминологии называют термами. Так уровень, соответствующий $l=0$, называют s -термом, уровень с $l=1$ называют p -термом. Для d -терма $l=2$. Для f -терма $l=3$. Для g -терма $l=4$ и т. д. При этом о ротаторе говорят, что при $l=0$ он находится в s -состоянии, при $l=1$ в p -состоянии и т. д.

Рассмотрим более подробно s - и p -состояния ротатора. Поскольку в s -состоянии $l=m=0$, согласно (11.67) собственная функция Y_0^0 , соответствующая нулевому собственному значению энергии $E_0=0$, будет равна:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \quad (12.8)$$

Отсюда для плотности вероятности $|Y_0^0|^2$ найдем:

$$|Y_0^0|^2 = \frac{1}{4\pi}. \quad (12.9)$$

В p -состоянии $l=1$, а квантовое число m может принимать три значения: $-1, 0, +1$. Следовательно, собственному значению энергии $E_1 = \frac{\hbar^2}{J}$ будут соответствовать три собственные функции:

$$Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin \vartheta, \quad (12.10)$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta, \quad (12.11)$$

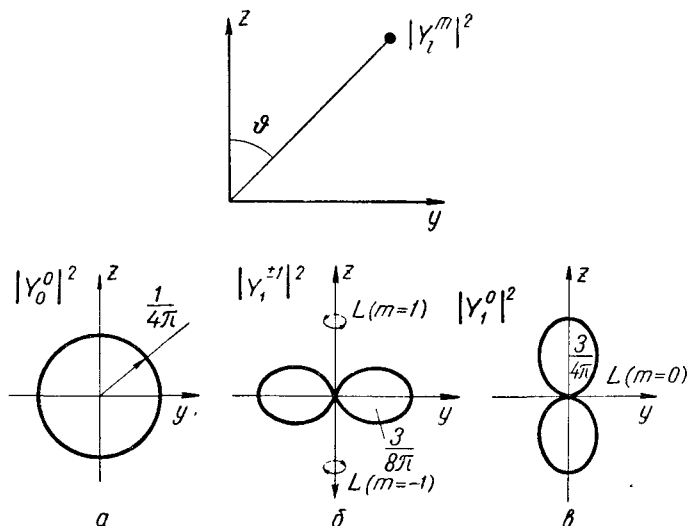
$$Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \vartheta. \quad (12.12)$$

Плотности вероятности будут определяться при этом формулами:

$$|Y_1^{-1}|^2 = |Y_1^1|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \vartheta, \quad (12.13)$$

$$|Y_1^0|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \vartheta. \quad (12.14)$$

Графически распределения плотности вероятности (12.9), (12.13) и (12.14) представлены на фиг. 12.1, причем в силу независи-



Фиг. 12.1. Распределение плотности вероятности для ротатора.

мости $|Y_l^m|^2$ от угла ϑ изображение дано только в плоскости (zy). Чтобы получить полную картину, график нужно вращать вокруг оси z .

Как видно из (12.9) и фиг. 12.1, a , направление момента L относительно оси z для ротатора в s -состоянии не зависит от угла ϑ . Это и понятно, так как момент $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ в этом случае равен нулю. Покоящаяся же материальная точка может с равной вероятностью находиться в любом месте сферической поверхности радиуса a , т. е. все положения ротатора возможны и равноправны. Классического аналога s -состояние не имеет.

Из (12.13) и фиг. 12.1, b следует, что наиболее вероятной из всех траекторий ротатора в p -состоянии с $l=1$ и $m=\pm 1$ является та, которая расположена в плоскости (xy), причем состояния с $m=1$ и с $m=-1$ будут отличаться одно от другого направлением вращения: при $m=1$ ротатор будет обладать

правым вращением (момент количества движения L параллелен оси z), а при $m = -1$ — левым (момент L антипараллелен оси z).

При $l=1$ и $m=0$ наиболее вероятной орбитой ротатора будет та орбита, которая лежит в плоскости, проходящей через ось z [см. (12.14) и фиг. 12.1, в]. При этом момент будет направлен перпендикулярно оси z .

Отметим также, что подобный анализ угловой части волновой функции справедлив для всех систем, обладающих центральной симметрией.

6. Правила отбора

Определение правил отбора, указывающих, при каких изменениях квантовых чисел переходы являются разрешенными, как указывалось, характеризуются матричными элементами:

$$(\mathbf{r})'_{lm} = \oint (Y_{l'}^{m'})^* \mathbf{r} Y_l^m d\Omega. \quad (12.15)$$

Если при каком-либо изменении квантовых чисел матричный элемент равен нулю, то такие переходы будут запрещенными (излучения не будет). Зная правила отбора, можно сразу найти как частоту, так и интенсивность излучения [см. (9.22)].

Введем в (12.15) вместо координат x , y и z (т. е. вместо \mathbf{r}) следующие переменные:

$$z = a \cos \vartheta, \quad (12.16)$$

$$\xi = x + iy = a \sin \vartheta e^{i\varphi}, \quad (12.17)$$

$$\eta = x - iy = a \sin \vartheta e^{-i\varphi}. \quad (12.18)$$

С физической точки зрения это эквивалентно разложению движения ротатора на три части: на колебание вдоль оси z , описываемое составляющей z , а также на лежащие в плоскости xu правое и левое вращения, характеризующиеся соответственно составляющими ξ и η ; при этом в совокупности все три составляющие должны описывать полное движение материальной точки по сфере.

Определение правил отбора в новых переменных сведется к вычислению следующих матричных элементов:

$$(z)'_{lm} = \oint (Y_{l'}^{m'})^* \cos \vartheta Y_l^m d\Omega. \quad (12.19)$$

$$(\xi)'_{lm} = \oint (Y_{l'}^{m'})^* \sin \vartheta e^{i\varphi} Y_l^m d\Omega, \quad (12.20)$$

$$(\eta)'_{lm} = \oint (Y_{l'}^{m'})^* \sin \vartheta e^{-i\varphi} Y_l^m d\Omega, \quad (12.21)$$

где ради простоты мы положили $a = 1$.

Учитывая рекуррентные соотношения между шаровыми функциями ¹⁾:

$$\cos \vartheta Y_l^m = AY_{l+1}^m + BY_{l-1}^m, \quad (12.22)$$

$$\sin \vartheta e^{\pm i\varphi} Y_l^m = A_{\pm} Y_{l+1}^{m\pm 1} + B_{\pm} Y_{l-1}^{m\pm 1}, \quad (12.23)$$

а также условие ортонормированности для шаровых функций (11.68), имеем:

$$(z)_{lm}^{\prime m'} = \text{const } \delta_{m', m} \delta_{l', l \pm 1}, \quad (12.24)$$

$$(\xi)_{lm}^{\prime m'} = \text{const } \delta_{m', m+1} \delta_{l', l \pm 1}, \quad (12.25)$$

$$(\eta)_{lm}^{\prime m'} = \text{const } \delta_{m', m-1} \delta_{l', l \pm 1}. \quad (12.26)$$

Отсюда получаем следующие правила отбора:

а) соответствующие колебаниям вдоль оси z :

$$\Delta m = m - m' = 0, \quad \Delta l = l - l' = \pm 1, \quad (12.27)$$

б) соответствующие правому вращению:

$$\Delta m = -1, \quad \Delta l = \pm 1, \quad (12.28)$$

в) соответствующие левому вращению:

$$\Delta m = +1, \quad \Delta l = \pm 1. \quad (12.29)$$

Таким образом, разрешенными будут только те переходы, для которых изменения магнитного квантового числа m и орбитального квантового числа l равны:

$$\Delta m = 0, \quad \pm 1, \quad (12.30)$$

$$\Delta l = \pm 1. \quad (12.31)$$

¹⁾ Коэффициенты A и B могут быть найдены сравнительно просто. Для этого в формулу (12.22) следует подставить разложения (11.67), положив в них:

$$P_l^m = \frac{(2l)!}{2^l l! (l-m)!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \left\{ x^{l-m} - \frac{(l-m)(l-m-1)}{2(2l-1)} x^{l-m-2} + \dots \right\}.$$

Тогда, сокращая все равенство на $e^{im\varphi} (1-x^2)^{m/2}$ и приравнявая в левых и правых частях коэффициенты при x^{l-m+1} и x^{l-m-1} (приравнивание коэффициентов при остальных степенях x ничего нового не дает), получаем:

$$A(l, m) = \sqrt{\frac{(l+1-m)(l+1+m)}{(2l+1)(2l+3)}}; \quad B(l, m) = \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}. \quad (12.22a)$$

Аналогичным путем находим:

$$A_{\pm}(l, m) = \pm \sqrt{\frac{(l+2\pm m)(l+1\pm m)}{(2l+1)(2l+3)}}, \quad (12.23a)$$

$$B_{\pm}(l, m) = \mp \sqrt{\frac{(l\mp m)(l-1\mp m)}{(2l+1)(2l-1)}}.$$

Заметим, что эти правила отбора для квантовых чисел m и l будут иметь место для любых центрально-симметричных систем и, в частности, для атома водорода.

Зная правила отбора, найдем для ротатора возможные частоты излучения (или поглощения):

$$\omega_{l'l} = 2\pi\nu_{l'l} = \frac{E_l - E_{l'}}{\hbar}. \quad (12.32)$$

Подставляя сюда выражение для энергии E_l [см. (12.7)] и учитывая, что в данном случае момент инерции ротатора остается неизменным, формулу (12.32) можно привести к виду:

$$\omega_{l'l} = \frac{\hbar}{2J} [l(l+1) - l'(l'+1)]. \quad (12.33)$$

Отсюда на основании (12.31) получаем:

$$\omega_{l, l-1} = \frac{\hbar}{J} l, \quad (12.34)$$

$$\omega_{l, l+1} = -\frac{\hbar}{J} (l+1), \quad (12.35)$$

причем частота $\omega_{l, l-1}$ соответствует переходу с верхнего энергетического уровня на нижний (т. е. сверху вниз), а $\omega_{l, l+1}$, наоборот, снизу вверх.

в. Спектры двухатомных молекул

Известны три основные разновидности спектров: непрерывный спектр, испускаемый нагретым телом (например, излучение абсолютно черного тела, спектральное распределение которого характеризуется формулой Планка), линейчатые спектры (или атомные), обусловленные переходами электронов в атомах с одних энергетических уровней на другие (примером может служить серия Бальмера для атома водорода), и, наконец, полосатые спектры излучения молекул. Последние представляют собой светлую полосу с резкой границей со стороны более низких частот и с размытой границей со стороны более высоких частот. Лишь только спектрографы с высокой разрешающей силой позволяют установить, что полоса состоит из множества отдельных линий.

Как мы увидим ниже, эти полосатые спектры непосредственно связаны с вращательным характером движения молекул.

Рассмотрим молекулу, состоящую из двух атомов с массами m_1 и m_2 , расположенными друг от друга на постоянном расстоя-

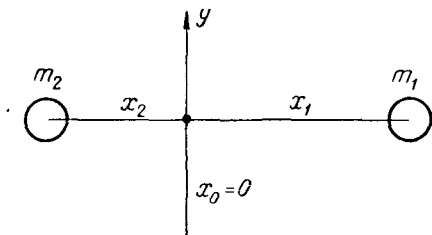
нии r (см. фиг. 12.2). Примером такой молекулы может быть в первом приближении двухатомная молекула HCl .

Как известно, при наличии двух или большего числа частиц центр тяжести движется как одна частица с массой, равной сумме масс всех частиц:

$$m_{\text{сумм.}} = \sum m_i, \quad (12.36)$$

а относительное движение характеризуется так называемой приведенной массой $m_{\text{пр.}}$, обратная величина которой равняется сумме обратных величин масс всех частиц:

$$\frac{1}{m_{\text{пр.}}} = \sum_i \frac{1}{m_i}. \quad (12.37)$$



Фиг. 12.2. Схема двухатомной молекулы.

Чтобы показать это, запишем лагранжиан \mathcal{L} системы, состоящей, например, из двух взаимодействующих друг с другом частиц с массами m_1 и m_2 :

$$\mathcal{L} = \frac{m_1 \dot{x}_1^2}{2} + \frac{m_2 \dot{x}_2^2}{2} - V(x_1 - x_2), \quad (12.38)$$

где x_1 и x_2 — координаты первой и второй частиц соответственно, а $(x_2 - x_1)$ — расстояние между ними. Вводя относительную координату $x = x_1 - x_2$ и координату центра тяжести:

$$x_{\text{ц. т.}} = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}, \quad (12.39)$$

получим:

$$\mathcal{L} = \frac{m_{\text{сумм.}} \dot{x}_{\text{ц. т.}}^2}{2} + \frac{m_{\text{пр.}} \dot{x}^2}{2} - V(x),$$

откуда, пользуясь уравнением Лагранжа:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = 0,$$

находим, что движение центра тяжести будет характеризоваться общей массой:

$$m_{\text{сумм.}} \dot{x}_{\text{ц. т.}} = \text{const}, \quad (12.40)$$

а относительное перемещение частиц — приведенной массой:

$$m_{\text{пр.}} \ddot{x} = - \frac{\partial V}{\partial x}. \quad (12.41)$$

Если центр тяжести покоится ($x_{\text{ц. т.}} = 0$), то тогда координаты x_1 и x_2 будут связаны с относительной координатой x при помощи соотношений:

$$x_1 = \frac{m_2 x}{m_1 + m_2}, \quad x_2 = - \frac{m_1 x}{m_1 + m_2}.$$

Отсюда для момента инерции двухатомной молекулы находим выражение:

$$J = m_1 x_1^2 + m_2 x_2^2 = m_{\text{пр.}} x^2, \quad (12.42)$$

подобное выражению момента инерции для одной материальной точки, масса которой равна приведенной массе, а координата — относительной координате. Поэтому во всех результатах, полученных для ротатора, мы должны вместо момента инерции подставить выражение (12.42), положив при этом $x = a$.

В случае, когда излучение обусловлено только ротационными переходами, его частота, согласно (12.34), будет определяться выражением:

$$\omega_{l, l-1} = 2Bl, \quad (12.43)$$

где

$$B = \frac{\hbar}{2J} = \frac{\hbar}{2m_{\text{пр.}} a^2}. \quad (12.44)$$

Отсюда видно, что спектры подобных молекул, совершающих ротационные переходы и называемые в связи с этим ротационными спектрами, представляют собой набор равноотстоящих (см. фиг. 12.3) друг от друга линий.

¹⁾ Этот вывод легко обобщить и на квантовый случай.

Для этого надо написать волновое уравнение для двух частиц с координатами r_1 и r_2 :

$$(E - V(r_1 - r_2) - \frac{1}{2m_1} p_1^2 - \frac{1}{2m_2} p_2^2) \psi = 0,$$

где

$$p_1 = -i\hbar \nabla_1, \quad p_2 = -i\hbar \nabla_2.$$

В случае покоящегося центра инерции, что на языке квантовой механики означает:

$$p_1 = -p_2 = p = -i\hbar \nabla, \quad r = r_1 - r_2,$$

находим для описания относительного движения волновое уравнение:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m_{\text{пр.}}}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi = 0, \quad (12.41a)$$

которое может быть получено из уравнения Шредингера (4.8), если в последнем массу частицы m_0 заменить приведенной массой.

Однако ротационный спектр находится в далекой инфракрасной области (длина волны излучения порядка 100—300 μ) и его исследование сопряжено с рядом трудностей. Подобные линии обнаружены, например, в молекуле HCl, как линии поглощения. Промер расстояния между линиями позволяет судить о моменте инерции молекулы.

Наряду с чисто ротационными спектрами существуют еще вибрационно-ротационные спектры, возникающие в том случае, когда вместе с вращением молекулы учитываются также и ее внутренние колебания. Заметим, что этот спектр расположен уже не в такой далекой инфракрасной части, как ротационный, и более доступен изучению.

Рассмотрим в общих чертах теорию двухатомной молекулы, расстояние между атомами которой не является постоянной величиной. В этом случае молекула представляет собой осциллирующий ротатор.

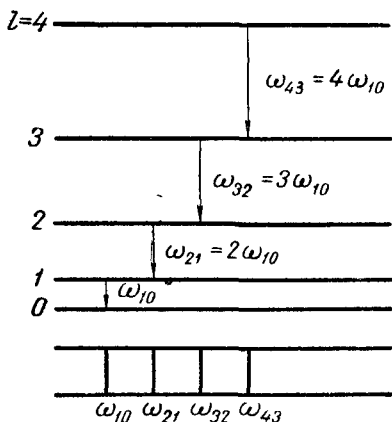
Не вдаваясь в подробности взаимодействия атомов, образующих молекулу, найдем, следуя простым качественным соображениям, общий ход кривой потенциальной энергии $V(r)$.

Во-первых, учитывая, что атомы не могут находиться сколь

удобно близко друг к другу, мы должны положить $V(r \rightarrow 0) \rightarrow \infty$. Во-вторых, при $r \rightarrow \infty$ взаимодействие атомов должно стать пренебрежимо малым, и поэтому $V(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$. Далее, поскольку молекула представляет собой устойчивую систему, при некотором конечном значении расстояния ($r = a$) между атомами потенциальная энергия V должна быть отрицательной величиной и достигать некоторого минимального значения. В самом деле, при $V \geq 0$ молекула немедленно бы распалась (более подробно об энергии связи атомов в молекуле см. § 27). Общий характер изменения потенциальной энергии атомов в молекуле в зависимости от расстояния между атомами изображен на фиг. 12.4.

Если отклонения $x = r - a$ молекулы от равновесного состояния (определяемого значением a) сравнительно невелики ($x \ll a$), то потенциальную энергию $V(r)$ можно разложить в ряд вблизи точки $r = a$:

$$V(r) = V(a + x) = V(a) + xV'(a) + \frac{x^2}{2}V''(a) + \dots \quad (12.45)$$

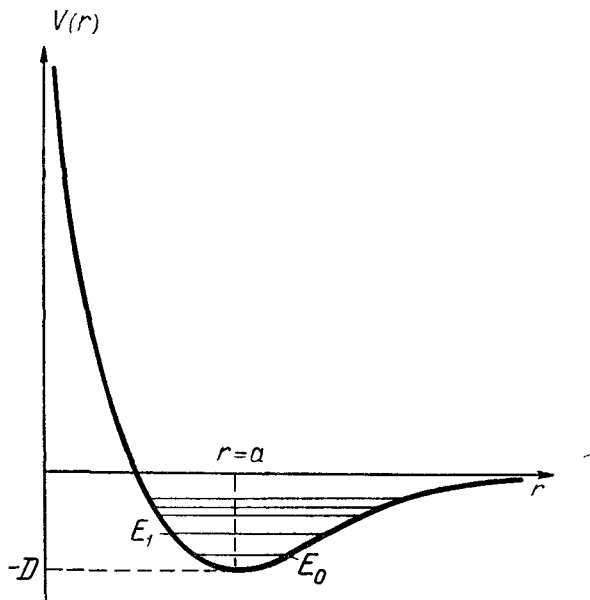


Фиг. 12.3. Спектр ротатора.

Ограничиваясь первыми тремя членами разложения и учитывая, что в точке $r = a$ функция V имеет минимум, т. е. $V'(a) = 0$, а $V''(a) > 0$, выражение (12.45) можно привести к виду:

$$V(r) = -D + \frac{m_{\text{пр.}} \omega^2 x^2}{2}. \quad (12.46)$$

Здесь $V''(a) = m_{\text{пр.}} \omega^2$ и $V(a) = -D$ представляют собой соответ-



Фиг. 12.4. Кривая потенциальной энергии двухатомной молекулы.

ственно коэффициент упругости и энергию диссоциации молекулы²⁾.

¹⁾ Обычно в качестве $V(r)$ выбирают эмпирический закон:

$$V(r) = D \left(1 - e^{-\sqrt{\frac{m_{\text{пр.}}}{2D}} \omega x} \right)^2 - D,$$

введенный Морзе, который при соответствующем подборе постоянных приблизительно правильно передает зависимость потенциальной энергии молекулы от межатомного расстояния. Физическая сторона вопроса о возникновении межмолекулярных сил с учетом квантовой теории будет рассмотрена нами в § 27.

²⁾ Энергия диссоциации D определяется работой, которую необходимо совершить (с точностью до нулевой энергии колебаний), чтобы разорвать молекулу. Эта энергия по порядку величины, как правило, равна нескольким электронвольтам.

Чтобы найти энергетические уровни рассматриваемой молекулы (а тем самым и ее спектр), обратимся к уравнению Шредингера (11.21) для радиальной части волновой функции, поскольку потенциальная энергия (12.46) в нашем приближении обладает сферической симметрией.

Поскольку нас интересует только относительное движение атомов, заменим в (11.21) массу m на $m_{\text{пр.}}$. В результате получим уравнение:

$$\nabla_r^2 R + \left[\frac{2m_{\text{пр.}}}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0. \quad (12.47)$$

Замечая, что

$$\nabla_r^2 R = \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} = \frac{1}{r} \frac{d^2 (rR)}{dr^2}, \quad (12.48)$$

и вводя функцию:

$$rR = u, \quad (12.49)$$

после подстановки (12.46) в (12.47) будем иметь:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m_{\text{пр.}}}{\hbar^2} \left\{ E + D - m_{\text{пр.}} \frac{\omega^2 x^2}{2} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_{\text{пр.}} r^2} \right\} u = 0. \quad (12.49a)$$

Так как $x \ll a$, то в этом уравнении можно считать $\frac{1}{r^2} = \frac{1}{(a+x)^2} \approx \approx \frac{1}{a^2}$. Тогда, полагая:

$$E + D - B\hbar l(l+1) = E', \quad (12.50)$$

где $B = \frac{\hbar}{2J}$, а $J = m_{\text{пр.}} a^2$, приведем (12.49a) к виду:

$$u'' + \frac{2m_{\text{пр.}}}{\hbar^2} \left(E' - m_{\text{пр.}} \frac{\omega^2 x^2}{2} \right) u = 0. \quad (12.51)$$

Это уравнение точно совпадает с уравнением (10.14) для гармонического осциллятора, и поэтому

$$E' = \hbar\omega \left(k + \frac{1}{2} \right), \quad (12.52)$$

где $k = 0, 1, 2, 3, \dots$.

Таким образом, для энергии E молекулы при учете не только ротационного, но и колебательного движения имеем:

$$E = -D + B\hbar l(l+1) + \hbar\omega \left(k + \frac{1}{2} \right). \quad (12.53)$$

Здесь первый член является энергией диссоциации, а второй и третий обусловлены соответственно вращением и колебанием молекулы.

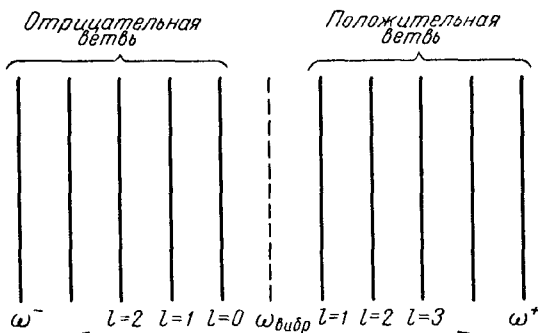
Заметим попутно, что для молекулы существует лишь конечное число дискретных энергетических уровней. Это связано с тем обстоятельством, что при

$$B\hbar l(l+1) + \hbar\omega \left(k + \frac{1}{2} \right) \geq D$$

молекула должна распасться.

Качественно распад молекулы при больших квантовых числах можно пояснить следующим образом. При $k \gg 1$ амплитуда колебаний может стать настолько большой, что атомы на этих расстояниях практически уже не будут взаимодействовать и молекула как связанная система перестанет существовать. В случае же слишком больших орбитальных квантовых чисел l , характеризующих энергию вращения, центробежные силы также могут разорвать молекулу.

Перейдем теперь к изучению вибрационно-ротационного спектра. При этом учтем, что положение на шкале спектра в основном будет определяться вибрационной энергией, так как она по



Фиг. 12.5. Вибрационно-ротационный спектр двухатомной молекулы.

своей величине превосходит ротационную энергию ($\lambda_{\text{вибр.}} \sim 10\mu$, а $\lambda_{\text{рот.}} \sim 100\mu$). Тогда, принимая во внимание, что спонтанные переходы могут происходить только сверху вниз, т. е. с изменением k на $k-1$ [квантовое число l при этом согласно правилам отбора может измениться как в сторону меньших ($l \rightarrow l-1$), так и в сторону больших ($l \rightarrow l+1$) значений], для частоты излучения,

$$\omega' = \frac{E(k, l) - E(k-1, l \pm 1)}{\hbar},$$

согласно (12.53) находим:

$$\omega' = \omega + \omega_{ll'}. \quad (12.54)$$

Здесь в соответствии с (12.34) и (12.35) $\omega_{l, l-1} = 2Bl$, $\omega_{l, l+1} = -2B(l+1)$, а

$$\omega = \frac{E_k - E_{k-1}}{\hbar}.$$

Таким образом, получаем две ветви (см. фиг. 12.5):

$$\omega^+ = \omega_{\text{вибр.}} + 2Bl \quad \text{и} \quad \omega^- = \omega_{\text{вибр.}} - 2B(l+1). \quad (12.55)$$

Подобные вибрационно-ротационные спектры наблюдаются, например, в молекулах HCl и CO .

Исследование вибрационно-ротационных спектров имеет важное значение для изучения структуры молекул. С их помощью можно, например, определить моменты инерции молекул, их изотопический состав (моменты инерции молекул, состоящих из различных изотопов того или иного элемента, будут несколько различны) и т. д.

В заключение рассмотрим спектр молекулы, когда один из атомов находится в возбужденном состоянии, т. е. когда наряду с вибрационно-ротационным излучением один из электронов атома переходит с одного, более высокого энергетического уровня (n) на другой, более низкий (n').

Энергию такой молекулы можно записать в виде:

$$E_M = E_n + E_k + E_l, \quad (12.56)$$

где E_n — энергия возбужденного атома, определяемая, например, для атома водорода формулой Бальмера (см. § 2):

$$E_n = -\frac{R\hbar}{n^2}. \quad (12.57)$$

Для энергии колебательного и вращательного движения соответственно имеем:

$$E_k = -D + \hbar\omega \left(k + \frac{1}{2} \right) \quad (12.58)$$

и

$$E_l = B\hbar l(l+1). \quad (12.59)$$

В результате перехода энергия $E_{M'}$ молекулы изменится и станет равной:

$$E_{M'} = E_{n'} + E_{k'} + E_{l'}. \quad (12.56a)$$

Поскольку теперь основная часть энергии излучения будет уже обязана электронному переходу $n \rightarrow n'$ в атоме, квантовые числа k и l могут как увеличиваться, так и уменьшаться:

$$k' = k \pm 1, \quad l' = l \pm 1. \quad (12.60)$$

При этом в целом будет иметь место потеря энергии на излучение за счет перехода электрона в атоме.

В этом случае возникает еще одна важная особенность, а именно энергия связи атомов в молекуле очень сильно зависит от номера той оболочки, на которой находится электрон. Поэтому в результате переходов энергия связи, естественно, должна изменяться, что приводит в свою очередь к изменению расстояния a между атомами. Конкретно мы рассмотрим прежде всего случаи, когда при переходах с возбужденного уровня на основной это расстояние, а вместе с тем и момент инерции $J = m_{\text{пр}} a^2$ увеличиваются,

а величина $B = \frac{\hbar}{2J}$ уменьшается. Благодаря же изменению величины $B \rightarrow B'$ ротационная часть энергии еще несколько изменяется и становится равной:

$$E_{l'} = B' \hbar l' (l' + 1), \quad (12.59a)$$

причем в рассматриваемом случае $B' < B$.

Для частоты излучения $\omega_M = \frac{E_M - E_{M'}}{\hbar}$ с учетом всевозможных вибрационных и ротационных переходов найдем:

$$\omega_M = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \pm \omega + \omega_{l, l'}, \quad (12.61)$$

где

$$\omega_{l, l'} = Bl(l+1) - B'l'(l'+1). \quad (12.62)$$

Вводя обозначения $\omega_0 = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \pm \omega$, приведем (12.61) к виду

$$\omega_M = \omega_0 + \omega_{l, l'}. \quad (12.61a)$$

Отсюда для полосатых спектров молекулы получаем три ветви частот:

$$\omega^+ = \omega_0 + \omega_{l, l-1} \quad (R\text{-ветвь}), \quad (12.63)$$

$$\omega^- = \omega_0 + \omega_{l, l+1} \quad (P\text{-ветвь}), \quad (12.64)$$

$$\omega^0 = \omega_0 + \omega_{l, l} \quad (Q\text{-ветвь}). \quad (12.65)$$

В этих формулах первая, положительная ветвь (R -ветвь) соответствует переходам между ротационными уровнями сверху вниз, вторая, отрицательная (P -ветвь) — снизу вверх и, наконец, третья, так называемая нулевая ветвь (Q -ветвь) возникает при отсутствии переходов между ротационными уровнями и всецело обязана изменению момента инерции, обусловленному переходами внутри атома.

Принимая во внимание (12.62), представим ω^+ , ω^- и ω^0 в форме:

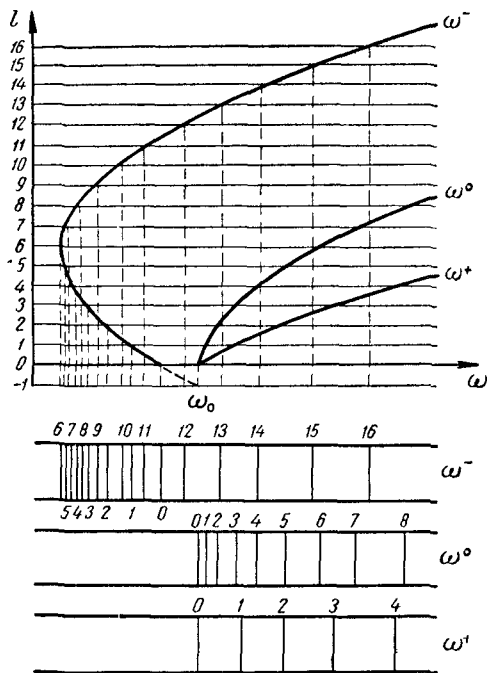
$$\omega^+ = \omega^0 + (B - B')l^2 + (B + B')l, \quad (12.63a)$$

$$\omega^- = \omega_0 + (B - B')(l + 1)^2 - (B + B')(l + 1), \quad (12.64a)$$

$$\omega^0 = \omega_0 + (B - B')(l^2 + l), \quad (12.65a)$$

и изобразим эти ветви графически (см. фиг. 12.6), откладывая по оси абсцисс частоту, а по оси ординат — орбитальное квантовое число l (диаграмма Фортра). Отсюда следует, что в результате

наложения ротационных линий ω_l, ν на электронно-вибрационную, определяемую частотой ω_0 , вместо одной линии получится целая



Фиг. 12.6. Полосатые спектры молекул (диаграмма Фортра):

ω^+ — положительная R -ветвь; ω^- — отрицательная P -ветвь; ω^0 — нулевая Q -ветвь.

полоса с резкой границей слева и размытой границей справа, что находится в полном согласии с экспериментальными фактами.¹⁾

¹⁾ В данном случае кант полосы обусловлен точкой поворота P -ветви. Остальные линии полосы, как говорят, будут оттенены в сторону меньших длин волн, т. е. в фиолетовую сторону. В другом случае, когда $B < B'$, в формулах (12.63а), (12.64а) и (12.65а) знак у членов, пропорциональных коэффициенту $(B - B')$, изменится на противоположный. Тогда кант полосы будет обусловлен точкой поворота R -ветви и будет ограничивать всю полосу справа. Остальные линии полосы получат оттенение в сторону больших длин волн, т. е. в левую сторону.

Наконец, при $B = B'$ параболическая зависимость частоты от квантового числа l вырождается в линейную. При этом мы получим спектр, изображенный на фиг. 12.5 ($\omega_{\text{вибр.}} \rightarrow \omega_0$), в котором Q -ветвь будет вообще отсутствовать, R -ветвь будет направлена в фиолетовую сторону, а P -ветвь — в красную.

г. Элементарная теория теплоемкости одноатомных и двухатомных веществ

Как известно, в основе классической теории теплоемкости одноатомных твердых тел лежит закон Дюлонга — Пти. Закон Дюлонга — Пти находит следующее простое объяснение в классической теории.

Будем считать в простейшем случае, что молекулы твердого тела представляют собой трехмерные гармонические осцилляторы. Тогда для средней энергии молекулы будем иметь значение ¹⁾:

$$\bar{E} = 3 \frac{\int_0^{\infty} E e^{-E/kT} dE}{\int_0^{\infty} e^{-E/kT} dE} = 3kT, \quad (12.66)$$

где $k = 1,38 \cdot 10^{-16}$ эрг/град — постоянная Больцмана. Заметим, что величина kT представляет собой среднюю энергию одномерного осциллятора, обладающего двумя степенями свободы (поступательное движение центра тяжести и колебание около центра тяжести). Отсюда получаем закон Дюлонга — Пти, согласно которому теплоемкость одноатомных твердых тел, приходящаяся на отдельную молекулу, т. е. на шесть степеней свободы, должна быть при любых температурах величиной постоянной и равной ²⁾:

$$c_v = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = 3k. \quad (12.67)$$

Закон Дюлонга — Пти нашел экспериментальное подтверждение для одноатомного вещества в области не очень низких температур. При $T \rightarrow 0$ по закону Дюлонга — Пти c_v также должна оставаться величиной постоянной, в то время как согласно экспериментальным данным она стремится к нулю. Это можно объяснить, если для средней энергии гармонического осциллятора воспользоваться не классической формулой, а квантовой формулой Планка:

$$\bar{E} = 3 \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1},$$

где ω — частота колебаний осциллятора. Тогда для теплоемкости одноатомного вещества найдем следующий установленный Эйнштейном закон:

$$c_v = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = 3k \frac{\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 e^{\frac{\Theta}{T}}}{\left(e^{\frac{\Theta}{T}} - 1\right)^2}, \quad (12.68)$$

где $\Theta = \frac{\hbar\omega}{k}$ зависит от частоты колебаний ω . Последняя формула качественно правильно передает действительный ход зависимости c_v от температуры.

¹⁾ Влияние свободных электронов на теплоемкость твердого тела будет ничтожным, что рассмотрено в § 6 [см. формулу (6.35)].

²⁾ Эта теория применима также и к одноатомному идеальному газу с той лишь разницей, что там отсутствует потенциальная энергия, благодаря чему на каждую молекулу будет приходиться три степени свободы, и поэтому вместо коэффициента 3 в формуле (12.67) надо писать коэффициент $\frac{3}{2}$.

При относительно высоких температурах $T \gg \Theta$ мы вновь получаем закон Дюлонга — Пти, так как

$$(e^{\frac{\Theta}{T}} - 1)^2 \cong \left(\frac{\Theta}{T}\right)^2, \quad e^{\frac{\Theta}{T}} \cong 1.$$

При низких же температурах $T \ll \Theta$ получаем:

$$c_v = 3k \left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 e^{-\frac{\Theta}{T}}, \quad (12.69)$$

т. е. при $T \rightarrow 0$ теплоемкость c_v также обращается в нуль, что, кстати сказать, находится в согласии с теоремой Нернста. Заметим, что теория Эйнштейна не дает полного количественного совпадения с экспериментом. Физически это связано с тем обстоятельством, что теория Эйнштейна полагает твердое тело состоящим из гармонических осцилляторов, обладающих строго одной и той же частотой колебаний ω .

Следующий шаг в развитии теории теплоемкости был сделан Дебаем. Дебай считал, что твердое тело состоит не из осцилляторов, обладающих одной и той же частотой, а рассматривал его как непрерывную среду и рассчитывал спектр продольных и поперечных упругих собственных колебаний на основе теории упругости. Тогда средняя энергия собственных колебаний будет определяться формулой:

$$\bar{E} = 3 \sum_0^{\omega_{\text{макс.}}} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \frac{\Delta N_{\text{прод.}} + \Delta N_{\text{попер.}}}{3N}, \quad (12.70)$$

где $\Delta N_{\text{прод.}}$ и $\Delta N_{\text{попер.}}$ — число продольных и поперечных колебаний, соответственно приходящихся на интервал $\Delta\omega$, а N — общее число атомов. Мы получим результат Эйнштейна, если предположим, что лишь для какой-то определенной частоты ω , соответствующей частоте колебаний гармонических осцилляторов, $\Delta N_{\text{прод.}} + \Delta N_{\text{попер.}} = 3N$ (число степеней свободы), в то время как для остальных частот $\Delta N_{\text{прод.}} = \Delta N_{\text{попер.}} = 0$. Вообще же величины $\Delta N_{\text{прод.}}$ и $\Delta N_{\text{попер.}}$ могут быть найдены из следующих соображений.

Если тело имеет форму куба с объемом L^3 , то, как было показано в § 4, волновые числа k_x, k_y, k_z будут связаны с этим объемом при помощи соотношений:

$$k_x = \frac{2\pi n_1}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_2}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n_3}{L},$$

где n_1, n_2 и n_3 — целые числа. Отсюда находим, что на единичный интервал квантовых чисел:

$$\Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \frac{\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z L^3}{8\pi^3}$$

приходится лишь одно состояние, поскольку $\Delta n_x = \Delta n_y = \Delta n_z = 1$. В случае сферической симметрии следует положить $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = 4\pi k^2 dk$. Тогда, принимая во внимание, что $k = \frac{\omega}{v}$ (где v — скорость распространения упругих колебаний), находим, что на интервал частот $d\omega$ приходится следующее число состояний:

$$\begin{aligned} \Delta N_{\text{прод.}} &= \frac{L^3 \omega^2 d\omega}{2\pi^2 v_{\text{прод.}}^3}, \\ \Delta N_{\text{попер.}} &= \frac{L^3 \omega^2 d\omega}{\pi^2 v_{\text{попер.}}^3}. \end{aligned} \quad (12.71)$$

Здесь мы учли, что число поперечных колебаний, поскольку они могут совершаться по двум взаимно перпендикулярным направлениям, в два раза больше числа продольных.

Пределы интегрирования устанавливаются в соответствии с допущением, что непрерывный спектр собственных колебаний следует оборвать на некоторой частоте $\omega_{\text{макс.}}$, так чтобы все частоты заключались в интервале от 0 до $\omega_{\text{макс.}}$. Частота $\omega_{\text{макс.}}$ определена Дебаем таким образом, чтобы общее число частот в интервале от 0 до $\omega_{\text{макс.}}$ равнялось общему числу степеней свободы:

$$\begin{aligned} 3N &= \sum_0^{\omega_{\text{макс.}}} (\Delta N_{\text{прод.}} + \Delta N_{\text{попер.}}) = \\ &= \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{1}{v_{\text{прод.}}^3} + \frac{2}{v_{\text{попер.}}^3} \right) \int_0^{\omega_{\text{макс.}}} \omega^2 d\omega. \end{aligned}$$

Отсюда находим:

$$\omega_{\text{макс.}} = \sqrt[3]{\frac{18\pi^2 N}{L^3 \left(\frac{1}{v_{\text{прод.}}^3} + \frac{2}{v_{\text{попер.}}^3} \right)}}. \quad (12.72)$$

Подставляя (12.71) в (12.70) и переходя после дифференцирования по T от суммы к интегралу, получаем формулу Дебая для теплоемкости твердого тела:

$$c_v = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = 3k \left[\frac{12}{x^3} \int_0^x \frac{\xi^3 d\xi}{e^\xi - 1} - \frac{3x}{e^x - 1} \right], \quad (12.73)$$

где $x = \frac{\Theta}{T}$, а Θ — так называемая характеристическая температура Дебая:

$$\Theta = \frac{\hbar \omega_{\text{макс.}}}{k}. \quad (12.74)$$

Отсюда для больших T ($T \gg \Theta$) находим формулу, дающую лишь небольшие поправки к закону Дюлонга — Пти:

$$c_v = 3k \left(1 - \frac{x^2}{20} + \dots \right). \quad (12.75)$$

Для малых же T ($T \ll \Theta$) имеем:

$$c_v = \frac{12\pi^4 k}{5} \frac{T^3}{\Theta^3}, \quad (12.76)$$

т. е. теплоемкость при $T \rightarrow 0$ будет также стремиться к нулю. Формула Дебая правильно передает ход теплоемкости как при высоких, так и при низких температурах. Следует, однако, иметь в виду, что она по существу является лишь приближенной, ибо получена в предположении о возможности замены кристаллической решетки упругим континуумом. Учет дискретной структуры решетки приведет к тому, что простая связь частоты с волновым вектором заменится более сложным соотношением, вид которого определяется спецификой данного вещества. Лишь для достаточно длинных

волн приведенная выше формула дает сравнительно хорошее количественное совпадение с экспериментом. В общем же случае теорию Дебая следует рассматривать как приближенную теорию, а дебаевскую температуру Θ — как эмпирически определяемый параметр.

Наконец, сделаем несколько замечаний о теплоемкости газов.

Имеющиеся расхождения классической теории теплоемкости для одноатомных газов с экспериментальными данными наблюдаются лишь в области низких температур, когда вместо классической статистики следует учитывать уже квантовую.

Применяя классическую теорию теплоемкости к газу, состоящему из двухатомных молекул, следует учитывать, что на каждую молекулу газа приходится 6 степеней свободы: три степени свободы за счет поступательного движения, две — за счет вращения молекулы (ротационное движение) и одна — за счет колебательного (вибрационного) движения. Тогда получим, что теплоемкость двухатомного газа, относящаяся на одну молекулу, должна быть в два раза больше, чем для одноатомного газа:

$$c_v = 3k,$$

и равной теплоемкости твердого тела, где учитывается еще три степени свободы, связанные с потенциальной энергией упругой силы. Однако многочисленные экспериментальные данные находятся в противоречии с этим результатом даже при сравнительно высоких температурах. Как известно, большинство газов, состоящих из двухатомных молекул, обладают теплоемкостью, равной $c_v = \frac{5}{2}k$. Никакие классические теории не смогли объяснить этот экспериментальный факт. Только с помощью квантовой теории удалось построить теорию теплоемкости двухатомных молекул в области средних энергий.

Если при температуре T средняя энергия $\frac{3}{2}kT$, приходящаяся на поступательное движение, меньше разности энергий между двумя вибрационными уровнями, то колебания за счет столкновений (тепловое движение) не смогут возбуждаться (точнее, будут возбуждаться очень редко), и молекулу можно рассматривать как жесткий диполь, который имеет лишь пять степеней свободы (три за счет поступательного движения и две за счет вращательного). При этом говорят, что вибрационная степень свободы «замораживается». Температура, при которой происходит это «замораживание», определяется, очевидно, равенством:

$$\frac{3}{2}kT_{\text{вibr.}} = \hbar\omega. \quad (12.77)$$

Для молекулы водорода, например, $T_{\text{вibr.}} = 4300^\circ \text{K}$, и поэтому при средних температурах $T < T_{\text{вibr.}}$ водород имеет теплоемкость $\frac{5}{2}k$, а не $3k$. Только в случае, когда $T > T_{\text{вibr.}}$, т. е. когда средняя поступательная энергия $\frac{3}{2}kT > \hbar\omega$ становится достаточной для возбуждения колебаний, теплоемкость должна увеличиваться до $3k$.

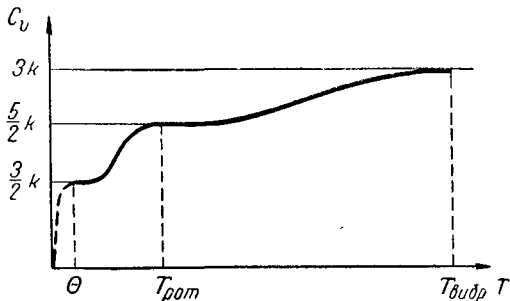
При температурах ниже $T_{\text{рот.}}$ должен наступить такой момент, когда поступательная энергия станет меньше ротационной, причем

$$\frac{3}{2}kT_{\text{рот.}} = \frac{\hbar^2}{2J}, \quad (12.78)$$

где J — момент инерции молекулы.

При $T < T_{\text{рот.}}$ двухатомная молекула будет эффективно обладать уже только тремя степенями свободы (поступательными), вследствие чего ее теплоемкость станет равной $\frac{3}{2}k$.

Для молекулы водорода $T_{\text{рот.}} = 55^\circ \text{K}$. Однако в большинстве случаев при столь низких температурах законы классической статистики неприменимы, и поэтому двухатомная молекула в этом случае будет вести себя как одноатомная, к которой при определении средней энергии следует применять не классическую, а квантовую статистику, т. е. формулу Планка. С учетом квантовых эффектов примерный ход кривой зависимости теплоемкости от температуры изображен на фиг. 12.7 (при условии, что $T_{\text{рот.}} > \theta$).



Фиг. 12.7. Ход кривой теплоемкости двухатомной молекулы.

Задача 12.1¹⁾. Найти явный вид сферических функций в случаях, когда орбитальное квантовое число $l = 2, 3$. Непосредственным вычислением убедиться в их ортонормированности. Построить графики для $|Y_{\frac{m}{l}}^m|^2$ при $m = 0, \pm 1, \pm 2$.

$$\text{О т в е т. } Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \vartheta - \frac{1}{2} \right),$$

$$Y_2^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_2^{\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi},$$

$$Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \left(\frac{5}{2} \cos^3 \vartheta - \frac{3}{2} \cos \vartheta \right),$$

$$Y_3^{\pm 1} = \pm \frac{1}{4} \sqrt{\frac{21}{4\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_3^{\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta e^{\pm 2i\varphi},$$

$$Y_3^{\pm 3} = \pm \frac{1}{4} \sqrt{\frac{35}{4\pi}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\varphi}.$$

Задача 12.2. Найти собственную функцию оператора L_x , если известно, что его собственное значение равно нулю, а орбитальное квантовое число $l = 1$.

Решение. Решение уравнения при $l = 1$ и

$$L_x \psi = 0$$

¹⁾ Задачи в настоящем параграфе относятся и к § 11.

будем искать в виде:

$$\psi = C_1 Y_1^1 + C_{-1} Y_1^{-1} + C_0 Y_1^0.$$

Пользуясь затем (11.88), где полагаем $l=1$ и $m=+1, -1, 0$, а также условием нормировки:

$$\int \psi^* \psi \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = 1,$$

находим:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_1^1 - Y_1^{-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \varphi.$$

Задача 12.3. Исследовать свободное движение частицы в сферических координатах в общем виде. Определить нормированные функции с $l=0$ (s -состояния).

Решение. Уравнение Шредингера в сферических координатах для свободного движения может быть записано в форме:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{drR}{dr} \right) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0, \quad (12.79)$$

где

$$k^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}.$$

Вводя новую функцию $\chi = \sqrt{r} R$, преобразуем (12.79) к виду:

$$\chi'' + \frac{1}{r} \chi' + \left(k^2 - \frac{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2}{r^2} \right) \chi = 0.$$

Решение последнего уравнения представляет собой функцию Бесселя полуцелого порядка. Учитывая, что волновая функция должна оставаться конечной в точке $r \rightarrow 0$, мы должны оставить только функцию Бесселя первого рода, когда

$$R = \frac{\text{const}}{\sqrt{kr}} J_{l + \frac{1}{2}}(kr).$$

Отсюда следует, что общее решение волнового уравнения для свободной частицы в сферических координатах с заданной энергией может быть представлено в виде:

$$\psi(k, r) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_l^m Y_l^m(\vartheta, \varphi) \frac{1}{\sqrt{kr}} J_{l + \frac{1}{2}}(kr). \quad (12.80)$$

В частности, при $l=0$ (s -состояние) будем иметь:

$$R(k, r) = \frac{C}{r} \sin kr. \quad (12.81)$$

Поскольку спектр является непрерывным, то последнее выражение мы должны нормировать на δ -функцию:

$$\int_0^{\infty} R^*(k', r) R(k, r) r^2 dr = \delta(k - k').$$

Отсюда находим:

$$C = \sqrt{\frac{2}{\pi}}.$$

Задача 12.4. Найти правила отбора для квадрупольного излучения ротатора.

Решение. Необходимо найти такие переходы, при которых матричный элемент квадрупольного момента

$$\begin{aligned} Q_{ss'} &= e \int \psi_{l'm'}^* (3x_s x_{s'} - a^2 \delta_{ss'}) \psi_{lm} d\Omega = \\ &= e (3 \int x_s x_{s'} \psi_{l'm'}^* \psi_{lm} d\Omega - a^2 \delta_{ss'} \int \psi_{l'm'}^* \psi_{lm} d\Omega) \end{aligned}$$

был бы отличен от нуля. Здесь

$$\begin{aligned} s, s' &= 1, 2, 3; \quad x_s = z = a \cos \vartheta, \\ x_{1,2} &= x \pm iy = a \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} = \begin{cases} \xi \\ \eta \end{cases}. \end{aligned}$$

Учитывая, что матричный элемент от билинейной комбинации выражается через сумму произведений линейных матричных элементов (см. задачу 10.4)

$$(x_s x_{s'})_{lm}^{l'm'} = \sum_{m'', l''} (x_s)_{lm}^{l''m''} (x_{s'})_{l''m''}^{l'm'},$$

а также то, что согласно формулам (12.24), (12.25) и (12.26) отличными от нуля должны быть только линейные матричные элементы вида:

$$\xi_{l, m}^{l \pm 1, m \pm 1}, \quad \eta_{l, m}^{l \pm 1, m - 1}, \quad z_{l, m}^{l \pm 1, m},$$

находим следующие правила отбора для квадрупольного излучения ротатора:

$$\Delta m = 0, \pm 1, \pm 2; \quad \Delta l = 0, \pm 2.$$

Как мы увидим в дальнейшем, четность шаровой функции определяется только значением l и не зависит от m (см. § 17), поэтому, если при дипольном излучении возможны лишь переходы из нечетного в четное состояние или наоборот ($\Delta l = \pm 1$), то при квадрупольном — только из четного в четное или из нечетного в нечетное.

Задача 12.5. Произвести разложение плоской волны:

$$\psi = e^{ikz} = e^{ikr \cos \vartheta} \quad (12.82)$$

по сферическим волнам.

Решение. Вводя обозначения $kr = y$ и $\cos \vartheta = x$, решение будем искать в виде разложения по полиномам Лежандра:

$$e^{iyx} = \sum_{l=0}^{\infty} B_l(y) P_l(x).$$

Отсюда, учитывая условие ортонормированности для полиномов Лежандра [см. (11.68)], находим:

$$B_l = \left(l + \frac{1}{2}\right) \int_{-1}^1 e^{iyx} P_l(x) dx.$$

Подставляя сюда для полиномов Лежандра выражение (11.59) и перебирая l раз производную с функции $(x^2 - 1)^l$ на функцию e^{iyx} , получаем:

$$B_l = \frac{1}{2^l l!} \left(l + \frac{1}{2}\right) i^l y^l \int_{-1}^1 (1 - x^2)^l e^{iyx} dx.$$

Далее, воспользовавшись хорошо известным в теории бесселевых функций равенством¹⁾:

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^l e^{iyx} dx = \sqrt{\pi} l! \left(\frac{2}{y}\right)^{l+1/2} J_{l+1/2}(y),$$

находим значение для коэффициентов B_l . Тогда искомое разложение плоской волны по сферическим принимает вид:

$$e^{ikz} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{1}{\sqrt{kr}} J_{l+1/2}(kr) P_l(\cos \vartheta). \quad (12.83)$$

Следует подчеркнуть, что плоская волна e^{ikz} удовлетворяет уравнению Шредингера для свободной частицы:

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0.$$

Поэтому заранее можно было предвидеть, что коэффициенты B_l будут пропорциональны функции Бесселя $J_{l+1/2}(kr)$, потому что правая часть (12.83) также должна представлять собой линейную комбинацию частных решений свободного уравнения Шредингера, записанного в сферических координатах [см. (12.80)].

Задача 12.6. В задаче ротатора найти среднее значение операторов H и L_z , для которых шаровая функция Y_l^m является собственной функцией. Кроме того, вычислить среднее значение операторов $L_x \pm iL_y$ (коммутирующих с H , но не с L_z) и z (коммутирующего с L_z , но не с H), для которых шаровая функция не является собственной. Какой вывод можно сделать о характере решений при наличии нескольких операторов, коммутирующих с гамильтонианом, но не коммутирующих между собой.

Решение. Исходя из общего выражения волновой функции:

$$\psi(t) = \sum_{l, m} C_{lm} Y_l^m e^{-i(E_l/\hbar)t} E_l^t$$

и равенств (11.87), (11.88) и (12.22), можно показать, что

$$\langle H \rangle = \sum_{l, m} E_l C_{lm}^* C_{lm},$$

$$\langle L_z \rangle = \sum_{l, m} \hbar m C_{lm}^* C_{lm},$$

$$\langle L_x \rangle \pm i \langle L_y \rangle = - \sum_{l, m} \hbar \sqrt{(l-1 \pm m)(l \mp m)} C_{l, m \pm 1}^* C_{lm},$$

$$\begin{aligned} \langle z \rangle = & \sum_{l, m} [B(l, m) C_{l-1, m}^* C_{lm} e^{-i\omega_{l, l} t} + \\ & + A(l, m) C_{l+1, m}^* C_{lm} e^{i\omega_{l+1, l} t}]. \end{aligned}$$

Здесь значения коэффициентов $A(l, m)$ и $B(l, m)$ заданы формулой (12.22а).

Поскольку функция Y_l^m является собственной функцией операторов H и L_z , среднее значение этих операторов равно линейной комбинации квадра-

¹⁾ См., например, Р. О. Кузьмин, Бесселевы функции, М.—Л., 1935, стр. 65.

тов модулей коэффициентов $C_{lm}^* C_{lm}$, характеризующих одно и то же состояние, и поэтому оно не должно зависеть от времени.

Среднее значение остальных операторов, для которых Y_l^m не является собственной функцией, как правило, должно зависеть от времени. Однако среднее значение операторов $L_x \pm iL_y$ (коммутирующих с гамильтонианом H) не зависит от времени, так как эти операторы пропорциональны сумме квадратичных комбинаций амплитуд $C_{l, m \pm 1}^* C_{l, m}$, относящихся хотя и к различным состояниям, но зато эти состояния обладают одним и тем же значением энергии. Таким образом, наличие двух и более операторов, коммутирующих с H , но не коммутирующих между собой, говорит о том, что данная квантовая система должна быть вырожденной.

§ 13. ТЕОРИЯ ВОДОРОДОПОДОБНОГО АТОМА (ПРОБЛЕМА КЕПЛера)

Боровская теория водородоподобного атома (см. § 3) имеет полуклассический характер и далеко не полностью может объяснить многие основные свойства атома. Как мы уже отмечали, с помощью боровской теории нельзя рассчитать интенсивности излучения атомов или построить теорию атома не с одним, а с несколькими электронами. Все эти вопросы не вызывают каких-либо принципиальных затруднений при построении теории атома при помощи волновой механики. Проблема же движения одного электрона в атоме, представляющая собой в математическом отношении обобщение классической задачи движения планеты вокруг Солнца (проблема Кеплера), интересна еще и в методическом отношении, так как допускает наряду с теорией гармонического осциллятора и ротатора точные решения. В настоящем параграфе мы рассмотрим эту задачу более подробно.

а. Собственные функции и собственные значения энергии

Заметим прежде всего, что энергия взаимодействия электрона с ядром:

$$V = -\frac{Ze_0^2}{r} \quad (13.1)$$

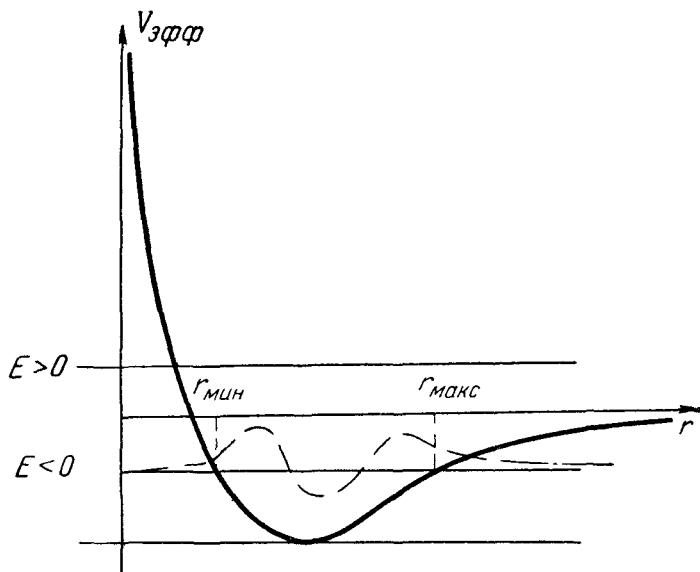
зависит только от расстояния r между ними. Поэтому задача водородоподобного атома, вокруг которого ядра которого движется один электрон, будет представлять собой типичную задачу на движение в поле центральных сил. Совмещая начало системы координат с ядром атома, угловую часть Y_l^m волновой функции ψ можно считать известной [см. (11.67)], а для нахождения уровней энергии и радиальной части $R(r)$ воспользоваться уравнением (11.21), которое в нашем случае принимает вид:

$$\nabla_r^2 R + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left\{ E + \frac{Ze_0^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2} \right\} R = 0. \quad (13.2)$$

Введем эффективную потенциальную энергию электрона ¹⁾:

$$V_{\text{эфф.}} = -\frac{Ze_0^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}, \quad (13.3)$$

первый член которой обусловлен кулоновским взаимодействием, а второй — центробежными силами.



Фиг. 13.1. График зависимости эффективной потенциальной энергии (сплошная кривая) от расстояния

$$V_{\text{эфф.}} = -\frac{Ze_0^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}.$$

Штрихпунктирной кривой показан ход волновой функции.

¹⁾ Попытаемся дать интерпретацию выражения (13.3) с точки зрения классической теории. Будем исходить из классического соотношения:

$$\frac{p_r^2}{2m_0} = E - \left(-\frac{Ze_0^2}{r} + \frac{p_\varphi^2}{2m_0 r^2} \right). \quad (13.3a)$$

Учитывая, далее, что для центральных сил $v_\varphi = \text{const}$, можем написать, что

$$V_{\text{эфф.}} = -\frac{Ze_0^2}{r} + \frac{p_\varphi^2}{2m_0 r^2}.$$

Для того чтобы обобщить это выражение на квантовый случай, следует вместо p_φ^2 подставить его квантовое значение $p_\varphi^2 = \hbar^2 l(l+1)$. Точно так же в формуле (13.2) выражение $\frac{1}{2m_0} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_r \right)^2$ можно, согласно классической теории, трактовать как $\frac{p_r^2}{2m_0}$.

Графически $V_{\text{эфф.}}$ представлена на фиг. 13.1. Из этого графика, в частности, следует, что если полная энергия электрона отрицательна $E < 0$, то его движение будет происходить в области, ограниченной с обеих сторон потенциальными барьерами (классический аналог — эллиптические орбиты), благодаря чему энергетический спектр должен иметь дискретный характер.

При $E > 0$ барьер справа ($r \rightarrow \infty$) будет отсутствовать и положение электрона со стороны больших r становится неограниченным (классический аналог — гиперболические орбиты).

Так как в атоме положение электрона должно быть ограниченным некоторым значением $r_{\text{макс.}}$ (эллиптические орбиты), то при построении теории атома следует считать $E < 0$. Тогда уравнение (13.2) принимает вид:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left\{ -A + \frac{2B}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0, \quad (13.4)$$

где

$$\frac{m_0 Z e_0^2}{\hbar^2} = B > 0 \quad \text{и} \quad -\frac{2m_0 E}{\hbar^2} = A > 0. \quad (13.5)$$

Вводя новую переменную:

$$\rho = 2\sqrt{A}r, \quad (13.6)$$

получаем уравнение:

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} R = 0, \quad (13.7)$$

где $R' = (dR/d\rho)$.

Исходя из графика для $V_{\text{эфф.}}$, можно судить об общем характере решения. Ясно, что внутри ямы $r_{\text{мин.}} < r < r_{\text{макс.}}$ оно будет иметь колебательный характер, а вне ее ($r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$) возникнут как неограниченно возрастающие, так и убывающие решения. Необходимо подобрать условия, которые позволят исключить неограниченно возрастающие решения. Это требование так же, как и в задаче гармонического осциллятора, должно привести к нахождению дискретных уровней энергии электрона.

Поскольку яма не обладает симметрией, асимптотические решения будем искать по отдельности, как при $\rho \rightarrow 0$, так и при $\rho \rightarrow \infty$.

Асимптотическое решение при $\rho \rightarrow \infty$ можно найти, согласно (13.7), из уравнения:

$$R'' - \frac{1}{4} R = 0, \quad (13.8)$$

т. е.

$$R_{\infty} = C_1 e^{-1/2\rho} + C_2 e^{1/2\rho}. \quad (13.9)$$

Чтобы исключить экспоненциально возрастающее решение, следует положить $C_2 = 0$. Коэффициент же C_1 может быть вклю-

чен в общий нормировочный множитель волновой функции, и поэтому его можно приравнять единице. Тогда

$$R_{\infty} = e^{-1/2\rho}. \quad (13.10)$$

Для определения асимптотического решения при $\rho \rightarrow 0$ на основании (13.7) будем иметь уравнение¹⁾:

$$R_0'' + \frac{2}{\rho} R_0' - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R_0 = 0, \quad (13.11)$$

откуда, полагая $R_0 = \rho^q$, находим $q(q+1) - l(l+1) = 0$, т. е. $q_1 = l$, $q_2 = -(l+1)$. Следовательно,

$$R_0 = C_1 \rho^l + C_2 \rho^{-l-1}. \quad (13.12)$$

Полагая $C_2 = 0$ (при этом неограниченно возрастающее решение при $\rho = 0$ исключается), а $C_1 = 1$, получаем:

$$R_0 = \rho^l. \quad (13.13)$$

Общее решение уравнения (13.7), которое можно также записать в виде:

$$\frac{d^2 \rho R}{d\rho^2} + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{B}{\rho \sqrt{A}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} \rho R = 0, \quad (13.7a)$$

выберем в форме:

$$R = R_{\infty} R_0 u. \quad (13.14)$$

В этом случае

$$\rho R = \rho^{l+1} e^{-1/2\rho} u = v u, \quad (13.15)$$

и для определения неизвестной функции u получаем уравнение:

$$u'' + 2u' \frac{v'}{v} + \left\{ \frac{v''}{v} - \frac{1}{4} + \frac{B}{\rho \sqrt{A}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} u = 0. \quad (13.16)$$

Замечая, что согласно (13.15):

$$\ln v = -1/2\rho + (l+1) \ln \rho,$$

находим:

$$\frac{v'}{v} = (\ln v)' = -\frac{1}{2} + \frac{l+1}{\rho}, \quad \text{т. е.} \quad v' = \left(-\frac{1}{2} + \frac{l+1}{\rho} \right) v.$$

Далее имеем:

$$v'' = -\frac{l+1}{\rho^2} v + \left(-\frac{1}{2} + \frac{l+1}{\rho} \right)^2 v, \quad \text{а} \quad \frac{v''}{v} = \frac{1}{4} - \frac{l+1}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}.$$

¹⁾ При $\rho \rightarrow 0$ члены $-\frac{1}{4}$ и $\frac{B}{\rho \sqrt{A}}$ по порядку будут много меньше члена $\frac{l(l+1)}{\rho^2}$ и поэтому могут быть отброшены.

Пользуясь найденными формулами, преобразуем (13.16) к виду:

$$\rho u'' + [2(l+1) - \rho] u' + \left[\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 \right] u = 0. \quad (13.17)$$

Чтобы характер решения для R в нуле и на бесконечности определялся асимптотическими формулами (13.10) и (13.13), необходимо найти условия, при которых функция u будет представлять собой некоторый конечный полином степени k без отрицательных степеней:

$$u = \sum_{\nu=0}^k a_{\nu} \rho^{\nu}. \quad (13.18)$$

Подставляя (13.18) в (13.17) и группируя члены с одинаковыми степенями ρ , будем иметь:

$$\sum_{\nu=0}^k \rho^{\nu} \left\{ a_{\nu} \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 - \nu \right) + a_{\nu+1} [\nu(\nu+1) + 2(\nu+1)(l+1)] \right\} = 0. \quad (13.19)$$

Отсюда, учитывая, что $a_{k+1} = 0$ и $a_k \neq 0$, получаем:

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = k + l + 1 = n. \quad (13.20)$$

Здесь квантовое число n , на единицу большее суммы орбитального:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

и радиального:

$$k = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (13.21)$$

квантовых чисел, получило название *главного квантового числа* n . Оно может принимать значения:

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (13.22)$$

Принимая во внимание равенство (13.20), для определения неизвестных коэффициентов a_{ν} ряда (13.18), согласно (13.19), получаем рекуррентное соотношение:

$$a_{\nu} (k - \nu) = -a_{\nu+1} (\nu + 1) (\nu + 2l + 2). \quad (13.23)$$

Полагая в (13.18) коэффициент при старшей степени $a_k = (-1)^k$ и вычисляя с помощью (13.23) все остальные коэффициенты, для функции u , находим выражение:

$$\begin{aligned} u &= (-1)^k \left\{ \rho^k - \frac{k(k+s)}{1!} \rho^{k-1} + \frac{k(k-1)(k+s)(k+s-1)}{2!} \rho^{k-2} - \dots \right\} = \\ &= \sum_{j=0}^k (-1)^{k+j} \rho^{k-j} \frac{k! (k+s)!}{j! (k-j)! (k+s-j)!}, \end{aligned} \quad (13.24)$$

где $s = 2l + 1$. Ряд (13.24) называется обобщенным полиномом Лагерра $Q_k^s(\rho)$ порядка k и может быть представлен¹⁾ также в замкнутой форме:

$$u = Q_k^s(\rho) = e^{\rho} \rho^{-s} \frac{d^k}{d\rho^k} (e^{-\rho} \rho^{k+s}). \quad (13.25)$$

Таким образом, для радиальной функции $R_{nl}(r)$ окончательно имеем:

$$R_{nl}(\rho) = C_{nl} e^{-1/2 \rho} \rho^l Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho), \quad (13.26)$$

где $\rho = 2\sqrt{A}r$. Принимая во внимание, что $\frac{B}{\sqrt{A}} = n$, а также учитывая значение для B [см. (13.5)], находим:

$$\rho = \frac{2Z}{na_0} r, \quad (13.27)$$

где величина $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2}$ является радиусом первой боровской орбиты. Вычисляя коэффициент C_{nl} из условия нормировки, получаем:

$$C_{nl} = \left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-l-1)!(n+l)!}}, \quad (13.28)$$

т. е.

$$R_{nl} = \left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-l-1)!(n+l)!}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l e^{-\frac{Zr}{na_0}} Q_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right). \quad (13.28a)$$

Как известно, условие нормировки для радиальной части волновой функции имеет вид:

$$\int_0^{\infty} r^2 R_{nl}^2 dr = 1.$$

¹⁾ Покажем, что функция u , записанная в замкнутой форме (13.25), действительно удовлетворяет уравнению (13.17). В самом деле, функция $v = e^{-\rho} \rho^{k+s}$ подчиняется уравнению $\rho v' + (\rho - k - s)v = 0$, в чем нетрудно убедиться, взяв от v первую производную по ρ . Дифференцируя это уравнение $(k+1)$ раз по правилу Лейбница, легко приведем его к виду:

$$\rho v^{(k+2)} + (\rho - s + 1)v^{(k+1)} + (k+1)v^{(k)} = 0.$$

Отсюда, вводя новую функцию $w = v^{(k)} e^{\rho} \rho^{-s}$, получаем для нее уравнение:

$$\rho w'' + (s+1-\rho)w' + kw = 0,$$

совпадающее с уравнением (13.17) для функции u [так как $(B/\sqrt{A}) - l - 1 = k$]. Поскольку при этом легко показать, что коэффициент при старшем члене (ρ^k) функции:

$$w = e^{\rho} \rho^{-s} \frac{d^k}{d\rho^k} (e^{-\rho} \rho^{k+s})$$

будет совпадать с соответствующим коэффициентом равенства (13.24), мы тем самым доказываем справедливость соотношения (13.25).

Подставляя сюда вместо R_{nl} его выражение (13.26) и заменяя, согласно (13.27), r на $\frac{na_0}{2Z}\rho$, получаем:

$$C_{nl}^2 \left(\frac{na_0}{2Z} \right)^3 \int_0^\infty \rho^{2l+2} e^{-\rho} Q_k^{2l+1} Q_k^{2l+1} d\rho = 1.$$

Представим теперь один из полиномов Q_k^{2l+1} в виде ряда (13.24), оставив для другого замкнутую форму (13.25). Тогда условие нормировки, записанное выше, примет вид:

$$C_{nl}^2 \left(\frac{na_0}{2Z} \right)^3 \int_0^\infty \rho (-1)^k \{ \rho^k - k(k+2l+1)\rho^{k-1} + \dots \} \frac{d^k}{d\rho^k} (e^{-\rho} \rho^{k+2l+1}) d\rho = 1.$$

Отсюда, пользуясь теоремой о перебросе производной (см. § 7 п. в), найдем:

$$C_{nl}^2 \left(\frac{na_0}{2Z} \right)^3 \int_0^\infty e^{-\rho} [(k+1)! \rho^{2l+k+2} - k! k(2l+k+1) \rho^{2l+k+1}] d\rho = 1.$$

Легко видеть, что остальные члены ряда для функции Q_k^s дают нуль, так как от них берутся производные более высокого порядка, чем соответствующий показатель степени ρ .

Используя далее известный интеграл:

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^s d\rho = s!, \quad (13.29)$$

легко находим для C_{nl} выражение (13.28)¹⁾. Аналогичным способом можно определить также средние значения от $(r^{-\nu})$ ($\nu=1, 2, 3, 4$), которые нам понадобятся в дальнейшем:

$$\langle r^{-\nu} \rangle = \int \psi_{nlm}^* r^{-\nu} \psi_{nlm} d^3x = \int_0^\infty R_{nl}^2 r^{-\nu+2} dr.$$

¹⁾ Легко также показать условие ортогональности, а вместе с тем и ортонормированности для радиальных функций:

$$\int_0^\infty r^2 R_{n'l'} R_{nl} dr = \delta_{n'l'}.$$

Отсюда, учитывая еще соотношение (11.68), можно записать условие ортонормированности для полной волновой функции проблемы Кеплера:

$$\int \psi_{n'l'm'}^* \psi_{nlm} d^3x = \delta_{m'm} \delta_{l'l} \delta_{n'n},$$

где

$$\psi_{nlm} = R_{nl} Y_l^m.$$

На основании приведенных выше формул последнее выражение можно представить в виде:

$$\begin{aligned} \langle r^{-\nu} \rangle = & C_{nl}^2 \left(\frac{na_0}{2Z} \right)^3 \left(\frac{na_0}{2Z} \right)^{-\nu} \int_0^{\infty} \rho^{-\nu+1} (-1)^k \{ \rho^k - k(k+2l+1)\rho^{k-1} + \\ & + \dots + (-1)^{k-2} \frac{k(k-1)(2l+k+1)!}{2l(2l+3)!} \rho^2 + (-1)^{k-1} \frac{k(2l+k+1)!}{(2l+2)!} \rho + \\ & + (-1)^k \frac{(2l+k+1)!}{(2l+1)!} \} \frac{d^k}{d\rho^k} (e^{-\rho} \rho^{k+2l+1}) d\rho. \end{aligned}$$

Полагая в этом выражении соответственно $\nu=1, 2, 3$ и 4 и вновь прибегая к теореме о перебросе производной, после несложных выкладок находим:

$$\begin{aligned} \langle r^{-1} \rangle &= \left(\frac{Z}{a_0} \right) \frac{1}{n^2}, \\ \langle r^{-2} \rangle &= \left(\frac{Z}{a_0} \right)^2 \frac{1}{n^3(l+1/2)}, \\ \langle r^{-3} \rangle &= \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \frac{1}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}, \\ \langle r^{-4} \rangle &= \frac{1}{2n^5} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^4 \frac{3n^2 - l(l+1)}{(l-1/2)l(l+1/2)(l+1)(l+3/2)}. \end{aligned} \quad (13.29a)$$

Здесь при вычислении $\langle r^{-1} \rangle$ мы должны оставить в полиноме Q_k^s лишь старший член ρ^k . При вычислении же $\langle r^{-2} \rangle$, наоборот, один последний ρ^0 . При вычислении $\langle r^{-3} \rangle$ — два последних и т. д. Выражения для $\langle r^{-3} \rangle$ и $\langle r^{-4} \rangle$ получены в предположении $l \neq 0$. Для s -состояний ($l=0$), как правило, вместо взаимодействий, пропорциональных подобным членам, появляется контактное взаимодействие (см. ниже § 19, 20).

Наряду с этим общим исследованием покажем для примера, как найти нормировочный коэффициент волновой функции $\psi_{nlm} = R_{nl} Y_l^m$ основного, т. е. наименьшего, энергетического состояния, характеризуемого квантовыми числами:

$$n=1, \quad l=m=k=0.$$

Замечая, что при $l=m=0$ шаровая функция Y_l^m , согласно (12.9), так же как и полином Q_k^{2l+1} при $k=0$, есть величина постоянная, для ψ_{100} в соответствии с (13.26) имеем:

$$\psi_{100} = C e^{-\frac{Zr}{a_0}}, \quad (13.30)$$

и, следовательно, условие нормировки принимает вид:

$$\int \psi_{100}^* \psi_{100} d^3x = \int \psi_{100}^* \psi_{100} r^2 dr d\Omega = 1. \quad (13.31)$$

Подставляя сюда явное выражение волновой функции ψ_{100} и учитывая ее независимость от углов ϑ и φ , получаем:

$$C^2 4\pi \int_0^\infty e^{-\frac{2Zr}{na_0}} r^2 dr = 1. \quad (13.31a)$$

Отсюда, вводя переменную $x = \frac{2Zr}{na_0}$ и принимая во внимание равенство (13.29), находим:

$$C = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2}.$$

Это же значение может быть получено из общих формул (13.28) и (11.67), если положить в последних $n=1$, $l=0$ и $m=0$.

Поэтому значение волновой функции наимизшего состояния будет определяться соотношением:

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}}. \quad (13.32)$$

Возможный спектр энергии водородоподобного атома легко может быть найден из формул (13.20) и (13.5):

$$E_n = -\frac{Z^2 e_0^2}{2a_0 n^2} = -\frac{R h Z^2}{n^2}, \quad (13.33)$$

где постоянная Ридберга:

$$R = \frac{e_0^4 m_0}{2\hbar^3}.$$

Заметим, что это выражение для энергии, кстати сказать, полностью совпадающее с соответствующим выражением борвской теории [см. (2.50)], зависит лишь от главного квантового числа $n=l+k+1$, т. е. от суммы орбитального l и радиального k квантовых чисел и не зависит от магнитного квантового числа m . В то же самое время волновая функция $\psi_{nlm} = R_{nl} Y_l^m$ зависит от всех трех квантовых чисел n , l и m по отдельности. Следовательно, уровни энергии, согласно волновой теории Шредингера, оказываются вырожденными, причем кратность вырождения в силу изменения m от $(-l)$ до $(+l)$ и l от 0 до $(n-1)$ [см. (13.20)] будет равна:

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l m = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2.$$

Как мы видели в § 12, вырождение по m характерно для любого центрального силового поля и связано с равноправностью

любых различных направлений, проходящих через начало координат.

Вырождение же по орбитальному квантовому числу l имеет место в теории Шредингера только в случае чисто кулоновского взаимодействия. В большинстве же других центрально-симметричных систем вырождение по l отсутствует, т. е. уровень энергии с заданным значением n расщепляется на n подуровней, отвечающих различным l^1). Если же система находится еще и в некотором внешнем поле (например, в магнитном), снимающем центральную симметрию, то исчезает вырождение и по m , т. е. энергетический уровень будет уже состоять в этом случае из n^2 различных подуровней.

б. Полуклассическая интерпретация основных результатов квантовомеханической теории водородоподобного атома

Как известно, в классической теории величина:

$$\frac{1}{2m_0} p_r^2 = E + \frac{Ze_0^2}{r} - \frac{p_\varphi^2}{2m_0 r^2} \quad (13.34)$$

[см. (13.3а)] должна быть больше нуля. Отсюда видно, что для эллиптических орбит ($E = -|E| < 0$) это возможно лишь тогда, когда радиус r лежит в пределах $r_{\text{мин.}} \leq r \leq r_{\text{макс.}}$, которые могут быть найдены путем приравнивания правой части равенства (13.34) нулю.

Отсюда, учитывая еще квантовое выражение для энергии (13.33), находим:

$$r_{\text{макс.}} = \frac{n^2 a_0}{Z} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{p_\varphi^2}{n^2 \hbar^2}} \right). \quad (13.35)$$

Нетрудно видеть, что если записать уравнение эллипса в полярных координатах:

$$r = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos \varphi}, \quad (13.36)$$

где параметр $p = \frac{b^2}{a}$ определяется отношением квадрата малой полуоси b к большой полуоси a , а $\varepsilon = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a}$ является эксцентриситетом эллипса, характеризующим его вытянутость (в

¹⁾ В частности, как мы увидим в дальнейшем, даже в атоме водорода учет релятивистских эффектов, объема ядра или так называемых вакуумных поправок, снимает вырождение по l . Аналогично в спектре щелочных металлов, имеющих на последней оболочке один электрон, воздействие электронов, находящихся на внутренних оболочках, снимает вырождение по l .

частности, при $\varepsilon = 0$ эллипс превращается в окружность), то для $r_{\text{макс.}}$ и $r_{\text{мин.}}$ из (13.36) получаются формулы:

$$r_{\text{макс.}} = a(1 + \varepsilon), \quad (13.37)$$

$$r_{\text{мин.}} = a(1 - \varepsilon).$$

Сравнивая их с (13.35), находим:

$$\frac{n^2 a_0}{Z} = a, \quad (13.38)$$

$$\sqrt{1 - \frac{p_\varphi^2}{n^2 \hbar^2}} = \varepsilon. \quad (13.39)$$

Таким образом, классическим аналогом величины $\frac{n^2 a_0}{Z}$ оказывается большая полуось эллипса, эксцентриситет которого определяется выражением (13.39).

Подставляя в (13.39) соответственно боровское значение $p_\varphi^2 = \hbar^2 n_\varphi^2 = \hbar^2 (l + 1)^2$ и значение, найденное по квантовой механике, $p_\varphi^2 = \hbar^2 l(l + 1)$, получаем:

$$\varepsilon_b = \sqrt{1 - \frac{(l + 1)^2}{n^2}}, \quad (13.40)$$

$$\varepsilon_{\text{кв.}} = \sqrt{1 - \frac{l(l + 1)}{n^2}}. \quad (13.41)$$

Отсюда видно, что эксцентриситет может обратиться точно в нуль лишь в боровской теории ($l = n - 1$). По волновой механике он при $l = n - 1$ достигает лишь минимального значения:

$$\varepsilon_{\text{кв.}}^{\text{мин.}} = \sqrt{\frac{1}{n}}. \quad (13.42)$$

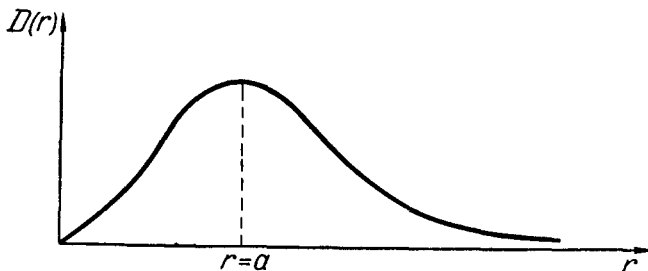
Поэтому в квантовой механике можно говорить лишь о классическом аналоге состояний с круговыми орбитами, когда число $l = n - 1$. Кроме того, следует подчеркнуть, что s -состояние ($l = 0$) дает в классическом приближении $\varepsilon_{\text{кв.}}^{\text{макс.}} = 1$, что соответствует параболическим орбитам. Однако этот случай никак нельзя сопоставить с параболическим, поскольку в квантовой механике при этом энергия остается [как видно из (13.33)] величиной отрицательной (напомним, что в классическом случае для параболических орбит энергия обращается в нуль), и поэтому радиус оказывается ограниченным со стороны максимального значения [см. (13.34)] выражением:

$$r_{\text{макс.}} = \frac{Ze_0^2}{|E|}.$$

Такое расхождение квантового решения для s -состояния с клас-

сическим связано с тем обстоятельством, что случай $l = 0$ просто не имеет классического аналога.

Вообще же, поскольку в волновой механике можно говорить только о вероятности того или иного события, все результаты, найденные нами по теории Шредингера, должны истолковываться с вероятностной точки зрения. Покажем, например, что в случае круговых орбит ($l = n - 1$) величина $a = \frac{n^2 a_0}{Z}$ [см. (13.38)], являющаяся в боровской теории просто радиусом круговой траек-



Фиг. 13.2. Распределение радиальной плотности вероятности в случае круговых орбит.

тории, в волновой теории соответствует наиболее вероятному значению координаты электрона $r = a$.

В самом деле, согласно условию нормировки:

$$\int_0^{\infty} r^2 R_{nl}^2 dr = 1,$$

распределение плотности вероятности $D(r)$ по радиусу определяется формулой:

$$D(r) = r^2 R_{nl}^2. \quad (13.43)$$

В случае круговых орбит, когда $l = n - 1$, а радиальное квантовое число $k = 0$, последнее выражение дает:

$$D(r) = r^2 R_{n, n-1}^2. \quad (13.43a)$$

Принимая во внимание, что согласно (13.25) и (13.26):

$$R_{n, n-1} = \text{const } e^{-\frac{1}{2} \rho} \rho^{n-1},$$

для функции $D(r)$ найдем следующее значение (см. фиг. 13.2):

$$D(r) = \text{const } r^{2n} e^{-\frac{2Zr}{na_0}}. \quad (13.44)$$

Отсюда, определяя то значение r , при котором эта функция достигает максимального значения:

$$\left(\frac{\partial D(r)}{\partial r}\right)_{r=r_n} = 0,$$

имеем:

$$r_n = a = \frac{n^2}{Z} a_0. \quad (13.45)$$

Заметим, кстати, что если положить $Z = 1$ и $n = 1$, то наименьшим радиусом орбиты будет радиус a_0 первой борховской орбиты.

В том же случае, когда радиальное квантовое число $k \neq 0$, т. е. когда орбиты можно назвать эллиптическими, распределение плотности вероятности $D(r)$ принимает вид:

$$D(r) = \text{const } r^{2l+2} e^{-\frac{Zr}{na_0}} (Q_k^{2l+1})^2, \quad (13.46)$$

и уравнение, определяющее экстремальные значения функции $D(r)$, запишется в форме:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D(r)}{\partial r} = \text{const } r^{2l+1} e^{-\frac{Zr}{na_0}} \{ & (2l+2) Q_k^{2l+1} - \\ & - r Q_k^{2l+1} + 2r \frac{\partial}{\partial r} Q_k^{2l+1} \} Q_k^{2l+1} = 0. \end{aligned} \quad (13.47)$$

В силу того, что Q_k^{2l+1} является полиномом k -й степени, уравнение (13.47) имеет k корней (не считая точек $r = 0$ и $r = \infty$), а также $(k+1)$ максимумов, что в значительной мере напоминает картину распределения плотности вероятности при свободном движении частицы внутри потенциальной ямы (волновая функция изменяется по синусоиде, см. § 4) или при движении осциллятора (см. § 10, фиг. 10.2).

в. Правила отбора. Спектр излучения водородоподобных атомов

Чтобы определить правила отбора в проблеме Кеплера, необходимо вычислить матричные элементы:

$$(r)_{n'l'm'}^{n''l''m''} = \int \psi_{n''l''m''}^* \mathbf{r} \psi_{n'l'm'} d^3x. \quad (13.48)$$

Подставляя сюда $\psi_{nlm} = Y_l^m R_{nl}$, получаем:

$$(r)_{n'l'm'}^{n''l''m''} = \int d\Omega (Y_{l''}^{m''})^* \frac{r}{r} Y_l^m \int_0^\infty R_{n''l''} r^3 R_{nl} dr. \quad (13.48a)$$

Интегрирование по углам ϑ и φ дает, как известно [см. (12.24) — (12.26)], правила отбора для орбитального квантового числа: $\Delta l = l - l' = \pm 1$, и магнитного квантового числа: $\Delta m = m -$

— $m' = 0, \pm 1$, пользуясь которыми вместо (13.48а) будем иметь:

$$(\mathbf{r})_{n'l'm'}^{n'l'm'} = \text{const} \left\{ \begin{matrix} \delta_{m', m} \\ \delta_{m', m \pm 1} \end{matrix} \right\} \delta_{l', l \pm 1} \int_0^\infty R_{n', l \pm 1} r^3 R_{nl} dr. \quad (13.48б)$$

Однако если вычислить интеграл¹⁾:

$$\int_0^\infty r^3 R_{n'l'} R_{nl} dr \sim \int_0^\infty r^{3+2l \pm 1} e^{-\frac{Zr}{a_0} \left(\frac{1}{n} + \frac{1}{n'} \right)} Q_k^l \left(\frac{2Zr}{na_0} \right) \times \\ \times Q_{k'}^{l' \pm 1} \left(\frac{2Zr}{n'a_0} \right) dr, \quad (13.48в)$$

то легко показать, что он не обращается в нуль ни при каких значениях n' , т. е. для всех разрешенных переходов главное квантовое число может изменяться произвольно.

Принимая во внимание правила отбора водородоподобного атома, перейдем к исследованию его спектра излучения. Для этого введем некоторые условные символы для обозначения энергетических уровней в атоме. Прежде всего спектральные термы атомов ($-E_{nl}/\hbar$), зависящие в общем случае не только от n , но и от l , будем обозначать через (nl) , т. е.

$$\left(-\frac{E_{nl}}{\hbar} \right) = (nl), \quad (13.49)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$, а для l , как уже указывалось в § 12, приняты буквенные обозначения: s, p, d, f, g, h, \dots , соответствующие $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$. Поскольку квантовые числа $l \leq n - 1$, то могут быть только термы:

$1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; 4s, 4p, 4d, 4f; 5s, 5p, 5d, 5f, 5g; \dots$

и т. д., но не может быть, например, терма $1p$, поскольку здесь $n = 1$ и $l = 1$, или не может быть терма $3f$, так как при этом $n = l = 3$ и т. д. Частота излучения в обозначениях (nl) принимает вид:

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = (n'l') - (nl), \quad (13.50)$$

причем здесь необходимо учитывать правила отбора для орбитального квантового числа l : $l' = l \pm 1$.

¹⁾ Для того чтобы вычислить этот интеграл, следует ввести новую переменную $\rho = \frac{Zr}{a_0} \left(\frac{1}{n} + \frac{1}{n'} \right)$. Затем, представив Q_k^l и $Q_{k'}^{l' \pm 1}$ в виде полиномов, интеграл можно взять почленно. В силу ортогональности в нуль обращается только интеграл вида:

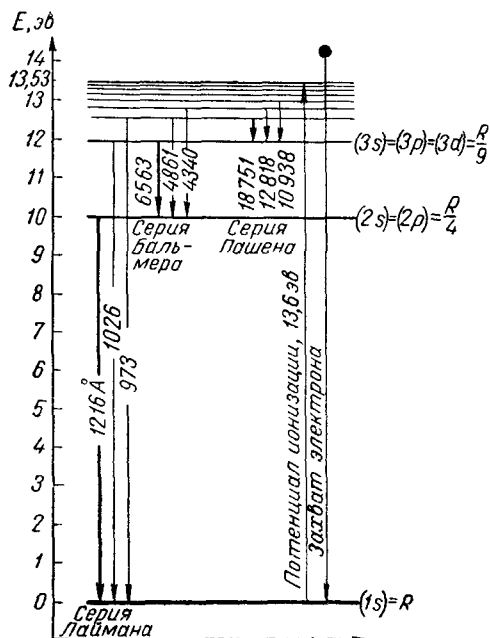
$$\int_0^\infty r^2 R_{n'l'} R_{nl} dr = 0 \quad (n' \neq n).$$

Пользуясь выражением (13.33), терм (nl) можно еще представить в форме:

$$(nl) = \frac{m_0 e_0^4 Z^2}{2\hbar^3 n^2} = \frac{RZ^2}{n^2}, \quad (13.51)$$

где постоянная Ридберга:

$$R = \frac{m_0 e_0^4}{2\hbar^3}.$$



Фиг. 13.3. Спектральные серии атома водорода.

Длины волн, соответствующие указанным переходам, выражены в ангстремах.

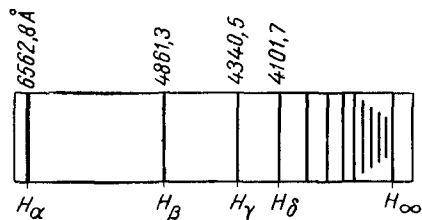
Для частоты излучения $\omega_{nn'}$ при этом получаем формулу:

$$\omega_{nn'} = RZ^2 \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (13.52)$$

Отсюда видно, что в случае атома водорода ($Z=1$) для серии Лаймана, соответствующей переходу на наинизший энергетический уровень $n'=1$, т. е. на уровень $1s$, имеем (см. фиг. 13.3)

$$\omega_{\text{Лайм.}} = (1s) - (np) = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (13.53)$$

где $n=2, 3, 4, \dots$. Для серии Бальмера (см. фиг. 13.4), соответствующей переходу на уровень $n'=2$ с уровней $n > 2$, имеем три типа возможных частот:



$$\begin{aligned}\omega'_{\text{Бальм.}} &= (2s) - (np), \\ \omega''_{\text{Бальм.}} &= (2p) - (ns), \\ \omega'''_{\text{Бальм.}} &= (2p) - (nd).\end{aligned}\quad (13.54)$$

Так как для атома водорода по орбитальному квантовому числу имеет место вырождение, то эти три линии сольются в одну (см. фиг. 13.3), в результате чего получим:

Фиг. 13.4. Спектральная серия Бальмера.

Длины волн, соответствующие видимым линиям H_{α} , H_{β} , H_{γ} и H_{δ} , приведены в ангстремах (Å); H_{∞} даёт теоретическое положение границы серии.

$$\omega_{\text{Бальм.}} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (13.55)$$

Аналогичная картина получается и для серии Пашена, определяемой частотами (см. фиг. 13.3)

$$\omega_{\text{Паш.}} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (13.56)$$

где $n=4, 5, 6, \dots$.

г. Движение частицы в кулоновском поле в случае непрерывного спектра

Хотя при исследовании непрерывного спектра волновую функцию можно выразить через вырожденную гипергеометрическую функцию, однако при исследовании гиперболического решения чаще всего используют асимптотическое поведение этой гипергеометрической функции при больших значениях r . Эти асимптотические решения могут быть непосредственно получены с помощью квазиклассического метода ВКБ.

Прежде чем использовать этот метод для исследования гиперболических орбит ($E > 0$), получим в квазиклассическом приближении некоторые общие формулы в применении к центральным силам.

Уравнение для радиальной части в случае центральных сил может быть представлено, согласно (11.21) и (11.51), в виде:

$$u'' + \left(\frac{2m_0 E}{\hbar^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u = 0, \quad (13.57)$$

где

$$u = Rr. \quad (13.58)$$

Потенциальная энергия $V(r)$ при $r \rightarrow 0$ должна убывать в рассматриваемом случае медленнее, чем r^{-2} . Кроме того, мы всегда можем выбрать потенциальную энергию таким образом, чтобы

$$V(r \rightarrow \infty) = 0.$$

Поскольку особенность уравнения (13.57) при $r \rightarrow 0$, определяемая членом $l(l+1)r^{-2}$, лежит вблизи потенциального барьера, соответствующие асимптотические выражения для ψ вблизи барьера, которые используются при сшивании решений (см. § 5), не дают хорошего приближения. Поэтому в методе ВКБ мы должны либо использовать другие асимптотические выражения (не бесселевы функции порядка $1/3$), либо с помощью введения нового аргумента $x = \ln r$ удалить эту особенность из точки $r = 0$ в точку $x = -\infty$.

Воспользуемся вторым методом и введем новую волновую функцию $\chi(x)$:

$$u = e^{x/2} \chi(x). \quad (13.59)$$

Тогда уравнение (13.57) примет такой вид:

$$\frac{d^2 \chi}{dx^2} + e^{2x} \left(\frac{2m_0}{\hbar^2} E - \frac{2m_0}{\hbar^2} V(e^x) - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 e^{-2x} \right) \chi = 0, \quad (13.60)$$

к которому уже применим метод ВКБ. В частности, для аргумента z , от которого зависит асимптотическое выражение ψ [см. (5.55)], будем иметь значение:

$$\begin{aligned} z &= \frac{1}{\hbar} \int e^x \sqrt{\left| 2m_0 E - 2m_0 V(e^x) - \hbar^2 \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 e^{-2x} \right|} dx = \\ &= \frac{1}{\hbar} \int |p| dx, \end{aligned} \quad (13.61)$$

причем в данном случае $|p|$ не является уже импульсом.

Возвращаясь к первоначальной независимой переменной r , получаем:

$$z = \frac{1}{\hbar} \int \sqrt{\left| 2m_0 E - 2m_0 V(r) - \hbar^2 \frac{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2}{r^2} \right|} dr. \quad (13.62)$$

Отсюда, в частности, вытекает, что при использовании квазиклассических выражений, полученных для одномерного уравнения, в радиальной части необходимо в орбитальном моменте сделать замену:

$$l(l+1) \rightarrow \left(l + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (13.63)$$

Применим теперь формулу (13.61) для исследования движения частицы в кулоновском поле:

$$V(r) = -\frac{Ze_0^2}{r}$$

в случае гиперболических орбит ($E > 0$).

При квазиклассическом рассмотрении необходимо воспользоваться «сшитыми» асимптотическими решениями (5.66) — (5.69).

Для этого в нашем случае [см. (13.62)] необходимо вычислить интеграл:

$$\int_{r_0}^r \frac{V\bar{f}(r)}{r} dr = \sqrt{\bar{f}} - \frac{V\bar{c}}{2} \ln \frac{2c + br + 2\sqrt{\bar{c}f}}{2c + br - 2\sqrt{\bar{c}f}} +$$

$$+ \frac{b}{4\sqrt{\bar{a}}} \ln \frac{2ar + b + 2\sqrt{\bar{a}f}}{2ar + b - 2\sqrt{\bar{a}f}}, \quad (13.64)$$

где

$$f = ar^2 + br + c, \quad (13.65)$$

а значение для r_0 находится из условия $f(r_0) = 0$.

Прежде всего определим асимптотическое решение для волновой функции при $r_0 \gg r \rightarrow 0$. Тогда, полагая в (13.64):

$$c = \left(l + \frac{1}{2}\right)^2, \quad b = -\frac{2m_0Ze_0^2}{\hbar^2}, \quad a = -\frac{2m_0E}{\hbar^2}$$

и вводя обозначения:

$$k = \frac{\sqrt{2m_0E}}{\hbar}, \quad \gamma = \frac{m_0Ze_0^2}{\hbar^2k} = \frac{Ze_0^2}{\hbar v}, \quad (13.66)$$

будем иметь:

$$z = \frac{1}{\hbar} \int_r^{r_0} |p| dr \ln r \approx -\left(l + \frac{1}{2}\right) \left(1 - \ln \frac{2\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{kr \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \gamma^2}} + \right.$$

$$\left. + \frac{i\gamma}{2\left(l + \frac{1}{2}\right)} \ln \frac{-\gamma + i\left(l + \frac{1}{2}\right)}{-\gamma - i\left(l + \frac{1}{2}\right)} \right) = -\left(l + \frac{1}{2}\right) \ln kr + \text{const.}$$

На основании формулы (5.51) асимптотическое решение в этом случае будет иметь вид:

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{|p|}} (C_1 e^{-z} + D_1 e^z),$$

причем в последнем равенстве, согласно (13.61):

$$|p| = \hbar \left(l + \frac{1}{2} \right).$$

Учитывая, что радиальная волновая функция R связана с χ , согласно (13.58) и (13.59), соотношением:

$$R = \frac{1}{\sqrt{r}} \chi, \quad (13.67)$$

находим:

$$R = Cr^l + Dr^{-(l+1)}.$$

Чтобы решение в нуле оставалось сходящимся, мы должны положить $D=0$, т. е. выбрать решение в виде:

$$R = Cr^l. \quad (13.68)$$

Это находится в полном согласии с асимптотическим решением, полученным другим способом [см. (13.13)].

В другом крайнем случае $r \rightarrow \infty$ мы будем иметь следующее асимптотическое решение [см. (5.67) и (5.66)]:

$$\chi_{r>r_0} = \frac{\text{const}}{\sqrt{p}} \sin \left(z + \frac{\pi}{4} \right), \quad (13.69)$$

причем для величины p , согласно (13.61), будем иметь:

$$p = r\hbar k. \quad (13.70)$$

Выражение (13.69) является аналитическим продолжением другого асимптотического решения при $r \rightarrow 0$.

При определении величины z , согласно (13.62), можно также воспользоваться интегралом (13.64), если в последнем положить:

$$a = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}, \quad b = \frac{2m_0 Z e_0^2}{\hbar^2}, \quad c = - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (13.71)$$

Тогда при $r \rightarrow \infty$, учитывая, что $\sqrt{f} \approx kr + \gamma$, будем иметь:

$$z \approx kr + \gamma - \frac{i \left(l + \frac{1}{2} \right)}{2} \ln \frac{\gamma + i \left(l + \frac{1}{2} \right)}{\gamma - i \left(l + \frac{1}{2} \right)} + \gamma \ln \frac{2kr}{\sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + \gamma^2}}. \quad (13.72)$$

Воспользуемся далее соотношениями:

$$\begin{aligned} & \ln\left(\gamma + i\left(l + \frac{1}{2}\right)\right) = \\ & = \ln\sqrt{\gamma^2 + \left(l + \frac{1}{2}\right)^2} + i\left(\frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{\gamma}{l + \frac{1}{2}}\right), \end{aligned} \quad (13.73)$$

$$\begin{aligned} & \ln\left(\gamma - i\left(l + \frac{1}{2}\right)\right) = \\ & = \ln\sqrt{\gamma^2 + \left(l + \frac{1}{2}\right)^2} + i\left(\frac{3\pi}{2} + \operatorname{arctg} \frac{\gamma}{l + \frac{1}{2}}\right)^1. \end{aligned} \quad (13.73a)$$

Здесь, записывая мнимую часть, мы учли, что $\gamma > 0$ и $\left(l + \frac{1}{2}\right) > 0$, и поэтому угол, определяющий мнимую часть логарифма в равенстве (13.73), лежит в первой четверти, а в равенстве (13.73a) — в четвертой.

Тогда выражение для аргумента z может быть преобразовано к следующему виду:

$$z = kr + \gamma \ln 2kr - \frac{\pi}{2}l - \frac{\pi}{4} + \delta_l^0, \quad (13.74)$$

где фаза δ_l^0 равна²⁾:

$$\delta_l^0 = -\left(l + \frac{1}{2}\right) \operatorname{arctg} \frac{\gamma}{l + \frac{1}{2}} - \gamma \ln \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \gamma^2} + \gamma. \quad (13.74a)$$

¹⁾ Соотношения (13.73) и (13.73a) легко могут быть получены при логарифмировании равенств:

$$\begin{aligned} \beta + i\alpha &= \sqrt{\beta^2 + \alpha^2} e^{i\varphi}, \\ -\beta \pm i\alpha &= \sqrt{\beta^2 + \alpha^2} e^{i(\pi \mp \varphi)}, \\ \beta - i\alpha &= \sqrt{\beta^2 + \alpha^2} e^{i(2\pi - \varphi)}, \end{aligned} \quad (13.73б)$$

где

$$\varphi = \operatorname{arctg} \frac{\alpha}{\beta} = \frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{\beta}{\alpha},$$

а величины β и α положительны. Аргумент φ комплексной величины выбран таким образом, чтобы он лежал в первой четверти, благодаря чему логарифм комплексной величины становится однозначно определенным.

²⁾ Если произвести более точный расчет, а именно, асимптотическое выражение для аргумента z получить из разложения для вырожденной гипергеометрической функции, то для фазы δ_l^0 найдем (см. Ф. Морс и Г. Фешбах, Методы теоретической физики, т. II, ИЛ, 1960, стр. 615):

$$\delta_l^0 = -\operatorname{arg} \Gamma(l + 1 + i\gamma).$$

Если $|l + i\gamma| \gg 1$, то, пользуясь формулой Стирлинга:

$$\Gamma(l + 1 + i\gamma) = |\Gamma(l + 1 + i\gamma)| e^{-i\delta_l^0} \approx \sqrt{2\pi} \left(\frac{l + i\gamma + 1/2}{e}\right)^{l + i\gamma + 1/2},$$

получим для δ_l^0 приближение (13.74a).

В частности, при $l=0$ и $\gamma \gg 1$ можно приближенно положить:

$$\delta_0^0 = \gamma(1 - \ln \gamma) - \frac{\pi}{4}.$$

Отсюда, принимая во внимание равенства (13.69), (13.67) и (13.70), находим:

$$R_l(k) = \frac{C \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right)}{r}. \quad (13.75)$$

Здесь C является нормировочным коэффициентом, а полная фаза:

$$\delta_l = \delta_l^0 + \gamma \ln 2kr. \quad (13.76)$$

Если в последнем равенстве мы положим величину $\gamma=0$, то найдем асимптотическое выражение для радиальной функции свободного движения:

$$R_l^{(\gamma=0)}(k) = \frac{C \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right)}{r}. \quad (13.77)$$

Таким образом, потенциальная энергия в поле центральных сил для асимптотического решения учитывается с помощью сдвига фазы:

$$\begin{aligned} \delta_l = & - \int_{r_0'}^r \sqrt{k^2 - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 r^{-2}} dr + \\ & + \int_{r_0}^r \sqrt{k^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2} V(r) - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 r^{-2}} dr, \end{aligned} \quad (13.78)$$

где r_0' — корень первого подынтегрального выражения.

В случае кулоновского поля эта фаза определяется выражением (13.76). Наличие в фазе логарифмического члена, зависящего от r , вытекает из дальнедействующего характера электростатических сил, оказывающих влияние на частицу даже при очень больших значениях r .

Фазы δ_l являются функциями не только l , но и величины k^2 (т. е. энергии $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$), и представляют собой существенные характеристики собственных функций непрерывного спектра.

Значение для фазы не может быть найдено в общем виде. Для каждой конкретной задачи величины δ_l определяются, как правило, приближенно. Особенно большую роль фазы играют в задачах рассеяния, где через них записывается выражение для эффективного сечения (см. § 29).

Волновая функция непрерывного спектра нормируется на δ -функцию. Учитывая, что фактически в бесконечной части про-

странства волновая функция определяется выражением (13.75) и только в очень небольшой области вблизи центра закон изменения волновой функции становится несколько другим, при определении коэффициента C будем считать, что во всем пространстве волновая функция изменяется по закону (13.75).

При подобном подходе волновая функция нормируется соотношением:

$$I = \int_0^{\infty} R_l(k) R_l(k') r^2 dr = \delta(k - k').$$

Подставляя сюда вместо $R_l(k)$ выражение (13.75) и принимая во внимание, что логарифмический член, входящий в выражение для фазы δ_l , растет медленно по сравнению с r и им можно практически пренебречь, находим:

$$\begin{aligned} I &= \frac{C^2}{2} \int_0^{\infty} \cos r(k - k') dr - \frac{C^2}{2} \int_0^{\infty} \cos [r(k + k') - \pi l + 2\delta_l] dr \approx \\ &\approx \frac{C^2}{2} \pi \delta(k - k'). \end{aligned}$$

Отсюда находим значение для нормировочного коэффициента:

$$C = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \quad (13.79)$$

в асимптотическом решении для поля центральных сил.

Схема энергетических уровней в атоме водорода (с учетом как дискретных уровней, так и непрерывного спектра) представлена на фиг. 13.3.

На этой схеме наглядно демонстрируется вырождение по l , проявляющееся в слиянии всех уровней с одинаковым n в один.

Помимо обычных переходов, между дискретными уровнями в атоме возможны по существу еще два обратных друг другу процесса, а именно процессы ионизации и захвата. При ионизации электрон переходит с дискретного уровня ($E < 0$), например, из низшего состояния, в область положительных энергий ($E > 0$), образующих непрерывный спектр (гиперболические орбиты). Этот процесс происходит с поглощением энергии.

Наоборот, при захвате свободный электрон переходит на один из возможных дискретных уровней, выделяя при этом соответствующую энергию.

Для того чтобы перевести электрон из низшего энергетического состояния ($n = 1$) в область $E > 0$, необходимо затратить энергию (см. фиг. 13.3):

$$E_{\text{ион.}} = T - E_1 = R\hbar + T,$$

где $T = \frac{m_0 v^2}{2}$ — кинетическая энергия электрона, практически не связанного с ядром. Энергия $E^{\text{ион.}}$ определяет так называемую энергию ионизации атома. Своего минимального значения энергия ионизации достигает при $T=0$, что соответствует переводу электрона с уровня $n=1$ в состояние непрерывного спектра с минимальной энергией ($E=0$), когда электрон может покинуть атом. Для атома водорода:

$$E_{\text{мин.}}^{\text{ион.}} = R\hbar = \frac{e_0^2}{2a_0} = 13,59 \text{ эв.}$$

д. Учет движения ядра

До сих пор все проводимые нами расчеты производились без учета движения ядра. Поэтому построенная выше теория водородоподобного атома будет строгой лишь в случае, когда масса ядра бесконечно большая, что, вообще говоря, в особенности для легких элементов (например, для водорода и гелия) можно принять лишь в сравнительно грубом приближении. Учет движения ядра привел к объяснению ряда важных экспериментальных фактов.

Чтобы учесть массу M ядра, поступим так же, как и при исследовании спектров двухатомных молекул [см. формулу (12.41а)], заменив всюду массу электрона m_0 приведенной массой:

$$m_{\text{пр.}} = \frac{m_0}{1 + \frac{m_0}{M}} \approx m_0 \left(1 - \frac{m_0}{M}\right). \quad (13.80)$$

Тогда постоянная Ридберга станет равной:

$$R_M = \frac{m_{\text{пр.}} e_0^4}{2\hbar^3} = R_\infty \left(1 - \frac{m_0}{M}\right), \quad (13.81)$$

благодаря чему несколько изменятся и значения для термов:

$$(nl) = \frac{Z^2 R_\infty}{n^2} \left(1 - \frac{m_0}{M}\right). \quad (13.82)$$

Поэтому частота излучения будет определяться выражением:

$$\omega_{nn'} = Z^2 R_\infty \left(1 - \frac{m_0}{M}\right) \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad (13.83)$$

отличающимся от прежнего [см. (13.52)] наличием множителя

$$\left(1 - \frac{m_0}{M}\right).$$

В силу зависимости частоты излучения атомов от массы M ядра атомов, определение атомного веса можно производить не

только обычными химическими, но и спектроскопическими методами. Благодаря этому удалось, в частности, доказать существование тяжелого водорода, ионизованных атомов гелия и т. д. Как известно, атомный вес водорода был определен в среднем относительно кислорода на основании химических исследований. Для каждого же атома в отдельности атомный вес был найден с помощью масс-спектрографа.

При этом были получены несколько отличные значения:

$$\frac{M_{\text{хим.}} - M_{\text{м. сп.}}}{M_{\text{хим.}}} 100\% \cong 0,0145\%. \quad (13.84)$$

На основании этого Берджем и Ментцелем было выдвинуто предположение о существовании изотопа водорода — дейтерия $D = {}_1H^2$ (или тяжелого водорода), имеющего атомный вес, в два раза больший, чем у обычного водорода. В самом деле, при определении атомного веса естественной смеси водорода вклад должен внести и дейтерий; в масс-спектрографе же измеряется лишь атомный вес ${}_1H^1$, поскольку спектральные линии атомов ${}_1H^2$ ложатся в другом месте шкалы.

Так же как и водород, дейтерий может вступить в реакцию, образуя, например, так называемую тяжелую воду D_2O . Впервые тяжелая вода была открыта Юри и Осборном в 1932 г. Основной метод получения дейтерия — это электролитическое разложение воды. Скорость выделения обычного водорода на катоде значительно превосходит скорость выделения дейтерия, в результате чего происходит значительная концентрация дейтерия в остатке жидкого электролита, где он и может быть обнаружен. Ввиду же малого количества тяжелого водорода в естественной воде, обнаружить его там почти невозможно. Наличие дейтерия подтверждается спектроскопическими исследованиями, показавшими, что в серии Бальмера ($n' = 2$) наряду с линиями:

$$\omega_H^{\text{Бальм.}} = R_\infty \left(1 - \frac{1}{1840}\right) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (13.85)$$

существуют линии (см. фиг. 13.5), расположенные несколько правее и укладывающиеся в формулу¹⁾:

$$\omega_D^{\text{Бальм.}} = R_\infty \left(1 - \frac{1}{3680}\right) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad (13.86)$$

которую нетрудно получить из (13.83), если положить там массу M равной удвоенной массе ядра атома водорода и $Z = 1$.

¹⁾ Согласно последним экспериментальным данным:

$$R_\infty = 2\pi c \cdot 109737, \quad R_H = 2\pi c \cdot 109678, \quad R_D = 2\pi c \cdot 109707,$$

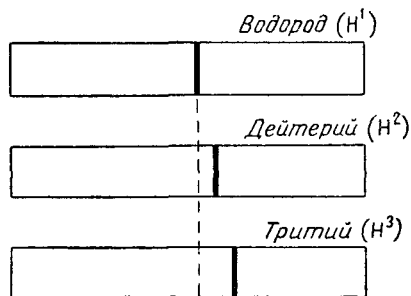
где цифры даны для $R_{\text{сп.}}$ (см. сноску на стр. 34).

Следует заметить, что ввиду большой относительной разницы в массах атома дейтерия и атома водорода они отличаются по своим физическим и химическим свойствам гораздо сильнее, чем изотопы других элементов. Так, например, хотя тяжелая вода внешне и похожа на обыкновенную воду, по физическим свойствам она несколько отличается от обыкновенной. В частности, температуры плавления и кипения ее при 1 атм равны соответственно $3,81^\circ$ и $101,4^\circ$. Она имеет большую вязкость и хуже растворяет соли, чем обычная вода. В связи с развитием ядерной физики тяжелая вода приобретает особое значение, так как она является хорошим замедлителем быстрых нейтронов, а также используется как источник получения дейтерия.

В настоящее время известен еще один изотоп водорода — тритий ($T = {}_1\text{H}^3$), ядро которого состоит из двух нейтронов и одного протона. Его соединения с кислородом образуют так называемую тритиевую воду. В природной воде отношение числа атомов трития к числу атомов ${}_1\text{H}^1$ равно примерно 10^{-18} , в то время как отношение числа атомов D к числу атомов водорода ${}_1\text{H}^1$ равно $\frac{1}{6800}$.

Тритий в смеси с дейтерием является важнейшим веществом для осуществления термоядерных реакций: при взаимодействии ядер D и T образуются ${}_2\text{He}^4$ и нейтрон, при этом за один акт выделяется энергия свыше 17 мэв^1). Тритий является бета-излучателем (время жизни — 12 лет), благодаря чему он широко используется также в качестве радиоактивного индикатора при некоторых химических и биологических исследованиях.

Спектральные линии атома трития несколько сдвинуты как относительно водородных, так и дейтериевых линий (см. фиг. 13.5)



Фиг. 13.5. Схема относительного расположения спектральных линий атома водорода и его изотопов.

¹) Так же как и в ядерной реакции деления U^{235} или Pu^{239} под действием нейтронов, реакция синтеза гелия из дейтерия и трития идет с выделением энергии. Однако в реакции синтеза необходимо преодолеть потенциальный барьер кулоновских сил отталкивания, действующих между ядрами D и T. Поэтому эта реакция достаточно эффективно может протекать лишь при высоких температурах ($\sim 10^8$ град.), в то время как в реакции деления нейтроны любых энергий (даже при низких температурах) могут легко проникнуть внутрь ядра. Для осуществления термоядерного взрыва необходимо предварительно нагреть смесь дейтерия и трития до температуры в несколько десятков миллионов градусов. Это можно сделать, например, в условиях атомного взрыва.

и находятся по формуле:

$$\omega_{\text{Т}}^{\text{Бальм.}} = R_{\infty} \left(1 - \frac{1}{5520} \right) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (13.87)$$

Другим очень важным следствием учета движения ядра было открытие ионизованного атома гелия, обнаруженного впервые спектроскопическим способом на Солнце. При исследовании солнечного спектра была найдена серия линий, располагающихся по закону:

$$\omega_{2n_1} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right), \quad (13.88)$$

где n_1 принимает значения:

$$n_1 = \frac{5}{2}, 3, \frac{7}{2}, 4, \frac{9}{2}, \dots \quad (13.89)$$

Эта серия представляла собой по существу водородную серию Бальмера ($n_1 = 3, 4, 5, \dots$) с рядом промежуточных линий, образующих серию, получившую название серии Пикеринга, характеризующуюся полуцелыми квантовыми числами $n_1 = \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \dots$. Вначале для объяснения серии Пикеринга предполагали, что водород на Солнце находится в особом состоянии, так что квантовое число n может принимать полуцелые значения. Однако в дальнейшем оказалось, что экспериментальные линии располагаются правее, нежели это следует из формулы (13.85). Поэтому выдвинутое предположение пришлось оставить. Затем была предложена другая гипотеза, согласно которой обнаруженный спектр обязан своим происхождением однократно ионизированному атому гелия (${}_2\text{He}^4$)⁺, масса ядра которого $M = 7360m_0$, заряд $Z = 2$, а частоты, согласно (13.83), определяются выражением:

$$\omega_{\text{He}} = 2^2 R_{\text{He}} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (13.90)$$

Полагая здесь $n' = 4$, приводим (13.90) к виду:

$$\omega_{\text{He}} = R_{\text{He}} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{\left(\frac{n}{2}\right)^2} \right), \quad (13.91)$$

где $n = 5, 6, 7, 8, \dots$.

Чтобы решить вопрос о том, обязана ли серия Пикеринга излучению атомов водорода (с предположением, что квантовые числа могут принимать полуцелые значения) или излучению ионизованного атома гелия (с нормальным значением квантовых

чисел), необходимо было найти экспериментальное значение постоянной Ридберга. В случае водорода:

$$R_H = R_\infty \left(1 - \frac{1}{1840}\right). \quad (13.92)$$

Для атома гелия:

$$R_{He} = R_\infty \left(1 - \frac{1}{7360}\right). \quad (13.93)$$

Тщательное изучение этого вопроса спектроскопистами подтвердило для постоянной Ридберга значение (13.93), и тем самым однозначно было доказано, что серия Пикеринга представляет собой спектр ионизованного атома гелия.

Задача 13.1. Исходя из соотношений (13.26) и (13.28), показать, что радиальные волновые функции R_{nl} при значении главного квантового числа $n = 1, 2, 3$ имеют вид:

$$\begin{aligned} R_{10} &= 2Ne^{-\rho/2}, \\ R_{20} &= \frac{1}{2\sqrt{2}} Ne^{-\rho/2} (2 - \rho), \\ R_{21} &= \frac{1}{2\sqrt{6}} Ne^{-\rho/2} \rho, \\ R_{30} &= \frac{1}{9\sqrt{3}} Ne^{-\rho/2} (6 - 6\rho + \rho^2), \\ R_{31} &= \frac{1}{9\sqrt{6}} Ne^{-\rho/2} \rho (4 - \rho), \\ R_{32} &= \frac{1}{9\sqrt{30}} Ne^{-\rho/2} \rho^2, \end{aligned}$$

где

$$N = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \quad \text{и} \quad \rho = \frac{2Zr}{na_0}.$$

На этих конкретных примерах убедиться, что функции R_{nl} являются ортонормированными, т. е.

$$\int_0^\infty r^2 R_{nl} R_{n'l} dr = \delta_{nn'}.$$

Указание. При доказательстве ортонормированности учесть, что при различных n и n' соответствующие значения для ρ будут также отличаться друг от друга.

Задача 13.2. Показать, что средний электростатический потенциал в пространстве, создаваемый водородоподобным атомом, находящимся в основном, т. е. в наинищем, состоянии, равен:

$$\Phi = \frac{e_0(Z-1)}{r} + e_0 \left(\frac{Z}{a_0} + \frac{1}{r}\right) e^{-\frac{2Zr}{a_0}}.$$

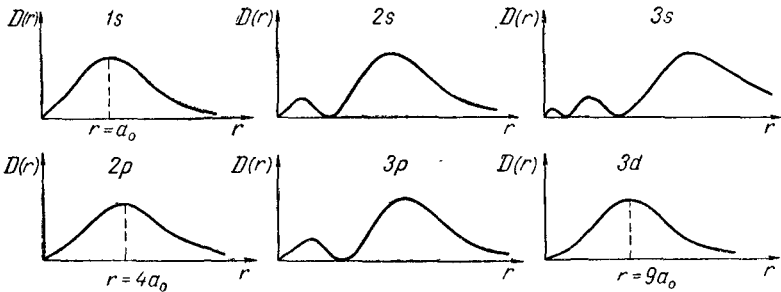
Указание. Найти среднее значение электростатического потенциала, создаваемого электроном:

$$\Phi_{\text{эл.}}(r) = -e_0 \int \psi^*(r') \frac{1}{|r-r'|} \psi(r') d^3x',$$

и сложить его с потенциалом ядра. При интегрировании по телесному углу Ω' учесть следующее равенство:

$$\oint \frac{d\Omega'}{|r-r'|} = 4\pi \begin{cases} \frac{1}{r}, & r' < r, \\ \frac{1}{r'}, & r' > r. \end{cases}$$

Задача 13.3. Показать, что максимумы плотности вероятности $D = r^2 A^2$ в состояниях $1s$, $2p$ и $3d$ при $Z=1$ находятся на расстояниях от ядра, соотв.



Фиг. 13.6. График радиального распределения плотности вероятности $D = r^2 A^2$ для различных состояний.

ветственно равных a_0 , $4a_0$ и $9a_0$ (круговые орбиты). Почему в состояниях $2s$, $3s$ и $3p$ имеется несколько максимумов (см. фиг. 13.6)?

Задача 13.4. Пользуясь конкретными функциями, приведенными в задаче 13.1, проверить при $n=1, 2, 3$ равенства:

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{n^2 a_0}{Z} \right)^2 \left[1 + \frac{1}{2n^2} + \frac{3}{2} \left(1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right) \right],$$

$$\langle r \rangle = \frac{n^2 a_0}{Z} \left[1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right) \right].$$

Найти средний разброс $\langle (\Delta r)^2 \rangle = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2$ радиальных отклонений для этих состояний.

Исходя из фиг. 13.6, а также из соотношения неопределенности, объяснить, почему в квантовой теории для круговых орбит $\langle (\Delta r)^2 \rangle$ не обращается в нуль.

Задача 13.5. С помощью квазиклассического метода ВКБ найти дискретный спектр энергий водородоподобного атома.

Решение. Собственные значения дискретного спектра ($E < 0$), согласно (5.75) и (13.62), могут быть найдены по формуле:

$$I = \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{-A + \frac{2B}{r} - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{r^2}} dr = \pi \left(k + \frac{1}{2}\right),$$

где r_1 и r_2 являются корнями подынтегрального выражения, а

$$A = -\frac{2m_0 E}{\hbar^2}, \quad B = \frac{m_0 Z e_0^2}{\hbar^2}.$$

Принимая во внимание, что последний интеграл равен ¹⁾:

$$I = \pi \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - \frac{1}{2} \right),$$

для энергии водородоподобного атома получаем формулу, точно совпадающую с соответствующей формулой, найденной по теории Шредингера.

Задача 13.6. Определить напряженность магнитного поля в центре атома водорода, создаваемого орбитальным движением электрона. Найти его численное значение для состояния $2p$.

О т в е т. $\langle H_x \rangle = \langle H_y \rangle = 0$,

$$\langle H_z \rangle = -m \frac{e_0 \hbar}{m_0 c} \left(\frac{m_0 e_0^2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{1}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2} \right) (l + 1)}.$$

Для состояния $2p$ ($m = 1$)

$$\langle H_z \rangle \sim 10^4 \text{ гаусс.}$$

Указание. Пользуясь классическим выражением для напряженности магнитного поля, создаваемого движущимся зарядом: $\mathbf{H} = -\frac{e_0}{m_0 c} \frac{1}{r^3} [\mathbf{r}\mathbf{p}]$, перейти к квантовому рассмотрению, заменив $[\mathbf{r}\mathbf{p}]$ оператором момента количества движения \mathbf{L} , а затем, используя формулу (13.29а), вычислить среднее значение $\langle \mathbf{H} \rangle$.

¹⁾ Этот интеграл может быть легко вычислен с помощью равенства (13.64), если в нем положить $a = -A$, $b = 2B$, $c = -\left(l + \frac{1}{2}\right)^2$ и учесть, что поскольку r_1 и $r_2 > r_1$ являются корнями уравнения $f(r) = 0$, то значения логарифмов, входящих в (13.64), будут определяться формулой [см. (13.73б)]:

$$\operatorname{ли} \frac{\beta + i\alpha}{\beta - i\alpha} = \begin{cases} -2\pi i, & \text{при } \beta > 0, \alpha \rightarrow +0, \\ 0, & \text{при } \beta < 0, \alpha \rightarrow +0. \end{cases}$$

Знак величины β при $r = r_{1,2}$ легко может быть найден, если принять во внимание равенства:

$$\begin{aligned} 2ar + b &= f'(r), \\ br + 2c &= 2f(r) - rf'(r), \\ f'(r_1) &> 0, \quad f'(r_2) < 0. \end{aligned}$$

§ 14. СТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

а. Основные идеи решения задач по теории возмущений

Далеко не все задачи квантовой механики могут быть решены современными математическими методами точно. Более того, в подавляющем большинстве случаев как для энергии, так и для волновых функций удастся найти лишь приближенные решения. При этом приходится прибегать к различного рода приближенным методам вычислений. Одним из таких методов является получивший наиболее широкое распространение метод теории возмущений, пришедший в квантовую механику из небесной механики, где он был впервые развит.

Как известно, в классической механике Ньютона точно решается лишь задача двух тел: например задача движения системы Земля — Солнце или системы Луна — Земля и т. д. Однако если при изучении движения планет принимать во внимание только притяжение Солнцем и не учитывать их взаимодействия между собой, то результаты теории в ряде случаев не смогут описать более тонких явлений, возникающих вследствие дополнительных взаимодействий (в связи с этим следует напомнить, что по отклонениям движения от эллиптической орбиты Юпитера на основе теоретических расчетов Леверье предсказал существование планеты Нептун, которая затем была открыта астрономами). Поэтому необходимо было включить в рассмотрение и взаимодействие планет друг с другом, которое может привести к важным результатам. Таким образом, возникла задача многих тел, которая в классической механике не имеет точного решения. В небесной механике для исследования такой задачи был разработан приближенный метод, основанный на том, что взаимодействия планет между собой по своей величине значительно меньше основного взаимодействия планеты с Солнцем.

Согласно этому методу прежде всего решается задача двух тел (нулевое приближение). Затем принимаются во внимание «возмущения» и находятся поправки к решению (первое приближение). Иначе говоря, следуя «методу возмущений», в первую очередь следует выделить из всей совокупности действующих на некоторое материальное тело сил основные силы, для которых можно получить точное решение. После этого необходимо учесть «возмущающие» силы.

Аналогично в квантовой механике при изучении движения электронов в атоме в качестве основных сил следует выбрать, например, силы, действующие между ядром и электроном. Возмущениями же при этом могут быть кулоновские силы взаимного отталкивания, действующие между электронами. Если атом поме-

щен во внешнее электрическое или магнитное поле, то в том случае, когда оно по своей величине будет в рассматриваемой области малым по сравнению с электрическим полем ядра, за возмущение может быть взята энергия электрона в этом электрическом или магнитном поле.

б. Основные уравнения теории возмущений

Изложим метод теории возмущений, применяющийся в случаях стационарных задач, когда гамильтониан системы не зависит от времени. Пусть гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид:

$$H = T + V = T + V^0 + V', \quad (14.1)$$

причем здесь энергия возмущения $V' \ll V^0$, а основная часть потенциальной энергии V^0 выбрана таким образом, чтобы описывающее систему уравнение Шредингера:

$$(E - H)\psi = 0 \quad (14.2)$$

при отбрасывании возмущения V' ($V' = 0$) имело точное решение, характеризуемое величинами E^0 и ψ^0 . Тогда, обозначая $T + V^0 = H^0$ (нулевое приближение) и принимая во внимание (14.1), приводим (14.2) к виду:

$$(E - H^0 - V')\psi = 0. \quad (14.2a)$$

Задача заключается в том, чтобы из этого уравнения найти (хотя бы приближенно) как значения энергии E_n , так и соответствующие им волновые функции ψ_n с учетом энергии возмущения V' . Согласно теории возмущений, решения для E и ψ ищутся в виде рядов:

$$\psi = \psi^0 + \psi' + \psi'' + \dots, \quad (14.3)$$

$$E = E^0 + E' + E'' + \dots, \quad (14.4)$$

где ψ' и E' — величины первого порядка малости по отношению к ψ^0 и E^0 , ψ'' и E'' — величины второго порядка малости и т. д.

Как правило, энергию возмущения V' можно представить как произведение потенциальной энергии, имеющей порядок V^0 , на некоторый малый параметр λ ($\lambda \ll 1$).

Тогда решения (14.3) и (14.4) должны представлять собой разложения по этому малому параметру λ , т. е. E^0 и ψ^0 не будут зависеть от этого параметра, E' и ψ' пропорциональны λ , E'' и ψ'' пропорциональны λ^2 и т. д.

Ограничиваясь в выражениях для ψ и E только членами первого порядка малости (т. е. оставляя члены, не зависящие от λ и пропорциональные λ), после подстановки (14.3) и (14.4) в (14.2a) для определения ψ' и E' получаем уравнение:

$$(E^0 + E' - H^0 - V')(\psi^0 + \psi') = 0. \quad (14.26)$$

Группируя члены одного порядка малости, находим:

$$(E^0 - H^0)\psi^0 + [(E' - V')\psi^0 + (E^0 - H^0)\psi'] + (E' - V')\psi' = 0. \quad (14.2в)$$

Поскольку мы здесь еще не отбрасывали никаких членов, а под ψ' и E' можно понимать сумму величин всех порядков малости (т. е. $\psi' \rightarrow \psi' + \psi'' + \dots$, $E' \rightarrow E' + E'' + \dots$), то уравнение (14.2в) можно считать точным.

Чтобы получить первое приближение теории возмущений, следует отбросить в (14.2в) члены второго порядка малости $(E' - V')\psi'$ и учесть, что для нулевого приближения имеет место уравнение:

$$(E^0 - H^0)\psi^0 = 0. \quad (14.5)$$

Из последнего уравнения могут быть найдены в нулевом приближении все собственные значения:

$$E_1^0, E_2^0, E_3^0, \dots, E_n^0, \dots,$$

и собственные функции:

$$\psi_1^0, \psi_2^0, \psi_3^0, \dots, \psi_n^0, \dots,$$

связанные между собой соотношением:

$$(E_n^0 - H^0)\psi_n^0 = 0. \quad (14.6)$$

Принимая во внимание эти соотношения, переходим к исследованию уравнения первого приближения теории возмущений:

$$(E^0 - H^0)\psi' = -(E' - V')\psi^0. \quad (14.7)$$

Предположим для дальнейшего, что в начальный момент времени система находилась в некотором квантовом состоянии $n' = n$. Тогда, в связи с тем что в нулевом приближении $E^0 = E_n^0$ и $\psi_0 = \psi_n^0$, при нахождении первого приближения: $E' = E_n'$, $\psi' = \psi_n'$ из (14.7) получаем:

$$(E_n^0 - H^0)\psi_n' = -(E_n' - V')\psi_n^0. \quad (14.7а)$$

Замечая, что любую функцию всегда можно представить в виде разложения по полной системе ортонормированных функций с теми же граничными условиями (в данном случае этой системой являются функции $\psi_1^0, \psi_2^0, \dots, \psi_n^0$), решение для ψ_n' будем искать в форме:

$$\psi_n' = \sum_n C_n \psi_n^0. \quad (14.8)$$

Таким образом, наша задача будет сводиться к тому, чтобы определить неизвестные коэффициенты C_n обобщенного ряда Фурье. Подставляя (14.8) в (14.7а), имеем:

$$\sum_n C_n (E_n^0 - H^0)\psi_n^0 = -(E_n' - V')\psi_n^0, \quad (14.9)$$

или, принимая во внимание (14.6), находим:

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \psi_{n'}^0 = - (E_n' - V') \psi_n^0. \quad (14.9a)$$

в. Невырожденный случай

Если рассматриваемая нами система является невырожденной, т. е. если каждому собственному значению энергии E_n^0 соответствует одна и только одна собственная функция ψ_n^0 , то, умножая уравнение (14.9a) слева на ψ_n^{0*} и интегрируя затем по всему пространству, можно привести его к виду:

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \delta_{nn'} = - E_n' + \int \psi_n^{0*} V' \psi_n^0 d^3x. \quad (14.10)$$

Здесь мы учли ортонормированность собственных функций ψ_n^0 :

$$\int \psi_n^{0*} \psi_{n'}^0 d^3x = \delta_{nn'}.$$

Поскольку величина, стоящая в левой части (14.10), равна нулю (при $n' = n$, $E_n^0 - E_{n'}^0 = 0$, а при $n' \neq n$, $\delta_{nn'} = 0$), для искомой дополнительной энергии E_n' находим выражение:

$$E_n' = V'_{nn}, \quad (14.11)$$

где

$$V'_{nn} = \int \psi_n^{0*} V' \psi_n^0 d^3x. \quad (14.11a)$$

Таким образом, дополнительная энергия E_n' системы естественно оказывается равной среднему значению энергии возмущения V' .

Следует заметить, что выражение (14.11) для дополнительной энергии E_n' было получено в результате приравнивания нулю левой части уравнения (14.7a), после того, как оно было умножено на ψ_n^{0*} , являющееся решением однородного уравнения, т. е. уравнения (14.7a) без правой части, и проинтегрировано по всему пространству. Отсюда следует, что правая часть неоднородного уравнения:

$$M\psi = f \quad (14.12)$$

должна быть ортогональной к решению соответствующего однородного уравнения $M\psi^0 = 0$, т. е.

$$\int \psi^{0*} f d^3x = 0. \quad (14.13)$$

Возвращаясь к определению волновых функций (т. е. коэффициентов $C_{n'}$) уравнения Шредингера (14.7a), записанного в пер-

вом приближении теории возмущений, преобразуем уравнение (14.9а) к виду:

$$\sum_{n''} C_{n''} (E_n^0 - E_{n''}^0) \psi_{n''}^0 = - (E_n^0 - V') \psi_n^0.$$

Тогда, умножая его слева на $\psi_{n'}^{0*}$ ($n' \neq n$) и принимая во внимание правило ортонормированности, после интегрирования по всему пространству находим:

$$C_{n'} = \frac{V'_{n'n}}{E_n^0 - E_{n'}^0}, \quad (14.14)$$

где

$$V'_{n'n} = \int \psi_{n'}^{0*} V' \psi_n^0 d^3x. \quad (14.15)$$

Таким образом, для ψ'_n имеем:

$$\psi'_n = C_n \psi_n^0 + \sum'_{n'} C_{n'} \psi_{n'}^0, \quad (14.16)$$

причем здесь штрих у символа суммы означает, что суммирование ведется по всем n' , кроме $n' = n$. Наконец, неизвестный пока что коэффициент C_n при волновой функции в нулевом приближении может быть найден из условия нормировки:

$$\int \psi_n^{0*} \psi_n d^3x = 1 \quad (14.17)$$

для полной волновой функции:

$$\psi_n = \psi_n^0 + \psi'_n = C_n^0 \psi_n^0 + \sum'_{n'} C_{n'} \psi_{n'}^0, \quad (14.18)$$

где

$$C_n^0 = 1 + C_n. \quad (14.19)$$

Подставляя (14.18) в (14.17) и оставляя члены не выше первого порядка малости, имеем:

$$\begin{aligned} & |C_n^0|^2 \int \psi_n^{0*} \psi_n^0 d^3x + \\ & + \sum'_{n'} \{ C_n^0 C_{n'} \int \psi_n^{0*} \psi_{n'}^0 d^3x + C_{n'}^* C_n^0 \int \psi_{n'}^{0*} \psi_n^0 d^3x \} = 1. \end{aligned} \quad (14.20)$$

Отсюда, учитывая условие ортонормированности, с точностью до фазового множителя, который нас не интересует, находим:

$$C_n^0 = 1, \quad (14.21)$$

т. е. $C_n = 0$.

В результате для волновой функции ψ_n в первом приближении теории возмущений окончательно получаем выражение:

$$\psi_n = \psi_n^0 + \sum'_{n'} \frac{V'_{n'n}}{E_n^0 - E_{n'}^0} \psi_{n'}^0. \quad (14.22)$$

Отсюда, а также из (14.11), видно, что как ψ'_n , так и E'_n пропорциональны энергии возмущения в первой степени (т. е. пропорциональны параметру λ). Заметим, что если бы мы вычисляли поправки к энергии и волновой функции во втором приближении теории возмущений, то как E''_n , так и ψ''_n оказались бы уже пропорциональными второй степени V' , т. е. пропорциональными λ^2 .

г. Вырожденный случай

Построим теперь теорию возмущений применительно к вырожденному случаю, когда одному и тому же собственному значению энергии E_n^0 при отсутствии возмущения соответствует j собственных функций:

$$\psi_{n_1}^0, \psi_{n_2}^0, \dots, \psi_n^0.$$

Тогда, очевидно, любая линейная комбинация этих функций:

$$\psi_n^0 = \sum_{i=1}^j C_i^0 \psi_{n_i}^0 \quad (14.23)$$

будет также являться решением волнового уравнения в нулевом приближении:

$$(E_n^0 - H^0) \psi_n^0 = 0,$$

имеющего собственное значение энергии, равное E_n^0 .

В случае же, когда появляется возмущение V' , такой произвол исчезает и коэффициенты C_i^0 могут стать связанными друг с другом. Покажем это, предварительно доказав, что, как и в случае невырожденных состояний, любое частное решение однородного уравнения (14.6) должно быть ортогональным правой части неоднородного уравнения (14.7а) первого приближения теории возмущений. Умножим для этого (14.7а) слева на $\psi_{n_i}^{0*}$ и проинтегрируем по всему пространству. Тогда получаем:

$$\int \psi_{n_i}^{0*} (E_n^0 - H^0) \psi' d^3x = - \int \psi_{n_i}^{0*} (E'_n - V') \psi_n^0 d^3x. \quad (14.24)$$

Применяя теорему о перебросе производной [см. (7.17)], имеем:

$$\int \psi' (E_n^0 - H^0) \psi_{n_i}^{0*} d^3x = - \int \psi_{n_i}^{0*} (E'_n - V') \psi_n^0 d^3x. \quad (14.25)$$

Отсюда, замечая, что $\psi_{n_i}^{0*}$ является решением уравнения Шредингера $(E_n^0 - H^0) \psi_{n_i}^{0*} = 0$, приходим к равенству:

$$\int \psi_{n_i}^{0*} (E'_n - V') \sum_{i'=1}^j C_{i'}^0 \psi_{n_{i'}}^0 d^3x = 0. \quad (14.26)$$

получившее название *векового*, унаследовав этот термин из небесной механики.

Если это вековое уравнение имеет несколько корней (не обязательно j), то каждому из них будут соответствовать совершенно определенные коэффициенты C'_l , найденные с помощью (14.17а) и (14.30) при $E'_n = E'_{n_k}$, где E'_{n_k} - какой-либо из корней уравнения (14.31). Следовательно, и волновые функции для различных дополнительных значений E'_n (даже в нулевом приближении) могут стать различными. Таким образом, если при отсутствии возмущения V' состояние системы было j -кратно вырожденным, то при его наличии кратность вырождения может понизиться или даже вообще исчезнуть [если уравнение (14.31) имеет j различных корней].

д. Эффект Штарка

Если атом поместить в электрическое поле, то его спектральные линии, вообще говоря, могут расщепляться. Такое явление было обнаружено в 1913 г. в опытах Штарка.

Как показал эксперимент, действие электрического поля на атом водорода и другие атомы проявляется по-разному. А именно, при небольших напряженностях поля энергетические уровни атома водорода (например, серия Бальмера) испытывают расщепление, пропорциональное первой степени поля (так называемый *линейный эффект Штарка*); для всех же остальных атомов вызываемое расщепление пропорционально второй степени поля (*квадратичный эффект Штарка*). При более сильных полях (порядка 10^8 в/см) появляется дополнительное расщепление, пропорциональное высшим степеням поля (для атома водорода — квадрату поля, и т. д.). Наконец, при очень больших электрических полях спектральные линии вовсе исчезают.

Эффект Штарка не нашел своего объяснения в классической теории, и только квантовая механика позволила построить теорию этого эффекта.

В самом деле, согласно классическим представлениям движение электрона в атоме всегда можно разложить на три взаимно ортогональных колебания. Возьмем одно из колебаний, которое происходит вдоль оси z , совпадающей по направлению с вектором постоянного электрического поля E ($E_x = E_y = 0$, $E_z = \mathfrak{E}$). Тогда для определения движения электрона по оси z ¹⁾ получаем уравнение ($e = -e_0$):

$$m_0 \ddot{z} + m_0 \omega_0^2 z = -e_0 \mathfrak{E}, \quad (14.32)$$

где m_0 — масса электрона, а ω_0 — круговая частота его колебаний.

¹⁾ На остальные два колебания по направлениям x и y , перпендикулярным к E , вектор электрического поля действовать не будет.

Нетрудно видеть, что решением уравнения (14.32) будет:

$$z = -\frac{e_0 \mathcal{E}}{m_0 \omega_0^2} + A \cos(\omega_0 t + \varphi). \quad (14.33)$$

Таким образом, действие постоянной силы ($-e_0 \mathcal{E}$) по классической теории приводит лишь к изменению положения точки равновесия системы, но никоим образом не сказывается на частоте колебаний. Следовательно, в соответствии с классическими представлениями частота излучения атомов, определяемая частотой механических колебаний атомных электронов, также не должна зависеть от того, помещен ли атом в электрическое поле или нет. Таким образом, никакой сдвиг спектральных линий в этом случае не должен возникать.

Рассмотрим теперь эффект Штарка, основываясь на квантовых представлениях.

Как мы только что указали, существуют два основных вида штарк-эффекта: линейный и нелинейный. Первый из них характерен лишь для водородоподобных атомов. Это связано с тем обстоятельством, что для водородоподобных атомов имеет место вырождение не только по магнитному квантовому числу m , но и по орбитальному квантовому числу l (см. § 13), что и обуславливает линейный штарк-эффект. Для всех же других атомов вырождение по l , вообще говоря, уже отсутствует, и поэтому для них линейный эффект Штарка не наблюдается.

Исследуем более подробно теорию линейного штарк-эффекта для атома водорода. Для примера ограничимся рассмотрением второго квантового уровня ($n=2$)¹⁾.

Поскольку внешнее электрическое поле (\mathcal{E}) (в опытах оно имело порядок $10^4 - 10^5$ в/см) много меньше внутриатомного, создаваемого ядром и равного:

$$\mathcal{E}_{\text{яд.}} = \frac{e_0}{a_0^2} \approx 5 \cdot 10^9 \text{ в/см}$$

(здесь a_0 — радиус первой боровской орбиты), для решения поставленной задачи с успехом можно использовать теорию возмущений, относящуюся к вырожденному случаю, причем в качестве возмущения V' мы должны взять потенциальную энергию электрона во внешнем электрическом поле:

$$V' = e_0 \mathcal{E} z. \quad (14.34)$$

В невозмущенном состоянии электрон имеет энергию [см. (13.33)]:

$$E_2^0 = -\frac{R\hbar}{4},$$

¹⁾ Первый квантовый уровень ($n=1$) является невырожденным и поэтому не будет расщепляться.

которой соответствуют четыре волновые функции:

$$\psi_1^0 = \psi_{2,0,0} = R_{20}(r) Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20}(r), \quad (14.35)$$

$$\psi_2^0 = \psi_{2,1,0} = R_{21}(r) Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \cos \vartheta, \quad (14.36)$$

$$\psi_3^0 = \psi_{2,1,1} = R_{21}(r) Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \frac{\sin \vartheta}{\sqrt{2}} e^{i\varphi}, \quad (14.37)$$

$$\psi_4^0 = \psi_{2,1,-1} = R_{21}(r) Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \frac{\sin \vartheta}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi}, \quad (14.38)$$

принимающие при замене ϑ и φ декартовыми координатами вид:

$$\psi_1^0 = f_1(r), \quad (14.35a)$$

$$\psi_2^0 = f_2(r) z, \quad (14.36a)$$

$$\psi_3^0 = f_2(r) \frac{x + iy}{\sqrt{2}}, \quad (14.37a)$$

$$\psi_4^0 = -f_2(r) \frac{x - iy}{\sqrt{2}}, \quad (14.38a)$$

где

$$f_1(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20}(r), \quad (14.39)$$

$$f_2(r) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{R_{21}(r)}{r}.$$

Общая же волновая функция электрона при этом равна:

$$\psi^0 = \sum_{i=1}^4 C_i^0 \psi_i^0. \quad (14.40)$$

Очевидно, поскольку в рассматриваемом случае кратность вырождения равна четырем ($j=4$), для определения неизвестных коэффициентов C_i^0 и поправки E_2' к энергии E_2^0 невозмущенного состояния, согласно (14.30), имеем следующую систему четырех уравнений:

$$\begin{aligned} C_1^0 (E_2' - V_{11}') - C_2^0 V_{12}' - C_3^0 V_{13}' - C_4^0 V_{14}' &= 0, \\ -C_1^0 V_{21}' + C_2^0 (E_2' - V_{22}') - C_3^0 V_{23}' - C_4^0 V_{24}' &= 0, \\ -C_1^0 V_{31}' - C_2^0 V_{32}' + C_3^0 (E_2' - V_{33}') - C_4^0 V_{34}' &= 0, \\ -C_1^0 V_{41}' - C_2^0 V_{42}' - C_3^0 V_{43}' + C_4^0 (E_2' - V_{44}') &= 0, \end{aligned} \quad (14.41)$$

где

$$V_{i'i} = \int \psi_i^{0*} V' \psi_i^0 d^3x = e_0 \int \psi_i^{0*} z \psi_i^0 d^3x. \quad (14.42)$$

При интегрировании по объему матричные элементы:

$$V'_{11}, V'_{22}, V'_{33}, V'_{13}, V'_{23}, V'_{14}, V'_{24} \text{ и } V'_{34}$$

обратятся в нуль, так как подынтегральное выражение каждого из них будет обязательно нечетной функцией относительно хотя бы одной из координат: z , x или y . Только матричные элементы:

$$V'_{12} \text{ и } V'_{21} = V'_{12},$$

являющиеся четными функциями трех координат, будут отличны от нуля:

$$V'_{12} = V'_{21} = e_0 \mathcal{E} \int f_1(r) f_2(r) z^2 d^3x. \quad (14.43)$$

Подставляя сюда вместо $f_1(r)$ и $f_2(r)$ их значения (14.39) и замечая, что в соответствии с (13.28a):

$$R_{20} = \frac{1}{2\sqrt{2}a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}},$$

а

$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{5/2}} r e^{-\frac{r}{2a_0}},$$

после интегрирования (14.43) по углам ϑ и φ (при этом необходимо учесть, что $z = r \cos \vartheta$) находим:

$$V'_{12} = V'_{21} = \frac{e_0 \mathcal{E}}{24a_0^3} \int_0^\infty r^4 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{a_0}} dr. \quad (14.43a)$$

Далее, принимая во внимание равенство:

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^s d\rho = \Gamma(s+1),$$

получаем:

$$V'_{12} = V'_{21} = -3e_0 \mathcal{E} a_0. \quad (14.44)$$

Пользуясь найденными значениями матричных элементов V'_{ii} , для определения поправки E'_2 , согласно (14.31), будем иметь вековое уравнение:

$$\begin{vmatrix} E'_2 & 3a_0 e_0 \mathcal{E} & 0 & 0 \\ 3a_0 e_0 \mathcal{E} & E'_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E'_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E'_2 \end{vmatrix} = 0, \quad (14.45)$$

которое можно также представить в виде:

$$E_2'^2 (E_2' - 9a_0^2 e_0^2 \mathcal{E}^2) = 0. \quad (14.45a)$$

Это уравнение имеет четыре корня:

$$\begin{aligned} E_2'^{(1)} &= -3a_0 e_0 \mathcal{E}, \\ E_2'^{(2)} &= 3a_0 e_0 \mathcal{E}, \\ E_2'^{(3)} &= E_2'^{(4)} = 0, \end{aligned} \quad (14.46)$$

причем каждому из них, согласно (14.41), должно соответствовать вполне определенное значение коэффициентов:

$$\left. \begin{aligned} C_1^{(1)} &= C_2^{(1)}; & C_3^{(1)} &= C_4^{(1)} = 0, \\ C_1^{(2)} &= -C_2^{(2)}; & C_3^{(2)} &= C_4^{(2)} = 0, \\ C_1^{(3)} &= C_2^{(3)} = 0; & C_3^{(3)}, C_4^{(3)} &\neq 0, \\ C_1^{(4)} &= C_2^{(4)} = 0; & C_3^{(4)}, C_4^{(4)} &\neq 0. \end{aligned} \right\} \quad (14.47)$$

Здесь верхний индекс j коэффициентов $C_i^{(j)} = C_i^0$ указывает, какому решению (корню) уравнения (14.45а) они принадлежат.

Таким образом, уровню с энергией:

$$E_2^{(1)} = E_2^0 + E_2'^{(1)} = -\frac{R\hbar}{4} - 3e_0 a_0 \mathcal{E} \quad (14.48)$$

в нулевом приближении, согласно (14.40) и (14.47), соответствует волновая функция:

$$\psi^{0(1)} = C_1^{(1)} (\psi_{2,0,0} + \psi_{2,1,0}),$$

которая, если учесть еще условие нормировки:

$$\int \psi^{0(1)*} \psi^{0(1)} d^3x = 1,$$

принимает вид:

$$\psi^{0(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,0,0} + \psi_{2,1,0}). \quad (14.49)$$

Аналогично нетрудно показать, что состояние с энергией:

$$E_2^{(2)} = E_2^0 + E_2'^{(2)} = -\frac{R\hbar}{4} + 3a_0 e_0 \mathcal{E} \quad (14.50)$$

будет описываться в нулевом приближении функцией:

$$\psi^{0(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,0,0} - \psi_{2,1,0}). \quad (14.51)$$

Для описания состояний с энергией:

$$E_2^{(3)} = E_2^{(4)} = E_2^0,$$

которые электрическое поле в первом приближении не возмущает, с одинаковым успехом можно пользоваться как функцией:

$$\psi^{0(3)} = \psi_{2,1,1} \quad (m = 1),$$

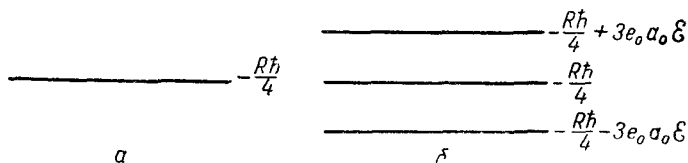
так и функцией:

$$\psi^{0(4)} = \psi_{2,1,-1} \quad (m = -1)$$

или же их линейной комбинацией, так как система при $m = \pm 1$ остается вырожденной даже при наличии электрического поля.

Таким образом, в том случае, когда проекция момента количества движения на ось z отлична от нуля ($m = \pm 1$ в единицах \hbar), т. е. когда движение электрона происходит преимущественно в плоскости (xy) (см. § 12, п. «а»), расщепление энергетических уровней (а значит, и спектральных линий) в электрическом поле будет отсутствовать. Если же ориентация момента такова, что его проекция на ось z равна нулю ($m = 0$), т. е. когда электрон движется в плоскости, содержащей ось z (см. § 12, п. «а»), то электрическое поле приводит к расщеплению (см. фиг. 14.1).

Качественно эффект Штарка для $n = 2$ можно интерпретировать следующим образом. В силу того, что при $n = 2$ характери-



Фиг. 14.1. Расщепление второго спектрального термина атома водорода в электрическом поле (линейный эффект Штарка):

α — энергетический уровень без поля ($\mathcal{E} = 0$); β — энергетические уровни в поле ($\mathcal{E} \neq 0$).

зующая движение атомного электрона волновая функция (см. фиг. 12.1) не будет обладать центральной симметрией, у атома появляется электрический момент \mathbf{p} , благодаря чему атом, будучи помещенным в электрическое поле:

$$(E_x = E_y = 0, \quad E_z = \mathcal{E}),$$

приобретает дополнительную энергию:

$$V' = -(\mathbf{p}\mathbf{E}) = -p\mathcal{E} \cos \gamma, \quad (14.52)$$

где γ — угол между направлением электрического дипольного момента атома и осью z .

Сравнивая это выражение с (14.46), мы видим, что электрический момент атома равен $p = 3a_0 e_0$, причем решение $\psi^{(1)}$ соответствует случаю $\gamma = 0$, а решение $\psi^{(2)}$ — случаю $\gamma = \pi$. Для третьего и четвертого решений следует положить $\gamma = \pm \frac{\pi}{2}$. Таким образом, в последнем случае электрический момент будет направлен перпендикулярно электрическому полю, благодаря чему никакой дополнительной энергии не возникает.

Иными словами, причиной, обуславливающей линейный эффект Штарка, является присущий атому водорода при $n = 2$ электрический момент \mathbf{p} .

Результаты, полученные на основе квантовой механики, находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными только в случае слабых полей ($\mathcal{E} \sim 10^4$ в/см). В более сильных полях ($\mathcal{E} \sim 10^8$ в/см) появляется дополнительное расщепление (квадратичный эффект Штарка), вызванное снятием вырождения по магнитному квантовому числу m . Наконец, в полях, напряженность которых превышает величину 10^8 в/см, эффект Штарка вообще исчезает. Это связано с так называемой автоионизацией атомов, т. е. с вырыванием электронов, находящихся на возбужденных уровнях.

е. Основы классической теории дисперсии

Теория возмущений нашла применение при изучении взаимодействия света с веществом. Дело в том, что результаты, полученные из квантовой теории, отличаются от тех результатов, которые следуют по классической теории, а экспериментальная проверка дает блестящее подтверждение выводов квантовой теории.

Рассмотрим теорию дисперсии (т. е. теорию рассеяния света в среде) для диэлектрических сред, характеризующихся согласно классическим представлениям показателем преломления:

$$n = \sqrt{\epsilon},$$

где ϵ — диэлектрическая проницаемость (магнитная проницаемость μ при этом положена равной единице: $\mu = 1$). Как известно, если с увеличением частоты света, проходящего через вещество, показатель преломления n увеличивается, т. е. если $\frac{dn}{d\omega} > 0$, то такая дисперсия называется нормальной. Типичным примером нормальной дисперсии является спектральное разложение видимого света стеклянными или кварцевыми призмами, когда фиолетовые лучи отклоняются от первоначального направления сильнее, чем красные.

Если же в некоторой области $\frac{dn}{d\omega} < 0$, то эта область называется областью аномальной дисперсии. Как правило, аномальная дисперсия наблюдается в области, связанной с поглощением света соответствующей частоты средой.

Для определения показателя преломления n (это является одним из важнейших моментов теории дисперсии) воспользуемся связью между напряженностью E электромагнитного поля, вектором индукции D и вектором поляризации P^1):

$$D = \epsilon E = E + 4\pi P. \quad (14.53)$$

¹⁾ Согласно определению, поляризация P среды складывается из электрических моментов атомов в единице объема.

Отсюда, учитывая, что $\varepsilon = n^2$, находим:

$$P = \frac{n^2 - 1}{4\pi} E. \quad (14.53a)$$

Таким образом, для определения n нам необходимо, исходя из микроскопических представлений о строении вещества, установить связь между P и E .

Чтобы яснее понять, что нового в теорию дисперсии вносит квантовая теория, вспомним основы классической теории дисперсии.

Согласно классической теории Лоренца, атомы можно рассматривать как гармонические осцилляторы, в которых электроны колеблются в простейшем случае с одной и той же круговой частотой ω . Тогда, направляя ось z по движению световой, т. е. электромагнитной волны, в силу ее поперечности можем вектор E направить по оси x ($E_x = \mathcal{E}$, $E_y = E_z = 0$), а вектор H по оси y . Пренебрегая силой, действующей на атомные электроны со стороны магнитного поля (так как она в $\frac{v}{c}$ раз меньше силы, действующей со стороны электрического поля E), колебание электронов в атоме можно описывать уравнением ($e = -e_0$):

$$m_0 \ddot{x} + m_0 \omega_0^2 x = -e_0 \mathcal{E}. \quad (14.54)$$

Предположим, далее, что частота падающей световой волны равна ω . Тогда

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos\left(\omega t - \frac{2\pi x}{\lambda}\right). \quad (14.55)$$

Если в рассматриваемом нами случае энергия, которую несет волна, значительно меньше энергии связи электронов в атоме, то в силу того, что длина волны λ будет порядка 10^{-8} см, отношением $\frac{\lambda}{x}$ в пределах атома ($x \sim a \sim 10^{-8}$ см) можно пренебречь. Таким образом, внутри атома электрическое поле волны при сделанных выше предположениях можно считать квазистационарным. В результате этого упрощения уравнение (14.54) принимает вид:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = -\frac{e_0}{m_0} \mathcal{E} = -\frac{e_0}{m_0} \mathcal{E}_0 \cos \omega t. \quad (14.54a)$$

Умножая (14.54a) на $(-e_0 N)$, где N — число атомов в единице объема, и учитывая, что

$$-e_0 x = p_x, \quad \text{а } P_x = N p_x = \mathcal{P}, \quad P_y = P_z = 0,$$

приводим это уравнение к виду:

$$\dot{\mathcal{P}} + \omega_0^2 \mathcal{P} = \frac{N e_0^2}{m_0} \mathcal{E}_0 \cos \omega t. \quad (14.54b)$$

Отсюда находим:

$$\mathcal{E} = \frac{Ne_0^2}{m_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} \mathcal{E}_0 \cos \omega t. \quad (14.56)$$

Сравнивая это выражение (14.53а), для показателя преломления получаем формулу:

$$\frac{n^2 - 1}{4\pi} = N \frac{e_0^2}{m_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2}, \quad (14.57)$$

хорошо известную из оптики.

Заметим, что если бы в атоме имелись электроны, обладающие различными собственными частотами:

$$\omega_0, \omega_1, \omega_2, \dots, \omega_k, \dots,$$

то формула (14.57) приняла бы более общий вид:

$$\frac{n^2 - 1}{4\pi} = \frac{e_0^2}{m_0} \sum_k \frac{N_k}{\omega_k^2 - \omega^2}, \quad (14.57a)$$

где N_k — число электронов в единице объема, движущихся с частотой ω_k .

Для радиочастотного диапазона ($\omega \ll \omega_0$) показатель преломления, согласно (14.57), с большой степенью точности может считаться величиной постоянной, определяемой соотношением:

$$\frac{n^2 - 1}{4\pi} \approx \frac{Ne_0^2}{m_0 \omega_0^2}. \quad (14.58)$$

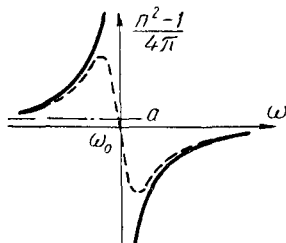
Наоборот, для частот $\omega \gg \omega_0$ значение показателя преломления следует находить из соотношения:

$$\frac{n^2 - 1}{4\pi} \approx -\frac{Ne_0^2}{m_0 \omega^2}, \quad (14.59)$$

т. е. при $\omega \ll \omega_0$ показатель преломления будет величиной постоянной и больше единицы, а при $\omega \gg \omega_0$ — меньше единицы, приближаясь при $\omega \rightarrow \infty$ к единице.

В области же частот ω , близких к ω_0 , показатель преломления по абсолютной величине неограниченно возрастает, а при $\omega = \omega_0$ испытывает разрыв (см. фиг. 14.2).

Это связано с тем обстоятельством, что в уравнении (14.54) не учитывается сила радиационного трения электрона: $F^{\text{тр.}} = \frac{2}{3} \frac{e_0^2}{c^3} \ddot{x}$, являющаяся результатом действия на электрон его собственного поля. Если бы $F^{\text{тр.}}$ была включена в уравнение, то кривая дисперсии в области $\omega \sim \omega_0$ имела бы вид, изображенный



Фиг. 14.2. Кривая дисперсии в классическом случае:

$$a = \frac{Ne_0^2}{m_0 \omega_0^2}.$$

на фиг. 14.2 штриховой линией. Из этого следует, что вблизи резонансной частоты ω_0 дисперсия становится аномальной. Поскольку область аномальной дисперсии совпадает с областью собственных механических частот колебаний электронов в атоме, то аномальной дисперсии всегда должно сопутствовать сильное поглощение.

ж. Квантовая теория дисперсии

Перейдем теперь к построению квантовой теории дисперсии. При этом по аналогии с классическим случаем будем предполагать, что все электроны атомов находятся в одном и том же квантовом состоянии k^1). Для решения нашей задачи используем метод возмущений, поскольку энергия взаимодействия с внешним полем, как правило, мала по сравнению с энергией связи электронов в атоме.

Замечая, что внешняя сила, действующая на электрон, в нерелятивистском случае (т. е. при отбрасывании «магнитной» силы), согласно (14.55), имеет вид ²⁾:

$$F_x = -e_0 \mathcal{E}_0 \cos \omega t, \quad F_y = F_z = 0,$$

для энергии возмущения получаем выражение:

$$V' = e_0 x \mathcal{E}_0 \cos \omega t. \quad (14.60)$$

В связи с этим уравнение Шредингера для электрона запишется в форме:

$$\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - H^0 - V' \right) \psi_k(t) = 0, \quad (14.61)$$

где H^0 — гамильтониан в отсутствие возмущения.

Допустим, что при $V' = 0$ уравнение (14.61) имеет точное решение:

$$\psi_k^0(t) = \psi_k^0 e^{-(i/\hbar) E_k t} = \psi_k^0 e^{-i \omega_k t}, \quad (14.62)$$

где ψ_k^0 и E_k удовлетворяют уравнению:

$$(E_k - H^0) \psi_k^0 = 0. \quad (14.63)$$

Тогда в соответствии с теорией возмущений решение будем искать в виде:

$$\psi_k(t) = \psi_k^0(t) + \psi_k^1(t). \quad (14.64)$$

¹⁾ Это предположение аналогично тому, как при классическом подходе все собственные механические частоты электронов предполагались одинаковыми.

²⁾ Здесь мы, так же как и в классическом случае, предположили, что на расстояниях порядка размеров атома электрическое поле можно считать квазистационарным.

Принимая во внимание, что, согласно (14.62) и (14.63), имеет место равенство:

$$\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - H^0\right) \psi_k^0(t) = 0, \quad (14.63a)$$

для определения $\psi_k'(t)$ и поправки к энергии E_k в первом приближении получаем уравнение:

$$\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - H^0\right) \psi_k'(t) = V' \psi_k^0(t). \quad (14.65)$$

Подставляя сюда V' из (14.60), находим:

$$\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - H^0\right) \psi_k'(t) = \frac{1}{2} e_0 x \mathcal{E}_0 \psi_k^0 \{e^{-it(\omega_k - \omega)} + e^{-it(\omega_k + \omega)}\}. \quad (14.65a)$$

Чтобы в этом уравнении исключить время t , будем искать функцию $\psi_k'(t)$ в форме:

$$\psi_k'(t) = u e^{-it(\omega_k - \omega)} + v e^{-it(\omega_k + \omega)}. \quad (14.66)$$

Тогда для определения функций u и v будем иметь уравнения:

$$\{\hbar(\omega_k - \omega) - H^0\} u = \frac{1}{2} e_0 x \mathcal{E}_0 \psi_k^0, \quad (14.67)$$

$$\{\hbar(\omega_k + \omega) - H^0\} v = \frac{1}{2} e_0 x \mathcal{E}_0 \psi_k^0. \quad (14.68)$$

Заметим, что два последних уравнения имеют совершенно одинаковую структуру. Поэтому нам достаточно найти лишь решение u уравнения (14.67). Тогда решение v уравнения (14.68) получим с помощью простой замены ω на $-\omega$.

Поскольку в уравнении (14.67) время явно не входит, при определении функции u мы можем воспользоваться методом возмущений для стационарных задач, когда решение можно искать в виде разложения по собственным функциям невозмущенной задачи [см. (14.8)]:

$$u = \sum_{k''} C_{k''} \psi_{k''}^0, \quad (14.69)$$

где $\psi_{k''}^0$ удовлетворяет уравнению:

$$(E_{k''} - H^0) \psi_{k''}^0 = 0. \quad (14.70)$$

Принимая во внимание это обстоятельство, приведем (14.67) к виду:

$$\hbar \sum_{k''} C_{k''} (\omega_{kk''} - \omega) \psi_{k''}^0 = \frac{e_0 x \mathcal{E}_0}{2} \psi_k^0. \quad (14.67a)$$

Здесь частота излучения:

$$\omega_{kk''} = \frac{E_k - E_{k''}}{\hbar}. \quad (14.71)$$

Умножая (14.67а) слева на ψ_k^{0*} и интегрируя затем по всему пространству с учетом ортонормированности собственных функций ($\int \psi_k^{0*} \psi_{k'}^0 d^3x = \delta_{k'k}$), для коэффициентов $C_{k'}$ и функции u соответственно находим выражения:

$$C_{k'} = -\frac{e_0 \mathcal{E}_0}{2\hbar} \frac{x_{k'k}}{\omega_{k'k} + \omega}, \quad (14.72)$$

$$u = \sum_{k'} \left(-\frac{e_0 \mathcal{E}_0}{2\hbar} \right) \frac{x_{k'k}}{\omega_{k'k} + \omega} \psi_{k'}^0, \quad (14.73)$$

где матричный элемент $x_{k'k}$ равен:

$$x_{k'k} = \int \psi_{k'}^{0*} x \psi_k^0 d^3x. \quad (14.74)$$

Заменяя в (14.73) ω на $-\omega$, находим выражение для функции v :

$$v = \sum_{k'} \left(-\frac{e_0 \mathcal{E}_0}{2\hbar} \right) \frac{x_{k'k}}{\omega_{k'k} - \omega} \psi_{k'}^0. \quad (14.75)$$

Общая же волновая функция $\psi_k(t)$ при этом, согласно (14.64), (14.66), (14.73) и (14.75), запишется в виде:

$$\psi_k(t) = e^{-i\omega_{k'} t} \left\{ \psi_k^0 - \frac{e_0 \mathcal{E}_0}{\hbar} \sum_{k'} \frac{x_{k'k} \psi_{k'}^0}{\omega_{k'k}^2 - \omega^2} [\omega_{k'k} \cos \omega t - i\omega \sin \omega t] \right\}. \quad (14.76)$$

Определив волновую функцию $\psi_k(t)$ электрона во внешнем поле, мы легко сможем найти вектор поляризации среды \mathcal{P} . В самом деле, по классической теории:

$$\mathcal{P} = Np = -Ne_0 x.$$

Чтобы это выражение обобщить на квантовый случай, вместо p следует взять его среднее значение. Тогда

$$\mathcal{P} = N \langle p \rangle = -Ne_0 \int \psi_k^{0*}(t) x \psi_k(t) d^3x. \quad (14.77)$$

Подставляя сюда $\psi_k(t)$ из (14.76) и оставляя только члены первого порядка малости относительно \mathcal{E}_0 , находим:

$$\mathcal{P} = \frac{2Ne_0^2}{\hbar} \sum_{k'} \frac{\omega_{k'k} |x_{k'k}|^2}{\omega_{k'k}^2 - \omega^2} \mathcal{E}_0 \cos \omega t. \quad (14.78)$$

При выводе этого соотношения мы учли, что

$$\int \psi_k^{0*} x \psi_k^0 d^3x = \int |\psi_k^0|^2 x d^3x = 0,$$

поскольку подынтегральная функция является нечетной функцией x . Сравнивая (14.78) с (14.53а), получаем дисперсионную формулу:

$$\frac{n^2 - 1}{4\pi} = \frac{2Ne_0^2}{\hbar} \sum_{k'} \frac{\omega_{k'h} |x_{k'h}|^2}{\omega_{k'h}^2 - \omega^2}. \quad (14.79)$$

Вводя новую переменную:

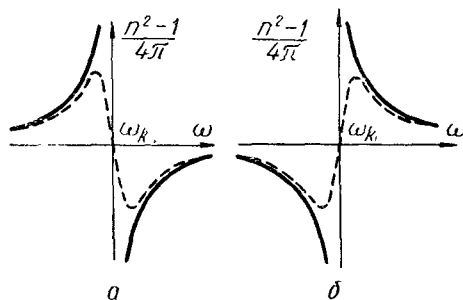
$$f_{k'h} = \frac{2m_0}{\hbar} \omega_{k'h} |x_{k'h}|^2, \quad (14.80)$$

получившую название *силы осциллятора*, преобразуем равенство (14.79) к виду:

$$\frac{n^2 - 1}{4\pi} = \frac{Ne_0^2}{m_0} \sum_{k'} \frac{f_{k'h}}{\omega_{k'h}^2 - \omega^2}. \quad (14.81)$$

Заметим, что если бы с самого начала была учтена квантовым путем сила радиационного трения, то для частот ω , близких к $\omega_{k'h}$, мы имели бы (подобно классическому случаю) в области аномальной дисперсии конечное значение для n^2 (см. фиг. 14.3а — штриховая линия).

Формула (14.81) напоминает по своей структуре классическое выражение (14.57). Однако по сути дела квантовые результаты принципиально отличаются от классических. В самом деле, согласно квантовой теории, аномальная дисперсия лежит в области



Фиг. 14.3. Кривые дисперсии.

а — положительная дисперсия ($\omega_k = \omega_{k'h}$); б — отрицательная дисперсия ($\omega_k = \omega_{k'h'}$).

частот, соответствующих разрешенным переходам в квантовой теории, а не в области собственной механической частоты колебаний электрона, как это вытекает из классической теории. Такой вывод следует из того, что в дисперсионной формуле (14.81) существенную роль играет сила осциллятора $f_{k'h}$, определяемая матричным элементом $x_{k'h}$ [см. (14.80)], характеризующим правила отбора, т. е. возможные переходы.

Д. С. Рождественский, используя так называемый метод кривок, экспериментально подтвердил эти выводы квантовой теории.

Вторым очень важным отличием квантовых результатов от классических является то, что, согласно квантовой теории, наряду с обычной положительной дисперсией может также существовать еще и отрицательная дисперсия (см. фиг. 14.3б), не имеющая классического аналога.

Действительно, если рассеяние света происходит на возбужденных атомах, то следует учитывать состояния с $E_k > E_{k'}$, для которых:

$$f_{k'k} \sim \omega_{k'k} = \frac{E_{k'} - E_k}{\hbar} < 0.$$

Для этих состояний дисперсионная формула (14.81) принимает вид:

$$\frac{n^2 - 1}{4\pi} = -\frac{Ne_0^2}{m_0} \sum_{k'} \frac{|f_{k'k}|}{\omega_{k'k}^2 - \omega^2}, \quad (14.81a)$$

а кривая дисперсии изображается пунктирной линией на фиг. 14.3б.

Экспериментально явление отрицательной дисперсии было обнаружено Ладенбургом. Таким образом, и этот вывод квантовой теории также получил свое подтверждение.

Найдем значение силы осциллятора $f_{k'k}$, а следовательно, и дисперсионную формулу в случае гармонического осциллятора. Замечая, что при этом отличными от нуля будут только матричные элементы [см. (10.55)]:

$$x_{k+1, k} = \sqrt{\frac{\hbar(k+1)}{2m_0\omega_0}} \quad \text{и} \quad x_{k-1, k} = \sqrt{\frac{\hbar k}{2m_0\omega_0}},$$

которым соответствуют квантовые частоты излучения, «случайно» совпадающие с соответствующими механическими частотами колебаний:

$$\omega_{k+1, k} = \omega_0 \quad \text{и} \quad \omega_{k-1, k} = -\omega_0,$$

находим:

$$f_{k+1, k} = (k+1), \quad f_{k-1, k} = -k. \quad (14.82)$$

В связи с этим дисперсионная формула (14.81) запишется в виде (так как $\sum_{k'} f_{k'k} = 1$):

$$\frac{n^2 - 1}{4\pi} = \frac{Ne_0^2}{m_0} \frac{k+1}{\omega_0^2 - \omega^2} - \frac{Ne_0^2}{m_0} \frac{k}{\omega_0^2 - \omega^2} = \frac{Ne_0^2}{m_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2}. \quad (14.83)$$

Отсюда следует, что в этой частной задаче квантовая и классическая теории дают для показателя преломления n одно и то же значение. Явление отрицательной дисперсии здесь не наблюдается. Это связано с тем обстоятельством, что для гармонических осцилляторов область отрицательной дисперсии, благодаря тому что $|\omega_{k+1, k}|^2 = |\omega_{k-1, k}|^2$, совпадает с соответствующей областью положительной дисперсии, которая ее перекрывает.

3. Комбинационное рассеяние света

Проанализируем прежде всего явление дисперсии с точки зрения энергетической схемы.

Предположим, что на атом, обладающий всего лишь тремя уровнями $E_{k''} < E_k < E_{k'}$ (см. фиг. 14.4), падает фотон с энергией:

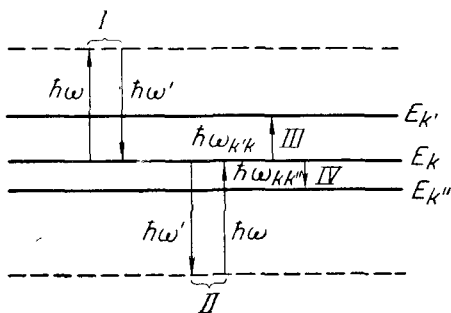
$$\varepsilon = \hbar\omega. \quad (14.84)$$

Вообще говоря, рассеяние этого фотона (т. е. явление дисперсии) будет представлять собой эффект второго порядка. В самом деле, может произойти так, что вначале произойдет поглощение падающего фотона [при этом электрон, находящийся в начальном моменте на уровне k , перейдет в некоторое промежуточное состояние, которое, вообще говоря, может быть и запрещенным¹⁾ (см. фиг. 14.4, I)], а затем испускание. Если электрон в результате испускания возвратится в свое прежнее состояние, то, согласно закону сохранения энергии, частота ω' рассеянного фотона будет равна частоте ω падающего фотона.

Кроме того, может случиться и наоборот: сначала атом испустит фотон (см. фиг. 14.4, II), а потом только произойдет поглощение падающего фотона.

При этом, так же как и в предыдущем случае, частота рассеянного фотона ω' будет равна частоте ω падающего фотона, если в результате поглощения атом вновь окажется в первоначальном состоянии.

Наконец, может быть случай резонанса, когда $\omega \approx \omega_{k'k}$. Тогда наряду с рассеянием фотоны могут также поглощаться (см. фиг. 14.4, III), а электроны в атоме совершать вынужденные переходы. Вероятность вынужденных переходов будет определяться коэффициентом Эйнштейна $B_{kk'}$ [см. (9.21)]. Наличие внешнего поля может также усилить переходы сверху вниз (см. фиг. 14.4, IV), что даст дополнительное излучение, пропорциональное коэффициенту $B_{kk''}$.



Фиг. 14.4. Энергетическая схема рассеяния фотонов:

$\hbar\omega$ — энергия падающего фотона; $\hbar\omega'$ — энергия рассеянного фотона; I, II — упругое рассеяние фотона ($\hbar\omega \neq \hbar\omega_{k'k}$ и $\hbar\omega \neq \hbar\omega_{kk''}$), III, IV — вынужденные переходы ($\hbar\omega \sim \hbar\omega_{k'k}$ или $\hbar\omega \sim \hbar\omega_{kk''}$).

¹⁾ Точнее, в промежуточных состояниях закон сохранения энергии может нарушаться. Только в окончательном результате этот закон должен выполняться.

Выше мы рассмотрели случаи, в которых атомы после рассеяния возвращаются в свое первоначальное состояние. Однако может оказаться и так, что после того, как атом поглотит падающий фотон, переход из промежуточного состояния совершится не на уровень k , а на уровень k' или на уровень k'' (см. фиг. 14.5). Тогда частота рассеянного света (ω' или ω'') уже не будет равна частоте ω падающего света. В таких случаях говорят о так называемом *комбинационном рассеянии*, или *раман-эффекте*. Экспериментально комбинационное рассеяние света впервые было обнаружено в жидкостях индийским физиком Раманом, а в твердых телах — советскими физиками

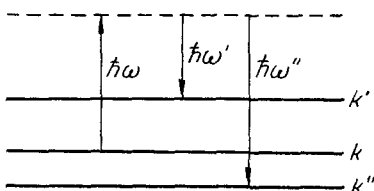
Л. И. Мандельштамом и Г. С. Ландсбергом (1928).

Как видно из фиг. 14.5, частота рассеянного фотона в раман-эффекте может быть как меньше, так и больше частоты падающего.

В первом случае линии:

$$\omega' = \omega - \omega_{k'k} < \omega,$$

называемые *стоксовыми линиями* (смещение происходит в сторону «красной» части спектра), соответствуют возбуждению атома, так



Фиг. 14.5. Комбинационное рассеяние света:

$\hbar\omega$ — энергия падающего фотона; $\hbar\omega'$ и $\hbar\omega''$ — энергии рассеянных фотонов, отвечающие «стоксовым» и «ангистоксовым» линиям.

как в результате рассеяния атом оказывается в энергетически более высоком состоянии. Во втором случае возникают так называемые *ангистоксовы* линии (смещение происходит в сторону «фиолетовой» части спектра):

$$\omega'' = \omega + \omega_{kk'} > \omega;$$

они могут присутствовать только в том случае, когда свет рассеивается на возбужденных атомах.

Очевидно, что при низких температурах могут наблюдаться только *стоксовы* линии. При повышении температуры, по мере того как атомы среды будут переходить в возбужденные состояния, будут появляться и *ангистоксовы* линии.

Важную роль комбинационное рассеяние играет при исследовании строения молекул. В самом деле, в § 12, п. «в» мы видели, что ротационные и вибрационные (а также вибрационно-ротационные) спектры, по которым можно судить о структуре молекул, расположены в глубокой инфракрасной области и поэтому труднодоступны наблюдению. Изучая же комбинационное рассеяние, можно иметь дело с видимым светом и по изменению его частоты судить о спектре молекул, поскольку последний при этом будет налагаться на спектральные линии падающего света.

Определяя ω' и ω'' (см. фиг. 14.6) из опыта, можно найти молекулярные частоты:

$$\omega_{k'k} = \omega - \omega' \quad \text{и} \quad \omega_{kk''} = \omega'' - \omega,$$

по которым, в частности, можно получить также и правила отбора.

В настоящее время комбинационное рассеяние используется как один из ведущих методов молекулярной физики.

Задача 14.1. Найти поправку к энергии системы во втором приближении теории возмущений.

Решение. Ограничиваясь в разложении волновой функции ψ (14.3) и энергии E (14.4) членами до второго порядка малости включительно и подставляя их в уравнение Шредингера (14.2а), получаем уравнение:

$$(E_n^0 - H^0)\psi_n'' = -(E_n' - V')\psi_n' - E_n''\psi_n^0.$$

Учитывая, что решение ψ_n^{0*} однородного уравнения должно быть ортогональным правой части и что выражение для ψ_n' задается формулой (14.22), находим:

$$E_n'' = \sum_{n'}' \frac{|V_{n'n}'|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0}. \quad (14.85)$$

Здесь значение для $V_{n'n}'$ определяется формулой (14.15). При этом мы воспользовались равенством:

$$V_{nn'} = V_{n'n}^*,$$

имеющим место для эрмитовых операторов.

Заметим, что поправка (14.85) второго приближения к энергии низшего состояния всегда отрицательна, поскольку все остальные уровни E_n^0 лежат выше E_n^0 , т. е. $E_{n'}^0 > E_n^0$.

Задача 14.2. Используя теорию возмущений, с точностью до величин порядка \hbar^2 найти энергию ангармонического осциллятора, гамильтониан которого равен:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{m_0\omega^2 x^2}{2} + V',$$

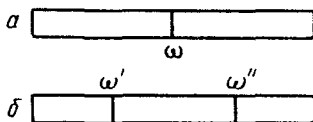
где $V' = \alpha x^3 + \beta x^4$, а постоянные α и β являются классическими величинами.

Решение. Как известно, энергия гармонического осциллятора ($V' = 0$) равна:

$$E_n^0 = \hbar\omega (n + 1/2).$$

Рассматривая энергию V' как энергию возмущения, в первом приближении находим:

$$E_n' = V_{nn}' = \alpha (x^3)_{nn} + \beta (x^4)_{nn}.$$



Фиг. 14.6. Наложение молекулярных частот на частоту падающего света:

a — спектральная линия ω без учета молекулярных колебаний; b — смещение спектральной линии ω , обусловленное молекулярными колебаниями:
 $\omega' = \omega - \omega_{k'k}$, $\omega'' = \omega + \omega_{kk''}$.

Легко показать, что

$$(x^3)_{nn} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 x^3 dx = 0,$$

поскольку подынтегральное выражение является нечетной функцией.

При вычислении же матричного элемента $\beta(x^4)_{nn}$ можно воспользоваться правилом умножения матричных элементов (см. задачу 10.4). Тогда будем иметь:

$$(x^4)_{nn} = \sum_k (x^2)_{nk} (x^2)_{kn} = ((x^2)_{n, n-2})^2 + ((x^2)_{n, n})^2 + ((x^2)_{n, n+2})^2.$$

Подставляя сюда значения для $(x^2)_{nk}$ из задачи 10.5, находим для энергии возмущения в первом приближении E'_n следующее выражение:

$$E'_n = \frac{3}{2} \hbar^2 \frac{\beta}{m_0^3 \omega^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right). \quad (14.86)$$

Однако наша задача решена еще не до конца, так как вклад, вносимый первым членом энергии возмущения αx^3 , во втором приближении будет пропорционален $\frac{x_0^6}{\hbar} \sim \hbar^3$ и поэтому также должен быть учтен. Что касается вклада во втором приближении от члена βx^4 , то он будет пропорционален $\frac{x_0^8}{\hbar} \sim \hbar^3$ и поэтому в рассматриваемом приближении может быть отброшен.

Энергия второго приближения теории возмущения может быть вычислена по формуле (14.85):

$$E''_n = \frac{\alpha^2}{\hbar \omega} \sum_{n'} \frac{(x^3)_{nn'} (x^3)_{n'n}}{(n - n')}.$$

Огличными от нуля будут только следующие матричные элементы [см. формулу (10.55) и задачу 10.5]:

$$\begin{aligned} (x^3)_{n, n-1} &= (x^2)_{n, n} (x)_{n, n-1} + (x^2)_{n, n-2} (x)_{n-2, n-1} = \\ &= 3x_0^3 \sqrt{\left(\frac{n}{2}\right)^3}, \end{aligned}$$

$$(x^3)_{n, n-3} = (x^2)_{n, n-2} (x)_{n-2, n-3} = x_0^3 \sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{8}},$$

$$(x^3)_{n, n+1} = (x^3)_{n+1, n},$$

$$(x^3)_{n, n+3} = (x^3)_{n+3, n},$$

где $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega_0}}$.

Отсюда находим:

$$E''_n = -\frac{15}{4} \hbar^2 \frac{\alpha^2}{m_0^3 \omega^4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right). \quad (14.87)$$

ЧАСТЬ II

РЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

§ 15. СКАЛЯРНОЕ РЕЛЯТИВИСТСКОЕ ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ КЛЕЙНА — ГОРДОНА

а. Классическая релятивистская механика и уравнение Клейна — Гордона. Релятивистская инвариантность

Уравнение Шредингера, подробно рассмотренное нами, применимо для описания движения частиц, скорость которых v значительно меньше скорости света c . Нерелятивистское волновое уравнение Шредингера неинвариантно относительно преобразований специальной теории относительности (преобразований Лоренца), поскольку координаты времени и пространства входят неравноправно: уравнение содержит первую производную по времени и вторые производные по координатам, в то время как специальная теория относительности требует такой записи уравнения, чтобы пространственные и временные координаты формально входили бы на одинаковых основаниях.

Вместе с тем можно сформулировать теорию так (см. 3.2), что соотношения де-Бройля:

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad E = \hbar \omega \quad (15.1)$$

будут трансформироваться при лоренцовом преобразовании как четырех-вектор p_μ с составляющими:

$$p_{1, 2, 3} = \mathbf{p}, \quad p_4 = \frac{iE}{c}. \quad (15.2)$$

Это свидетельствует, в частности, о том, что возможно обобщение волновой механики на случай движения частиц со скоростями, сравнимыми со скоростью света.

Один из возможных путей обобщения нерелятивистского волнового уравнения, совместимый с формулами преобразований специальной теории относительности, был предложен Клейном и Гор-

доном, а также Фоком (1926). Наиболее простой способ получения волнового уравнения для свободной частицы сводится к следующему: в классическое релятивистское соотношение между энергией E , импульсом \mathbf{p} и массой покоя m_0 частицы:

$$E^2 - c^2 p^2 - m_0^2 c^4 = 0 \quad (15.3)$$

следует подставить операторы энергии и импульса:

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla, \quad (15.4)$$

действующие на волновую функцию $\psi(\mathbf{r}, t)$. Заменяя, кроме того, массу m_0 величиной $\hbar k_0/c$, после сокращения на величину $\hbar^2 c^2$ получаем¹⁾:

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - k_0^2 \right) \psi = \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} - k_0^2 \right) \psi = 0. \quad (15.5)$$

Здесь

$$x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z, \quad x_4 = ict \quad (15.6)$$

(по индексу μ , входящему дважды, предполагается суммирование от 1 до 4). Поскольку мы исходили из релятивистского соотношения (15.3), полученное уравнение является релятивистски инвариантным, и поэтому оно симметрично относительно пространственных и временных координат. Мы не будем здесь более строго доказывать релятивистскую инвариантность уравнения и перейдем к изучению его свойств.

б. Плотность заряда и тока

Выражения для плотности заряда и тока можно найти тем же путем, что и в нерелятивистской теории, положив в основу уравнение непрерывности:

$$\operatorname{div} \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (15.7)$$

Умножая уравнение (15.5) слева на ψ^* , а комплексно-сопряженное [аналогичное (15.5), но с заменой ψ на ψ^*] — на ψ и производя вычитание, получаем:

$$\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* - \frac{1}{c^2} \left(\psi^* \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi - \psi \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi^* \right) = 0. \quad (15.8)$$

¹⁾ Здесь и в дальнейшем зависимость ψ от t , как это делалось в теории Шредингера, мы, как правило, писать не будем. В волновом уравнении для монохроматических волн ($E = \text{const}$), когда можно ограничиться только частью функции ψ , не зависящей от времени, вместо оператора энергии будет входить его собственное значение.

Последнее равенство можно преобразовать к виду:

$$\operatorname{div} \{ \psi \operatorname{grad} \psi^* - \psi^* \operatorname{grad} \psi \} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right\} = 0. \quad (15.9)$$

Вводя теперь плотность заряда и плотность тока соответственно выражениями:

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2m_0c^2} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \psi \right], \quad (15.10)$$

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2im_0} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi], \quad (15.11)$$

замечаем, что они удовлетворяют уравнению непрерывности (15.7) и, кроме того, образуют четырехмерный вектор:

$$j_\mu = \frac{e\hbar}{2m_0i} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} - \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x_\mu} \right) \psi \right], \quad (15.12)$$

где

$$x_4 = ict, \quad j_4 = ic\rho. \quad (15.13)$$

Плотность тока (15.11) совпадает с нерелятивистской формулой (5.21), плотность заряда переходит в нерелятивистское выражение (5.20) при $v \ll c$. Действительно, воспользуемся заменой $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow E$ [см. (15.4)]; тогда с помощью (15.10) для плотности заряда получим выражение:

$$\rho = \frac{eE}{m_0c^2} \psi^* \psi, \quad (15.14)$$

которое в нерелятивистском приближении $E \sim m_0c^2$ переходит в обычную формулу $\rho = e\psi^* \psi$. Таким образом, мы выбрали такую нормировку, чтобы релятивистские значения для ρ и \mathbf{j} при $\left(\frac{v}{c}\right)^2 \ll 1$ переходили бы в соответствующие нерелятивистские выражения.

Заметим, что введение плотности частиц (в отличие от плотности заряда):

$$\rho_0 = \frac{\rho}{e} = \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right] \quad (15.15)$$

в релятивистской теории встречает трудности. Волновое уравнение Клейна — Гордона является дифференциальным уравнением второго порядка, поэтому возможно произвольное задание ψ и $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ для некоторого момента t . Следовательно, плотность ρ_0 (15.15) в общем случае не является положительно определенной величиной в отличие от нерелятивистской плотности вероятности:

$$\rho_0 = \psi^* \psi. \quad (15.16)$$

Вследствие этого выражение (15.15) является плотностью заряда, а не плотностью числа частиц. Это связано с тем обстоятельством, что релятивистское уравнение описывает движение частиц как с положительным, так и с отрицательным зарядом (пи-мезоны, к которым применимо это уравнение, могут обладать и положительным и отрицательным зарядом). Поэтому величина ρ_0 может иметь оба знака.

в. Релятивистская теория атома водорода (без учета спина электрона)

Чтобы ввести в рассмотрение взаимодействие частицы с электромагнитным полем, заданным, как обычно, векторным \mathbf{A} и скалярным Φ потенциалами, мы, так же как и в нерелятивистском случае, введем операторы:

$$\mathbf{F} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi, \quad \mathbf{P} = -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}. \quad (15.17)$$

Тогда с помощью (15.3) находим уравнение Клейна--Гордона¹⁾:

$$\left\{ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right)^2 - c^2 \left(i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - m_0^2 c^4 \right\} \psi = 0. \quad (15.19)$$

Применим это уравнение к исследованию спектра водородоподобного атома. Полагая $\mathbf{A} = 0$ и $V = e\Phi = -\frac{Ze_0^2}{r}$, из (15.19) получаем:

$$\nabla^2 \psi + \frac{1}{c^2 \hbar^2} \{ (E - V)^2 - m_0^2 c^4 \} \psi = 0. \quad (15.20)$$

Поскольку потенциальная энергия в последнем уравнении от времени не зависит, можно перейти к стационарному случаю, сделав замену:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} (E + m_0 c^2) t}.$$

В последнем выражении мы выделили собственную энергию частицы $m_0 c^2$. Тогда уравнение (15.20) принимает вид:

$$\nabla^2 \psi + \frac{1}{c^2 \hbar^2} \left[\left(E + m_0 c^2 + \frac{Ze_0^2}{r} \right)^2 - m_0^2 c^4 \right] \psi = 0. \quad (15.21)$$

¹⁾ Это уравнение можно получить также из классической функции Гамильтона для частицы в электромагнитном поле:

$$H = \sqrt{c^2 \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m_0^2 c^4} + e\Phi. \quad (15.18)$$

Для этого после переноса $e\Phi$ в левую часть и возведения обеих частей в квадрат нужно сделать замену классических величин соответствующими операторами, действующими на волновую функцию.

Так же как и в теории Шредингера, решение последнего уравнения будем искать в форме:

$$\psi = R(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi). \quad (15.22)$$

Тогда для радиальной части получим уравнение:

$$\left(\nabla_r^2 - A + \frac{2B}{r} - \frac{l(l+1) - \alpha^2 Z^2}{r^2} \right) R = 0. \quad (15.23)$$

Здесь $\alpha = \frac{e_0^2}{c\hbar} \cong \frac{1}{137}$ является безразмерной величиной, получившей название *постоянной тонкой структуры*,

$$A = \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \left[1 - \left(1 + \frac{E}{m_0 c^2} \right)^2 \right], \quad (15.24)$$

$$B = \frac{m_0 Z e_0^2}{\hbar^2} \left[1 + \frac{E}{m_0 c^2} \right].$$

При $c^2 \rightarrow \infty$ последние выражения точно переходят в соответствующие выражения нерелятивистской теории (см. § 13).

Несколько уточненные (путем учета релятивистских эффектов) значения для постоянных A и B не могут каким-либо образом сказаться на характере решения релятивистского волнового уравнения по сравнению с решением уравнения Шредингера.

Появление же в уравнении (15.23) дополнительного члена $\frac{Z^2 \alpha^2}{r^2}$ можно формально рассматривать как введение дополнительной релятивистской потенциальной энергии притяжения, обратно пропорциональной квадрату расстояния, которая может при некоторых условиях изменить характер решения, что будет более подробно проанализировано ниже.

Прежде всего исследуем асимптотическое решение R_0 при $r \rightarrow 0$.

В этом случае уравнение (15.23) принимает вид:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2(rR_0)}{dr^2} - \frac{l(l+1) - Z^2 \alpha^2}{r^2} R_0 = 0. \quad (15.25)$$

Решение последнего уравнения будем искать в виде:

$$R_0 = Cr^s.$$

Тогда для определения s получаем уравнение:

$$s(s+1) - l(l+1) + Z^2 \alpha^2 = 0, \quad (15.26)$$

с решением:

$$s_{1,2} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2 \alpha^2}. \quad (15.27)$$

В этом случае

$$R_0 = C_1 r^{s_1} + C_2 r^{s_2}. \quad (15.28)$$

Если

$$Z\alpha < \frac{1}{2},$$

то оба корня s_1 и s_2 при любых значениях $l=0, 1, 2, \dots$ будут вещественными величинами и мы можем ограничиться решением для rR_0 , не расходящимся в нуле, т. е. положить $C_2=0$. Кроме того, при $E < 0$ (когда $A > 0$) в выражении для волновой функции при $r \rightarrow \infty$ следует ограничиться экспоненциально убывающим решением.

Ограничение с обеих сторон убывающими решениями дает для определения спектра энергии такое же выражение, какое было получено по теории Шредингера [см. (13.20)], если в последнем l заменить на s_1 . Тогда для определения собственных значений будем иметь уравнение:

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = k + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2\alpha^2}. \quad (15.29)$$

Подставляя сюда вместо постоянных B и A их релятивистские значения (15.24), получаем ($n=k+l+1$):

$$E_{nl} = m_0c^2 \left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left(k + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2\alpha^2}\right)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} - m_0c^2. \quad (15.30)$$

Разлагая последнее выражение в ряд по $Z^2\alpha^2$ и оставляя первые два не обращающиеся в нуль члена, находим спектр энергий с учетом релятивистских членов:

$$E_{nl} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (15.31)$$

Первый член совпадает с соответствующим выражением нерелятивистской теории; второй член, пропорциональный квадрату постоянной тонкой структуры $\alpha \approx 1/137$, дает релятивистские поправки.

Учет релятивистских поправок для атома водорода ($Z=1$) интересен в том отношении, что он снимает вырождение по l , благодаря чему уровни с заданным значением n расщепляются на n близких (ввиду малости α^2) подуровней, поскольку орбитальное квантовое число l может принимать n значений ($l=0, 1, 2, \dots, n-1$).

Для сравнения с экспериментом можно рассчитать дублетное расщепление для серии Бальмера ($n=2$). Для величины этого расщепления имеем:

$$\Delta\omega = \frac{E_{21} - E_{20}}{\hbar} = \frac{8}{3} \frac{R\alpha^2}{16}. \quad (15.32)$$

Сравнение результатов с данными эксперимента показывает, что истинная величина расщепления для серии Бальмера оказывается примерно в три раза меньшей, чем это следует из формулы (15.32).

Причина этого противоречия заключается в том, что тонкая структура уровней атома водорода не исчерпывается релятивистской зависимостью массы от скорости. Как будет показано в § 19, при этом следует учитывать также и спин электрона, т. е. собственный механический момент, который автоматически приводит к магнитному моменту. Вначале предполагалось, что уравнение Клейна — Гордона пригодно для описания релятивистского электрона. Однако противоречия с опытными фактами помогли установить, что это уравнение описывает движение частицы со спином, равным нулю, в то время как спин электронов равен $1/2$. Уравнение Клейна — Гордона, по-видимому, применимо к описанию движения пи-мезонов — частиц со спином, равным нулю.

Наконец, рассмотрим другой случай, когда в уравнении (15.27):

$$Z\alpha > \frac{1}{2}. \quad (15.33)$$

При этом будем иметь не поправочные к нерелятивистскому уравнению члены, а принципиально новое решение.

В самом деле, при $l=0$ оба корня s_1 и s_2 будут комплексными, и поэтому для асимптотического решения (15.28) будем иметь выражение:

$$R_0 = \frac{1}{\sqrt{r}} (C_1 r^{i\gamma} + C_2 r^{-i\gamma}), \quad (15.34)$$

где $\gamma = \sqrt{Z^2\alpha^2 - \frac{1}{4}}$. Тогда мы не можем ограничить нашу задачу условием $C_2=0$ (или $C_1=0$), так как оба решения имеют одинаковую сингулярность при $r \rightarrow 0$.

Поскольку в этом случае решение даже при $E < 0$ со стороны малых r остается неограниченным потенциальным барьером, спектр энергии для $l=0$ будет непрерывным, в результате чего должно произойти «падение» частицы на центр.

Вопрос об устойчивости движения частиц имеет весьма важное значение при исследовании центральных сил.

Полученный результат может быть использован при анализе решения уравнения Шредингера, когда на частицу действуют силы притяжения вида:

$$V = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m_0 r^2}. \quad (15.35)$$

Составляя асимптотическое решение при $r \rightarrow 0$ [см. (15.26)], находим, что исчезающее в нуле решение может быть получено

только для максимального значения ($q=2$), причем частица не упадет на центр, когда

$$\beta < \frac{1}{2}.$$

В связи с этими замечаниями следует также отметить, что потенциальная энергия, обратно пропорциональная кубу расстояния, встречается в теории элементарных частиц сравнительно часто, поскольку она описывает взаимодействие двух элементарных магнитных диполей.

При этом следует различать два случая. В первом случае $V \sim r^{-3}$ лишь на сравнительно больших расстояниях, а на малых расстояниях V убывает не быстрее чем r^{-2} . Такой закон изменения V имеет место, например, для так называемого спин-орбитального взаимодействия в теории Дирака. Тогда эта расходимость не вызывает никаких трудностей. Более того, если по релятивистской теории Клейна—Гордона устойчивость в кулоновском центре ограничена сравнительно небольшими значениями $Z < \frac{1}{2} \cdot 137$, то при учете спиновых эффектов, которые несколько уменьшают влияние релятивистских эффектов (см. § 17), это условие будет соответствовать Z , лежащим за пределами существующей периодической системы ($Z < 137$).

Во втором случае, когда закон притяжения $V \sim r^{-3}$ остается справедливым также и в случае $r \rightarrow 0$, соединение элементарных частиц в атомоподобные системы становится невозможным. Подобный закон имеет место, например, в мезонной теории ядерных сил, где существенная роль принадлежит квазимагнитным взаимодействиям. В этом случае потенциал приходится обрезать на некоторых малых расстояниях таким законом изменения V , чтобы стало возможным образование атомоподобной системы.

Задача 15.1. Найти выражение для ρ и j при наличии электромагнитного поля в релятивистском скалярном уравнении.

Решение. Воспользовавшись заменой $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$, $E \rightarrow E - e\Phi$, запишем уравнение Клейна—Гордона для частицы в электромагнитном поле:

$$\left\{ \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{ie\Phi}{\hbar} \right)^2 - k_0^2 \right\} \psi = 0.$$

Затем, повторяя расчет, приведший к формуле (15.12), легко получить ее обобщение:

$$j_\mu = \frac{e\hbar}{2m_0i} \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x_\mu} \psi - \frac{2ie}{\hbar c} \psi^* \psi A_\mu \right\},$$

где четырехмерный потенциал A_μ имеет компоненты:

$$A_\mu = \{ \mathbf{A}, i\Phi \}.$$

Задача 15.2. Показать, что в случае независимости от времени потенциалов A и Φ пространственные координаты и время в уравнении Клейна—Гордона разделяются и волновая функция может быть представлена в виде:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}.$$

Задача 15.3. Найти волновую функцию свободной частицы, описываемой уравнением Клейна—Гордона, используя для нормировки выражение для плотности ρ . Показать, что в релятивистском случае ρ является плотностью заряда, а не плотностью числа частиц.

Решение. Пусть импульс частицы направлен по оси z и пусть частица движется на отрезке длиной L (одномерный случай). Тогда решение уравнения Клейна—Гордона можно записать в виде:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{L}} \{ A e^{-i c K t + i k z} + B e^{i c K t - i k z} \},$$

где $E = \pm c \hbar K$ — энергия частицы.

Учитывая, что плотность заряда определяется выражением:

$$\rho = \frac{i e \hbar}{2 m_0 c^2} \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right\},$$

находим для общего заряда значение [см. также (15.14)]:

$$\int_{-L/2}^{L/2} \rho dz = \frac{e |E|}{m_0 c^2} (A^* A - B^* B).$$

Отсюда следует, что ρ является плотностью распределения заряда (а не числа частиц), поскольку для интерпретации последней формулы следует предположить, что частицы, описываемые амплитудой B (отрицательные энергии), имеют противоположный заряд по сравнению с частицами, описываемыми амплитудой A ($E > 0$).

§ 16. ТЕОРИЯ ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ. СПИН ЭЛЕКТРОНА

В 1896 г. Зееман обнаружил, что спектральные линии атомов, помещенных в сравнительно сильное магнитное поле, расщеплены на несколько компонент. Это явление получило название *эффекта Зеемана*.

С тех пор эффект Зеемана играет особую роль в исследовании строения атома и в особенности его магнитных свойств. Вместе с экспериментальным обнаружением все новых особенностей зеемановского расщепления развивалась также и его теория.

Поскольку эффект Зеемана сыграл одну из решающих ролей в открытии многих свойств движения электронов в атоме и в первую очередь спина (т. е. собственного механического момента) и магнитного момента электрона, остановимся более подробно на теории этого эффекта.

а. Классическая теория эффекта Зеемана

Согласно электронной теории Лоренца, в простейшей модели излучающего атома электрон движется в нем под действием упругой силы:

$$\mathbf{F} = -k\mathbf{r}. \quad (16.1)$$

Здесь коэффициент упругости k связан с массой электрона и круговой частотой колебаний ω_0 соотношением:

$$k = m_0\omega_0^2. \quad (16.2)$$

Поэтому уравнение колебания электрона при наличии однородного и постоянного магнитного поля \mathbf{H} принимает вид:

$$m_0\ddot{\mathbf{r}} + m_0\omega_0^2\mathbf{r} = -\frac{e_0}{c}[\dot{\mathbf{r}}\mathbf{H}]. \quad (16.3)$$

Здесь $e = -e_0$ — заряд электрона. Проектируя последнее уравнение на оси координат (ось z выбрана по направлению поля \mathbf{H} , так что $H_x = H_y = 0$, $H_z = \mathcal{H}$), находим:

$$\begin{aligned} \ddot{x} + \omega_0^2 x + \frac{e_0}{m_0 c} \dot{y} \mathcal{H} &= 0, \\ \ddot{y} + \omega_0^2 y - \frac{e_0}{m_0 c} \dot{x} \mathcal{H} &= 0, \\ \ddot{z} + \omega_0^2 z &= 0. \end{aligned} \quad (16.4)$$

Умножив второе уравнение на мнимую единицу i и сложив его с первым, получим:

$$\ddot{\xi} + \omega_0^2 \xi - 2i\omega_0 \dot{\xi} = 0, \quad (16.5)$$

где $\omega = \frac{e_0 \mathcal{H}}{2m_0 c}$ — ларморова частота колебаний, а $\xi = x + iy$. Решение уравнения (16.5) при $\omega \ll \omega_0$ имеет вид¹⁾:

$$\xi = e^{i\omega t} \{ A e^{i\omega_0 t} + B e^{-i\omega_0 t} \}, \quad (16.6)$$

а для координаты z из (16.4) следует, что

$$z = C e^{\pm i\omega_0 t}. \quad (16.7)$$

Из последних выражений видно, что под влиянием магнитного поля частота колебаний электрона (трехмерного осциллятора)

¹⁾ Величина ω даже в случае очень сильных полей $\mathcal{H} \sim 10^8$ гаусс имеет порядок $\omega \sim 10^{13}$ сек⁻¹, в то время как частота колебаний электрона в атоме (оптический спектр) $\omega_0 \sim 10^{16}$ сек⁻¹. Поэтому соотношение $\omega \ll \omega_0$ практически всегда имеет место.

изменяется. Атом, помещенный в магнитное поле, должен испускать излучение трех частот:

$$\omega_0 - \nu, \omega_0, \omega_0 + \nu. \quad (16.8)$$

Согласно классической теории, осциллятор не излучает в направлении своего колебания. Поэтому, наблюдая свет, излученный атомом по направлению оси z (т. е. по направлению силовых линий магнитного поля), мы должны обнаружить лишь две линии (несмещенная компонента ω_0 , обязанная колебаниям по оси z , будет отсутствовать); в других направлениях должны наблюдаться все три компоненты (нормальный эффект Зеемана).

Представление колебания электрона с помощью формул (16.6) и (16.7) означает разложение колебаний на продольную составляющую, направленную по магнитному полю, т. е. по оси z , и на две поперечных, которым соответствуют два вращения: правое и левое. Это означает, что магнитное поле на продольные колебания не действует, оно действует только на круговые вращения, расположенные в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

Как известно, в квантовой теории изменение частоты колебаний связывалось всегда с изменением энергии. Поэтому с первого взгляда может показаться странным, что магнитное поле изменяет энергию электрона, поскольку сила Лоренца $\mathbf{F} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}]$ перпендикулярна скорости, и поэтому ее работа, так же как и работа любой центробежной силы, должна равняться нулю. Однако, с другой стороны, хорошо известно, что вращающийся по окружности электрон, подобно круговому току, образует диполь, энергия которого в магнитном поле равна:

$$V_{\text{магн.}} = -(\mu\mathbf{H}). \quad (16.9)$$

Эти два на первый взгляд противоположных заключения могут быть разъяснены следующим образом. В течение всего времени изменения магнитного поля от нуля до некоторого постоянного значения $H_z = \mathcal{H}$ на электрон должна действовать по направлению движения составляющая электрического поля \mathcal{E} , которая и сообщает электрону дополнительную энергию. Величина этой составляющей может быть найдена из закона индукции Фарадея (второе уравнение Максвелла):

$$\oint \mathcal{E} dt = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int \mathcal{H} dS.$$

Предполагая, что \mathcal{H} и \mathcal{E} зависят только от времени и что включение магнитного поля не изменяет радиуса стационарной орбиты, находим:

$$\mathcal{E} = -\frac{r}{2c} \frac{d\mathcal{H}}{dt}.$$

Дополнительная скорость, сообщаемая электрону со стороны этого электрического поля, может быть найдена из уравнения ($e = -e_0$):

$$\frac{d}{dt} v^{\text{магн.}} = -\frac{e_0 \mathcal{E}}{m_0} = \frac{r e_0}{2m_0 c} \frac{d\mathcal{H}}{dt}.$$

Отсюда для дополнительной скорости получаем выражение:

$$v^{\text{магн.}} = \frac{r e_0}{2m_0 c} \mathcal{H},$$

совершенно не зависящее от закона включения магнитного поля. Поскольку это магнитное поле направлено по оси z , а индуцированное им электрическое поле (а вместе с тем и $v^{\text{магн.}}$) направлено перпендикулярно магнитному полю и радиусу траектории, можно записать в векторной форме:

$$v^{\text{магн.}} = \frac{e_0}{2m_0 c} [Hr].$$

Отсюда видно, что магнитное поле сообщает электрону дополнительное вращение (ларморову прецессию) с угловой скоростью

$$\omega = \frac{e_0}{2m_0 c} \mathcal{H}.$$

Мы можем теперь определить искомую дополнительную энергию, которую получает вращающийся электрон при включении магнитного поля. Поскольку энергия электрона, помещенного в магнитное поле, целиком определяется его кинетической энергией, будем иметь:

$$V^{\text{магн.}} = \frac{m_0}{2} (v + v^{\text{магн.}})^2 - \frac{m_0 v^2}{2},$$

где v — скорость электрона до включения магнитного поля. Учитывая в последнем уравнении лишь члены, линейные относительно $v^{\text{магн.}}$, получаем:

$$V^{\text{магн.}} = \frac{e_0}{2c} (v [Hr]) = \frac{e_0}{2c} (H [rv]). \quad (16.10)$$

Сопоставляя формулу (16.10) с (16.9), мы видим, что магнитный момент вращающегося по окружности электрона определяется выражением:

$$\mu = -\frac{e_0}{2c} [rv]. \quad (16.11)$$

Учитывая, что его механический момент равен:

$$L = m_0 [rv],$$

находим простое соотношение между магнитным и механическим моментами при движении электрона по орбите:

$$\mu = -\frac{e_0}{2m_0 c} L. \quad (16.12)$$

Заметим, что эта же величина магнитного момента может быть найдена из других соображений. Как известно, магнитный момент замкнутого тока равен:

$$\mu = \frac{IS}{c} \mathbf{n}^0,$$

где \mathbf{n}^0 — единичный вектор нормали к плоскости контура с током. В последней формуле следует считать, что сила тока равна:

$$J = -\frac{e_0}{T} = -\frac{e_0 v}{2\pi r},$$

где $T = \frac{2\pi r}{v}$ — период вращения, а величина обтекаемой им площади:

$$S = \pi r^2.$$

Тогда для величины μ мы вновь получим выражение (16.11).

б. Эффект Зеемана в нерелятивистской теории Шредингера.

Чтобы записать волновое уравнение Шредингера для электрона, движущегося в магнитном поле, воспользуемся общим правилом перехода от классического гамильтониана к квантовому (см., например, § 5).

Для этого, написав классическое выражение для энергии движения электрона при наличии электростатического и магнитного полей, мы должны вместо импульса \mathbf{p} подставить оператор импульса \mathbf{p} .

Тогда уравнение Шредингера для электрона в поле центральных сил при наличии еще магнитного поля, характеризуемого вектор-потенциалом \mathbf{A} , принимает вид:

$$(E - H^{\text{III}}) \psi = 0, \quad (16.13)$$

где гамильтониан уравнения Шредингера:

$$H^{\text{III}} = e\Phi(r) + \frac{\mathbf{P}^2}{2m_0}, \quad (16.14)$$

а оператор $\mathbf{P} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$ носит название *оператора обобщенного импульса*. Для случая постоянного и однородного магнитного поля, направленного по оси z ($H_x = H_y = 0$, $H_z = \mathcal{H}$), мы можем написать:

$$A_x = -\frac{1}{2} y \mathcal{H}, \quad A_y = \frac{1}{2} x \mathcal{H}.$$

Принимая во внимание, что

$$(\mathbf{pA}) \psi = -i\hbar (\nabla \mathbf{A}) \psi + (\mathbf{Ap}) \psi,$$

причем

$$(\nabla \mathbf{A}) = \operatorname{div} \mathbf{A} = 0,$$

а также отбрасывая члены, пропорциональные квадрату напряженности магнитного поля \mathcal{H} , находим:

$$\left\{ E - e\Phi(r) - \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \frac{e}{m_0 c} (\mathbf{A}\mathbf{p}) \right\} \psi = 0. \quad (16.15)$$

Учитывая, что

$$\frac{e}{m_0 c} (\mathbf{A}\mathbf{p}) = \frac{e\mathcal{H}}{2m_0 c} L_z, \quad (16.16)$$

где

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

приводим уравнение Шредингера к виду:

$$\left\{ \nabla^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left[E + \frac{e\mathcal{H}}{2m_0 c} L_z - e\Phi(r) \right] \right\} \psi = 0. \quad (16.17)$$

Нетрудно убедиться в том, что этому уравнению удовлетворяет волновая функция для центрально-симметричного поля [см. (11.19) и (11.67)]:

$$\psi = R(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi). \quad (16.18)$$

В самом деле, подставляя это решение в (16.17) и принимая во внимание, что

$$L_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m,$$

получаем уравнение:

$$\left\{ \nabla^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E + \frac{e\mathcal{H}}{2m_0 c} \hbar m - e\Phi(r) \right) \right\} \psi = 0,$$

в котором учтено влияние магнитного поля на атом. Последнее уравнение можно представить в виде:

$$\begin{aligned} (E - H^{\text{III}}) \psi &= 0, \\ H^{\text{III}} &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} - e_0 \Phi(r) + \frac{e_0 \mathcal{H} \hbar}{2m_0 c} m, \end{aligned} \quad (16.19)$$

причем здесь учтено, что заряд электрона:

$$e = -e_0.$$

Последний член в выражении для гамильтониана можно объяснить наличием у атома орбитального магнитного момента, который дает дополнительную энергию:

$$E^{\text{магн.}} = -(\boldsymbol{\mu}\mathbf{H}) = -\mu_z \mathcal{H} = \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} m \mathcal{H}. \quad (16.20)$$

Поэтому для орбитального магнитного момента из теории Шредингера автоматически получаем выражение:

$$\mu_z = -\frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} m. \quad (16.21)$$

Принимая во внимание, что для проекции механического момента на ось z мы имели значение:

$$L_z = \hbar m,$$

находим соотношение между моментами, которое было установлено также на основе классических соображений [см. (16.12)]:

$$\frac{\mu_z}{L_z} = -\frac{e_0}{2m_0 c}. \quad (16.22)$$

Отсюда следует, что проекции орбитального магнитного момента кратны некоторому единичному магнитному моменту:

$$\begin{aligned} \mu_z &= -\mu_0 m, \\ \mu_0 &= \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} = 9,273 \cdot 10^{-21} \text{ эрг} \cdot \text{гаусс}^{-1}, \end{aligned} \quad (16.23)$$

получившему название *магнетона Бора*.

Магнитный момент электрона является одной из основных характеристик магнитных свойств атома. Как видно из формулы (16.20), для дополнительной энергии орбитального электрона, помещенного в магнитное поле, получаем выражение:

$$E^{\text{магн}} = \frac{e_0 \hbar \mathcal{H}}{2m_0 c} m = \circ \hbar m, \quad (16.24)$$

где \circ — частота ларморовой прецессии.

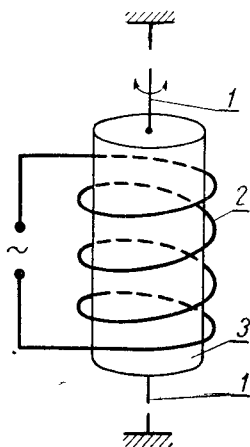
Учитывая правила отбора для магнитного квантового числа ($\Delta m = 0, \pm 1$), находим, что дополнительная частота излучения благодаря зеемановскому расщеплению по теории Шредингера будет такой же, как и по классической теории [см. (16.8)]:

$$\Delta \omega = \frac{\Delta E^{\text{магн.}}}{\hbar} = \circ \Delta m = 0, \pm \circ. \quad (16.25)$$

Как известно, нормальное¹⁾ зеемановское расщепление спектральных линий (триплеты и дублеты) встречается сравнительно

¹⁾ Заметим, что названия «нормальный» и «аномальный» эффекты Зеемана соответствуют исторической терминологии. Пока не был открыт спин электрона, была известна лишь классическая теория триплетного расщепления, которое получило название нормального эффекта Зеемана. Экспериментальное же открытие более сложного расщепления, которое в то время не находило теоретического объяснения (теория спина была еще неизвестна), получило название аномального эффекта Зеемана. В настоящее время оба эффекта Зеемана нашли свое теоретическое обоснование.

редко, а именно в следующих случаях: 1) в сильных полях (эффект Пашена — Бака), 2) когда общий спин электронов в атоме равняется нулю (например, в парагелии, у которого на внешней оболочке имеется два электрона с противоположно направленными спинами). В противном случае мы имеем более сложное расщепление (более чем на три линии), получившее название аномального эффекта Зеемана. Аномальный эффект Зеемана связан со спиновыми свойствами электронов. Его теория может быть построена только на основе теории Дирака, учитывающей спиновые эффекты (см. § 20).



Фиг. 16.1. Схема опытов Эйнштейна — де-Гааза по определению множителя Ланде g :

1 — кварцевая нить; 2 — катушка с током; 3 — ферромагнитный стержень.

в. Экспериментальное открытие спина электрона

Как было только что показано, теория Шредингера объясняет наличие лишь орбитальных механического и магнитного моментов, т. е. моментов, возникающих благодаря движению заряженного электрона в атоме. Основными формулами, которые характеризуют эти свойства, являются формула (16.22) для отношения орбитального магнитного и орбитального механического моментов и формула (16.24), указывающая на то, что число возможных ориентаций магнитного момента относительно оси z должно быть обязательно нечетным, так как число состояний с квантовыми числами m равняется $2l + 1$.

Экспериментальная проверка показала, что выводы теории Шредингера не укладываются в общую схему опытных данных, анализ которых привел к открытию спиновых свойств электрона. Остановимся кратко на результатах этих экспериментов.

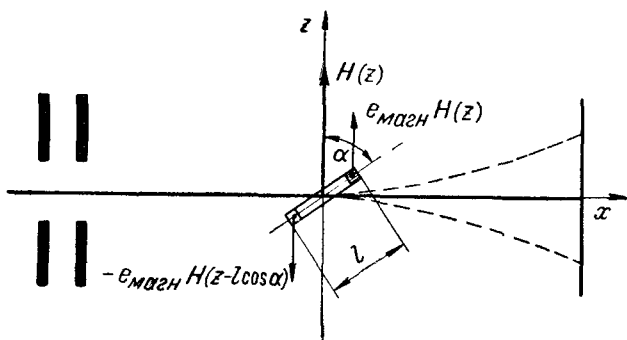
1. Прежде всего остановимся на опытах Эйнштейна — де-Гааза (1915) по экспериментальной проверке соотношения (16.22):

$$\frac{\mu_z}{L_z} = g \frac{e_0}{2m_0c},$$

где множитель Ланде g для орбитальных моментов должен равняться единице. Этот опыт заключается в следующем (см. фиг. 16.1). Ферромагнитный стержень подвешивается на кварцевой нити. При его намагничивании путем пропускания тока через катушку вместе с магнитным возникает также и механический

момент, величина которого может быть определена по закручиванию кварцевой нити.

Если этот образец перемагничивать при помощи переменного тока, то будет возникать переменный механический момент, что приведет ферромагнитный образец к крутильным колебаниям. Для усиления эффекта поворота использовалось еще явление резонанса. Экспериментальное измерение гиромагнитного отношения (16.22) показало, что знак этого отношения отрицательный, т. е. вполне однозначно можно было сделать вывод о том, что намагничение ферромагнитного образца обусловлено движением



Фиг. 16.2. Схема опытов Штерна и Герлаха по определению магнитных моментов одновалентных атомов.

электронов. Однако значение множителя Ланде g было найдено равным не единице, как этого требовала классическая теория или теория Шредингера, а двум ($g=2$). Это значение для g получило объяснение только после создания теории спина (см. ниже).

2. Штерн и Герлах (1921) в своих экспериментах (см. фиг. 16.2) изучали поведение пучка атомов в неоднородном магнитном поле, пытаясь проверить теоретическую формулу (16.23):

$$\mu_z = -\mu_0 m,$$

описывающую пространственное квантование. В этих классических опытах пучок одновалентных атомов (водорода, лития, серебра), движущихся по направлению оси x , встречал на своем пути магнитное поле, направленное по оси z , т. е. перпендикулярно к его движению ($H_x = H_y = 0$, $H_z = \mathcal{H}$). Это магнитное поле обладало большой неоднородностью, т. е. являлось сильно меняющимся. Тогда на магнитный диполь:

$$\mu = e_{\text{магн.}} I, \quad (16.26)$$

где $e_{\text{магн.}}$ — магнитный заряд, а l — длина магнитного диполя, будет действовать сила, направленная также по оси z ¹⁾:

$$\begin{aligned} F_z &= e_{\text{магн.}} \{ \mathcal{H}'(z) - \mathcal{H}'(z - l \cos \alpha) \} = \\ &= e_{\text{магн.}} l \cos \alpha \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial z} = \mu_z \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial z} = - \mu_0 \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial z} m. \end{aligned} \quad (16.27)$$

Рассчитаем в упрощенной схеме величину смещения, которое получит частица, находящаяся под действием силы F_z в течение времени t . Если частица движется со скоростью v перпендикулярно магнитному полю (т. е. оси z) и проходит при этом расстояние $L = vt$, то смещение по направлению оси z будет равно:

$$\delta z = \frac{1}{2} \omega t^2 = \frac{1}{2} \frac{L^2}{v^2} \frac{\mu_z}{M} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial z}. \quad (16.28)$$

При этом мы учли, что ускорение $\omega = \frac{F_z}{M}$, сила F_z определена формулой (16.27), а M — масса атома.

Отсюда следует, что пучок частиц, обладающих магнитным моментом μ , при прохождении через неоднородное магнитное поле должен претерпевать расщепление, причем число компонент определяется возможным числом проекций магнитного момента μ на направление поля.

В опытах Штерна и Герлаха изучалось расщепление пучка атомов в s -состоянии. Как известно, в s -состоянии механический, а следовательно, и магнитный момент атома равен нулю ($l = m = 0$), и поэтому никакого расщепления вообще не должно было быть. Если бы электрон находился в p -состоянии ($l = 1$), то тогда должно было бы наблюдаться тройное расщепление пучка, соответствующее трем возможным значениям магнитного квантового числа:

$$\delta z = 0 \quad (m = 0), \quad \delta z = \mp \frac{1}{2} \frac{L^2}{v^2} \frac{\mu_0}{M} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial z} \quad (m = \pm 1).$$

Однако опыты на водороде, литии, серебре и др. показали, что расщепление пучка происходит только на две компоненты. Тем самым было доказано, что атомы в s -состоянии обладают все же магнитным моментом, причем проекция этого момента на выделенное направление z принимает лишь два значения. Результаты измерений над величиной μ показали, что этот магнитный момент равен магнетону Бора:

$$\mu_0 = \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c}. \quad (16.29)$$

¹⁾ Заметим, что при определении движения центра тяжести магнитного диполя совершенно безразлично рассматривать его как жесткий диполь, или как круговой ток.

Чтобы согласовать результаты этих двух классических опытов, Уленбек и Гаудсмит выдвинули гипотезу, согласно которой электрон наряду с орбитальным моментом должен обладать еще собственным механическим, а следовательно, и магнитным моментом. Этот механический момент получил название *спина* электрона в связи с попыткой связать его с внутренними вращательными степенями свободы (классическая модель вращающегося волчка; по-английски «to spin» — вертеть). Следует сразу же подчеркнуть, что строгой классической теории спина не существует. Согласно гипотезе Уленбека и Гаудсмита, собственный механический момент электрона должен быть равен $\frac{1}{2}\hbar$, так что

$$\dot{S}_z = \pm \frac{1}{2} \hbar, \quad (16.30)$$

т. е. квантовое число, которое характеризует его проекцию на ось z , должно принимать не целые, а полуцелые значения ($m_s = \pm \frac{1}{2}$). Характерное отличие целых (например, орбитального магнитного m) от полуцелых (спинового m_s) квантовых чисел сводится прежде всего к числу возможных состояний. Целые числа всегда дают нечетное число состояний (при $l=0$ существует одно состояние $m=0$; при $l=1$ — три состояния $m=0, +1, -1$ и т. д.). Полуцелые же квантовые числа дают четное число состояний (например, при $s=\frac{1}{2}$ мы имеем два состояния: $m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$; при $s=\frac{3}{2}$ — четыре и т. д.).

Предположение о существовании полуцелых квантовых чисел было введено еще до гипотезы Уленбека и Гаудсмита для объяснения дублетного расщепления термов одновалентных атомов. Опыты Штерна и Герлаха показали два возможных внутренних состояния электрона в одновалентных атомах, т. е. доказали, что спин электрона следует характеризовать полуцелыми квантовыми числами, которые соответствуют его двум противоположным ориентациям. Поскольку из опытов Эйнштейна — де-Гааза следовало, что в формуле (16.29) множитель Ланде $g=2$, то, принимая во внимание значение для соответствующего механического момента (16.30), находим, что проекция собственного магнитного момента на ось z должна равняться магнетону Бора:

$$\mu_{sz} = -\frac{e_0}{m_0 c} S_z = \mp \mu_0. \quad (16.31)$$

После введения спина электрона не только магнитные свойства, но и мультиплетное расщепление спектральных линий атомов получили правильную интерпретацию.

г. Уравнение Паули

Нерелятивистское волновое уравнение, учитывающее собственный магнитный момент электрона, впервые было предложено Паули. С этой целью обычный гамильтониан уравнения Шредингера он дополнил членом, который учитывает еще взаимодействие магнитного момента электрона μ с внешним магнитным полем H :

$$V^{\text{П.}} = -(\mu H). \quad (16.32)$$

Тогда стационарное уравнение Шредингера принимает вид:

$$\{E - H^{\text{Ш.}} + (\mu H)\} \psi = 0, \quad (16.33)$$

где гамильтониан уравнения Шредингера:

$$H^{\text{Ш.}} = \frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\Phi. \quad (16.34)$$

Далее необходимо было найти соответствующие величины для описания собственного магнитного момента электрона. Как известно, введение спина связано с введением четвертого квантового числа, которое должно характеризовать внутренние свойства электрона.

Волновая функция ψ частицы может зависеть только от трех квантовых чисел, соответствующих квантованию трех пространственных координат.

Для описания спина и введения четвертого квантового числа Паули вводит вместо одной волновой функции ψ две волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 . В этом случае одна волновая функция будет описывать состояние с одним направлением спина, а другая — с противоположным; само же волновое уравнение должно представлять собой систему двух уравнений.

Как известно, система двух и более уравнений, например:

$$\begin{aligned} a_{11}\Psi_1 + a_{12}\Psi_2 &= 0, \\ a_{21}\Psi_1 + a_{22}\Psi_2 &= 0, \end{aligned} \quad (16.35)$$

может быть представлена одним уравнением в матричной записи:

$$(a)(\Psi) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = 0, \quad (16.35a)$$

если учитывать при этом закон умножения матриц $(c) = (a)(b)$: элементы матрицы-произведения равны сумме произведений элементов строк первой матрицы на соответствующие элементы столбцов второй матрицы, т. е.

$$c_{ik} = \sum_n a_{in} b_{nk}. \quad (16.36)$$

Паули предложил выбрать волновую функцию Ψ в виде матрицы с одним столбцом $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$, а собственный магнитный момент электрона положить равным:

$$\mu = -\mu_0 \sigma', \quad (16.37)$$

где μ_0 — магнетон Бора, σ' — три двухрядных матрицы Паули:

$$\sigma'_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma'_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma'_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (16.38)$$

которые мы будем обозначать буквой σ со штрихом (той же буквой без штриха будем обозначать четырехрядные матрицы Дирака). Эти матрицы характеризуют проекции вектора спина на оси координат.

Используя правила умножения матриц (16.36), легко показать, что матрицы Паули обладают следующими свойствами.

Квадрат каждой матрицы равен единице:

$$\sigma_1'^2 = \sigma_2'^2 = \sigma_3'^2 = I', \quad (16.39)$$

где через I' обозначена двухрядная единичная матрица $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Различные матрицы антикоммутируют друг с другом, причем

$$\begin{aligned} \sigma'_1 \sigma'_2 &= -\sigma'_2 \sigma'_1 = i \sigma'_3, \\ \sigma'_2 \sigma'_3 &= -\sigma'_3 \sigma'_2 = i \sigma'_1, \\ \sigma'_3 \sigma'_1 &= -\sigma'_1 \sigma'_3 = i \sigma'_2. \end{aligned} \quad (16.40)$$

Учитывая значения матриц, нерелятивистское уравнение Паули можно представить в виде:

$$\left\{ (E - H^{\text{III}}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \mu_0 \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} H_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} H_y + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} H_z \right] \right\} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (16.41)$$

Это матричное уравнение эквивалентно системе двух обычных уравнений, каждое из которых соответствует одной из строк матрицы:

$$\begin{aligned} (E - H^{\text{III}} - \mu_0 H_z) \Psi_1 - \mu_0 (H_x - i H_y) \Psi_2 &= 0, \\ (E - H^{\text{III}} + \mu_0 H_z) \Psi_2 - \mu_0 (H_x + i H_y) \Psi_1 &= 0. \end{aligned} \quad (16.42)$$

В частности, рассмотрим случай движения электрона в магнитном поле, направленном по оси z ($H_x = H_y = 0$, $H_z = \mathcal{H}$). Учитывая при этом гамильтониан уравнения Шредингера при нали-

чи магнитного поля (16.19), находим для описания движения электрона два уравнения:

$$\begin{aligned} \left\{ E + e_0\Phi - \mu_0\mathcal{H}m - \mu_0\mathcal{H} - \frac{p^2}{2m_0} \right\} \Psi_1 &= 0, \\ \left\{ E + e_0\Phi - \mu_0\mathcal{H}m + \mu_0\mathcal{H} - \frac{p^2}{2m_0} \right\} \Psi_2 &= 0, \end{aligned} \quad (16.43)$$

где энергии $\mu_0\mathcal{H}m$ и $\pm\mu_0\mathcal{H}$ характеризуют соответственно взаимодействие орбитального и спинного моментов с магнитным полем \mathcal{H} . В частности, для s -состояний магнитное квантовое число m равно нулю, и поэтому уравнение Паули принимает вид:

$$\begin{aligned} \left(E + e_0\Phi - \mu_0\mathcal{H} - \frac{p^2}{2m_0} \right) \Psi_1 &= 0, \\ \left(E + e_0\Phi + \mu_0\mathcal{H} - \frac{p^2}{2m_0} \right) \Psi_2 &= 0, \end{aligned} \quad (16.44)$$

т. е. волновая функция Ψ_1 описывает состояние, когда собственный механический момент электрона (т. е. спин) направлен по оси z , а волновая функция Ψ_2 — против оси z . Эти две возможные ориентации собственного магнитного момента, направленного антипараллельно механическому, и наблюдались в опытах Штерна и Герлаха.

В качестве функции Ψ^+ Паули предложил выбрать так называемую эрмитово-сопряженную волновую функцию — матрицу $\Psi^+ = (\Psi_1^* \Psi_2^*)$, элементы которой не только комплексно-сопряжены, но и транспонированы, т. е. строки заменены столбцами. Иначе говоря, если Ψ есть матрица-столбец, то Ψ^+ будет матрицей-строкой с комплексно-сопряженными элементами. Тогда для плотности вероятности будем иметь выражение:

$$\Psi^+\Psi = (\Psi_1^* \Psi_2^*) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \Psi_1^*\Psi_1 + \Psi_2^*\Psi_2, \quad (16.45)$$

в котором учтена возможность двух направлений спина.

Аналогичным образом должны образовываться и другие матричные элементы. Например,

$$\begin{aligned} \Psi^+\sigma_3\Psi &= (\Psi_1^* \Psi_2^*) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = (\Psi_1^* \Psi_2^*) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ -\Psi_2 \end{pmatrix} = \\ &= \Psi_1^*\Psi_1 - \Psi_2^*\Psi_2, \end{aligned} \quad (16.46)$$

т. е. $\Psi_1^*\Psi_1$ и $\Psi_2^*\Psi_2$ характеризуют плотности вероятности состояний, в которых электрон имеет ориентацию спина соответственно по и против оси z . Зная выражение для собственного магнитного момента в теории Паули:

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e_0\hbar}{2m_0c} \boldsymbol{\sigma},$$

а также соотношение между собственным магнитным и механическим моментами, которое следует из экспериментов Эйнштейна — де-Гааза:

$$\mu = -\frac{e_0}{m_0 c} S,$$

находим, что

$$S = \frac{1}{2} \hbar \sigma', \quad (16.47)$$

т. е., в согласии с другими опытными фактами, проекция механического момента на ось z равна $\pm 1/2$.

Поскольку оператор спина выражается через матрицы σ' , составляющие спина, так же как и составляющие орбитального момента, которые являются операторами, зависящими от производных [см. (11.75) и (11.76)], не будут коммутировать между собой и будут удовлетворять аналогичным перестановочным соотношениям, которые легко установить на основе равенств (16.40) и (16.47):

$$\begin{aligned} S_x S_y - S_y S_x &= i \hbar S_z, \\ S_y S_z - S_z S_y &= i \hbar S_x, \\ S_z S_x - S_x S_z &= i \hbar S_y. \end{aligned} \quad (16.48)$$

Таким образом, как теория Клейна — Гордона, учитывающая только релятивистские эффекты, так и теория Паули, где, наоборот, не учитываются релятивистские, а учитываются только спиновые эффекты, явились предшественницами более строгой теории электрона — теории Дирака, из которой все основные свойства электрона следуют автоматически. Заметим, кстати, что в теории Паули абсолютное значение собственного магнитного момента вводилось эмпирически.

Задача 16.1. Показать, что в нерелятивистской квантовой механике, так же как и в классической теории, эффект Зеемана обусловлен прецессионным движением орбиты в магнитном поле с частотой, равной частоте Лармора.

Решение. Учитывая выражение для гамильтониана уравнения Шредингера в случае электрона, движущегося в магнитном поле, направленном по оси z :

$$H = \frac{p^2}{2m} + oL_z,$$

находим производную по времени:

$$\frac{dL_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} (HL_x - L_x H) = -oL_y, \quad \frac{dL_y}{dt} = oL_x, \quad \frac{dL_z}{dt} = 0.$$

Здесь o — ларморова частота. Отсюда следует, что проекция момента количества движения на направление поля (ось z) является интегралом движения. Проекция же на оси x и y прецессируют вокруг оси z с частотой o .

Задача 16.2. Показать, что оператор спина \mathbf{S} обладает векторным характером, т. е. если составить линейную комбинацию:

$$\begin{aligned} S'_x &= \alpha_1 S_x + \beta_1 S_y + \gamma_1 S_z, & S'_y &= \alpha_2 S_x + \beta_2 S_y + \gamma_2 S_z, \\ S'_z &= \alpha_3 S_x + \beta_3 S_y + \gamma_3 S_z, \end{aligned}$$

где α, β, γ — направляющие косинусы углов, то

$$S'_x S'_y - S'_y S'_x = i\hbar S'_z \text{ и т. д.}$$

Задача 16.3. Показать, что в однородном магнитном поле, переменном лишь во времени, волновая функция уравнения Паули распадается на произведение координатной и спиновой функций. Какой вид примет это решение, если поле не будет зависеть от времени?

Решение. Решение уравнения Паули следует искать в виде:

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \psi(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix}.$$

Тогда легко показать, что «координатная» часть волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ удовлетворяет обычному уравнению Шредингера, не учитывающему спин:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \text{HШ} \cdot \psi(\mathbf{r}, t),$$

а спиновая часть волновой функции может быть найдена из уравнения:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} = \mu_0 (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{H}) \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix}.$$

Нормировка спиновой части волновой функции будет:

$$(C_1^* C_2^*) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = C_1^* C_1 + C_2^* C_2 = 1.$$

В случае постоянного во времени магнитного поля в последних уравнениях легко определить еще временную часть. Для этого следует положить:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} &= e^{-i \frac{E_s}{\hbar} t} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}, \\ \psi(\mathbf{r}, t) &= e^{-\frac{i}{\hbar} (E - E_s) t} \psi(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Тогда для определения независимых от времени частей волновой функции, а также энергии E_s , имеем:

$$\begin{aligned} (E - E_s) \psi &= \text{HШ} \cdot \psi, \\ E_s \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} &= \mu_0 (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{H}) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Задача 16.4. Найти собственные значения оператора проекции спинового момента на направление, характеризуемое сферическими углами θ и φ . Исследовать частные случаи, когда этими направлениями являются соответственно оси x, y, z .

Решение. Рассмотрим прежде всего случай, когда спин направлен по оси z . Тогда исходное уравнение принимает вид:

$$S_z \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \hbar \lambda \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix},$$

где

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Это матричное уравнение эквивалентно двум однородным алгебраическим уравнениям:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} C_1 - \lambda C_1 &= 0, \\ \frac{1}{2} C_2 + \lambda C_2 &= 0. \end{aligned}$$

Нормированные решения этих уравнений имеют вид:

$$\lambda = \frac{1}{2}, \quad C_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \lambda = -\frac{1}{2}, \quad C_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Первое, очевидно, соответствует случаю, когда спин направлен по оси z , второе — случаю, когда спин направлен против оси z .

Оператор проекции спина на направление, образующее с осями координат сферические углы ϑ и φ , будет равен:

$$S = \sin \vartheta \cos \varphi S_x + \sin \vartheta \sin \varphi S_y + \cos \vartheta S_z,$$

где

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Отсюда из уравнения:

$$S \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = h\lambda \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix},$$

как и в предыдущем случае, находим два решения:

а) решение, соответствующее случаю, когда спин параллелен этому направлению:

$$\lambda = \frac{1}{2}, \quad C_{1/2} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

и

б) решение, соответствующее случаю, когда спин антипараллелен этому направлению:

$$\lambda = -\frac{1}{2}, \quad C_{-1/2} = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\vartheta}{2} \\ \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}.$$

Полагая $\vartheta = 0$, $\varphi = 0$, получаем предыдущее решение.

Случаи, когда спин направлен по оси x или y , могут быть получены, если соответственно положим:

$$\vartheta = \frac{\pi}{2}, \quad \varphi = 0 \quad \text{или} \quad \vartheta = \frac{\pi}{2}, \quad \varphi = \frac{\pi}{2}.$$

Задача 16.5. Спин электрона направлен параллельно оси z . Найти вероятность того, что проекции спина а) на направление, параллельное оси x , и б) на направление, составляющее с осью z угол ϑ , будут иметь значения $\frac{1}{2}\hbar$ и $-\frac{1}{2}\hbar$.

Указание. Взять волновую функцию, описывающую состояние, в котором спин направлен по оси z , и затем разложить ее по функциям, соответствующим случаям, когда спин параллелен и антипараллелен направлению, составляющему с осью z угол ϑ . Обе эти функции приведены в задаче 16.4. Без ограничения общности можно положить угол $\varphi = 0$.

Тогда коэффициенты разложения (квадрат модуля) дадут вероятности:

$$w_{1/2} = \cos^2 \frac{\vartheta}{2}, \quad w_{-1/2} = \sin^2 \frac{\vartheta}{2}$$

проекций спина на соответствующие направления, равных соответственно:

$$\pm \frac{1}{2} \hbar.$$

Если мы будем проецировать спин на направление оси x , то в последних формулах следует положить $\vartheta = \frac{\pi}{2}$.

§ 17. РЕЛЯТИВИСТСКОЕ ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ ДИРАКА ¹⁾

а. «Линеаризация» оператора энергии. Матрицы Дирака, их связь с матрицами Паули

Как было указано в § 15, в основе построения квантовой релятивистской механики лежит известное релятивистское соотношение между энергией E , импульсом \mathbf{p} и массой покоя частицы m_0 :

$$E = c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}. \quad (17.1)$$

Для получения волнового уравнения, описывающего свободную частицу, в этом соотношении необходимо перейти к операторам:

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla, \quad (17.2)$$

и подействовать ими на волновую функцию. Однако непосредственный переход к операторам в (17.1) невозможен, поскольку нельзя определить действие операторов дифференцирования, стоящих под знаком радикала. Поэтому прежде всего необходимо освободиться от квадратного корня в соотношении (17.1).

¹⁾ См., например, П. А. М. Дирак, Принципы квантовой механики, М., 1960; Л. де-Бройль, Магнитный электрон (Теория Дирака), Харьков, 1936.

Для этой цели можно возвести (17.1) в квадрат; тогда (см. § 15) мы придем к релятивистскому волновому уравнению Клейна — Гордона с однокомпонентной волновой функцией¹⁾.

Как мы уже отмечали, это уравнение описывает движение бесспиновых частиц и не применимо к электронам, спин которых равен $1/2$ (в единицах \hbar).

Другой путь получения линейного релятивистского волнового уравнения и притом первого порядка избрал Дирак (1928). Он предложил произвести «линеаризацию» соотношения (17.1). Это привело его к открытию релятивистского волнового уравнения для электрона, играющего фундаментальную роль в релятивистской квантовой механике и в квантовой теории поля, поскольку оно оказалось пригодным для описания движения частиц со спином $1/2$ (в единицах \hbar). Следует заметить, что после уравнений классической электродинамики Максвелла — Лоренца следующий важный этап развития учения об электроне связан с уравнением Дирака. Полуклассическая теория Бора и нерелятивистская квантовая механика явились лишь как бы промежуточными теориями.

Для линеаризации релятивистского соотношения между энергией и импульсом или «извлечения» квадратного корня из четырехчлена с помощью матриц представим (17.1) в следующем виде:

$$E = c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} = c \sum_{\mu=0}^3 \alpha_{\mu} p_{\mu}, \quad (17.3)$$

где

$$p_0 = m_0 c, \quad p_1 = p_x, \quad p_2 = p_y, \quad p_3 = p_z. \quad (17.4)$$

При этом легко заметить, что

$$E^2 = c^2 \sum_{\mu=0}^3 p_{\mu} p_{\mu} = c^2 (p^2 + m_0^2 c^2). \quad (17.5)$$

Чтобы установить, каким условиям должны удовлетворять величины α_{μ} , возведем обе части соотношения (17.3) в квадрат.

1) Точнее, в этом случае мы будем иметь фактически двухкомпонентную функцию с составляющими $\psi_1 = \psi$ и $\psi_2 = \frac{\partial \psi}{\partial t}$, поскольку в основное уравнение входит вторая производная по времени. Одна степень свободы соответствует частицам с положительной энергией, другая — с отрицательной. Как было показано в работе Паули и Вайскопфа, чтобы исключить состояния частиц с отрицательной энергией, необходимо произвести вторичное квантование скалярного уравнения и наряду с бесспиновыми частицами одного знака заряда ввести бесспиновые частицы, обладающие противоположным зарядом. (Более подробно см. А. А. Соколов, Введение в квантовую электродинамику, § 10, 11.)

Тогда в случае, если операторы ρ_μ и $\rho_{\mu'}$ коммутируют друг с другом ¹⁾, имеем:

$$E^2 = c^2 \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \rho_\mu \rho_{\mu'} \alpha_\mu \alpha_{\mu'} = \frac{c^2}{2} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \rho_\mu \rho_{\mu'} (\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu). \quad (17.6)$$

Последнее равенство совпадает с (17.5) только в том случае, если:

$$\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu = 2\delta_{\mu\mu'}, \quad (17.7)$$

т. е. если все четыре величины α_μ антикоммутируют друг с другом:

$$\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu = 0 \quad \mu \neq \mu' \quad (17.8)$$

и квадрат каждой из них равен единице:

$$\alpha_\mu^2 = 1. \quad (17.9)$$

Напомним, что аналогичными свойствами обладают также двухрядные матрицы Паули (§ 16):

$$\sigma'_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma'_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma'_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (17.10)$$

а именно все они антикоммутируют между собой [см. формулу (16.40)] и квадрат каждой равен единице [см. формулу (16.39)]. Однако для «извлечения» квадратного корня из четырехчлена необходимо иметь четыре соотношения (17.7) ($\mu = 0, 1, 2, 3$), а не три (16.39) и (16.40), которым удовлетворяют матрицы Паули.

В связи с этим Дирак предложил взять совокупность четырехрядных матриц σ_n и ρ_n , связанных с двухрядными матрицами при помощи соотношений:

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} \sigma'_n & 0' \\ 0' & \sigma'_n \end{pmatrix} \quad (n = 1, 2, 3), \quad (17.11)$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0' & I' \\ I' & 0' \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0' & -iI' \\ iI' & 0' \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix}, \quad (17.12)$$

где σ'_n — матрицы Паули,

$$0' = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad I' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

¹⁾ Эти операторы будут коммутировать друг с другом, когда отсутствует электромагнитное поле. Таким образом, Дирак предложил сначала извлечь квадратный корень из оператора для свободной частицы, а затем уже обобщить полученное уравнение на случай наличия полей.

Отсюда находим:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

и т. д. Свойства этих матриц аналогичны свойствам матриц Паули, что можно легко проверить непосредственным умножением, в частности, оказывается, что квадраты их равны единице:

$$\sigma_n^2 = \rho_n^2 = I, \quad (17.13)$$

точнее, равняются четырехрядной единичной матрице:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (17.14)$$

Как и в случае матриц Паули, имеем:

$$\begin{aligned} \sigma_1 \sigma_2 &= -\sigma_2 \sigma_1 = i \sigma_3, & \rho_1 \rho_2 &= -\rho_2 \rho_1 = i \rho_3 \text{ и т. д.} \\ \sigma_n \rho_{n'} &= \rho_n \sigma_n & (n, n' &= 1, 2, 3). \end{aligned} \quad (17.15)$$

Отсюда следует, что различные матрицы σ антикоммутируют между собой (аналогичное заключение относится также к системе матриц ρ):

$$\sigma_n \sigma_{n'} + \sigma_n \sigma_n = \rho_n \rho_{n'} + \rho_n \rho_n = 2\delta_{nn'}. \quad (17.16)$$

Матрицы же σ_n и $\rho_{n'}$ коммутируют друг с другом.

Дирак предложил в качестве матриц α_n , которые были введены при линеаризации релятивистского выражения для полной энергии, выбрать следующие:

$$\alpha_n = \rho_1 \sigma_n = \begin{pmatrix} 0' & \sigma_n' \\ \sigma_n' & 0' \end{pmatrix} \quad (n = 1, 2, 3), \quad (17.17)$$

$$\alpha_0 = \rho_3 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix}. \quad (17.18)$$

В обычной форме записи эти четырехрядные матрицы имеют вид:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \alpha_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \alpha_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \alpha_0 &= \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (17.19)$$

Отсюда, умножая матрицы друг на друга, легко показать, что они удовлетворяют соотношениям (17.7), т. е.

$$\alpha_1^2 = 1, \alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2 = 0 \text{ и т. д.}$$

б. Уравнение Дирака. Плотность заряда и тока

Переходя к операторам в линеаризованном с помощью матриц α_μ релятивистском соотношении между энергией и импульсом (17.3), мы получаем уравнение Дирака для свободной частицы¹⁾.

$$(E - H)\psi = 0, \quad (17.20)$$

где операторы E и \mathbf{p} , как и обычно, равны:

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla,$$

а гамильтониан H определяется выражением:

$$H = c(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}) + \rho_3 m_0 c^2. \quad (17.21)$$

При движении электрона в электромагнитном поле, заданном векторным и скалярным (\mathbf{A}, Φ) потенциалами, мы можем пользоваться теми же уравнениями (17.20) и (17.21), только в соответствии с общими правилами волновой механики в качестве операторов энергии и импульса должны быть взяты их обобщенные значения:

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi, \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}. \quad (17.22)$$

Поэтому волновое уравнение Дирака при наличии электромагнитного поля может быть записано в виде:

$$(F - c(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{P}) - \rho_3 m_0 c^2)\psi = 0. \quad (17.23)$$

¹⁾ Наличие четырех компонент волновой функции ψ означает, что каждое состояние может иметь два знака энергии (положительное и отрицательное; см ниже) и два направления спина (более подробно см. § 18).

В классическом случае соотношение между энергией и импульсом (17.1) может быть представлено в виде, похожем на формулу (17.20):

$$E - (\mathbf{v}\mathbf{p}) - \sqrt{1 - \beta^2} m_0 c^2 = 0.$$

Это равенство легко проверить, если принять во внимание, что для свободной частицы

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad \text{и} \quad \mathbf{p} = \frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1 - \beta^2}}.$$

Отсюда следует, что матрица $\boldsymbol{\alpha} \rightarrow \frac{\mathbf{v}}{c}$ должна играть роль скорости, а $\rho_3 \rightarrow \sqrt{1 - \beta^2}$ — некоторого скаляра, характеризующего лоренцево сокращение.

В соответствии с числом строк и столбцов матриц α и ρ_1 волновая функция ψ должна иметь четыре компоненты, которые мы объединим в виде матрицы, состоящей из одного столбца:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}, \quad (17.24)$$

понимая под сопряженной функцией эрмитово-сопряженную матрицу, состоящую из одной строки:

$$\psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*). \quad (17.25)$$

Таким образом, матричное волновое уравнение Дирака (17.23) эквивалентно системе четырех уравнений:

$$\begin{aligned} (F - m_0 c^2) \psi_1 - c(P_x - iP_y) \psi_4 - cP_z \psi_3 &= 0, \\ (F - m_0 c^2) \psi_2 - c(P_x + iP_y) \psi_3 + cP_z \psi_4 &= 0, \\ (F + m_0 c^2) \psi_3 - c(P_x - iP_y) \psi_2 - cP_z \psi_1 &= 0, \\ (F + m_0 c^2) \psi_4 - c(P_x + iP_y) \psi_1 + cP_z \psi_2 &= 0. \end{aligned} \quad (17.26)$$

Комплексно-сопряженное волновое уравнение также может быть представлено в виде одного матричного уравнения:

$$\psi^+ (F - c(\alpha \mathbf{P}) - \rho_3 m_0 c^2) = 0, \quad (17.27)$$

в котором действие операторов $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ и $-i\hbar \nabla$ на волновую функцию, стоящую слева от них, следует понимать в таком же смысле, как и в уравнении (17.20), но только с обратным знаком, т. е.

$$- \psi^+ i\hbar \nabla = i\hbar \nabla \psi^+; \quad \psi^+ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^+. \quad (17.28)$$

Таким образом, уравнения (17.23) и (17.27) могут быть записаны в виде:

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi) \psi - c \left(\alpha \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) \psi - \rho_3 m_0 c^2 \psi = 0, \quad (17.29)$$

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) \psi - c \left(\left(i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi^+ \alpha \right) - m_0 c^2 \psi^+ \rho_3 = 0. \quad (17.30)$$

Умножая уравнение (17.29) слева на ψ^+ , а (17.30) справа на ψ и вычитая второе уравнение из первого, получаем соотношение:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi^+ \psi + \operatorname{div} \psi^+ \alpha \psi = 0, \quad (17.31)$$

которое можно интерпретировать как уравнение непрерывности для плотности вероятности ρ и плотности тока \mathbf{j} :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0,$$

$$\text{где} \quad \rho = e\psi^+\psi, \quad \mathbf{j} = ec\psi^+\boldsymbol{\alpha}\psi. \quad (17.32)$$

Если в последнем равенстве от матричного представления перейти к компонентам волновых функций, то его следует понимать следующим образом:

$$\rho_0 = \frac{\rho}{e} = \psi^+\psi = (\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 + \psi_3^*\psi_3 + \psi_4^*\psi_4, \quad (17.33)$$

т. е. ρ_0 является матрицей, состоящей из одного элемента, и поэтому представляет собой обычную функцию.

Точно так же легко показать, что

$$\begin{aligned} j_x/ec &= \psi^+\alpha_x\psi = (\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = (\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*) \begin{pmatrix} \psi_4 \\ \psi_3 \\ \psi_2 \\ \psi_1 \end{pmatrix} = \\ &= \psi_1^*\psi_4 + \psi_2^*\psi_3 + \psi_3^*\psi_2 + \psi_4^*\psi_1. \end{aligned} \quad (17.33a)$$

Заметим, что в отличие от уравнения Клейна—Гордона плотность ρ_0 будет положительно определенной величиной. Однако это не означает, что в теории Дирака ρ_0 следует рассматривать как плотность числа частиц. Так же как и в теории Клейна—Гордона, в теории Дирака наряду с электронами должны существовать частицы противоположного заряда — позитроны¹⁾. Из формулы (17.32) можно еще раз заключить, что величину $c\boldsymbol{\alpha}$ следует рассматривать как оператор скорости.

в. Трансформационные свойства волновой функции при преобразованиях Лоренца и пространственных вращениях

Согласно общим принципам специальной теории относительности, физические законы не должны зависеть от выбора лоренцевой системы координат. Поэтому как уравнение Максвелла, так и уравнение Клейна—Гордона и уравнение Дирака должны быть инвариантными относительно преобразований Лоренца.

Исследуем трансформационные свойства волновой функции Дирака. С этой целью прежде всего запишем преобразования Лоренца:

$$ct' = ct \operatorname{ch} \gamma - x \operatorname{sh} \gamma, \quad x' = x \operatorname{ch} \gamma - ct \operatorname{sh} \gamma, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad (17.34)$$

¹⁾ При вторичном квантовании, если ρ_0 является положительно определенной величиной, то это означает лишь, что к частицам следует применить статистику Ферми (например, в случае уравнения Дирака), если ρ_0 может принимать как положительные, так и отрицательные значения (например, в случае уравнения Клейна—Гордона), то — статистику Бозе.

где

$$\operatorname{ch} \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \operatorname{sh} \gamma = \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}.$$

Этому же преобразованию должен удовлетворять любой четырехмерный вектор и, в частности, плотность заряда и тока:

$$c\rho' = c\rho \operatorname{ch} \gamma - j_x \operatorname{sh} \gamma, \quad j'_x = j_x \operatorname{ch} \gamma - c\rho \operatorname{sh} \gamma, \quad j'_{y,z} = j_{y,z}. \quad (17.35)$$

Исходя из определения этих величин, по теории Дирака будем иметь:

$$\begin{aligned} \psi'^+ \psi' &= \psi^+ (\operatorname{ch} \gamma - \alpha_1 \operatorname{sh} \gamma) \psi = \psi^+ e^{-\gamma \alpha_1} \psi, \\ \psi'^+ \alpha_1 \psi' &= \psi^+ (\alpha_1 \operatorname{ch} \gamma - \operatorname{sh} \gamma) \psi = \psi^+ \alpha_1 e^{-\gamma \alpha_1} \psi, \\ \psi'^+ \alpha_{2,3} \psi' &= \psi^+ \alpha_{2,3} \psi. \end{aligned} \quad (17.36)$$

Здесь мы приняли во внимание, что $e^{\gamma \alpha_1} = \operatorname{ch} \gamma \alpha_1 + \operatorname{sh} \gamma \alpha_1 = \operatorname{ch} \gamma - \alpha_1 \operatorname{sh} \gamma$, поскольку $\alpha_1^{2n} = 1$, $\alpha_1^{2n+1} = \alpha_1$, где n — целое число.

Чтобы удовлетворить последним соотношениям, мы должны положить:

$$\psi' = \left(\operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} - \alpha_1 \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2} \right) \psi = e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} \psi, \quad (17.37)$$

$$\psi'^+ = \psi^+ \left(\operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} - \alpha_1 \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2} \right) = \psi^+ e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1}.$$

Тогда, принимая во внимание, что

$$\alpha_1 e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} = e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} \alpha_1, \quad \alpha_2 e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} = e^{\frac{\gamma}{2} \alpha_1} \alpha_2, \quad (17.38)$$

легко показать справедливость соотношений (17.36). Из (17.37) видно, что волновые функции преобразуются не как вектор (целые углы γ) и не как тензор (двойные углы γ), а как полу-вектор, преобразование которого характеризуется углом $\frac{\gamma}{2}$. Величины, преобразующиеся по закону (17.37), получили название *спиноров*, или *тензоров половинного ранга*.

Аналогичным способом можно показать, что при обычном пространственном вращении (например, вокруг оси z на угол φ) спинор преобразуется по закону:

$$\psi' = e^{i\varphi \frac{\sigma_z}{2}} \psi, \quad \psi'^+ = \psi^+ e^{-i\varphi \frac{\sigma_z}{2}}. \quad (17.39)$$

Последние соотношения следуют из преобразований для вектора тока:

$$\begin{aligned} j'_x &= j_x \cos \varphi + j_y \sin \varphi, \\ j'_y &= j_y \cos \varphi - j_x \sin \varphi, \\ j'_z &= j_z, \end{aligned} \quad (17.40)$$

которые в теории Дирака могут быть представлены в виде:

$$\begin{aligned}\psi'^+ \alpha_1 \psi' &= \psi^+ (\alpha_1 \cos \varphi + \alpha_2 \sin \varphi) \psi, \\ \psi'^+ \alpha_3 \psi' &= \psi^+ \alpha_3 \psi \text{ и т. д.}\end{aligned}\quad (17.41)$$

Подставляя сюда значения для ψ' из (17.39) и принимая во внимание, что

$$\begin{aligned}\alpha_1 e^{i\tau_3 \frac{\varphi}{2}} &= \alpha_1 \left(\cos \frac{\varphi}{2} + i\tau_3 \sin \frac{\varphi}{2} \right) = \left(\cos \frac{\varphi}{2} - i\tau_3 \sin \frac{\varphi}{2} \right) \alpha_1 = \\ &= e^{-i\tau_3 \frac{\varphi}{2}} \alpha_1, \quad \alpha_3 e^{i\tau_3 \frac{\varphi}{2}} = e^{i\tau_3 \frac{\varphi}{2}} \alpha_3,\end{aligned}$$

приходим к соотношениям (17.40).

§ 18. ДИРАКОВСКАЯ ТЕОРИЯ ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА В ПОЛЕ ЦЕНТРАЛЬНЫХ СИЛ

а. Орбитальный, спиновый и полный моменты количества движения. Законы сохранения

Для определения механического момента электрона мы воспользуемся законами сохранения, рассматривая движение электрона в поле центральных сил:

$$V = e\Phi(r) \quad (18.1)$$

(например, при движении электрона в кулоновском поле ядра $V = -\frac{Ze_0^2}{r}$). Как было показано в нерелятивистской теории Шредингера, в таком силовом поле сохраняется орбитальный момент количества движения:

$$L = [rp]. \quad (18.2)$$

Однако в теории Дирака, где учитывается также и спин электрона, проекция орбитального момента количества движения не коммутирует с гамильтонианом:

$$H = c(\alpha p) + \rho_3 m_0 c^2 + V(r), \quad (18.3)$$

или

$$H = c\alpha_1 p_x + c\alpha_2 p_y + c\alpha_3 p_z + \rho_3 m_0 c^2 + V(r), \quad (18.3a)$$

и поэтому не является интегралом движения. В самом деле, с составляющей $L_z = (y p_x - x p_y)$ не будут коммутировать два первых члена гамильтониана (18.3a):

$$HL_z - L_z H = c\alpha_1 p_y (p_x x - x p_x) - c\alpha_2 p_x (p_y y - y p_y).$$

Принимая во внимание, что

$$(p_x x - x p_x) = (p_y y - y p_y) = \frac{\hbar}{i},$$

находим:

$$\mathbf{H}L_z - L_z\mathbf{H} = \frac{c\hbar}{i}(\alpha_1 p_y - \alpha_2 p_x) \neq 0. \quad (18.4)$$

Чтобы обобщить закон сохранения момента на частицы, обладающие спином, воспользуемся еще соотношением:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\sigma_3 - \sigma_3\mathbf{H} &= c p_x \rho_1 (\sigma_1 \sigma_3 - \sigma_3 \sigma_1) + \\ &+ c p_y \rho_1 (\sigma_2 \sigma_3 - \sigma_3 \sigma_2) = \frac{2c}{i}(\alpha_2 p_x - \alpha_1 p_y). \end{aligned} \quad (18.5)$$

Отсюда следует, что любая составляющая оператора (например, по оси z):

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (18.6)$$

коммутирует с оператором Гамильтона \mathbf{H} и, следовательно, является интегралом движения¹⁾.

Этот результат можно интерпретировать следующим образом. Электрон обладает собственным механическим моментом количества движения (спином). При этом сохраняется лишь полный момент (орбитальный плюс спиновый). Для s -состояний орбитальный момент равен нулю; в этом случае мы будем иметь закон сохранения спина, причем для квадрата спина получаем:

$$S^2 = \frac{1}{4} \hbar^2 (\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2) = s(s+1) \hbar^2 = \frac{3}{4} \hbar^2, \quad (18.7)$$

т. е. спин электрона принимает полуцелые значения $s = \frac{1}{2}$ (в единицах \hbar).

б. Свойства оператора полного момента. Квантование полного момента. Векторная модель

Покажем теперь, что операторы проекций полного момента количества движения в теории Дирака подчиняются тем же перестановочным соотношениям, что и компоненты орбитального момента в нерелятивистской квантовой теории (см. § 11). Замечая, что операторы \mathbf{L} и \mathbf{S} коммутируют друг с другом, так как действуют на разные переменные, находим, в частности:

$$\begin{aligned} J_x J_y - J_y J_x &= (L_x + S_x)(L_y + S_y) - (L_y + S_y)(L_x + S_x) = \\ &= L_x L_y - L_y L_x + S_x S_y - S_y S_x = i\hbar(L_z + S_z). \end{aligned} \quad (18.8)$$

¹⁾ Поскольку сохраняется только суммарная величина (18.6), разделение момента на спиновую и орбитальную часть в общем случае не является строгим. Однако такое разделение оказывается возможным лишь в некоторых частных случаях (см. § 20).

Таким образом,

$$\begin{aligned} J_x J_y - J_y J_x &= i\hbar J_z, \\ J_y J_z - J_z J_y &= i\hbar J_x, \\ J_z J_x - J_x J_z &= i\hbar J_y. \end{aligned} \quad (18.9)$$

Два последних соотношения получены из первого путем циклической перестановки координат:

$$x \rightarrow y, \quad y \rightarrow z, \quad z \rightarrow x.$$

Отсюда для оператора квадрата полного момента количества движения получаем выражение:

$$J^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = L^2 + S^2 + 2(L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z), \quad (18.10)$$

с которым коммутирует не только гамильтониан, но и проекция полного момента количества движения на любую ось координат, например на ось z :

$$J^2 J_z - J_z J^2 = 0. \quad (18.11)$$

По аналогии с орбитальным и спиновым моментом мы можем сделать вывод о том, что квадрат полного момента и одна из его проекций (например, J_z) одновременно могут иметь собственные значения.

Правила квантования полного момента количества движения можно найти по известным правилам квантования его составляющих — орбитального (для бесспиновой частицы):

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad (l=0, 1, \dots), \quad L_z = \hbar m, \quad (m=-l, \dots, +l) \quad (18.12)$$

и спинового (например, для $l=0$) моментов:

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1), \quad \left(s = \frac{1}{2}\right), \quad S_z = \hbar m_s, \quad \left(m_s = \pm \frac{1}{2}\right). \quad (18.13)$$

Подобная задача называется сложением моментов и в теории Дирака решается точно в общем виде. Однако для простоты расчетов решим эту задачу в приближении Паули, т. е. когда учитывается спин частицы, но сама частица является нерелятивистской.

Если частица движется в поле центральных сил, то между компонентами волновой функции:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (18.14)$$

подчиняющейся уравнению Паули (см. § 16), может быть установлена связь в силу законов сохранения для момента количества движения:

$$\begin{aligned} J^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} &= \left(\mathbf{L} + \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}'\right)^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 j(j+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \\ J_z \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} &= \left(L_z + \frac{1}{2} \hbar \sigma'_3\right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar m_j \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (18.15)$$

где $\mathbf{L} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]$ — оператор орбитального момента, σ' — двухкомпонентные матрицы Паули. Решение системы уравнений (18.15) будем искать в виде ¹⁾:

$$\Psi_1 = C_1 Y_l^{m'}, \quad \Psi_2 = C_2 Y_l^m, \quad (18.16)$$

где Y_l^m — шаровые функции (см. § 11). Тогда, принимая во внимание, что

$$L^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 l(l+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (18.17)$$

будем, согласно (18.15), (18.12) и (18.13), иметь:

$$\frac{1}{\hbar} (\sigma' \mathbf{L}) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix},$$

или

$$\frac{1}{\hbar} [(L_x - iL_y) \Psi_2 - L_z \Psi_1] = q \Psi_1, \quad (18.18)$$

$$\frac{1}{\hbar} [(L_x + iL_y) \Psi_1 - L_z \Psi_2] = q \Psi_2,$$

где

$$q = j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}. \quad (18.18a)$$

Воспользуемся далее соотношениями (11.87) и (11.88):

$$L_z Y_l^m = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_l^m = m\hbar Y_l^m, \quad (18.19)$$

$$(L_x \pm iL_y) Y_l^m = -\hbar \sqrt{(l+1 \pm m)(l \mp m)} Y_l^{m \pm 1}. \quad (18.20)$$

Отсюда видно, что мы сможем сократить в левых и правых частях шаровые функции, если положим $m' = m - 1$. Тогда найдем следующее соотношение между коэффициентами:

$$\begin{aligned} (q - m + 1) C_1 + \sqrt{(l-1-m)(l+m)} C_2 &= 0, \\ \sqrt{(l+1-m)(l+m)} C_1 + (q + m) C_2 &= 0. \end{aligned} \quad (18.21)$$

Из условия равенства нулю определителя системы находим два значения q , соответствующие двум возможным типам решения:

$$q = l, \quad j = l + \frac{1}{2}, \quad C_2 = -\sqrt{\frac{l-m+1}{l+m}} C_1, \quad (18.22)$$

$$q = -(l+1), \quad j = l - \frac{1}{2}, \quad C_2 = \sqrt{\frac{l+m}{l-m+1}} C_1. \quad (18.23)$$

¹⁾ При этом выборе будет сохраняться лишь квадрат орбитального момента, но не его проекция на ось z .

²⁾ Кроме того, имеется также другое решение для j , которое равно $j = -l - \frac{3}{2}$ при $q = l$ и $j = -l - \frac{1}{2}$ при $q = -l - 1$. Эти решения должны быть отброшены, так как соответствуют отрицательным значениям j , хотя величина $j(j+1)$ остается такой же, как и при положительных значениях j .

Коэффициенты C_1 и C_2 , определяющие соотношения между шаровыми функциями, при сложении двух моментов (в данном случае орбитального и спинового) носят название *коэффициентов Клебша* — *Жордана*.

Воспользовавшись также условием нормировки $C_1^2 + C_2^2 = 1$, решение первого типа, когда $j = l + \frac{1}{2}$, $l = 0, 1, \dots$, запишем в виде ¹⁾:

$$\Psi^{(j=l+1/2)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_l^m \\ -\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}} Y_l^m \end{pmatrix} = Y_l^{j=l+1/2}. \quad (18.24)$$

В случае же, если $j = l - \frac{1}{2}$, $l = 1, 2, \dots$ (второй тип решения), волновая функция будет равна:

$$\Psi^{(j=l-1/2)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}} Y_l^{m-1} \\ \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_l^m \end{pmatrix} = Y_l^{(j=l-1/2)}, \quad (18.25)$$

где $Y_l^{(j)}$ — так называемые *шаровые спиноры*,^с условие ортонормированности которых имеет вид:

$$\oint d\Omega Y_l^{(j)'+} Y_l^{(j)} = \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (18.26)$$

где $j = l + \frac{1}{2}$ соответствует случаю, когда спиновый и орбитальный моменты параллельны, а $j = l - \frac{1}{2}$ — когда они антипараллельны. Это условие может быть легко получено, если учесть, что шаровой спинор $Y_l^{(j) \mp}$ представляет собой матрицу с одной строкой, и также принять во внимание условие ортонормированности шаровых функций. Шаровые спиноры (18.24) и (18.25) представляют собой спинорное обобщение обычных шаровых функций (см. § 11) и представляют собой угловую часть решения для любых задач, связанных с движением частицы с полуцелым спином в поле центральных сил.

Подставляя эти решения для функции Ψ в (18.15), находим, что проекция J_z полного момента количества движения принимает значения $J_z = \hbar m_j$, причем квантовое число m_j равно

¹⁾ Заметим, что эта связь между шаровыми функциями устанавливается только при наличии спин-орбитального взаимодействия, которое мы учли с помощью соотношения (18.15). Если же оно отсутствует, то оба решения будут совершенно независимыми.

$m_j = m - \frac{1}{2}$. Для решений первого типа ($j = l + \frac{1}{2}$), как видно из (18.24), m может изменяться в пределах от $-l$ ($m_j = -l - \frac{1}{2} = -j$) до $l + 1$ ($m_j = l + \frac{1}{2} = j$), поскольку множитель при несуществующей для последнего значения m функции Y_l^m обращается в нуль. Точно так же для решений второго типа ($j = l - \frac{1}{2}$) число m может изменяться в пределах от $-l + 1$ ($m_j = -j$) до l ($m_j = j$).

Таким образом, наши результаты сводятся к следующему: квадрат полного момента количества движения имеет собственные значения:

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad j = \begin{cases} l \pm \frac{1}{2}, & l \neq 0, \\ \frac{1}{2}, & l = 0, \end{cases} \quad (18.26a)$$

т. е. квантуется подобно орбитальному моменту, но при этом квантовое число j , называемое *внутренним квантовым числом*, принимает полуцелые значения¹⁾. Собственные значения проекции момента на ось также характеризуются полуцелыми квантовыми числами:

$$J_z = \hbar m_j, \quad m_j = -j, \dots, +j. \quad (18.27)$$

Исходя из соотношений (18.6) и (18.7), а также правил квантования (18.26a) и (18.27), нетрудно получить важные в спектроскопии формулы квантования скалярных произведений (LS) и (JS):

$$(LS) = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) = \frac{\hbar^2}{2}\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}, \quad (18.28)$$

и по аналогии:

$$(JS) = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 + S^2) = \frac{\hbar^2}{2}\{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)\}. \quad (18.29)$$

Остановимся также на векторной модели сложения моментов, которая, несмотря на известную математическую условную нестрогость²⁾, позволяет решать ряд сложных вопросов и дает при этом часто точные результаты.

Как мы уже упоминали, в квантовой механике вектор момента не имеет определенного направления в пространстве: одновременно определенные значения имеет его абсолютная величина (квадрат) и одна из проекций, например, на ось z . Мы можем это выразить геометрически, представив вектор момента описывающим конус, ось которого совпадает с осью z . Тогда проекция момента на ось z будет иметь определенное значение, в то время как проекции на оси x и y остаются неопределенными.

¹⁾ Это название связано с историей вопроса: число j было введено спектроскопистами до открытия спина чисто эмпирически. Термин «внутреннее» отражал неясные на том этапе какие-то внутренние свойства частиц.

²⁾ Математическая нестрогость заключается, например, в том, что квадрат вектора \mathbf{j} равняется не j^2 , а $j(j+1)$.

Эти соображения можно в равной мере отнести и к спиновому моменту, поскольку он обладает такими же коммутационными свойствами, что и орбитальный момент. Эти векторы ориентируются так, что их сумма образует вектор \mathbf{J} , постоянный по величине. Таким образом, векторы \mathbf{L} и \mathbf{S} направлены не произвольным образом, они как бы прецессируют около \mathbf{J} как два связанных гироскопа¹⁾.

На фиг. 18.1 отложены безразмерные величины j^* , l^* , s^* . Каждый из векторов l^* , s^* определен на своем конусе. Оба эти вектора «прецессируют» вокруг j^* как связанная система. Заметим, что, согласно формулам (18.26), сложение вектора l^* с целыми значениями орбитального квантового числа $l = 0, 1, 2, \dots$ и вектора s^* с полуцелыми значениями спинового квантового числа $s = \pm 1/2$ приводит к вектору полного момента j^* с полуцелыми значениями внутреннего квантового числа $j = l \pm \frac{1}{2}$.

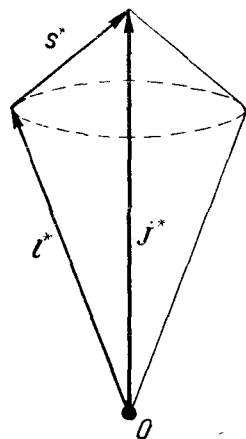
Векторная модель позволяет быстро находить ряд величин. Например, найдем правила квантования угла между векторами l^* и s^* . Из косоугольного треугольника получаем:

$$\cos(l^*s^*) = \frac{1}{2l^*s^*} \{j^{*2} - l^{*2} - s^{*2}\}, \quad (18.30)$$

т. е.

$$\cos(l^*s^*) = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2\sqrt{l(l+1)s(s+1)}} \quad (18.31)$$

и т. д.



Фиг. 18.1. Сложение спинового и орбитального моментов.

в. Движение в поле центральных сил с учетом спиновых эффектов. Теория ротатора

Если мы хотим исследовать движение частицы в поле центральных сил в нерелятивистском приближении, но с учетом спиновых эффектов, то вместо шаровых функций Y_l^m , характеризующих состояния, в которых сохраняется орбитальный момент количества движения, мы должны использовать шаровые спиноры $Y_l^{(j)}$, характеризующие состояния, в которых сохраняется полный момент количества движения (орбитальный плюс спиновый). Поскольку шаровые спиноры в нерелятивистском приближении состоят из шаровых функций, имеющих одно и то же значение квантового числа l , для радиальной части в этом случае получим то же самое уравнение, что и для нерелятивистской бесспиновой частицы, т. е.

$$\nabla_r^2 R + \left(\frac{2m_0 E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0. \quad (18.32)$$

¹⁾ Эта связь с точки зрения классической теории может быть интерпретирована как связь через магнитные моменты.

Таким образом, волновые функции для электрона в поле центральных сил будут иметь вид:

$$\Psi = R Y_{l m}^{(j)}, \quad (18.33)$$

где шаровой спинор $Y_{l m}^{(j)}$ определяется выражениями (18.24) и (18.25).

В частности, для ротатора мы можем положить $r = a = \text{const}$ и радиальную часть волновой функции $R = 1$. Тогда спиновые эффекты в данном приближении не дадут каких-либо дополнительных членов для энергии ротатора, которая будет определяться выражением (12.7), установленным для бесспиновой частицы, т. е.

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 a^2}. \quad (18.34)$$

Что касается волновой функции, то она будет характеризоваться шаровым спинором $Y_{l m}^{(j)}$; поэтому мы должны прежде всего установить правила отбора для квантовых чисел l , m_j и j , которые будут иметь место не только для задачи ротатора, но и для любой задачи о движении частицы в поле центральных сил, в том числе и для задачи атома водорода.

Вместо формул (12.19), на основе которых были установлены правила отбора для бесспиновых частиц, теперь будем иметь:

$$(q)_{l m_j}^{l' m_j'} = \oint (Y_{l' m'}^{(j')})^* q Y_{l m}^{(j)} d\Omega, \quad (18.35)$$

причем в последней формуле q может принимать три значения

$$q = z = \cos \vartheta, \quad q = x \pm iy = \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} \quad (18.36)$$

(для простоты примем радиус ротатора равным единице: $a = 1$). Если вместо шаровых спиноров подставить их значения из (18.24) и (18.25), то для этого матричного элемента получаем:

$$\begin{aligned} (q)_{l m_j}^{l' m_j'} &= D^{(j')} \oint (Y_{l' m'}^{m'-1})^* q Y_{l m}^{m-1} d\Omega + \\ &+ C^{(j')} \oint (Y_{l' m'}^{m'})^* q Y_{l m}^{m} d\Omega. \end{aligned} \quad (18.37)$$

Отсюда видно, что оба интеграла в (18.37) будут точно совпадать с интегралами в формулах (12.19) — (12.21). Поэтому для квантовых чисел l и m находим такие же правила отбора, как и для ротатора без спина, т. е.

$$\Delta l = l - l' = \pm 1, \quad \Delta m = 0 (q = z), \quad \Delta m = \pm 1 (q = x \pm iy).$$

Найдем теперь правила отбора для квантовых чисел m_j и j . Поскольку m_j для обоих типов решений связано с m одним и тем

же соотношением $m_j = m - \frac{1}{2}$, правила отбора для m_j будут такие же, как и для m , т. е.

$$\Delta m_j = 0, \pm 1.$$

Если при определении правил отбора для j рассматривается случай, когда переходы совершаются между состояниями, характеризующимися одинаковыми типами решений ($j' = l' + \frac{1}{2} \rightarrow j = l + \frac{1}{2}$ или $j' = l' - \frac{1}{2} \rightarrow j = l - \frac{1}{2}$), коэффициенты $D^{(j'j)}$ и $C^{(j'j)}$, как видно из (18.24) и (18.25), будут всегда положительны и поэтому подобные переходы всегда разрешены. В этом случае возможное изменение j должно также совпадать с изменением орбитального квантового числа l , т. е. $\Delta j = \Delta l = \pm 1$.

В том же случае, когда переходы будут совершаться между состояниями, характеризующимися различными типами решений ($j' = l' + \frac{1}{2} \rightarrow j = l - \frac{1}{2}$ или $j' = l' - \frac{1}{2} \rightarrow j = l + \frac{1}{2}$), то, учитывая, что $\Delta l = \pm 1$, получаем три возможных значения для $\Delta j = 0, +2, -2$. Однако здесь следует учесть то обстоятельство, что коэффициенты $D^{(j'j)}$ и $C^{(j'j)}$ будут иметь разные знаки. Более того, оказывается, что при $\Delta j = \pm 2$ оба члена будут взаимно компенсировать друг друга, благодаря чему этот переход становится запрещенным. При $\Delta j = 0$ эта разность не обращается в нуль, однако благодаря тому, что оба члена входят с разными знаками, интенсивность излучения будет слабее, чем при переходах между состояниями, характеризующимися одинаковыми типами решений, когда $\Delta j = \pm 1$. Покажем это на конкретном примере. Выберем начальное состояние $j = l - \frac{1}{2}$, а конечное $j' = l' + \frac{1}{2}$ и рассмотрим случай $\Delta m = m' - m = 0$.

Тогда, учитывая равенство (12.22), приведем соответствующий матричный элемент (18.37) к виду:

$$\begin{aligned} \langle j' m_j' | \hat{m}_j | j m_j \rangle = & \delta_{l', l+1} [D^{(j', j)} A(l, m-1) + C^{(j', j)} A(l, m)] + \\ & + \delta_{l', l-1} [D^{(j', j)} B(l, m-1) + C^{(j', j)} B(l, m)], \end{aligned} \quad (18.38)$$

$$\text{где } j' = l' + \frac{1}{2}, \text{ а } j = l - \frac{1}{2}.$$

Подставляя сюда значения:

$$D^{(j' = l' + 1/2, j = l - 1/2)} = \frac{1}{\sqrt{(2l' + 1)(2l + 1)}} \sqrt{l' + m'} \sqrt{l + 1 - m}$$

и

$$C^{(j' = l' + 1/2, j = l - 1/2)} = -\frac{1}{\sqrt{(2l' + 1)(2l + 1)}} \sqrt{l' + 1 - m'} \sqrt{l + m}$$

из равенств (18.24) и (18.25), а также значения A и B из (12.22а), находим, что коэффициент при $\delta_{l', l+1}$ обращается в нуль, т. е. переход $\Delta j = -2$ является запрещенным. В то же самое время коэффициент при $\delta_{l', l-1}$ в нуль не обращается, т. е. переход $\Delta j = 0$ является разрешенным, но интенсивность линии будет ослаблена по сравнению с $\Delta j = \pm 1$. Аналогичным путем легко показать, что переход $\Delta j = 2$ также является запрещенным не только для $q = z$, но и для $q = x \pm iy$ ($\Delta m = \pm 1$).

Итак, окончательно, правила отбора для квантовых чисел, характеризующих состояния частицы в поле центральных сил с учетом спина, принимают вид:

$$\begin{aligned} \Delta l &= \pm 1, \quad \Delta m_j = 0, \pm 1, & (18.39) \\ \Delta j &= \begin{cases} \pm 1 & \text{(нормальная интенсивность),} \\ 0 & \text{(ослабленная интенсивность).} \end{cases} \end{aligned}$$

г. Четность состояния

В связи с формулировкой закона сохранения момента количества движения для дираковских частиц уточним смысл квантовых чисел l и j в задаче о движении частицы в поле центральных сил по теории Дирака. В нерелятивистской квантовой теории орбитальное квантовое число l было связано с абсолютной величиной момента количества движения $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, который является там интегралом движения. Таким образом, в теории Шредингера, а также в теории Паули, где учитываются лишь спиновые, но не релятивистские эффекты, число l представляет сохраняющуюся во времени величину.

В теории Дирака орбитальный момент не коммутирует с гамильтонианом и поэтому не является интегралом движения; вследствие этого роль квантового числа l как характеристики закона сохранения момента имеет лишь приближенный смысл.

Однако оказывается, что l характеризует еще одно свойство квантовой частицы, которое носит название *четности состояния*. Под четностью состояния мы будем понимать поведение волновой функции при инверсии пространства:

$$x = -x', \quad y = -y', \quad z = -z'. \quad (18.40)$$

Введем далее оператор инверсии пространства I ¹⁾, действие которого по определению состоит в том, что

$$I \psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}), \quad (18.41)$$

¹⁾ Этот оператор превращает правовинтовую систему координат в левовинтовую и наоборот. В теории Дирака вводится оператор $P = \rho_3 I$ (см. задачу 18.6).

т. е. он изменяет знаки у координат на обратные. Собственные значения λ этого оператора можно найти путем двукратного его применения:

$$I^2\psi = \lambda^2\psi, \quad (18.42)$$

которое возвращает нас к прежним значениям координат. Из двух последних соотношений следует, что

$$\lambda = \pm 1, \quad (18.43)$$

т. е. волновые функции либо не меняются при действии оператора инверсии (четные функции, $\lambda = 1$), либо меняют свой знак на противоположный (нечетные функции, $\lambda = -1$).

Найдем теперь величины, определяющие четность волновой функции для частицы в поле центральных сил. В сферической системе координат r, ϑ, φ преобразование инверсии касается только угловой части:

$$r' = r, \quad \vartheta' = \pi - \vartheta, \quad \varphi' = \varphi + \pi, \quad (18.44)$$

в чем нетрудно убедиться, если учесть, что при этом координаты:

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad z = r \cos \vartheta \quad (18.45)$$

изменяют свои знаки на противоположные. Заметим, что радиальная часть волновой функции при преобразовании инверсии остается неизменной, тогда как угловая часть изменяется по следующему закону:

$$\begin{aligned} IY_l^m(\vartheta, \varphi) &= Y_l^m(\pi - \vartheta, \pi + \varphi) = \text{const } P_l^m(-\cos \vartheta) e^{im(\varphi + \pi)} = \\ &= (-1)^l Y_l^m, \end{aligned} \quad (18.46)$$

ибо

$$P_l^m(-x) = (-1)^l P_l^m(x).$$

Таким образом, четность состояния в центрально-симметричном поле определяется четностью числа l .

Далее нетрудно заметить, что гамильтониан в поле центральных сил при инверсии пространства не меняется; поэтому оператор инверсии I (или в теории Дирака оператор P) и оператор Гамильтона H коммутируют между собой. Из этого следует, что четность состояния является интегралом движения, ибо:

$$\frac{d}{dt} I = \frac{i}{\hbar} (HI - IH) = 0. \quad (18.47)$$

Закон сохранения четности не имеет классического аналога в отличие от других законов сохранения (энергии, импульса, момента). Следовательно, в нерелятивистской волновой механике число l характеризует две сохраняющиеся величины: квадрат момента количества движения и четность состояния. В теории Дирака

число l теряет смысл квадрата момента количества движения, но связь этого числа с четностью состояния сохраняется.

В дальнейшем мы узнаем, что проблема четности играет исключительно важную роль в физике элементарных частиц. Все волновые функции как одной, так и двух и т. д. частиц строго разделяются на четные и нечетные. В частности, дипольные переходы возможны между состояниями, обладающими различным значением четности (правило Лапорта). При наличии двух и более частиц с четностью связывается общий спин системы, а также статистика, которой должны подчиняться частицы. Более подробно все эти вопросы будут проанализированы в дальнейшем при рассмотрении конкретных эффектов.

д. Решение уравнения Дирака для свободной частицы

Рассмотрим движение свободной частицы спина $1/2$ (например, электрона) с постоянным импульсом. Без ограничения общности исследования можно выбрать направление оси z по направлению импульса, т. е. в уравнении (17.20) положить:

$$p_x = p_y = 0, \quad p_z \neq 0. \quad (18.48)$$

Тогда уравнение Дирака примет вид:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - c\alpha_3 i\hbar \frac{\partial}{\partial z} - \rho_3 m_0 c^2 \right) \psi = 0. \quad (18.49)$$

Решение этого уравнения будем искать в форме:

$$\psi = \frac{1}{L^{3/2}} b e^{-i\epsilon K t + i k z}, \quad (18.50)$$

где L^3 — объем основного куба, волновое число k , как и в случае свободной частицы в нерелятивистской теории Шредингера, равно:

$$k = \frac{2\pi n}{L} \quad (n = 0, 1, 2, \dots),$$

$$K = \sqrt{k^2 + k_0^2}, \quad k_0 = \frac{m_0 c}{\hbar},$$

а четырехрядная матрица:

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix}$$

удовлетворяет условию нормировки:

$$b^+ b = b_1^* b_1 + b_2^* b_2 + b_3^* b_3 + b_4^* b_4 = 1. \quad (18.51)$$

Для определения величины ε , а также коэффициентов b_μ воспользуемся системой уравнений (17.24), положив

$$p_x = p_y = 0, \quad E\psi = c\hbar\varepsilon K\psi, \quad p_z\psi = \hbar k\psi.$$

Тогда получим:

$$\begin{aligned} (\varepsilon K - k_0) b_1 - k b_3 &= 0, & (\varepsilon K - k_0) b_2 + k b_4 &= 0, \\ (\varepsilon K + k_0) b_3 - k b_1 &= 0, & (\varepsilon K + k_0) b_4 + k b_2 &= 0. \end{aligned} \quad (18.52)$$

Отсюда для величины ε находим два значения: $\varepsilon = 1$ (энергия электрона положительна) и $\varepsilon = -1$ (энергия электрона отрицательна). Умножая (18.52) на ε и учитывая, что

$$\varepsilon k = \varepsilon \sqrt{(K - \varepsilon k_0)(K + \varepsilon k_0)},$$

преобразуем эти четыре уравнения к двум независимым:

$$\sqrt{K + \varepsilon k_0} b_3 = \varepsilon \sqrt{K - \varepsilon k_0} b_1, \quad (18.52a)$$

$$\sqrt{K + \varepsilon k_0} b_4 = -\varepsilon \sqrt{K - \varepsilon k_0} b_2. \quad (18.52b)$$

При нахождении решения (18.52a) мы должны положить $b_2 = b_4 = 0$, а при решении (18.52b) $b_1 = b_3 = 0$. Принимая во внимание далее еще условие нормировки (18.51), получаем четыре независимых решения: два из них относятся к состояниям с $\varepsilon = 1$:

$$b^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad b^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ -\sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \end{pmatrix}, \quad (18.53)$$

а два — к состояниям с $\varepsilon = -1$:

$$b^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ -\sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad b^{(4)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \end{pmatrix}, \quad (18.54)$$

т. е. состояния (18.53) отличаются от состояний (18.54) знаком энергии.

Чтобы выяснить физический смысл состояний $b^{(i)}$ с различными $i = 1, 2, 3, 4$, найдем проекцию спина на направление движения,

т. е. на ось z . Прежде всего заметим, что так как при движении частицы вдоль оси z $L_z = x p_y - y p_x = 0$, то проекция спина на ось z должна сохраняться, в чем нетрудно убедиться непосредственно, поскольку матрица σ_3 будет коммутировать с гамильтонианом, соответствующим уравнению (18.49).

Найдем собственные значения этого оператора, применив его непосредственно к спиновым функциям $b^{(1)}$.

Тогда будем иметь:

$$\frac{1}{2} \sigma_3 b^{(1)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} b^{(1)}, \quad (18.55)$$

т. е. для этого решения собственное значение оператора $\frac{1}{2} \sigma_3$ равно $\frac{1}{2}$.

Точно так же легко показать, что

$$\frac{1}{2} \sigma_3 b^{(2)} = -\frac{1}{2} b^{(2)}, \quad \frac{1}{2} \sigma_3 b^{(3)} = \frac{1}{2} b^{(3)} \quad \text{и} \quad \frac{1}{2} \sigma_3 b^{(4)} = -\frac{1}{2} b^{(4)}.$$

Таким образом, четыре возможных состояния соответствуют четырем возможным комбинациям знака энергии и направления спина. Решение $b^{(1)}$ соответствует положительным энергиям ($\varepsilon = 1$) и случаю, когда спин направлен по оси z ($s = 1$). Аналогичным образом для решения $b^{(2)}$ имеем $\varepsilon = 1$, $s = -1$, а для решения $b^{(3)}$ и $b^{(4)}$ соответственно имеем $\varepsilon = -1$, $s = 1$ и $\varepsilon = -1$, $s = -1$, где s — удвоенная проекция спина на направление импульса.

Кстати заметим, что для состояний с положительной энергией ($\varepsilon = 1$) при сравнительно малых скоростях волновые функции ψ_3 и ψ_4 будут иметь порядок $\frac{k}{K} \sim \frac{v}{c}$ относительно волновых функций ψ_1 и ψ_2 ($\psi_3 \sim \frac{v}{c} \psi_1$). Для состояний с отрицательной энергией [см. формулы (18.54)], наоборот, $\psi_1 \sim \frac{v}{c} \psi_3$.

Мы рассмотрели частный случай движения частицы вдоль оси z . Однако все это не ограничивает общности исследования свободного движения. В самом деле, если направление импульса характеризуется сферическими углами ϑ и φ , то всегда можно выбрать другую штрихованную систему координат таким образом, чтобы ось z' была направлена по импульсу. Затем, совершая два поворота: один на угол ϑ вокруг оси y' , направленной перпендикулярно к плоскости zz' , другой на угол φ вокруг оси z , можно перейти от решения в штрихованной системе координат (ось z' направлена по импульсу) к общему случаю (направление импульса характеризуется сферическими углами ϑ , φ).

Учитывая, что при повороте системы координат волновая функция изменяется по закону (17.39), мы можем записать решение в этом общем случае:

$$\psi = \frac{1}{L^{3/2}} e^{-\frac{i}{2}(\varphi\sigma_3 + \theta\sigma_2)} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{1+s} \left(1 + \frac{\varepsilon k_0}{K}\right)^{1/2} \\ \sqrt{1-s} \left(1 + \frac{\varepsilon k_0}{K}\right)^{1/2} \\ \varepsilon \sqrt{1+s} \left(1 - \frac{\varepsilon k_0}{K}\right)^{1/2} \\ -\varepsilon \sqrt{1-s} \left(1 - \frac{\varepsilon k_0}{K}\right)^{1/2} \end{pmatrix} e^{-i\varepsilon cKt + i\mathbf{kr}}, \quad (18.56)$$

которое является обобщением формул (18.50), (18.53) и (18.54).

Задача 18.1¹⁾. Показать, что операторы энергии $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ и импульса $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ преобразуются при преобразованиях Лоренца как четырехмерный вектор:

$$\frac{E}{c} = \frac{E' + \beta p'_x}{\sqrt{1-\beta^2}}; \quad p_x = \frac{p'_x + \frac{E'}{c} \beta}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad p_y = p'_y, \quad p_z = p'_z,$$

где

$$\beta = \frac{v}{c}, \quad E' = i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \text{ и т. д.}$$

Указание. Воспользоваться известными лоренцевыми преобразованиями координат (17.34) и сделать переход при дифференцировании от одних переменных к другим.

Задача 18.2. Доказать релятивистскую инвариантность скалярного уравнения для свободной частицы.

Указание. Для этого надо доказать инвариантность операторного соотношения:

$$E'^2 - c^2 p'^2 = E^2 - c^2 p^2,$$

что легко сделать, если использовать результаты предыдущей задачи.

Задача 18.3. Показать, что в случае пространственного поворота системы координат вокруг оси y на угол ϑ волновая функция преобразуется по закону:

$$\psi' = \left(\cos \frac{\vartheta}{2} + i\sigma_2 \sin \frac{\vartheta}{2} \right) \psi = e^{+i \frac{\vartheta}{2} \sigma_2} \psi.$$

Указание. Воспользоваться методом, который приводит к формулам (17.39).

Задача 18.4. С помощью векторной модели сложения моментов найти углы с учетом геометрического сложения векторов в квантовой механике, т. е.

$$\cos(j^*s^*); \quad \cos(j^*l^*).$$

Указание. Использовать метод, которым получены формулы (18.30) и (18.31).

¹⁾ Задачи в данном параграфе относятся и к § 17.

Задача 18.5. Показать, что волновая функция $\tilde{\psi} = C\psi^*$ ($C = i\alpha_2\rho_3$, ψ^* — комплексно-сопряженная, а не эрмитово-сопряженная функция, т. е. не ψ^+) уравнения Дирака для электрона с отрицательной энергией, будет удовлетворять уравнению Дирака с положительной энергией и противоположным (положительным) знаком заряда, т. е. будет описывать движение позитрона (преобразование зарядового сопряжения).

Решение. Уравнение Дирака имеет вид:

$$\left\{ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi - c \left[\alpha_1 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) + \alpha_2 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) + \alpha_3 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_3 m_0 c^2 \right\} \psi = 0; \quad (18.57)$$

для комплексно-сопряженного уравнения мы можем написать (с учетом того, что $\alpha_1^* = \alpha_1$, $\alpha_2^* = -\alpha_2$, $\alpha_3^* = \alpha_3$, $\rho_3^* = \rho_3$):

$$\left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi + c \left[\alpha_1 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} A_x \right) - \alpha_2 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c} A_y \right) + \alpha_3 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_3 m_0 c^2 \right\} \psi^* = 0. \quad (18.58)$$

Заметим, что комплексно-сопряженная функция ψ^* отличается от ψ^+ (эрмитово-сопряженной), а именно:

$$\psi^* = \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \\ \psi_3^* \\ \psi_4^* \end{pmatrix},$$

в то время как:

$$\psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*).$$

Сделаем замену в комплексно-сопряженном уравнении Дирака, полагая $\tilde{\psi} = i\alpha_2\rho_3\psi^*$. Тогда мы найдем, что $\tilde{\psi}$ будет удовлетворять исходному уравнению, если в нем заряд e заменить на $-e$. Принимая во внимание, что

состояние $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i|E|t}{\hbar}} \psi(\mathbf{r})$ трактуется как состояние с положительной энергией ($E = |E|$), а состояние $\psi^*(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{|E|t}{\hbar}} \psi^*(\mathbf{r})$ — как состояние с отрицательной энергией ($E = -|E|$), мы должны у функции $\tilde{\psi}$ трактовать знак энергии иначе, чем у функции ψ^* .

Задача 18.6. Доказать инвариантность уравнения Дирака относительно инверсии пространства: $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, $\mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$ (P-преобразование) и относительно слабого обращения времени (СТ-преобразование), которое эквивалентно сильному обращению времени: $t \rightarrow -t$, $\Phi \rightarrow -\Phi$ (Т-преобразование), сделанному совместно с зарядово-сопряженным преобразованием: $e \rightarrow -e$ (С-преобразование).

Решение. В результате P-преобразования уравнение (18.57) принимает вид:

$$\left\{ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi + c \left[\alpha_1 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) + \alpha_2 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) + \alpha_3 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_3 m_0 c^2 \right\} \psi = 0. \quad (18.59)$$

Сделав в этом уравнении замену $\psi \rightarrow \rho_s \psi$, мы преобразуем его к первоначальному виду (18.57).

В результате слабого обращения времени вместо (18.57) будем иметь:

$$\left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi - c \left[\alpha_1 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} A_x \right) + \alpha_2 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c} A_y \right) + \alpha_3 \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_s m_0 c^2 \right\} \psi = 0. \quad (18.60)$$

Последнее уравнение в результате замены $\psi \rightarrow \sigma_2 \psi^*$ примет вид сопряженного уравнения (18.58). В свою очередь сопряженное уравнение (18.58) после аналогичных преобразований примет вид основного (18.57).

Таким образом, уравнение Дирака должно быть инвариантным относительно совместного тройного РСТ-преобразования (теорема Людерса — Паули).

Задача 18.7. Объяснить, почему в случае свободного движения только продольная составляющая вектора спина коммутирует с гамильтонианом.

Произвести в случае свободного движения такое обобщение понятия спина, чтобы все его составляющие коммутировали с гамильтонианом.

Найти средние значения составляющих обобщенного спина и закон их изменения при лоренцевых преобразованиях. Исследовать спиральность частицы, когда спин параллелен импульсу.

Решение. Так же как и в случае поля центральных сил, для свободного электрона лишь полный момент количества движения (18.6) будет коммутировать с гамильтонианом свободного поля:

$$H = c(\boldsymbol{\alpha p}) + \rho_s m_0 c^2.$$

Поскольку продольная составляющая орбитального момента обращается в нуль, то продольная составляющая оператора спина:

$$S_3 = \frac{1}{2} \hbar \frac{(\boldsymbol{\sigma p})}{|p|}$$

должна быть интегралом движения, в чем нетрудно также убедиться и непосредственно, показав, что оператор S_3 коммутирует с оператором H .

В случае свободного движения можно найти такое обобщение понятия оператора спина:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}^0,$$

где

$$\boldsymbol{\sigma}^0 = \frac{\mathbf{p}(\boldsymbol{\sigma p})}{p^2} + \rho_s \frac{\boldsymbol{\sigma p}^2 - \mathbf{p}(\boldsymbol{\sigma p})}{p^2}, \quad (18.61)$$

когда все его составляющие будут коммутировать с гамильтонианом H , причем продольные составляющие обычного и обобщенного спина совпадают друг с другом. Если мы напишем решение для волновой функции, соответствующее положительной энергии (см. 18.53):

$$\psi = \frac{1}{L^{3/2} \sqrt{2}} \left[C_1 \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \\ 0 \end{pmatrix} + C_{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ -\sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \end{pmatrix} \right] e^{-icKt + ikz}, \quad (18.62)$$

где импульс направлен по оси z , то для средних значений s^0 оператора σ^0 находим:

для продольной составляющей:

$$s_3^0 = \int \psi^\dagger \sigma_3 \psi d^3x = C_1^* C_1 - C_{-1}^* C_{-1};$$

для поперечных составляющих:

$$s_1^0 = \int \psi^\dagger \rho_3 \sigma_1 \psi d^3x = C_{-1}^* C_1 + C_1^* C_{-1},$$

$$s_2^0 = i (C_{-1}^* C_1 - C_1^* C_{-1}).$$

Если мы выберем волновую функцию как сумму состояний, обладающих различной энергией (в том числе и отрицательной), то при вычислении средних значений временные члены исчезнут, так как оператор обобщенного спина коммутирует с гамильтонианом H . Некоммутативность же различных операторов, являющихся в то же время интегралами движения, говорит о том, что система является вырожденной (заданному импульсу и энергии могут соответствовать различные направления спина) и поэтому в средние значения вектора s^0 входят различные комбинации амплитуд C_1 и C_{-1} (см. также задачу 12.8). Можно показать, что вектор s^0 является трехмерным единичным вектором, так как $(s_1^0)^2 + (s_2^0)^2 + (s_3^0)^2 = (C_1^* C_1 + C_{-1}^* C_{-1})^2 = 1$ и при лоренцевых преобразованиях преобразуется по закону:

$$s_3'^0 = s_3^0 \cos \gamma + s_1^0 \sin \gamma,$$

$$s_1'^0 = s_1^0 \cos \gamma - s_3^0 \sin \gamma,$$

$$s_2'^0 = s_2^0, \quad (18.63)$$

где

$$\cos \gamma = \frac{\beta_1 - \beta \cos \vartheta}{B}, \quad \sin \gamma = \frac{\beta \sqrt{1 - \beta_1^2} \sin \vartheta}{B},$$

$$B = \sqrt{(\beta_1 - \beta \cos \vartheta)^2 + \beta^2 (1 - \beta_1^2) \sin^2 \vartheta}. \quad (18.64)$$

Здесь $c\beta_1 = \frac{k}{K}$ — скорость частицы в первоначальной системе координат направлена по оси z , причем $c\beta$ — скорость штрихованной системы координат, составляющая с осью z угол ϑ , должна лежать в плоскости xz . Под s_3^0 следует понимать продольную составляющую спина относительно нового направления импульса. Отсюда видно, что трехмерный единичный вектор в результате лоренцевых преобразований остается трехмерным единичным вектором.

Определим спиральность, т. е. вращение вектора поляризации относительно импульса, когда $s_3^0 = 1$ ($C_1 = 1, C_{-1} = 0$). В этом случае, как видно из (18.62):

$$\sigma_3^0 \psi = i \sigma_1^0 \psi.$$

Учитывая еще зависимость волновой функции от времени $\psi \sim e^{-ickt}$, находим, что вращение будет совершаться в плоскости xu (от оси x к оси u), расположенной перпендикулярно к импульсу (ось z). Следовательно, в правой системе координат случай $s_3^0 = 1$ будет описывать правовинтовую спиральность, а в левой системе координат — левовинтовую. Этот результат является вполне естественным, так как $s_3^0 = (s^0 \mathbf{k}^0)$, где \mathbf{k}^0 — единичный вектор импульса, s^0 — единичный аксиальный вектор спина. При переходе от правой системы координат к левой направление \mathbf{k}^0 изменяется на противоположное, а s^0 — остается без изменения, т. е. в этом случае изменяется лишь математическая форма описания спиральности.

Задача 18.8. Показать, что для описания движения частицы со спином половина и массой покоя, равной нулю (волновое уравнение для нейтрино),

может быть использовано либо уравнение с двухрядными матрицами Паули (уравнение Вейля), либо уравнение Дирака, расщепляющееся на два независимых уравнения.

Решение. Квадратный корень из (17.1) при $m_0 = 0$ может быть извлечен с помощью двухрядных матриц Паули и поэтому вместо уравнения Дирака можно написать уравнение с двухкомпонентной функцией $\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$ (уравнение Вейля):

$$(E - c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})) \varphi = 0. \quad (18.65)$$

Это уравнение в противоположность уравнению Дирака (см. задачу 18.6) не инвариантно относительно инверсии пространства, поскольку после замены $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ мы никаким преобразованием волновой функции φ не сможем вернуть его к первоначальному виду.

Для частиц с $m_0 = 0$ четырехкомпонентное уравнение Дирака разбивается на два независимых волновых уравнения.

Для первого решения выбираем:

$$s_3^0 = -\epsilon = -\frac{E}{|E|}, \quad (18.66)$$

т. е. будем считать, что частицы с положительной энергией $\epsilon = 1$ (нейтрино) обладают левой спиральностью, а с отрицательной $\epsilon = -1$ (антинейтрино) — правой.

Тогда для второго решения будем иметь:

$$s_3^0 = \epsilon = \frac{E}{|E|}, \quad (18.67)$$

т. е., наоборот, частицы с положительной энергией $\epsilon = 1$ (нейтрино) должны обладать правой спиральностью, а с отрицательной (антинейтрино) — левой.

Соотношения (18.66) и (18.67) остаются инвариантными относительно преобразований Лоренца [это видно из равенств (18.63) и (18.64), где следует положить $\beta_1 = 1$], слабого обращения времени и инверсии пространства (при переходе от правой системы координат к левой, хотя знак у величины s_3^0 изменится на противоположный, однако зависимость спиральности от знака энергии остается без изменений).

Примечание. В связи с открытием явлений, известных под названием несохранения четности, что оказалось связанным со спиральностью нейтрино, Ли и Янг, а также Ландау предложили массу нейтрино положить равной нулю, а для его описания взять двухкомпонентное уравнение Вейля.

Неинвариантность уравнения Вейля относительно P-преобразования они предложили компенсировать неинвариантностью относительно C-преобразования (при переходе нейтрино к антинейтрино спиральность нейтрино должна измениться). Таким образом уравнение Вейля должно остаться инвариантным относительно совместного CP-преобразования (комбинированная инверсия), а также T-преобразования для того, чтобы выполнялась теорема Людерса — Паули (CPT = const).

С другой стороны, для описания нейтрино можно также взять уравнение Дирака с массой покоя, равной нулю, и выделить в нем нейтрино определенной спиральности. Однако там наряду с одним решением (нейтрино — левовинтовое, антинейтрино — правовинтовое), имеется второе совершенно равноправное решение (нейтрино — правовинтовое, антинейтрино — левовинтовое). Было бы весьма странным, если второе решение не имело никакого физического применения.

Недавно наряду с электронным нейтрино (т. е. нейтрино, вылетает с позитроном, а антинейтрино — с электроном) было открыто второе, так называемое мюонное нейтрино, которое, по-видимому, и описывается вторым решением уравнения Дирака (см. также § 30 и § 31).

§ 19. Уравнение Дирака в приближенной форме

Во многих задачах, которые решаются по теории Дирака, в окончательных результатах можно ограничиться либо членами порядка $\frac{v}{c}$, если учитывать влияние спина на движение электрона в магнитном поле (уравнение Паули), либо членами порядка $\left(\frac{v}{c}\right)^2$, если учитывать влияние спиновых и релятивистских поправок на движение электрона в электрическом поле.

Поэтому мы запишем уравнение Дирака в приближенной форме, отбросив в нем величины порядка выше $\left(\frac{v}{c}\right)^2$. Как будет показано ниже, в таком приближенном уравнении особенно отчетливо вырисовывается роль как релятивистских, так и спиновых членов.

С этой целью прежде всего представим уравнение Дирака (17.26) в виде двух матричных уравнений:

$$\begin{aligned} (F - m_0c^2) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} &= c (\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{P}) \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}, \\ (F + m_0c^2) \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} &= c (\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{P}) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (19.1)$$

В эквивалентности (19.1) и (17.26) нетрудно убедиться, если подставить в (19.1) вместо двухрядных матриц Паули $\boldsymbol{\sigma}'$ значения (16.38), а вместо операторов F и \mathbf{P} значения (17.22) и расписать каждое из двух матричных уравнений как систему двух уравнений.

Вообще говоря, в уравнении (19.1) компоненты волновой функции ψ_p зависят от времени, т. е. $\psi_p(\mathbf{r}, t)$. Если же электрическое и магнитное поля не зависят от времени, то мы можем перейти к стационарному случаю:

$$\psi_p(\mathbf{r}, t) = e^{-i/\hbar(E + m_0c^2)t} \psi_p(\mathbf{r}) \quad (19.2)$$

и ограничиться только положительными значениями энергии $E + m_0c^2 > 0$.

В последнем преобразовании мы в общей энергии выделили собственную энергию m_0c^2 , что оказывается очень удобным при исследовании движения при сравнительно малых скоростях, когда основной вклад дают нерелятивистские члены.

Подставляя (19.2) в (19.1) и сокращая все члены уравнения на временной множитель $e^{-i/\hbar(E + m_0c^2)t}$, представим уравнения (19.1) в виде:

$$(E - e\Phi) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = c (\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{P}) \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}, \quad (19.3)$$

$$(2m_0c^2 + E - e\Phi) \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = c (\boldsymbol{\sigma}'\mathbf{P}) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (19.4)$$

Из последнего уравнения получаем:

$$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0c} \left(1 + \frac{E - e\Phi}{2m_0c^2}\right)^{-1} (\sigma'P) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (19.5)$$

В отличие от (19.1) в уравнениях (19.3) и (19.5) компоненты волновой функции не должны зависеть от времени. Рассмотрим прежде всего переход от уравнений Дирака, представленных равенствами (19.3) и (19.5), к уравнению Паули, в котором учитывается влияние спиновых эффектов при наличии магнитного поля, т. е. члены порядка $\frac{v}{c}$, и отбрасываются релятивистские поправки, т. е. величины порядка $\left(\frac{v}{c}\right)^2$.

Принимая во внимание, что $E - e\Phi = \frac{m_0v^2}{2}$, мы можем в данном приближении пренебречь величиной $\frac{E - e\Phi}{2m_0c^2}$ по сравнению с единицей.

Тогда из (19.5) найдем:

$$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{(\sigma'P)}{2m_0c} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (19.6)$$

Отсюда еще раз убеждаемся, что при положительной энергии «малые» компоненты $\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ имеют порядок $\left(\frac{v}{c}\right)$ относительно «больших» $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$, поскольку $\frac{P}{m_0c} \sim \frac{v}{c}$.

Подставляя (19.6) в (19.3), мы исключим «малые» компоненты, а для определения «больших» получим уравнение:

$$(E - e\Phi) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0} (\sigma'P) (\sigma'P) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

Далее, принимая во внимание равенство¹⁾:

$$(\sigma'a)(\sigma'b) = (ab) + i(\sigma'[ab]), \quad (19.7)$$

¹⁾ Для того чтобы обосновать это равенство, представим левую часть (19.7) в виде:

$$(\sigma'a)(\sigma'b) = (\sigma'_1a_x + \sigma'_2a_y + \sigma'_3a_z)(\sigma'_1b_x + \sigma'_2b_y + \sigma'_3b_z).$$

Учитывая, что $\sigma_1^2 = I$ и т. д., $\sigma'_1\sigma'_2 = -\sigma'_2\sigma'_1 = i\sigma'_3$ и т. д. [см. (16.39), (16.40)], будем иметь:

$$\begin{aligned} (\sigma'a)(\sigma'b) = & a_xb_x + a_yb_y + a_zb_z + i\sigma'_3(a_xb_y - a_yb_x) + \\ & + i\sigma'_2(a_zb_x - a_xb_z) + i\sigma'_1(a_yb_z - a_zb_y), \end{aligned}$$

откуда и следует (19.7).

справедливое как в случае матриц Паули, так и в случае матриц Дирака, будем иметь:

$$(\sigma'P)(\sigma'P) = P^2 + i(\sigma'[PP]).$$

Подставляя сюда значение для:

$$P = p - \frac{e}{c}A,$$

находим:

$$[PP]\psi = -\frac{e}{c}([pA] + [Ap])\psi.$$

Учитывая, что оператор p действует на все функции, стоящие справа от него, мы можем написать:

$$[pA]\psi = -[Ap]\psi + \psi[pA] = -[Ap]\psi + \frac{\hbar}{i}H\psi,$$

где $H = \text{rot } A$ — напряженность магнитного поля. Следовательно,

$$[PP]\psi = -\frac{e\hbar}{ic}H\psi,$$

и поэтому

$$(\sigma'P)(\sigma'P) = P^2 - \frac{e\hbar}{c}(\sigma'H).$$

Таким образом, уравнение Дирака при учете членов, пропорциональных только $\left(\frac{v}{c}\right)$, переходит в уравнение Паули [см. (16.33)]:

$$\left(E - e\Phi - \frac{P^2}{2m_0} + \frac{e\hbar}{2m_0c}(\sigma'H)\right)\psi = 0. \quad (19.8)$$

Появление дополнительного выражения для энергии электрона в магнитном поле:

$$V_{\text{магн}} = -(\mu H)$$

автоматически приводит к существованию магнитного момента электрона:

$$\mu = \frac{e\hbar}{2m_0c}\sigma', \quad (19.9)$$

величина которого в теории Паули постулировалась, исходя из анализа экспериментальных данных.

Заметим, что, поскольку этот магнитный момент (его называют кинематическим или дираковским магнитным моментом) появляется при переходе к нерелятивистскому приближению, учитывающему только члены первого порядка малости по $\frac{v}{c}$, дополнительная энергия $V_{\text{магн}}$ относительно нерелятивистских энергий будет иметь порядок $\frac{v}{c}$.

Принимая во внимание значение механического момента электрона [см. (18.6)]:

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}',$$

находим требуемое из опытов Штерна—Герлаха соотношение:

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{m_0 c} \mathbf{S}, \quad (19.10)$$

являющееся следствием теории Дирака.

Рассмотрим теперь влияние релятивистских и спиновых эффектов на движение электрона в электрическом (например, кулоновском) поле. Для этого в уравнении Дирака мы должны удержать наряду с нерелятивистскими членами также члены порядка $\left(\frac{v}{c}\right)^2$.

Кроме того, при переходе в указанном приближении от четырехкомпонентных функций к двухкомпонентным мы должны произвести «перенормировку» исходя из соотношения:

$$(\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = (\Psi_1^* \Psi_2^*) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \quad (19.11)$$

Полагая в (19.5) $\mathbf{A} = 0$, а также

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (\psi_1^* \psi_2^*) = (\Psi_1^* \Psi_2^*) N,$$

получим следующее выражение «малых» компонент через «большие»:

$$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0 c} \left(1 - \frac{E - e\Phi}{2m_0 c^2}\right) (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{p}) N \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \quad (19.12)$$

Принимая во внимание, что $(\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{p}) = p^2$, и удерживая в дальнейшем только члены, не превышающие второго порядка малости $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ с помощью условия «перенормировки» (19.11), находим:

$$(\Psi_1^* \Psi_2^*) \left(N^2 + N \frac{p^2}{4m_0^2 c^2} N \right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = (\Psi_1^* \Psi_2^*) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}.$$

Отсюда получаем:

$$N = 1 - \frac{p^2}{8m_0^2 c^2}, \quad (19.13)$$

в чем нетрудно убедиться, подставляя это значение N в предыдущее равенство, и поэтому в данном приближении:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left(1 - \frac{p^2}{8m_0^2 c^2}\right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (19.14)$$

$$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0 c} \left(1 - \frac{E - e\Phi}{2m_0 c^2} - \frac{p^2}{8m_0^2 c^2}\right) (\boldsymbol{\sigma}' \mathbf{p}) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}.$$

Между прочим заметим, что в приближении Паули (учитывающем только члены порядка $\frac{v}{c}$) перенормировочный коэффициент обращается в единицу.

Подставляя последние выражения в уравнение (19.3), будем иметь:

$$\begin{aligned} & \left\{ E - e\Phi - \frac{1}{8m_0^3c^2} (E - e\Phi) p^2 \right\} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \\ & = \left\{ \frac{p^2}{2m_0} - (\sigma' p) \frac{E - e\Phi}{4m_0^2c^2} (\sigma' p) - \frac{p^4}{16m_0^3c^2} \right\} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Для дальнейших преобразований воспользуемся следующими соотношениями¹⁾:

$$\begin{aligned} (\sigma' p) (E - e\Phi) (\sigma' p) &= (E - e\Phi) p^2 - i\hbar e (\sigma' E) (\sigma' p) = \\ &= (E - e\Phi) p^2 - i\hbar e (\mathbf{E} p) + e\hbar (\sigma' [E p]) \end{aligned} \quad (19.15)$$

и

$$\frac{p^4}{2m_0} = p^2 (E - e\Phi) = (E - e\Phi) p^2 + \frac{2\hbar e}{i} (\mathbf{E} p) + \hbar^2 e \nabla^2 \Phi, \quad (19.16)$$

где $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$ — вектор напряженности электрического поля, а операторы ∇ и ∇^2 действуют только на потенциал Φ .

Тогда уравнение Дирака в рассматриваемом приближении примет вид:

$$\left(E - e\Phi - \frac{p^2}{2m_0} \right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = V' \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix},$$

где дополнительная к нерелятивистскому уравнению Шредингера энергия, имеющая порядок $\left(\frac{v}{c}\right)^2$, равна:

$$V' = -\frac{p^4}{8m_0^3c^2} - \frac{e\hbar}{4m_0^2c^2} (\sigma' [E p]) + \frac{\hbar^2 e}{8m_0^3c^2} \nabla^2 \Phi. \quad (19.17)$$

Левая часть уравнения (19.17) описывает движение частицы в нерелятивистском приближении в постоянном во времени электрическом поле. В правой части уравнения (19.17) стоит дополнительная энергия взаимодействия, описывающая релятивистские и спиновые поправки.

Первый член в правой части последнего равенства:

$$V^{\text{рел.}} = -\frac{p^4}{8m_0^3c^2} \quad (19.18)$$

дает поправку на релятивистскую скорость частицы. Аналогичная дополнительная энергия должна появиться также и

¹⁾ Соотношения (19.15), (19.16) носят операторный характер и поэтому для их доказательства необходимо оператором \mathbf{p} и матрицей σ' действовать еще и на подразумеваемую справа волновую функцию.

в релятивистском уравнении Клейна—Гордона. Классический аналог этого члена мы получим, если релятивистское выражение для гамильтониана разложим в ряд, удерживая члены порядка $\left(\frac{v}{c}\right)^2$:

$$H = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} = m_0 c^2 + \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2}.$$

Следующий член разложения характеризует так называемое *спин-орбитальное взаимодействие*:

$$V_{\text{с. о.}} = -\frac{e\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma}' [E\mathbf{p}]), \quad (19.19)$$

которое описывает взаимодействие движущегося магнитного момента с электрическим полем.

Появление этого взаимодействия может быть интерпретировано в классической теории следующим образом: движущийся со скоростью \mathbf{v} магнитный момент, как пространственная составляющая тензорной величины, приобретает дополнительный электрический момент, являющийся пространственно-временной составляющей той же тензорной величины:

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{эл.}} = \frac{1}{c} [\mathbf{v}\boldsymbol{\mu}] = \frac{1}{m_0 c} [\mathbf{p}\boldsymbol{\mu}]. \quad (19.20)$$

Благодаря появлению $\boldsymbol{\mu}_{\text{эл.}}$ электрон получает дополнительное взаимодействие с электрическим полем ядра:

$$V^{\text{кл.}} = -(\mathbf{E}\boldsymbol{\mu}_{\text{эл.}}) = -\frac{e\hbar}{2m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma}' [E\mathbf{p}]). \quad (19.21)$$

Это классическое выражение для энергии взаимодействия в два раза больше соответствующего квантового выражения [см. (19.19)]. Заметим, что еще до появления теории Дирака была сделана попытка объяснить тонкую структуру с помощью полуклассического введения спин-орбитального взаимодействия. Однако, чтобы получить согласие с экспериментом, Томас и Я. И. Френкель предложили в классическом выражении для энергии взаимодействия (19.21) поставить коэффициент $1/2$. Это взаимодействие, которое совершенно автоматически следует из теории Дирака, получило название *поправки Томаса—Френкеля*¹⁾.

В частности для кулоновского поля ядра:

$$\Phi = \frac{Ze_0}{r}, \quad \mathbf{E} = \frac{Ze_0 \mathbf{r}}{r^3}, \quad e = -e_0. \quad (19.22)$$

Взаимодействие движущегося магнитного момента с ядром, согласно (19.19), становится равным:

$$V_{\text{с. о.}} = \frac{Ze_0^2 (\mathbf{S}\mathbf{L})}{2m_0^2 c^2 r^3}, \quad (19.23)$$

где $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}'$ — спиновый, а $\mathbf{L} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]$ — орбитальный моменты.

¹⁾ Я. И. Френкель, Волновая механика, т. 2, М.—Л., 1938; см. также (16.11), где коэффициент $1/2$ появляется у магнитного момента, создаваемого движущимся зарядом.

Заметим, что спин-орбитальное взаимодействие должно отсутствовать для s -состояния, у которого орбитальный момент обращается в нуль. Наконец, последний член взаимодействия, который в случае кулоновского поля равен¹⁾:

$$V_{\text{конг.}} = \frac{\hbar^2 e}{8m_0^3 c^2} \nabla^2 \Phi = \frac{\pi \hbar^2 Z e_0^2}{2m_0^3 c^2} \delta(r), \quad (19.24)$$

носит название *контактного взаимодействия*. Соответствующая ему дополнительная энергия:

$$\Delta E_{\text{конг.}} = \int \Psi^\dagger V_{\text{конг.}} \Psi d^3x, \quad (19.25)$$

пропорциональная $|\Psi(0)|^2$, будет отлична от нуля лишь для s -состояния, поскольку только в этом случае, согласно (13.28а), $|\Psi(0)|^2 \neq 0$. Для всех других же состояний ($l \neq 0$) этот квадрат волновой функции при $r=0$ обращается в нуль. В этом смысле контактный член можно рассматривать как спин-орбитальное взаимодействие для s -состояний. Таким образом, два последних члена в энергии взаимодействия (19.17) характеризуют спиновые свойства электрона.

Задача 19.1. Показать, что матрица α является оператором скорости и что в случае свободного движения α не является, в противоположность оператору импульса ($\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$), интегралом движения. В чем должно проявляться это различие? Определить, в каком случае средние значения, вычисленные по формуле:

$$\mathbf{v} = \int \psi^\dagger \alpha \psi d^3x \text{ и т. д.},$$

будут связаны между собой классическим соотношением:

$$\mathbf{v} = c^2 \frac{\mathbf{p}}{E}. \quad (19.26)$$

Указание. Исходя из гамильтониана (17.21) можно определить оператор скорости:

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{i}{\hbar} (H\mathbf{r} - \mathbf{r}H) = \alpha c,$$

а также можно показать, что скорость не является интегралом движения, так как $\dot{\alpha} \neq 0$. Это приводит к тому, что если с заданным \mathbf{k} взять линейную комбинацию состояний как с положительной энергией [см. (18.53)], так и с отрицательной [см. (18.54)], то останутся интерференционные члены, зависящие от времени ($\sim e^{\pm 2ic\mathbf{k}t}$), благодаря чему теоремы Эренфеста в теории Дирака будут выполняться лишь в среднем. Интерференционные члены должны отсутствовать при вычислении среднего значения оператора импульса.

Соотношение (19.26) будет иметь место, если оставить состояния лишь с положительной энергией ($\epsilon = 1$).

¹⁾ При выводе уравнения (19.24) мы учли, что, согласно (4.78):

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(r) = -4\pi\delta(x)\delta(y)\delta(z). \quad (19.24a)$$

§ 20. ТОНКАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРА ВОДОРОДОПОДОБНОГО АТОМА

а. Постановка вопроса

Задача о движении электрона в водородоподобном атоме (проблема Кеплера) по праву считается пробным камнем любого варианта квантовой теории. Это связано с двумя основными причинами. С одной стороны, это исследование имеет большое методическое значение, поскольку поле кулоновских сил допускает точное решение; с другой стороны, полученные результаты можно с высокой степенью точности сравнить с экспериментом, например, со спектрами излучения атомов, наблюдаемыми методами оптической спектроскопии и радиоспектроскопии.

Решение задачи о движении электрона в кулоновском поле ядра (атом водорода) на основе уравнения Шредингера, проведенное в § 13, дает выражение для энергии:

$$E_n^0 = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2}, \quad (20.1)$$

хорошо согласующееся с экспериментальными данными. Это выражение для энергии можно принять за нулевое приближение. Однако более детальное изучение спектров атомов показывает, что спектральные линии обладают тонкой структурой, которая, естественно, должна быть связана с мультиплетной структурой энергетических уровней. Теория Шредингера оказывается недостаточной для описания закономерностей в спектрах вследствие того, что она не учитывает по крайней мере двух важных факторов: релятивистской зависимости массы от скорости и спиновых свойств электрона. Оба эти фактора, как мы уже знаем, учитываются в теории Дирака, и поэтому применение уравнения Дирака в проблеме Кеплера дает результаты, хорошо описывающие мультиплетную структуру энергетических уровней.

Как было только что указано, решение проблемы Кеплера в теории Дирака можно произвести точно. Однако это решение в математическом отношении требует весьма громоздких выкладок (гораздо более сложных, чем по теории Шредингера, так как в данном случае мы будем иметь не одно, а четыре уравнения). Кроме того, за этими громоздкими выкладками не всегда удается уловить физический смысл полученных результатов, анализ которых для нас представляет основную ценность. Поэтому мы используем более элементарный метод решения, основанный на приближенных формулах предыдущего параграфа. Этот метод позволяет не только получить с точностью до членов порядка $\left(\frac{v}{c}\right)^2$

формулы, характеризующие тонкую структуру, но и дать интерпретацию отдельных членов как проявлений релятивистских или спиновых свойств электрона.

б. Учет релятивистских и спиновых эффектов

Как следует из § 18 [см. формулы (18.24) и (18.25)], волновая функция частицы, описываемой уравнением Дирака, с учетом спиновых свойств имеет вид:

$$\Psi = R_{nl} Y_{lm}^{(j)}. \quad (20.2)$$

Здесь $Y_{lm}^{(j)}$ — шаровой спинор, причем при $j = l + \frac{1}{2}$ спин параллелен орбитальному моменту, а при $j = l - \frac{1}{2}$ эти векторы будут антипараллельными, а R_{nl} — радиальная часть волновой функции.

Хотя члены порядка $(v/c)^2$ в уравнении (20.2) формально и не учтены, связь между шаровыми функциями в шаровом спиноре, определяющем нулевое приближение волновой функции, устанавливается спин-орбитальным взаимодействием, имеющим порядок $(v/c)^2$.¹⁾

Поэтому шаровым спинором можно пользоваться, когда на атом не действуют еще какие-то внешние возмущающие силы, по порядку величины более интенсивные, чем спин-орбитальные. Иначе спин-орбитальная связь будет нарушена, и соотношение между шаровыми функциями должно быть установлено исходя из новой постановки задачи.

Шаровые спиноры, так же как и шаровые функции, удовлетворяют уравнению:

$$\nabla_{\vartheta, \varphi}^2 Y_{lm}^{(j)} = -l(l+1) Y_{lm}^{(j)}; \quad (20.3)$$

поэтому, учитывая равенство (11.17), для определения радиальной функции в (20.2) находим такое же уравнение, которое было установлено в нерелятивистской теории Шредингера:

$$\nabla_r^2 R_{nl} + \left(\frac{2m_0 E_n^0}{\hbar^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{Ze_0^2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{nl} = 0.$$

Волновая функция (20.2) полностью определяет правила отбора для всех квантовых чисел. Правила отбора для квантовых чисел l , j и m_j задаются формулой (18.39), а правила отбора для главного квантового числа n , очевидно, будут такими же,

¹⁾ В квантовой механике известны случаи, когда малая энергия возмущения позволяет установить соотношение между коэффициентами функции в нулевом приближении. С аналогичным положением мы уже встречались при рассмотрении эффекта Штарка (см. § 14).

как и в теории Шредингера [см. (13.48в)], поскольку радиальную функцию мы оставляем без изменения. Учитывая все это, приходим к следующим правилам отбора в теории водородоподобного атома с учетом спиновых эффектов:

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta j = 0, \pm 1, \quad \Delta m_j = 0, \pm 1, \quad \Delta n \text{ — любое целое число.} \quad (20.4)$$

Что касается выражения для энергии, то мы не можем ограничиться в данной задаче ее нерелятивистским значением (20.1), так как последнее не определяет тонкой структуры энергетических уровней.

Зная же нулевое приближение волновой функции (20.2), а также дополнительную энергию взаимодействия, описывающую релятивистские [см. (19.18)] и спиновые [см. (19.23) и (19.24)] эффекты, можно найти соответствующие энергетические уровни, характеризующие мультиплетную структуру спектра.

Согласно формуле (19.18), релятивистская поправка к энергетическим уровням будет равна:

$$\Delta E^{\text{рел.}} = - \int (\Psi^{(j)})^+ \frac{p^4}{8m_0^3 c^2} \Psi^{(j)} d^3x. \quad (20.5)$$

Поскольку в рассматриваемом случае:

$$\begin{aligned} \frac{p^2}{2m_0} \Psi^{(j)} &= \left(E_n^0 + \frac{Ze_0^2}{r} \right) \Psi^{(j)}, \\ (\Psi^{(j)})^+ \frac{p^2}{2m_0} &= (\Psi^{(j)})^+ \left(E_n^0 + \frac{Ze_0^2}{r} \right), \end{aligned} \quad (20.6)$$

мы видим, что это дополнительное взаимодействие не будет зависеть от сферических углов ϑ , φ , т. е. при интегрировании по телесному углу мы будем иметь:

$$\oint d\Omega (Y_{lm}^{(j)})^+ Y_{lm}^{(j)} = 1. \quad (20.7)$$

Тогда для дополнительной энергии, характеризующей релятивистские эффекты, получим:

$$\begin{aligned} \Delta E^{\text{рел.}} &= - \frac{1}{2m_0 c^2} [(E_n^0)^2 + 2E_n^0 Z e_0^2 \langle r^{-1} \rangle + Z^2 e_0^4 \langle r^{-2} \rangle] = \\ &= - \frac{R\hbar Z^4 \alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right), \end{aligned} \quad (20.8)$$

где $\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$ — постоянная тонкой структуры.

При выводе последней формулы мы воспользовались равенством (13.29а):

$$\begin{aligned} \langle r^{-1} \rangle &= \frac{Z}{a_0} \frac{1}{n^2} = \frac{2R\hbar Z}{e_0^2 n^2}, \\ \langle r^{-2} \rangle &= \left(\frac{Z}{a_0} \right)^2 \frac{1}{n^3 (l+1/2)} = \frac{2RZ^2 m_0}{\hbar n^3 (l+1/2)}. \end{aligned}$$

Формула (20.8) точно совпадает с дополнительной релятивистской энергией, которая была вычислена в том же приближении при помощи релятивистского уравнения Клейна—Гордона [см. (15.31)].

Аналогичным способом с помощью формулы (19.23) найдем дополнительную энергию, обязанную спин-орбитальному взаимодействию:

$$\Delta E_{c.-o.} = \frac{Ze_0^2}{2m_0^2c^2} (\mathbf{SL}) \langle r^{-3} \rangle. \quad (20.9)$$

Воспользовавшись далее для $\langle r^{-3} \rangle$ выражением (13.29а):

$$\langle r^{-3} \rangle = \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \frac{1}{n^3 l(l+1/2)(l+1)},$$

а для (\mathbf{SL}) выражением (18.28):

$$(\mathbf{SL}) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2} q & \text{при } l \neq 0, \\ 0 & \text{при } l = 0, \end{cases}$$

получим для энергии (20.9) следующее значение¹⁾:

$$\Delta E_{c.-o.} = R\hbar \frac{Z^4 \alpha^2}{2n^3} \frac{q(1 - \delta_{l0})}{l(l+1/2)(l+1)}. \quad (20.10)$$

В последних формулах:

$$q = j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) = \begin{cases} l & \text{при } j = l + \frac{1}{2}, \\ -(l+1) & \text{при } j = l - \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (20.11)$$

а величина:

$$\delta_{l0} = \begin{cases} 0 & \text{при } l \neq 0, \\ 1 & \text{при } l = 0. \end{cases} \quad (20.12)$$

Наконец, для энергии, соответствующей контактному взаимодействию, согласно (19.24) получаем:

$$\Delta E_{\text{конт.}} = \pi \frac{\hbar^2 Ze_0^2}{2m_0^2c^2} |\Psi(0)|^2,$$

¹⁾ С первого взгляда может показаться, что спин-орбитальное взаимодействие, обратно пропорциональное кубу расстояния, не может дать устойчивых состояний. Однако это не так. На малых расстояниях спин-орбитальное взаимодействие ведет себя так же, как релятивистское, т. е. обратно пропорционально квадрату расстояния. Косвенным доказательством этого может служить тот факт, что $\Delta E_{c.-o.}$ отличается от $\Delta E^{\text{рел.}}$ лишь численным коэффициентом порядка единицы.

где

$$|\Psi(0)|^2 = R_{nl}^2(0) Y_{lm}^{(j)+} Y_{lm}^{(j)}. \quad (20.13)$$

Принимая далее во внимание выражение для:

$$|R_{nl}(0)|^2 = \frac{4}{n^3} \delta_{l0} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3$$

[см. (13.28a), а также, что $|Y_{lm}^{(j)}|^2 = \frac{1}{4\pi}$ при $l=0$ и $j = \frac{1}{2}$, находим:

$$|\Psi(0)|^2 = \frac{\delta_{l0}}{\pi n^3} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3, \quad (20.14)$$

т. е.

$$\Delta E_{\text{конт.}} = R\hbar \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \delta_{l0} \quad (20.15)$$

Отсюда для дополнительной энергии, в которой учтены релятивистские эффекты, а также спин-орбитальные и контактные взаимодействия, получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \Delta E_{\text{рел.}} + \Delta E_{\text{с.-о.}} + \Delta E_{\text{конт.}} = \\ &= -R\hbar \frac{Z^4 \alpha^2}{n^4} \left[\frac{n}{l + 1/2} - \frac{3}{4} - \frac{qn(1 - \delta_{l0})}{2l(l + 1/2)(l + 1)} - n\delta_{l0} \right]. \end{aligned}$$

Подставляя сюда значение q из (20.11), имеем²⁾:

$$\Delta E_{nj} = -R\hbar \frac{Z^4 \alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right). \quad (20.16)$$

Поэтому, суммируя оба результата (20.1) и (20.16), получаем

¹⁾ Кстати заметим, что формула (20.15) для контактного взаимодействия может быть получена как предел при $l \rightarrow 0$ выражения (20.10) для спин-орбитального взаимодействия, если в последнем отбросить множитель δ_{l0} , ограничивающий его применимость. Поэтому многие авторы получают формулу тонкой структуры, не вводя предположения о существовании контактного взаимодействия. Однако такое совпадение носит «случайный» характер, поскольку в числителе формулы (20.10) мы имеем для s -состояний нуль всегда, а в знаменателе — только в нерелятивистском приближении. В ряде других задач, например, при наличии в атоме нескольких электронов, энергия, связанная с контактным взаимодействием, не является уже пределом выражения для спин-орбитального взаимодействия.

²⁾ Эта задача в теории Дирака может быть решена точно. Тогда для определения энергетических уровней получается замкнутая формула, первый член разложения которой (не зависящий от α^2) дает нерелятивистскую формулу (20.1). Второй член, пропорциональный α^2 , дает дополнительную энергию (20.16). Третий член разложения, пропорциональный в данном приближении α^4 , нет смысла учитывать, так как он перекрывается более сильными, так называемыми вакуумными поправками, пропорциональными α^3 (см. § 22).

формулу тонкой структуры спектра водородоподобного атома¹⁾:

$$E_{nj} = E_n^0 + \Delta E_{nj} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (20.17)$$

Отсюда видно, что расщепление уровней пропорционально квадрату постоянной тонкой структуры.

в. Исследование тонкой структуры по теории Дирака

С учетом тонкой структуры положение энергетических уровней атома водорода оказывается зависящим также от внутреннего квантового числа j . Поэтому термы будем обозначать следующим образом:

$$(nl_j) = -\frac{E_{nlj}}{\hbar} = \frac{RZ^2}{n^2} \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (20.18)$$

Из этой формулы видно, что тонкая структура по теории Дирака зависит лишь от главного квантового числа n и внутреннего квантового числа j . От орбитального же квантового числа l , в противоположность бесспиновой теории Клейна—Гордона, тонкая структура уровней не зависит. Из приведенной на фиг. 20.1 схемы видно, что все термы являются двукратно расщепленными, так как каждому значению l соответствуют два значения j ; например, вместо одного терма $2p$ ($l=1$) имеем теперь два терма $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$. Исключения представляют s -термы ($l=0$), для которых j может принимать лишь одно значение ($j = \frac{1}{2}$). Таким об-

¹⁾ Точное решение уравнения Дирака дает следующее обобщение формулы (15.30), учитывающей релятивистские эффекты на случай наличия также и спина:

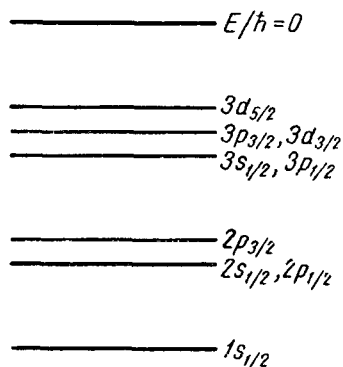
$$E_{nj} = m_0 c^2 \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{\left(n - j - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - Z^2 \alpha^2} \right)^2} \right]^{-1/2} - m_0 c^2. \quad (20.17a)$$

Формула (20.17) может быть получена из (20.17a), если последнюю разложить в ряд и ограничиться первыми двумя членами.

Поскольку минимальное значение $j = \frac{1}{2}$, мы найдем, что устойчивое движение в кулоновском поле точечного ядра будет, согласно теории Дирака, простирается до $Z_{кр.} = 137$, в то время как в теории Клейна—Гордона оно было ограничено $Z_{кр.} = \frac{1}{2} \cdot 137$ [см. (15.33)]. Такое увеличение $Z_{кр.}$ связано с тем обстоятельством, что спиновые эффекты, как было уже отмечено, несколько компенсируют релятивистские.

разом, учет релятивистских и спиновых эффектов несколько понижает, но не расщепляет s -термы (см. фиг. 20.1).

Заметим, что благодаря расщеплению энергетических уровней кратность вырождения несколько изменяется. В самом деле, главное квантовое число может принимать следующие значения: $n = 1, 2, 3, 4, \dots$. Орбитальное квантовое число l изменяется в пределах от $l = 0$ (s -состояние) до $n - 1$. Внутреннее квантовое число j принимает значения $j = l \pm \frac{1}{2}$ ($l \neq 0$) и $j = \frac{1}{2}$ ($l = 0$) и, наконец, магнитное квантовое число $m_j = -j, \dots, +j$, т. е.



Фиг. 20.1. Схема энергетических уровней атома водорода.

при заданном j оно принимает $2j + 1$ полуцелых значений. Таким образом, кратность вырождения, характерная для любого центрального поля, связанная с равноправностью различных направлений, для частиц спина $\frac{1}{2}$ равняется $2j + 1$ (напомним, что для бесспиновых частиц она равнялась $2l + 1$). Кроме того, в случае кулоновского поля остается еще специфическое вырождение по l (так как энергия от l не зависит). Поскольку при заданном j квантовое число l может принимать два значения $l = j \pm \frac{1}{2}$, то полная кратность вырождения в кулоновском поле будет равна $2(2j + 1)$. Исключением является состояние с максимальным значением $j = n - \frac{1}{2}$, поскольку l в этом случае может принимать

лишь одно значение $l = j - \frac{1}{2}$ (напомним, что состояние с $l = n$ запрещено). Для него кратность вырождения будет равна $2j + 1$. Заметим, что любое нарушение кулоновского поля точечного заряда (учет конечности размеров ядра, учет вакуумных поправок, который будет рассмотрен в § 21) полностью снимает вырождение по l .

При определении величины расщепления спектральных линий необходимо учесть правила отбора (20.4). Тогда вместо одной линии серии Лаймана будем иметь две:

$$\omega^{(1)} = (1s_{1/2}) - (np_{1/2}),$$

(линия слабой интенсивности, так как $\Delta j = 0$),

$$\omega^{(2)} = (1s_{1/2}) - (np_{3/2}). \quad (20.19)$$

Для линий серии Бальмера будем иметь следующие расщепления:

$$\begin{aligned}
 \omega^{(1)} &= (2s_{1/2}) - (np_{1/2}), \\
 \omega^{(2)} &= (2s_{1/2}) - (np_{3/2}), \\
 \omega^{(3)} &= (2p_{1/2}) - (ns_{1/2}), \\
 \omega^{(4)} &= (2p_{1/2}) - (nd_{3/2}), \\
 \omega^{(5)} &= (2p_{3/2}) - (ns_{1/2}), \\
 \omega^{(6)} &= (2p_{3/2}) - (nd_{3/2}), \\
 \omega^{(7)} &= (2p_{3/2}) - (nd_{5/2}),
 \end{aligned} \tag{20.20}$$

и, наконец, линия $(2p_{1/2}) - (nd_{5/2})$ будет отсутствовать, так как в этом случае $\Delta j = 2$ (запрещенный переход).

Заметим, что если вырождение по l не снято, то линии $\omega^{(1)}$ и $\omega^{(3)}$ (а также $\omega^{(2)}$ и $\omega^{(4)}$) будут совпадать друг с другом, поскольку начальный и конечный уровни имеют одно и то же значение для главного n и внутреннего j квантовых чисел. Аналогичным способом можно определить закон расщепления для других линий. При этом низшим энергетическим уровнем, претерпевающим расщепление, является уровень $n=2$. В случае атома водорода ($Z=1$) расщепление этого уровня наиболее тщательно изучалось экспериментально. Вообще говоря, уровень $n=2$ должен расщепляться на три, причем, согласно изложенной здесь теории, два из этих уровней оказываются слившимися:

$$\begin{aligned}
 (2s_{1/2}) &= (2p_{1/2}) = \frac{R}{4} \left[1 + \frac{\alpha^2}{4} \left(2 - \frac{3}{4} \right) \right], \\
 (2p_{3/2}) &= \frac{R}{4} \left[1 + \frac{\alpha^2}{4} \left(1 - \frac{3}{4} \right) \right].
 \end{aligned} \tag{20.21}$$

Отсюда для частоты переходов между этими уровнями, согласно теории Дирака, находим:

$$\Delta\omega^D = (2p_{1/2}) - (2p_{3/2}) = R \frac{\alpha^2}{16}, \tag{20.22}$$

что составляет $1,095 \cdot 10^4 \text{ Мгц}^1$.

В то же время с учетом лишь релятивистских эффектов (уравнение Клейна—Гордона) соответствующее расщепление равно [см. (15.32)]:

$$\Delta\omega^{K.-Г.} = (2s) - (2p) = \frac{8}{3} R \frac{\alpha^2}{16}, \tag{20.23}$$

т. е. почти в три раза больше расщепления, найденного по теории Дирака. Таким образом, учет спиновых свойств частиц несколько уменьшает влияние релятивистских эффектов.

Эксперимент с большой точностью подтвердил правильность выводов теории Дирака.

¹) $1 \text{ Мгц} = 10^6 \text{ сек}^{-1}$, т. е. круговая частота ω , выраженная в сек^{-1} , связана с частотой ν , выраженной в Мгц , соотношением

$$\omega = 2\pi \cdot 10^6 \nu.$$

В связи с этим интересно отметить, что тонкая структура спектра атома водорода теоретически впервые была рассчитана Зоммерфельдом по классической теории Бора, причем в основу теории было положено релятивистское выражение для гамильтониана. Зоммерфельд получил [см. (2.61)] для бесспиновой релятивистской теории выражение (20.22):

$$\Delta_{\text{Зомм.}} = (2s) \quad (2p) = \frac{h^2 \alpha^2}{16}. \quad (20.24)$$

Однако такое совпадение этого результата Зоммерфельда с выводом теории Дирака оказалось до некоторой степени случайным, поскольку в теории Зоммерфельда не были учтены спиновые эффекты, и поэтому с помощью его теории невозможно было предсказать существование при $n=2$ трех уровней, наличие которых затем было подтверждено экспериментально.

г. Экспериментальная проверка теории тонкой структуры

Большим достижением теории Дирака является объяснение в хорошем согласии с экспериментом тонкой структуры атомных спектров, как результата проявления релятивистских и спиновых эффектов. Однако более тщательные исследования не давали убедительных данных о полном согласии теории и опыта. Предметом специальных исследований явился вопрос об уровнях $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$, которые согласно теории Дирака [см. (20.21)] в атоме водорода должны точно совпадать друг с другом. Уже примерно в 1934 г. спектроскописты высказывали сомнение в правильности этого теоретического заключения; но так как опыты не позволяли повысить точность измерений, а обнаруженное ими оптическим методом расхождение с теорией, т. е. расщепление этих уровней, было весьма незначительным, на это обстоятельство не было обращено особого внимания. Полная достоверность в экспериментальных данных относительно указанного расщепления была достигнута значительно позднее после применения наряду с оптическими также и радиоспектроскопическими методами исследования.

Радиоспектроскопический метод возник и получил бурное развитие в послевоенные годы в результате технического прогресса в микроволновой радиотехнике¹⁾. Радиоспектроскопия, выделив-

¹⁾ Под микроволновым сверхвысокочастотным радиоизлучением понимают область электромагнитного спектра, заключенную между длинами волн от миллиметра до десятков сантиметров (10^6 — 10^8 Мгц). Успех радиоспектроскопии в применении к исследованию спектров атомов связан с тем обстоятельством, что расстояния между компонентами уровней, расщепленных благодаря релятивистским, спиновым и вакуумным эффектам, соответствуют длинам волн радиочастотного диапазона.

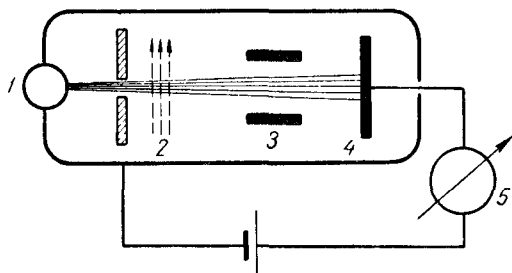
шаяся сейчас в особую область физики, дает ценные результаты при исследовании ядер, атомов и молекул. Радиоспектроскопические методы находят приложение также в физике твердых и жидких тел и др.

В 1947 г. Лэмб и Ризерфорд применили радиоспектроскопический метод к исследованию положения уровней $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$. При этом они воспользовались особым свойством $2s_{1/2}$ -состояния. Это состояние является метастабильным, т. е. дипольный переход из него в нижнее состояние $1s_{1/2}$ запрещен правилами отбора, поскольку в этом случае $\Delta l = 0$, а для разрешенных переходов $\Delta l = \pm 1$ [см. формулу (20.4)]¹.

Переход из метастабильного состояния возможен или с испусканием двух фотонов (вероятность такого перехода уменьшается по сравнению с разрешенным переходом в 10^8 раз), или с предварительным переходом на уровни $2p$. Лэмб и Ризерфорд поставили своей целью исследовать последний способ перехода.

Опишем в общих чертах схему их опыта (см. фиг. 20.2). Пучок атомов в невозбужденном $1s_{1/2}$ -состоянии получается в результате диссоциации молекулярного водорода при высокой температуре (вольфрамовая печь). Бомбардирующий поток электронов возбуждает далее некоторую часть атомов пучка (примерно один из ста миллионов) до метастабильного состояния $2s_{1/2}$. Метастабильные атомы, в противоположность невозбужденным, при попадании на металлическую мишень легко отдают свою энергию возбуждения, вырывая электроны из металла. Электронный ток измерялся чувствительным гальванометром.

Если пучок метастабильных атомов подвергнуть воздействию возмущения, которое вызывает переходы $2s \rightarrow 2p$, то в этом случае атомы практически мгновенно вслед за этим переходят в $1s_{1/2}$ -со-



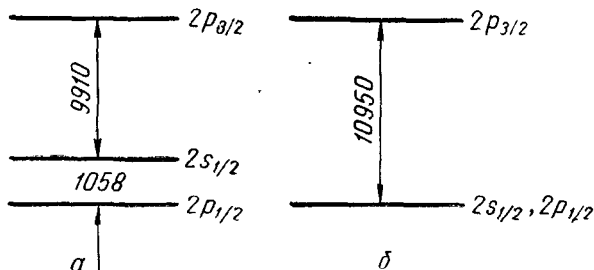
Фиг. 20.2. Схема опытов Лэмба — Ризерфорда по экспериментальному обнаружению расщепления уровней $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$:

1 — вольфрамовая печь, испускающая пучок атомов водорода; 2 — поток электронов, возбуждающих атомы водорода; 3 — радиочастотное поле; 4 — мишень; 5 — гальванометр.

¹) Это справедливо для дипольного перехода, однако расчет показывает, что между состояниями $1s_{1/2}$ и $2s_{1/2}$ запрещен также и квадрупольный переход.

стояние, не успевая достигнуть мишени, в результате чего ток в гальванометре уменьшается.

Такие переходы в опыте Лэмба и Ризерфорда индуцировались радиочастотным излучением (вероятность соответствующего спонтанного перехода, пропорциональная ω^4 , исчезающе мала вследствие малости ω), причем при некоторой частоте наблюдается сильное гасящее действие, в результате которого ток на мишень прекращается. Эта частота ω истолковывается как резонансная, вызывающая вынужденные переходы $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ или $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ с последующим практически мгновенным переходом на уровень $1s_{1/2}$; энергия $\hbar\omega$ соответствует разности энергий между этими состоя-



Фиг. 20.3. Расщепление термов в атоме водорода: *а* — экспериментальные данные; *б* — по теории Дирака (без учета вакуумных эффектов). Частоты соответствующих переходов указаны в мегагерцах.

ниями. Таким образом, открывается возможность весьма точного измерения относительного положения уровней:

$$2s_{1/2}, 2p_{1/2} \text{ и } 2p_{3/2}^1).$$

В результате проведенных измерений было установлено, что уровень $2s_{1/2}$ сдвинут вверх относительно уровня $2p_{1/2}$ примерно на $1/10$ часть расстояния между уровнями дублета ($2p_{1/2}$) — ($2p_{3/2}$) равного $\frac{\alpha^2}{16}R$. Расположение уровней водородоподобного атома при $n=2$, полученное на основе опытов Лэмба и Ризерфорда, приведено на фиг. 20.3. Для сравнения там же приведено расположение тех же уровней по теории Дирака. Расстояния между уровнями даны в мегагерцах. Согласно новейшим данным сдвиг

¹⁾ В опытах Лэмба и Ризерфорда фиксировалась волна радиочастотного излучения, а условие резонанса, которое соответствовало разности зеемановских компонент между состояниями $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ или $2p_{3/2}$, подбиралось путем изменения магнитного поля \mathcal{H} . Затем, экстраполируя результаты на случай $\mathcal{H} = 0$, авторы находили сдвиг уровня.

уровня $2s_{1/2}$ составляет примерно $1057,77 \text{ Мгц}$, или в длинах волн $\sim 28 \text{ см}$.

Это, казалось бы, ничтожное расхождение теории и эксперимента привело к замечательному прогрессу в теоретической физике, и, в частности, в квантовой электродинамике. Этот вопрос будет рассмотрен более подробно в § 22.

д. Аномальный эффект Зеемана

Полная теория эффекта Зеемана как аномального, так и нормального может быть построена только на основе теории Дирака, в которой учитываются не только релятивистские, но и спиновые эффекты.

Это связано с тем обстоятельством, что аномальный эффект Зеемана обусловлен спиновыми свойствами атома и поэтому, естественно, ни классическая теория, ни волновая механика Шредингера не могли его удовлетворительно объяснить.

В основу теории положим приближенное уравнение Дирака (19.17), в котором с точностью до членов $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ учтены эти эффекты. Пусть магнитное поле направлено по оси z , т. е. $H_x = H_y = 0$, $H_z = \mathcal{H}$. Тогда, учитывая, что, согласно (16.16),

$$\frac{p^2}{2m_0} \cong \frac{p^2}{2m_0} + \frac{e_0}{m_0 c} (\mathbf{A} \mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m_0} - \mu_0 i \mathcal{H} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (20.25)$$

приводим уравнение (19.17), описывающее движение электрона в кулоновом поле ядра, к виду:

$$\left(E + \frac{Ze_0^2}{r} - \frac{p^2}{2m_0}\right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = (V_{\text{рел.}} + V_{\text{с.-о.}} + V_{\text{конт.}} + V_{\text{магн.}}) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (20.26)$$

где $V_{\text{рел.}}$, $V_{\text{с.-о.}}$ и $V_{\text{конт.}}$ определяются соответственно формулами (19.18), (19.23) и (19.24) и при своем усреднении:

$$\Delta E_{nj} = \int (\Psi_1^* \Psi_2^*) (V_{\text{рел.}} + V_{\text{с.-о.}} + V_{\text{конт.}}) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} d^3x \quad (20.27)$$

дают формулу тонкой структуры (20.16), т. е. ¹⁾

$$\Delta E_{nj} = -R\hbar \frac{Z^4 \alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right). \quad (20.28)$$

¹⁾ Вообще говоря, в данном случае основную роль играет спин-орбитальное взаимодействие $V^{\text{с.-о.}}$. Однако, поскольку релятивистские члены того же порядка, что и спин-орбитальное взаимодействие, мы можем положить

$$\Delta E^{\text{с.-о.}} \sim \Delta E_{nj}$$

При наличии магнитного поля получаем в правой части (20.26) взаимодействие:

$$V_{\text{магн.}} = \mu_0 \mathcal{H} \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \sigma_3' \right), \quad (20.29)$$

которое дает следующее значение для дополнительной энергии атома:

$$\Delta E_{\text{магн.}} = \mu_0 \mathcal{H} \int (\Psi_1^* \Psi_2^*) \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \sigma_3' \right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} d^3x. \quad (20.30)$$

Следует заметить, что в правой части уравнения (20.26) от соотношения между дополнительными энергиями и зависит появление либо аномального (случай слабого магнитного поля), либо нормального (случай сильного магнитного поля) эффекта Зеемана.

Допустим, что мы имеем сравнительно слабое магнитное поле, взаимодействие атомных электронов с которым будет меньше, чем релятивистское или спин-орбитальное взаимодействие.

Тогда за нулевое приближение мы должны взять волновые функции (20.2), которые получены при сохранении спин-орбитальной связи.

Подставляя эти функции в (20.30), для дополнительной энергии получаем выражение:

$$\Delta E_{\text{магн.}} = \mu_0 \mathcal{H} \int_0^{\infty} |R_{nl}|^2 r^2 dr \oint d\Omega (Y_{lm}^{(j)})^+ \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \sigma_3' \right) Y_{lm}^{(j)}. \quad (20.31)$$

В последнем равенстве следует принять во внимание, что интеграл по r равняется единице:

$$\int_0^{\infty} |R_{nl}|^2 r^2 dr = 1. \quad (20.32)$$

Подставляя же вместо шаровых спиноров их значения из (18.24) и (18.25) и учитывая при этом условие ортогональности для шаровых функций:

$$\oint (Y_l^m)^* (Y_l^m) d\Omega = 1,$$

находим следующее выражение для дополнительной энергии при $j = l + \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{магн.}} &= \frac{\mu_0 \mathcal{H}}{2l+1} [(l+m)m + (l+1-m)(m-1)] = \\ &= \mu_0 \mathcal{H} \left(m - \frac{1}{2} \right) \frac{2(l+1)}{2l+1}. \end{aligned}$$

Точно так же при $j = l - \frac{1}{2}$ будем иметь:

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{магн.}} &= \frac{\mu_0 \mathcal{H}}{2l+1} [(l-m+1)m + (l+m)(m-1)] = \\ &= \mu_0 \mathcal{H} \left(m - \frac{1}{2}\right) \frac{2l}{2l+1}. \end{aligned}$$

Отсюда, учитывая, что $m_j = m - \frac{1}{2}$, оба последних выражения можно записать в виде одной формулы:

$$\Delta E_{\text{магн.}} = \mu_0 \mathcal{H} g m_j = \circ \hbar g m_j, \quad (20.33)$$

где $\circ = \frac{e_0 \mathcal{H}}{2m_0 c}$ — частота ларморовой прецессии, а множитель Ланде равен:

$$g = \frac{j + \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2}}. \quad (20.34)$$

Таким образом, в случае аномального эффекта Зеемана в дополнительной энергии появляется множитель Ланде g , который в случае нормального эффекта Зеемана [см. (16.23)] равнялся единице.

Дополнительная энергия (20.33) ведет не к обычному триплетному расщеплению (нормальный эффект Зеемана), а дает более сложную картину расщепления (аномальный эффект Зеемана).

Ввиду того, что m_j может принимать $2j+1$ различных значений, каждый уровень при аномальном эффекте Зеемана расщепляется на $2j+1$ отдельных подуровней, т. е. внешнее магнитное поле полностью снимает вырождение, имеющее место даже в релятивистской теории атома водорода.

Для получения картины расщепления необходимо учесть значения множителя Ланде ($g=2$ для $s_{1/2}$ -состояний, $g=\frac{2}{3}$ для $p_{1/2}$ -состояний, $g=\frac{4}{3}$ для $p_{3/2}$ -состояний и т. д.), а также правила отбора для магнитного квантового числа m_j . В частности, при $\Delta m_j = 0$ испускаются компоненты, поляризованные параллельно оси z (т. е. параллельно магнитному полю), а при $\Delta m_j = \pm 1$ находим компоненты, поляризованные перпендикулярно магнитному полю.

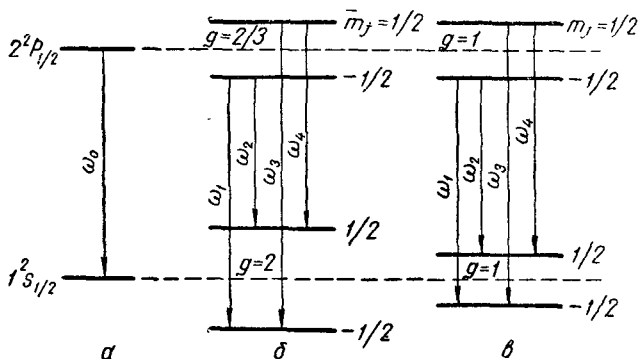
Формула (20.33) приводит нас к следующему значению для частоты излучения:

$$\omega = \omega_0 + \circ (g^0 m_j^0 - g m_j), \quad (20.35)$$

где ω_0 — частота излучения в отсутствие магнитного поля ($\mathcal{H} = 0$), g^0 и g — множители Ланде начального и конечного

состояний; магнитное квантовое число m_j конечного состояния может принимать три значения: $m_j = m_j^0, m_j^0 \pm 1$.

На фиг. 20.4, б изображено расщепление спектральных уровней $1^2s_{1/2}$ и $2^2p_{1/2}$ в слабом магнитном поле, причем за единицу расщепления взята ларморова частота. Из фиг. 20.4, б видно, что в этом случае мы будем иметь не три (как в случае нормального эффекта Зеемана), а четыре смещенные линии. Величина смещения определяется формулой (20.35).



Фиг. 20.4. Эффект Зеемана:

a — расположение уровней без поля; *б* — аномальный эффект Зеемана; *в* — нормальный эффект Зеемана.

В случае слабого поля [согласно (20.34)] мы находим:

$$g^0 = \frac{2}{3}, \quad g = 2.$$

Отсюда

$$\begin{aligned} \Delta\omega_1 = \omega_1 - \omega_0 &= \frac{2}{3} \omega, & \Delta\omega_2 &= -\frac{4}{3} \omega, \\ \Delta\omega_3 &= \frac{4}{3} \omega, & \Delta\omega_4 &= -\frac{2}{3} \omega. \end{aligned} \quad (20.36)$$

Формула (20.34) для множителя Ланде применима для атома водорода, а также для атомов, обладающих одним валентным электроном. В общем случае множитель Ланде принимает значение:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}, \quad (20.37)$$

где L , S и J — общие орбитальный, спиновый и полный моменты атомов, причем:

$$J = |L \pm S|.$$

В частности, для элементов первой группы ($J = j, L = l, s = \frac{1}{2}$) формулы (20.37) и (20.34) тождественно совпадают друг с другом. Для s -состояний ($l = 0, j = s = \frac{1}{2}$) множитель Ланде достигает максимального значения:

$$g_s = 2. \tag{20.38}$$

Для атомов с двумя электронами на внешней оболочке (например, атомов гелия), наряду с триплетным состоянием $S = 1$, возможны также одиночные линии ($S = 0, J = L$). Для последних мы имеем $g = 1$ и, следовательно, в этом случае спиновые эффекты никакой роли не должны играть, и мы должны при любых полях наблюдать нормальный эффект Зеемана, т. е. триплетное расщепление.

е. Случай сильных магнитных полей. Эффект Пашена — Бака

Как было указано, аномальный эффект Зеемана появляется в случае слабых полей, когда внешнее магнитное поле не может нарушить спин-орбитальную связь.

Математически это означает, что $\Delta E_{\text{магн.}}$ [см. (20.33)] будет много меньше естественного расщепления линий $\Delta E_{\text{с.-о.}}$, определяемого формулой (20.28):

$$\Delta E_{\text{с.-о.}} \gg \Delta E_{\text{магн.}} \tag{20.39}$$

В последнем случае сначала мы решали задачу с учетом спин-орбитального взаимодействия, что устанавливает связь между шаровыми функциями, образующими шаровой спинор (18.24) или (18.25), а затем находили дополнительную энергию, которая приводит к аномальному эффекту Зеемана, поскольку множитель Ланде g не равен единице.

В случае сильных полей, когда, наоборот, расщепление за счет внешнего магнитного поля больше, чем за счет спин-орбитального взаимодействия:

$$\Delta E_{\text{магн.}} \gg \Delta E_{\text{с.-о.}}, \tag{20.39а}$$

магнитное поле «разрывает» спин-орбитальную связь и решения для нулевого приближения, выраженные через шаровые спиноры [см. (18.24) и (18.25)], не будут уже иметь места.

В этом случае в уравнении (20.26) мы можем пренебречь взаимодействиями $V_{\text{рел.}}$, $V_{\text{с.-о.}}$ и $V_{\text{конт.}}$, и оно поэтому с учетом (20.29) примет вид:

$$\left(E + \frac{Ze_0^2}{r} - \frac{p^2}{2m_0} \right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \mu_0 \mathcal{H} \begin{pmatrix} -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \sigma_3' \\ \sigma_3' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \tag{20.40}$$

Учитывая, что функции Ψ_1 и Ψ_2 должны быть пропорциональны шаровой функции Y_l^m , причем $-i \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_l^m = m Y_l^m$, находим для этих волновых функций два независимых уравнения:

$$\begin{aligned} \left(E + \frac{Ze_0^2}{r} - \frac{p^2}{2m_0} - \mu_0 \mathcal{H} (m_1 + 1) \right) \Psi_1 &= 0, \\ \left(E - \frac{Ze_0^2}{r} - \frac{p^2}{2m_0} - \mu_0 \mathcal{H} (m_2 - 1) \right) \Psi_2 &= 0, \end{aligned} \quad (20.41)$$

из которых видно, что дополнительная энергия будет равна:

$$\Delta E_{m_s}^{\text{магн.}} = \mu_0 \mathcal{H} m, \quad (20.42)$$

а

$$\Delta (\Delta E_{m_s})^{\text{магн.}} = \mu_0 \mathcal{H} \Delta m,$$

т. е. волновая функция Ψ_1 соответствует случаю, когда спин электрона направлен по магнитному полю ($m_s = 1/2$), а волновая функция Ψ_2 — направлению спина против магнитного поля.

Так как мы выбрали такое значение m , которое для обеих функций будет давать одно и то же значение энергии, то для функции Ψ_1 мы должны будем положить $m_1 = m - 1$, а для функции Ψ_2 положить $m_2 = m + 1$.

В этом случае волновые функции:

$$\Psi_1 = R_{nl} Y_l^{m-1}, \quad \Psi_2 = R_{nl} Y_l^{m+1} \quad (20.43)$$

будут ортогональны друг другу, так что

$$\int \Psi_1^* \Psi_2 d^3x = \int_0^\infty |R_{nl}|^2 r^2 dr \oint d\Omega (Y_l^{m-1})^* Y_l^{m+1} = 0. \quad (20.44)$$

Поскольку взаимодействие атома с внешним магнитным полем (20.29) содержит только матрицу σ_3 , не смешивающую волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 , то под влиянием этого взаимодействия переходы из состояния с $m_s = \frac{1}{2}$ в состояние с $m_s = -\frac{1}{2}$ будут в данном случае запрещенными, и поэтому $\Delta m_s = 0$.

Учитывая это обстоятельство, а также правила отбора для квантового числа m ($\Delta m = 0, \pm 1$), на основании (20.42) находим для зеемановского расщепления спектральных линий следующее выражение:

$$\Delta \omega = \omega \Delta m = 0, \pm \omega, \quad (20.45)$$

что совпадает с результатом теории Шредингера, приводящей к нормальному эффекту Зеемана (триpletное расщепление спектральных линий).

Таким образом, в сильных полях ($\Delta E_{\text{магн.}} \gg \Delta E_{\text{с.-о.}}$) аномальный эффект переходит в нормальный, что находится в согласии

с экспериментальными данными (эффект Пашена — Бака). Интересно отметить, что переход аномального эффекта Зеемана в нормальный может быть проиллюстрирован фиг. 20.4, если множитель Ланде g положить равным единице (см. случай ν). Тогда расщепление будет:

$$\Delta\omega_1 = \Delta\omega_4 = 0, \quad \Delta\omega_3 = 0, \quad \text{а } \Delta\omega_2 = -\omega,$$

т. е. вместо четырех компонент расщепленной линии получаем три.

В особых случаях, когда для одного энергетического уровня $\Delta E^{c.o.} < \Delta E^{магн.}$, а для другого, наоборот, $\Delta E^{c.o.} > \Delta E^{магн.}$, или когда для обоих уровней они имеют один и тот же порядок, зеемановское расщепление становится сложным. Поскольку все эти вопросы носят специальный характер, мы не будем здесь на них останавливаться.

Задача 20.1. Исследовать диамагнетизм и парамагнетизм атомов, помещенных в постоянное и однородное магнитное поле ($H_x = H_y = 0, H_z = \mathcal{H}$), оставляя, в отличие от исследования эффекта Зеемана, в гамильтониане не только члены, пропорциональные \mathcal{H} [см. (20.25)], но и члены, содержащие \mathcal{H}^2 .

Указать, у каких атомов может наблюдаться диамагнетизм.

Решение. С учетом членов, пропорциональных \mathcal{H}^2 , вместо (20.25) будем иметь:

$$\frac{p^2}{2m_0} = \frac{p^2}{2m_0} - \mu_0 i \mathcal{H} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e_0^2}{8m_0 c^2} (x^2 + y^2) \mathcal{H}^2.$$

Следовательно, в правой части (20.26) появится еще член:

$$V_{\text{диамагн.}} = \frac{e_0^2}{8m_0 c^2} (x^2 + y^2) \mathcal{H}^2,$$

который с учетом (20.33) дает следующее выражение для дополнительной энергии электрона, помещенного в магнитное поле:

$$\Delta E^{\text{магн.}} = \mu_0 \mathcal{H} g m_j + \frac{e_0^2 \mathcal{H}^2}{12m_0 c^2} \langle r^2 \rangle. \quad (20.46)$$

Здесь при вычислении энергии возмущения, пропорциональной $x^2 + y^2$, мы воспользовались сферической симметрией, которая должна иметь место в нулевом приближении ($\mathcal{H} = 0$) и положили:

$$\int \Psi^+ (x^2 + y^2) \Psi d^3x = \frac{2}{3} \int \Psi^+ r^2 \Psi d^3x = \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle.$$

Отсюда для магнитного момента атома, находящегося в магнитном поле, находим выражение:

$$\mu^{\text{атом.}} = - \frac{\partial \Delta E^{\text{магн.}}}{\partial \mathcal{H}} = - \mu_0 g m_j - \frac{e_0^2 \mathcal{H} \langle r^2 \rangle}{6m_0 c^2} = \mu^{\text{парамагн.}} + \mu^{\text{диамагн.}}. \quad (20.47)$$

Последняя формула представляет собой обобщение известной формулы, связывающей $\Delta E^{\text{магн.}}$ с \mathcal{H} на случай, когда $\Delta E^{\text{магн.}}$ является нелинейной функцией \mathcal{H} .

Диамagnetизм атомов характеризуется вторым членом равенства (20.47), пропорциональным \mathcal{H} .

Для магнитной восприимчивости, рассчитанной на грамм-атом, имеем выражение:

$$\chi_{\text{диам.}} = N \frac{\partial \mu_{\text{диам.}}}{\partial \mathcal{H}} = - \frac{e_0^2 N}{6m_0 c^2} \langle r^2 \rangle, \quad (20.48)$$

где N — число Авогадро.

Величина $\chi_{\text{диам.}}$ никогда не может быть равной нулю и всегда должна быть величиной отрицательной ($\langle r^2 \rangle > 0$). Поэтому диамagnetный эффект должен иметь место во всех атомах.

Что касается первого члена правой части равенства (20.47), пропорционального m_j , то он может принимать как положительные, так и отрицательные значения, поскольку $m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j$.

Однако в состоянии термодинамического равновесия отрицательные значения для m_j , дающие меньшее значение для энергии, будут более предпочтительны. Поэтому в среднем для парамагнитной восприимчивости получается положительное значение¹⁾:

$$\chi_{\text{парам.}} = \frac{\mu_0^2 g^2 j(j+1)}{kT}.$$

Выражение (20.47) получено для слабого магнитного поля, когда имеет место аномальный эффект Зеемана. Однако оно легко может быть обобщено на случай сильного магнитного поля. Для этого в указанном равенстве мы должны положить $g = 1$, $m_j = m$ [см. (20.42)].

Поскольку парамагнитная восприимчивость значительно больше диамagnetной $\chi_{\text{парам.}} \gg \chi_{\text{диам.}}$, то при $j \neq 0$ атомы проявляют парамагнитные свойства.

Для водородоподобных атомов j отлично от нуля (минимальное значение $j = \frac{1}{2}$) и поэтому они всегда будут парамагнитными.

Только для атомов с четным числом электронов квантовое число j может обращаться в нуль (например, парагелий в основном состоянии, см. § 24). Такой атом будет диамagnetным.

Задача 20.2. Производя геометрическое сложение орбитального и спинового моментов, показать, что аномальный эффект Зеемана связан с тем обстоятельством, что полный магнитный момент μ не параллелен общему механическому моменту \mathbf{J} . С помощью геометрической модели объяснить также эффект Пашена — Бака.

Решение. Прежде всего необходимо сложить геометрически векторы механических и магнитных моментов:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}; \quad \boldsymbol{\mu} = - \frac{e_0}{2m_0 c} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}).$$

При геометрическом изображении (см. фиг. 20.5) можно выбрать масштабы таким образом, чтобы $\boldsymbol{\mu} = - \frac{e_0}{2m_0 c} \mathbf{L} = 1$ (параллельность или антипараллельность векторов при этом не существенна).

¹⁾ См. Р. Беккер, Электронная теория, М. — Л., 1936, стр. 169.

Тогда

$$\mu_l = L, \text{ а } \mu_s = 2S,$$

т. е. полный магнитный момент μ в магнитном поле будет испытывать два вращения: одно с угловой скоростью ω вокруг направления полного механического момента (эта угловая скорость будет соответствовать частоте, отвечающей переходу между компонентами спин-орбитального расщепления спектральных линий $\omega \sim R\alpha^2$), другое — с частотой ларморовой прецессии вокруг направления магнитного поля H ($H_x = H_y = 0, H_z = \mathcal{H}$).

При $\omega \gg \omega$ дополнительную энергию следует вычислять по формуле:

$$\Delta E^{\text{магн.}} = -\frac{(\mu J)(JH)}{J^2}.$$

Поскольку в среднем магнитный момент направлен по J , будем иметь:

$$\Delta E^{\text{магн.}} = g\omega\hbar m_j,$$

где $g = \frac{e_0\mathcal{H}}{2m_0c}$, а множитель Ланде g равен:

$$g = \frac{L}{J} \cos(LJ) + 2\frac{S}{J} \cos(SJ).$$

Подставляя значения косинусов углов:

$$\cos(SJ) = \frac{J^2 - L^2 + S^2}{2JS}, \quad \cos(LJ) = \frac{J^2 - S^2 + L^2}{2JL}$$

и учитывая, что $J^2 \rightarrow \hbar J(J+1)$ и т. д., получаем для множителя Ланде выражение (20.37). Следует обратить внимание на то, что если бы векторы μ и J были параллельными, то множитель Ланде обратился бы в единицу.

В сильных полях $\omega \gg \omega$ мы должны рассматривать независимое вращение орбитального и спинового моментов μ вокруг оси z . Тогда для дополнительной энергии найдем выражение:

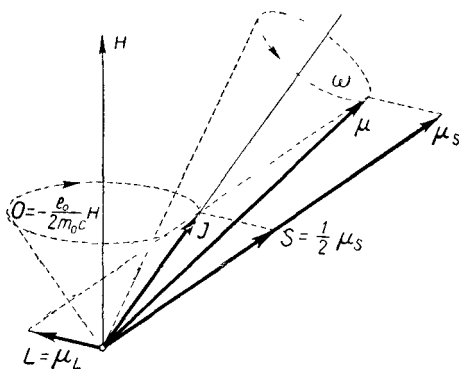
$$\Delta E^{\text{магн.}} = -\mu_z \mathcal{H} = -\frac{e_0\mathcal{H}}{2m_0c} (L_z + 2S_z) = \omega\hbar (m + 1),$$

которое приводит непосредственно к нормальному зеемановскому расщеплению (эффект Пашена — Бака).

Задача 20.3. С помощью релятивистского скалярного волнового уравнения и уравнения Дирака найти частоты разрешенных переходов между состояниями $n=2$ и $n=3$. Показать, что по теории Дирака имеется семь линий, пять из которых будут различны, а по скалярной же теории только три различные линии.

Задача 20.4. Определить в атоме водорода правила отбора для квантовых чисел в случае магнитного дипольного и электрического квадрупольного излучений.

Решение. Чтобы сделать переход в квантовой теории от формул для электрического дипольного излучения к магнитному дипольному излучению,



Фиг. 20.5. Геометрическая интерпретация аномального эффекта Зеемана.

мы должны по аналогии с классической теорией в соответствующей формуле для вероятности излучения (9.20) матричный элемент электрического момента $e\mathbf{r}_{n'n}$ заменить матричным элементом магнитного момента $\boldsymbol{\mu}_{n'n}$. Тогда вероятность магнитного дипольного излучения будет определяться выражением:

$$A_{nn'} = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\boldsymbol{\mu}_{n'n}|^2, \quad (20.49)$$

где

$$\boldsymbol{\mu}_{n'n} = \int \Psi_n^{\dagger} \boldsymbol{\mu} \Psi_n d^3x, \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2m_0c} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}).$$

а орбитальный и спиновые моменты соответственно равны:

$$\mathbf{L} = [r\mathbf{P}], \quad \mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}.$$

Под индексом n следует понимать совокупность всех четырех квантовых чисел (n, l, j, m_j) .

Подставляя сюда решение (20.2) и учитывая, что составляющие оператора $\boldsymbol{\mu}$ не зависят от r , получаем:

$$\boldsymbol{\mu}_{n'n} = \int_0^{\infty} R_{n'l} R_{n'l} r^2 dr \oint Y_{l'm'}^{(j)\dagger} \boldsymbol{\mu} Y_{l'm}^{(j)}. \quad (20.50)$$

Учитывая действия на матричные элементы шаровых спиноров $Y_{lm}^{(j)}$ [см. (18.24) и (18.25)] операторов $L_z, L_x \pm iL_y$ [см. (18.19) и (18.20)], а также матриц S_z и $S_x \pm iS_y$ [см. (18.6)], найдем следующие правила отбора в случае магнитного дипольного излучения (квантовое число l при этом не должно изменяться):

$$\Delta m_j = 0, \pm 1; \quad \Delta j = 0, \pm 1; \quad \Delta l = 0; \quad \Delta n = 0. \quad (20.51)$$

Отсюда видно, что магнитное излучение в атоме водорода возможно при переходе между уровнями, расщепляющимися в результате учета спин-орбитальной связи (одинаковые n и l , но различные j).

Для определения правил отбора при электрическом квадрупольном излучении необходимо вычислить следующие матричные элементы (см. также задачу 12.4):

$$(rq_s)_{n'n}^2 = \sum_{n''l''m''j''} r_{n'n''} r_{n''n} (q_s)_{lmj}^{l''m''j''} (q_s)_{l'm'j'}^{l''m''j''},$$

где

$$q_3 = \frac{z}{r}, \quad q_{1,2} = \frac{x \pm iy}{r}.$$

Принимая во внимание, что матричный элемент $r_{n'n''}$ отличен от нуля при любых значениях главных квантовых чисел, а $(q_s)_{lmj}^{l''m''j''}$ при условии (18.39), найдем следующие правила отбора для квадрупольного излучения: Δn — произвольное число, $\Delta l = 0, \pm 2$; $\Delta m_j = 0, \pm 1, \pm 2$; $\Delta j = 0 \left(j \neq \frac{1}{2} \right), \pm 1, \pm 2$.

Заметим, что при квадрупольном излучении в противоположность дипольному возможны переходы только между состояниями, обладающими одинаковой четностью ($\Delta l = 0, \pm 2$).

§ 21. ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ЯДРА НА АТОМНЫЕ СПЕКТРЫ

а. Постановка вопроса

Как было уже отмечено в § 13, учет конечности массы ядра оказывает заметное влияние на атомные спектры. Оно проявляется, например, в том, что постоянная Ридберга, входящая в выражение для энергии водородоподобного атома:

$$E_n = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2}, \quad (21.1)$$

несколько уменьшается и становится равной:

$$R = R_\infty \left(1 - \frac{m_0}{M}\right), \quad (21.2)$$

где

$$R_\infty = \frac{m_0 e^4}{2\hbar^3}$$

постоянная Ридберга, соответствующая бесконечной массе ядра.

Из этого результата, в частности, следует, что постоянные Ридберга атомов водорода, дейтерия и трития будут несколько отличаться друг от друга и огромная точность, достигаемая в современной спектроскопии, позволяет использовать этот эффект для обнаружения присутствия изотопов (более подробно см. § 13).

Точно так же на атомные спектры могут оказать влияние и другие свойства атомного ядра, а именно его конечные размеры, а также магнитный момент.

б. Учет конечных размеров ядра

Как известно, решая задачу о движении электрона в поле ядра по классической теории, совершенно безразлично, считать ли ядро точечным или имеющим некоторые конечные размеры. Важно, чтобы электрон в процессе движения находился все время вне ядра и заряд внутри ядра был бы распределен сферически симметрично. Это связано с тем обстоятельством, что потенциал вне ядра, распределение заряда в котором сферически симметрично, совпадает с потенциалом точечного ядра. В квантовой механике ситуация несколько иная. Волновая функция должна быть отличной от нуля и внутри ядра; поэтому электрон всегда обладает определенной вероятностью (пусть малой) находиться внутри ядра. Благодаря этому характер распределения заряда внутри ядра должен каким-то образом сказываться на энергетических уровнях электронов в атоме.



Фиг. 21.1. Потенциальная энергия с учетом конечных размеров ядра.

Штриховая линия показывает изменение потенциальной энергии внутри ядра, если бы потенциал изменялся по кулоновскому закону не только вне, но и внутри ядра.

Для оценки влияния конечных размеров ядра на спектр водородоподобного атома мы примем, что ядро представляет собой сферу радиуса R_N с равномерно распределенным по объему зарядом.

Тогда потенциальная энергия будет иметь вид (см. фиг. 21.1):

$$V = -\frac{Ze_0^2}{R_N} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R_N^2} \right) \quad \text{при } r < R_N, \quad (21.3)$$

$$V = -\frac{Ze_0^2}{r} \quad \text{при } r > R_N. \quad (21.4)$$

Для приближенного вычисления сдвига энергетических уровней, обусловленного конечными размерами ядра, можно воспользоваться методом теории возмущений, рассматривая в качестве энергии возмущения разность между потенциалами точечного ядра и ядра с равномерным по объему распределением заряда:

$$V^{об.} = Ze_0^2 \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R_N} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R_N^2} \right) \right) \varepsilon(r), \quad (21.5)$$

причем

$$\varepsilon(r) = \begin{cases} 1 & \text{при } r < R_N, \\ 0 & \text{при } r > R_N. \end{cases} \quad (21.6)$$

Таким образом, эта возмущающая сила отлична от нуля только внутри ядра.

Смещение уровней в первом приближении теории возмущений будет определяться формулой:

$$\Delta E^{об.} = \int \psi^* V^{об.} \psi d^3x. \quad (21.7)$$

Последнее выражение можно легко вычислить, заменяя величину $|\dot{\psi}|^2$ ее значением в нуле, поскольку изменение этой величины в области $r \leq R$ сравнительно невелико:

$$\begin{aligned} \Delta E^{об.} &= 4\pi Ze_0^2 |\psi(0)|^2 \int_0^{R_N} r^2 \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{R_N} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R_N^2} \right) \right] dr = \\ &= \frac{2\pi}{5} Ze_0^2 R_N^2 |\psi(0)|^2. \end{aligned} \quad (21.8)$$

Подставляя сюда выражение для $|\psi(0)|^2$ из (20.14), находим, что этот сдвиг уровней будет равен:

$$\Delta E^{об.} = \frac{2}{5} \frac{Z^4 \delta_{l0} R_N^2 e_0^2}{a_0^3 n^3}, \quad (21.9)$$

т. е. в нерелятивистской теории он отличен от нуля лишь для s -состояний ($l=0$).

Можно показать, что для p -уровней этот сдвиг будет содержать еще множитель порядка $\left(\frac{R_N}{a_n}\right)^2$ ¹⁾, где $a_n = a_0 \frac{n^2}{Z}$. Для d -состояний этот множи-

¹⁾ Чтобы вычислить сдвиг p -уровней, мы должны в формуле (21.7) взять для $|\psi(r)|$ следующий член разложения:

$$|\psi(r)|^2 = r^2 \left| \frac{\partial \psi(r)}{\partial r} \right|_{r \rightarrow 0}^2,$$

поскольку для p -состояний основной член $|\psi(0)|^2$ обращается в нуль.

тель будет равняться $\left(\frac{R_N}{a_n}\right)^4$ и т. д. Так что, как для p -, так и для d -состояний, им можно в первом приближении пренебречь.

В частности, для атома водорода этот сдвиг составляет около 1 Мгц , что никак не может объяснить лэмбовский сдвиг уровней, равный $\sim 1057 \text{ Мгц}$ (см. § 20).

Учет объема ядра оказался весьма существенным при изучении так называемого изотопического смещения, т. е. смещения уровней у атомов с одинаковым порядковым номером Z (число протонов) и различным массовым числом A (число протонов и нейтронов).

Вообще говоря, на изотопическое смещение уровней оказывают влияние прежде всего различные массы изотопов (массовый эффект) и различные их объемы (объемный эффект). При массовом эффекте с увеличением числа A частота смещается в ультрафиолетовую область. Например, при $Z=1$ наибольшей частотой обладает тритий с $A=3$, затем дейтерий с $A=2$ и, наконец, обычный водород с $A=1$ [см. (21.2), а также § 13]. При объемном же эффекте с увеличением числа A изотопическое смещение линий будет происходить в инфракрасную область. Например, для водородоподобного атома для сдвига уровней при учете объемного эффекта, согласно (21.9), (21.13), (см. ниже) и (21.1), будем иметь:

$$E_n = -\frac{RZ^2\hbar}{n^2} \left(1 - \frac{4}{5} \frac{Z^2 R_0^3}{a_0^3 n} A^{2/3} \right).$$

Экспериментальные факты показывают, что изотопическое смещение в ультрафиолетовую область наблюдается у элементов с Z не более чем 40—50. У элементов с большим значением Z изотопическое смещение наблюдается в противоположную, т. е. в инфракрасную часть спектра. Это означает, что для сравнительно легких элементов изотопическое смещение обусловлено главным образом массовым эффектом, в то время как для более тяжелых элементов, наоборот, объемным эффектом. Вообще же говоря, эффект изотопического смещения представляет собой более сложное явление. На него могут влиять, в частности, и другие факторы, связанные со строением атома: например, спин ядра, поляризация ядер электронами и т. д.

в. Мезоатомы

Влияние конечных размеров ядра особенно сильно сказывается на положении уровней мезоатомов — атомных систем, в которых вокруг ядра вращается не электрон, а мю-мезон, спин которого совпадает со спином электрона (т. е. равен $1/2$ в единицах \hbar), а масса в 207 раз больше массы электрона ($m_\mu = 207m_e$), т. е. мю-мезон представляет собой по существу тяжелый электрон. Чтобы получить мезоатом, отрицательные мю-мезоны следует пропускать сквозь вещество. При этом мю-мезоны, теряя свою энергию и замедляясь, могут быть захвачены на орбиту вокруг ядра, образуя мю-мезонный атом.

Мезоатомы получены почти для всех элементов периодической системы Менделеева, начиная с самых легких элементов (водород) и кончая тяжелыми (уран, нептуний и т. д.)¹⁾.

Как известно, мю-мезон является ядерно-неактивной частицей, т. е. его движение вокруг ядра определяется в основном, так же как и для электрона, кулоновским притяжением. Однако он может взаимодействовать и с неэлек-

¹⁾ Более подробно эти вопросы рассмотрены в статье Д. Д. Иваненко и Г. Е. Пустовалова, УФН, 61, 27 (1957).

тромагнитными полями: электронно-нейтринным и ядерным, которые приводят, например, к его спонтанному распаду на электрон, нейтрино и антинейтрино (соответствующее время жизни для покоящегося мю-мезона равно $\tau = 2,2 \cdot 10^{-6}$ сек), а также обладает определенной вероятностью быть захваченным ядром. Поэтому время жизни мю-мезоатома определяется двумя конкурирующими процессами, а именно: естественным распадом мю-мезона на электрон, нейтрино и антинейтрино и ядерным захватом мю-мезона. В легких мезоатомах ($Z < 10$) вероятность первого процесса больше вероятности второго, т. е. время жизни мезоатома будет определяться временем жизни покоящегося мю-мезона ($\tau \sim 10^{-6}$ сек). При $Z > 10$ начинает преобладать ядерный захват и время жизни медленно уменьшается до величины $\sim 7 \cdot 10^{-8}$ сек ($Z = 82$)¹.

В теории мю-мезоатомов основную роль играет обычное электростатическое взаимодействие, т. е., рассматривая в первом приближении заряд ядра как точечный, мы можем для энергии мезоатома и для радиуса орбиты воспользоваться формулами, полученными нами для обычного водородоподобного атома, заменив в них массу электрона массой мю-мезона.

Тогда для энергии и радиуса орбиты мы будем иметь соответственно [см. (13.33), (13.45)]:

$$E_n = -\frac{m_\mu Z^2 e_0^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad r_n = \frac{\hbar^2}{m_\mu e_0^2} \frac{n^2}{Z}, \quad (21.10)$$

где $m_\mu = 207m_0$.

Отсюда видно, что энергия мю-мезона в мезоатоме увеличивается в 207 раз по сравнению с соответствующей энергией электрона в атоме, а радиус орбиты, наоборот, уменьшается во столько же раз. Поэтому, если наряду с мю-мезонами в атоме остаются и электроны, то последние будут двигаться от ядра значительно дальше, чем мю-мезоны, и, следовательно, не могут оказать существенного влияния на вращающийся вокруг ядра мю-мезон. Таким образом, образовавшийся мезоатом можно рассматривать как водородоподобный, который может обладать не только малым, но и большим значением Z .

Поскольку радиус «боровской» орбиты мезона в 207 раз меньше радиуса электронной орбиты, то вероятность пребывания мезона в ядре должна стать значительно больше, чем вероятность пребывания электрона в соответствующем водородоподобном атоме. Благодаря этому основной поправкой к энергетическим уровням мезоатома становится поправка на объем ядра. В частности, для энергии s -состояний будем теперь иметь формулу, которая может быть получена из (21.9) и (21.10) путем замены боровского радиуса a_0 аналогичным радиусом мезоатома:

$$a_\mu = \frac{\hbar^2}{m_\mu e_0^2}. \quad (21.11)$$

Тогда будем иметь:

$$E_{n, l=0} = -\frac{m_\mu Z^2 e_0^4}{2\hbar^2 n^2} \left(1 - \frac{4}{5} \frac{Z^2 R_N^3}{n a_\mu^3} \right). \quad (21.12)$$

Учитывая, что радиус ядра зависит от массового числа $A \sim 2Z$ по закону:

$$R_N = R_0 A^{1/3} \approx R_0 (2Z)^{1/3}, \quad (21.13)$$

¹) В связи с этим следует заметить, что для ядерно-активных пи-мезонов, ответственных, в частности, за ядерные силы, время жизни по отношению к распаду на мю-мезон и нейтрино равно $2,6 \cdot 10^{-8}$ сек, тогда как время жизни их по отношению к захвату ядром во много раз меньше. В частности, для пи-мезоводорода время захвата отрицательного пи-мезона с орбиты будет порядка 10^{-15} сек.

где $R_0 = \text{const}$, находим в первом приближении для поправки на объем ядра для s -состояний следующую формулу:

$$E_{n, l=0} = -\frac{m_{\mu} Z^2 e_0^4}{2\hbar^2 n^2} \left[1 - \frac{4 \cdot 2^{2/3}}{5n} Z^{8/3} \left(\frac{R_0}{a_{\mu}} \right)^2 \right]. \quad (21.14)$$

Отсюда видно, что поправка на объем ядра для энергии s -уровней будет пропорциональна $Z^{8/3}$ и поэтому для тяжелых элементов может стать весьма значительной.

Более того, для тяжелых элементов орбита мю-мезона в мезоатоме для сравнительно малых значений n может оказаться при больших Z даже внутри ядра. В частности, при $Z = Z_{\text{кр.}} \cong 45$ боровский радиус мезоатома становится равным радиусу ядра.

Для внутренних орбит ($Z > Z_{\text{кр.}}$) основная часть потенциала будет определяться не законом Кулона (21.4), а, например, формулой (21.3), соответствующей потенциалу трехмерного гармонического осциллятора — упрощенной модели ядра с равномерным распределением заряда по объему.

В этом случае для определения энергии вместо уравнения (13.4) будем иметь:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m_{\mu}}{\hbar^2} \times \\ \times \left(E + \frac{3Ze_0^2}{2R_N} - \frac{1}{2} \frac{Ze_0^2 r^2}{R_N^3} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_{\mu} r^2} \right) R = 0. \quad (21.15)$$

Сделаем в последнем уравнении замену переменных, положив $R = \sqrt{r} R'$, $r = \sqrt{\rho}$. Тогда, принимая во внимание, что

$$\nabla_r^2 R = 4\rho^{5/4} \left(\frac{d^2 R'}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR'}{d\rho} + \frac{3}{16\rho^2} R' \right),$$

находим для определения энергии трехмерного гармонического осциллятора уравнение, формально совпадающее с соответствующим уравнением проблемы Кеплера:

$$\frac{d^2 R'}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR'}{d\rho} + \left(-A + \frac{2B}{\rho} - \frac{C}{\rho^2} \right) R' = 0, \quad (21.16)$$

но обладающее несколько другими значениями для постоянных:

$$A = \frac{Ze_0^2 m_{\mu}}{4\hbar^2 R_N^3}, \quad B = \frac{m_{\mu}}{4\hbar^2} \left(E + \frac{3Ze_0^2}{2R_N} \right), \\ C = \frac{1}{4} \left(l^2 + l - \frac{3}{4} \right) = l'(l'+1), \quad (21.17) \\ l' = \frac{1}{2} \left(l - \frac{1}{2} \right).$$

Для определения собственных значений можно воспользоваться результатом (13.20), согласно которому:

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = l' + k + 1.$$

Подставляя сюда вместо B , A и l' их значения из (21.17) и принимая во внимание, что $k = n - l - 1$, находим для энергии мезона, находящегося на орбите внутри ядра, следующее значение:

$$E_{kl} = -V_0 + \hbar\omega (2k + l + 3/2), \quad (21.18)$$

где частота механических колебаний трехмерного осциллятора:

$$\omega = \sqrt{\frac{Ze_0^2}{m_\mu R_N^3}}.$$

Величина $\frac{3}{2}\hbar\omega$ представляет собой нулевую энергию трехмерного осциллятора, которая в три раза больше соответствующей нулевой энергии одномерного осциллятора, а $V_0 = \frac{3}{2} \frac{Ze_0^2}{R_N}$ — наибольшая глубина осцилляторной потенциальной ямы.

Выражение (21.18) справедливо, когда потенциальная энергия изменяется по закону (21.3) от нуля до бесконечности.

Учет конечных размеров ядра дает дополнительную энергию, представляющую собой разность между потенциальной энергией частицы в осцилляторной яме и в кулоновском поле, усредненную по пространству, находящемуся вне ядра, т. е. эта дополнительная энергия равна:

$$\Delta E^{\text{об.}} = Ze_0^2 \oint d\Omega \int_{R_N}^{\infty} |\psi|^2 \left[\frac{1}{R_N} \left(\frac{3}{2} - \frac{r^2}{2R_N^2} \right) - \frac{1}{r} \right] r^2 dr. \quad (21.19)$$

Поскольку волновая функция сферического осциллятора будет носить характер волновой функции кулоновского поля, так как будет определяться из того же самого волнового уравнения с заменой r на $\rho = r^2$, то она будет спадать с увеличением r по экспоненциальному закону. Поэтому поправка (21.19) окажется существенной только в том случае, когда радиус мезоатома r_n будет близок к R_N .

В качестве примера рассмотрим переход $2p \rightarrow 1s$ в свинце ($Z=82$).

Если рассматривать мезоатом свинца с точечным ядром, то, согласно формуле (21.10), можно найти, что при этом переходе выделится энергия:

$$E_2 - E_1 = \frac{3m_\mu Z^2 e_0^4}{8\hbar^2} = 14 \text{ Мэв}. \quad (21.20)$$

Учет релятивистских и спиновых эффектов при переходе $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ еще повысит эту энергию на величину:

$$\Delta(\Delta E) \cong 2 \text{ Мэв}. \quad (21.21)$$

Попутно заметим, что существенная роль релятивистских и спиновых эффектов, которые при этом сказываются, связана с тем обстоятельством, что здесь разложение идет по величине $(Z\alpha)^2$. Последняя для свинца принимает сравнительно большое значение $\left(Z=82, \alpha = \frac{1}{137} \right)$. Однако сравнение с экспериментом показывает, что вместо требуемых 16 Мэв при этом переходе выделяется энергия всего 6 Мэв. Такое расхождение теории с экспериментом связано с тем обстоятельством, что для свинца состояние $1s$ лежит внутри ядра. На состояние $2p$, радиус орбиты для которого лежит вне ядра, влияние объема невелико. Поэтому, если для энергии уровня $1s$ взять значение по формуле (21.18), определяющей энергетические уровни частиц на орбитах, лежащих внутри ядра, а для энергии уровня $2p$ значение по формуле (21.10) для точечного ядра, то энергия перехода $2p \rightarrow 1s$ будет равна 3,6 Мэв. Если же учесть еще поправку к энергии $1s$ -уровня по формуле (21.19), то получится значение энергии перехода около 5 Мэв, уже сравнительно близкое к экспериментальному.

Изучение мультиплетной структуры $2p$ -уровня в мезоатомах позволило окончательно установить спин мю-мезона. Для частицы целочисленного спина уровень расщепляется на нечетное число компонент (для спина нуль оно вообще отсутствует, для спина единица должно было наблюдаться три линии и т. д.). Поскольку же уровень $2p$ расщепляется на две компоненты ($2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$), было окончательно установлено, что спин мю-мезона равен $1/2$. В случае точечного ядра теоретическое расщепление, вычисленное по формуле (20.17), должно было составлять $\approx 0,55$ Мэв, причем уровни $2p_{1/2}$ и $2s_{1/2}$ должны совпадать. Учет же конечных размеров ядра в мезоатоме свинца уменьшает расщепление уровней $2p_{3/2} - 2p_{1/2}$ до 0,2 Мэв и поднимает уровень $2s_{1/2}$ даже выше уровня $2p_{3/2}$. Это изображено на фиг. 21.2. Из приведенных данных следует также, что тяжелые мезоатомы должны излучать гамма-кванты с энергией в несколько Мэв. Более легкие мезоатомы излучают рентгеновские лучи.

Существенное влияние размеров ядра на спектры тяжелых мезоатомов дало возможность путем исследования спектральных закономерностей определить распределение заряда внутри ядра. В частности, было показано, что R_0 в формуле для электромагнитного радиуса ядра с массовым числом A :

$$R_N = R_0 A^{1/3} \quad (21.22)$$

следует взять равным $R_0 = 1,2 \cdot 10^{-13}$ см, а не $1,4 \cdot 10^{-13}$ см, как при исследовании ядерных взаимодействий.

Точно так же изучение мультиплетной структуры спектральных линий мезоатомов позволило установить магнитный момент мю-мезона, который оказался близок к мю-мезонному магнетону:

$$\mu_\mu = - \frac{ge_0 \hbar}{2m_\mu c} \quad (21.23)$$

с множителем Ланде $g = 2$.

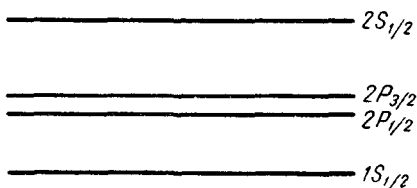
Если теория мю-мезоатомов базируется в основном на электромагнитных взаимодействиях, то в теории пи-мезоатомов значительная роль принадлежит ядерным взаимодействиям, теория которых далека от своего завершения.

В связи с этим следует заметить, что экспериментальное изучение пи-мезоатомов и выяснение ряда закономерностей, носящих пока что полумпирический характер, приобретают в создании будущей теории ядерных сил особое значение. Все эти вопросы выходят за рамки настоящего учебника и поэтому мы на них более подробно останавливаться не будем.

г. Применимость уравнения Дирака для описания движения нейтрона и протона

Как известно, уравнение Дирака описывает движение частиц со спином $1/2$. Оно применимо не только к электрону, но и к протону и нейтрону. При наличии электромагнитного поля следует учитывать наличие заряда лишь у протона, а также наличие особого врожденного магнитного момента у протона и нейтрона, который получил название аномального. Здесь следует напомнить, что энергия взаимодействия заряженной дираковской частицы с электромагнитным полем:

$$V_e = e\Phi - e(\alpha A) \quad (21.24)$$



Фиг. 21.2. Схема расположения уровней в мезоатоме.

благодаря наличию собственного механического момента $\left(\frac{\hbar}{2}\sigma\right)$ содержит в себе также в нерелятивистском приближении еще и магнитный момент:

$$\mu_e = \frac{e\hbar}{2m_0c}\sigma, \quad (21.25)$$

который получил название кинематического или дираковского. Однако при переходе к релятивистскому случаю в выражении (21.25) вместо массы m_0 мы должны подставить ее релятивистское значение $\frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}}$ и поэтому с увеличением скорости движения до ультрарелятивистской ($v \sim c$) дираковский магнитный момент обращается в нуль.

Наряду с дираковским магнитным моментом, который проявляется только в нерелятивистском приближении и величина которого определяется зарядом, частица может обладать еще аномальным магнитным моментом, не исчезающим даже в ультрарелятивистском случае и не зависящим от заряда частицы.

Составим теперь энергию взаимодействия аномального магнитного момента с электромагнитным полем. Энергия взаимодействия (21.24) электрона с электромагнитным полем с точки зрения четырехмерного пространства представляет собой скаляр. В самом деле, в четырехмерном пространстве $i\Phi = A_4$, $A_x = A_1$, $A_y = A_2$, $A_z = A_3$. Точно так же единичная матрица I есть четвертая составляющая матрицы скорости $\alpha_4 = iI^1$.

Отсюда энергию взаимодействия (21.24) мы можем представить в четырехмерной записи как скалярную величину:

$$V_e = -e \sum_{\mu=1}^4 \alpha_{\mu} A_{\mu}. \quad (21.26)$$

Как известно, электромагнитное поле образует антисимметричный тензор 2-го ранга:

$$H_{\mu\nu} = \frac{\partial A_{\nu}}{\partial x_{\mu}} - \frac{\partial A_{\mu}}{\partial x_{\nu}}, \quad (21.27)$$

где

$$x_4 = ict.$$

Отсюда имеем:

$$\begin{aligned} H_x &= H_{23}, & H_y &= H_{31}, & H_z &= H_{12}, \\ iE_x &= H_{41}, & iE_y &= H_{42}, & iE_z &= H_{43}. \end{aligned} \quad (21.28)$$

Поэтому энергия взаимодействия аномального магнитного момента μ с электромагнитным полем должна определяться формулой:

$$V_m = \mu \sum_{\mu, \nu=1}^4 \alpha_{\mu\nu} H_{\mu\nu}, \quad (21.29)$$

где $\alpha_{\mu\nu}$ — тензор 2-го ранга, составленный из матриц Дирака²⁾.

Воспользовавшись правилом преобразования волновой функции как при лоренцевых [см. (17.38)], так и при пространственных поворотах [см. (17.39)],

1) Точнее, по закону четырехмерного вектора будут преобразовываться величины $j_{\mu} = ec\psi^+ \alpha_{\mu} \psi$ [см. (17.32)], где $\alpha = \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$, $\alpha_4 = iI$.

2) Точнее, тензором 2-го ранга является величина $\psi^+ \alpha_{\mu\nu} \psi$.

можно показать, что матрицей, образующей тензор 2-го ранга, являются величины ¹⁾:

$$\begin{aligned} \alpha_{23} &= \rho_3 \sigma_1, & \alpha_{31} &= \rho_3 \sigma_2, & \alpha_{12} &= \rho_3 \sigma_3, & \alpha_{41} &= -i \rho_2 \sigma_1, \\ \alpha_{12} &= -i \rho_2 \sigma_2, & \alpha_{13} &= -i \rho_2 \sigma_3. \end{aligned} \quad (21.30)$$

Поэтому энергия взаимодействия аномального магнитного момента с электромагнитным полем принимает вид:

$$V_m = \mu [\rho_3 (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{H}) + \rho_2 (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{E})]. \quad (21.31)$$

Электрон обладает зарядом и спином, а вместе с тем и дираковским магнитным моментом. Аномальный его магнитный момент сравнительно мал (см. ниже). Нейтрон же, наоборот, не обладает зарядом, но обладает аномальным магнитным моментом. Последний и определяет взаимодействие нейтрона с электромагнитным полем. Что касается протона, то он обладает не только зарядом и спином, а следовательно, дираковским магнитным моментом, но также и аномальным магнитным моментом. Следует отметить, что существенную роль в теории нуклонов играют ядерные взаимодействия (см. § 28).

д. Экспериментальное определение магнитного момента нейтрона и протона

Экспериментальное определение магнитного момента нейтрона, протона и более сложных ядер основано по существу на той же идее, что и определение магнитного момента электрона в опытах Штерна — Герлаха. Эта идея состоит в том, что необходимо включить магнитное поле, перпендикулярное к направлению движения частицы. Тогда частица должна реагировать различным образом на то, будет ли ее магнитный момент ориентирован по направлению поля или против него.

Остановимся прежде всего на некоторых вопросах относительно возможности определения и дираковского, и аномального магнитного момента свободной частицы.

Пусть свободная частица движется перпендикулярно к оси z . Тогда гамильтониан, описывающий это движение, принимает вид:

$$H = c \rho_1 \sigma_1 p_x + c \rho_1 \sigma_2 p_y + \rho_3 m_0 c^2. \quad (21.32)$$

Собственный механический момент, перпендикулярный направлению этого движения:

$$S_z = \frac{1}{2} \hbar \sigma_3, \quad (21.33)$$

не коммутирует с данным гамильтонианом.

С этим гамильтонианом будет коммутировать проекция полного момента на ось z :

$$J_z = y p_x - x p_y + \frac{1}{2} \hbar \sigma_3, \quad (21.34)$$

которая вместе с энергией и может быть точно определена.

Оценим с помощью соотношения неопределенности неточность в определении орбитального момента. Для этого поместим начало координат в центр тяжести волнового пакета. Тогда неточность в значении орбитального момента будет:

$$\Delta L_z \approx \Delta y \Delta p_x - \Delta x \Delta p_y.$$

¹⁾ Более подробно см. А. А. Соколов, Введение в квантовую электродинамику, М., 1958, § 19.

Учитывая, что, согласно соотношению неопределенности, $\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{\Delta x}$, $\Delta p_y \sim \frac{\hbar}{\Delta y}$ и что ошибки могут иметь как положительный, так и отрицательный знаки, находим:

$$|\Delta L_z| \sim \hbar \left(\frac{|\Delta y|}{|\Delta x|} + \frac{|\Delta x|}{|\Delta y|} \right). \quad (21.35)$$

Неточность в ΔL_z будет минимальна, когда $|\Delta x| = |\Delta y|$. В этом случае ошибка при определении орбитального момента, связанная с поступательным движением частицы, оказывается порядка собственного момента и поэтому для свободной частицы перпендикулярная составляющая собственного механического момента, а вместе с тем и дираковского магнитного момента не может быть определена.

В связи с этим напомним, что в опытах Штерна и Герлаха определялся магнитный момент электрона, связанного в атоме, поскольку в s -состоянии орбитальный механический момент точно обращается в нуль и непосредственно измеряется его спиновый, или дираковский, магнитный момент.

Энергия же взаимодействия, отвечающая перпендикулярной составляющей аномального магнитного момента, согласно (21.31), равна:

$$V_m = \mu_B \sigma_n \mathcal{H}. \quad (21.36)$$

Эта составляющая уже коммутирует с гамильтонианом (21.32) и поэтому может быть точно измерена.

Таким образом, у свободного нейтрона аномальный магнитный момент может быть измерен, когда магнитное поле направлено перпендикулярно к его движению, что было сделано в опытах Блоха и Альвареца (1940)⁴.

В этих опытах при прохождении пучка нейтронов через кусок намагниченного железа²) сильнее рассеиваются нейтроны, магнитный момент которых параллелен вектору магнитной индукции в железе.

Поэтому после прохождения сквозь намагниченное железо останутся преимущественно нейтроны, магнитный момент которых направлен против вектора магнитной индукции. Если пучок нейтронов пропустить последовательно через два куска намагниченного железа, то такой случай будет совершенно аналогичен прохождению света последовательно через два николя, т. е. первый кусок железа будет играть роль поляризатора, второй — анализатора. Это явление и использовалось для определения магнитного момента нейтрона.

Схема опытов Блоха — Альвареца изображена на фиг. 21.3.

Неполяризованные нейтроны, движущиеся по направлению оси, пропускаются через поляризатор (1-й кусок железа, вектор магнитной индукции которого направлен вверх). Тогда после прохождения поляризатора останутся нейтроны с магнитным моментом, направленным преимущественно вниз. Эти поляризованные нейтроны совершенно свободно пройдут через анализатор, если вектор магнитной индукции анализатора будет, как и для поляризатора, также направлен вверх и их прохождение будет значительно ослаблено, когда эти куски железа будут намагничены антипараллельно.

Далее между поляризатором и анализатором включался прибор, который мог переворачивать спин нейтрона. В основу устройства этого прибора был положен ядерно-магнитный резонанс, который с успехом был использован Раби для определения магнитного момента протона и других более тяжелых ядер.

¹) Аналогично можно показать, что с гамильтонианом коммутирует лишь продольная составляющая спина и поэтому в принципе она может быть также измерена экспериментально.

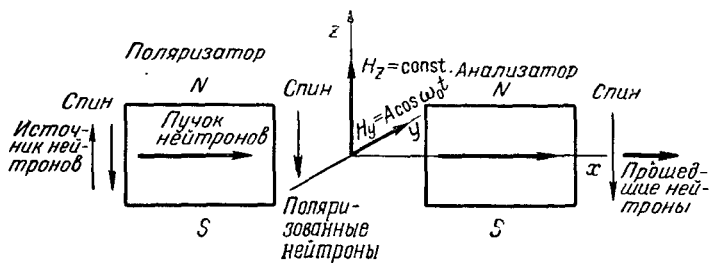
²) Заметим, что нейтроны не обладают электрическим зарядом, поэтому они сравнительно свободно проходят через вещество, взаимодействуя практически лишь при столкновениях с ядрами атомов.

Основная идея прибора, переворачивающего спин нейтрона, заключалась в следующем. Параллельно вектору намагниченности поляризатора и анализатора включалось в пространстве между ними (см. фиг. 21.3) сравнительно сильное постоянное магнитное поле. Тогда нейтрон, магнитный момент которого антипараллелен этому магнитному полю, получит дополнительную энергию:

$$\Delta E^{\text{ант.}} = \mu_n \mathcal{H}. \quad (21.37)$$

Если же магнитный момент будет параллелен полю, то соответствующая энергия будет равна:

$$\Delta E^{\text{парал.}} = -\mu_n \mathcal{H}. \quad (21.38)$$



Фиг. 21.3. Опыты по определению магнитного момента нейтрона.

Затем перпендикулярно полю \mathcal{H} включалось сравнительно слабое осциллирующее магнитное поле:

$$H_y = A \cos \omega_0 t,$$

которое особенно интенсивно будет переворачивать спин нейтрона, когда частота ω_0 будет близка к резонансной, определяемой из условия:

$$\omega_0 = \frac{\Delta E^{\text{ант.}} - \Delta E^{\text{парал.}}}{\hbar} = \frac{2\mu_n \mathcal{H}}{\hbar}. \quad (21.39)$$

При этой резонансной частоте число нейтронов, испытывающих переворачивание магнитного момента, достигает своего максимального значения. Это может быть экспериментально установлено по минимуму числа нейтронов, прошедших при этом через анализатор, поставленный параллельно поляризатору или по максимуму числа прошедших нейтронов, когда поляризатор и анализатор поставлены антипараллельно.

Определив экспериментально частоту ω_0 , которая по существу является удвоенной частотой ларморовой прецессии, можно определить магнитный момент нейтрона, который по последним данным оказался равным¹⁾:

$$\mu_n = -1,9131\mu_{\text{яд.}}$$

Здесь в качестве единицы измерения ядер, в том числе и нейтрона, выбирается ядерный магнетон:

$$\mu_{\text{яд.}} = \frac{e_0 \hbar}{2m_p c} = \frac{m_0}{m_p} \mu_0 = \frac{1}{1836,1} \mu_0 = 0,505 \cdot 10^{-28} \text{ эрг} \cdot \text{гаусс}^{-1},$$

где m_p — масса протона, а μ_0 — магнетон Бора.

¹⁾ Более подробно дальнейшее усовершенствование экспериментов Блоха — Альвареса для определения магнитного момента нейтрона описано в книге «Экспериментальная ядерная физика», том I, под ред. Э. Сегре, ИЛ, Москва, 1955, стр. 340.

Заметим, что, измерив резонансную частоту осциллирующего поля, можно определить лишь величину, а не знак магнитного момента. Однако если заменить осциллирующее магнитное поле вращающимся, то можно определить и знак момента, поскольку для резонанса необходимо, чтобы имело место векторное равенство $\omega_0 = -2\sigma$, где $\sigma = \frac{\mu_n \mathcal{H}}{\hbar}$ — частота ларморовой прецессии спина нейтрона. Знак минус показывает, что магнитный момент нейтрона, так же как и у электрона, направлен противоположно направлению собственного механического момента.

Отметим также, что область резонансных частот ω_0 , соответствующих переворачиванию магнитного момента нейтрона, протона или других ядер в поле $\mathcal{H} \sim 10^4$ эрстед, совпадает с микроволновым диапазоном. Действительно, из формулы (21.39) следует, что она будет порядка 10^8 Мгц, что соответствует длине волны порядка нескольких метров.

Определение магнитного момента протона, который может быть найден лишь в связанном состоянии, поскольку протон наряду с аномальным магнитным моментом благодаря наличию заряда обладает также еще и дираковским, следует производить не с отдельным протоном и даже не с отдельными атомами, а с молекулами, у которых спины электронов скомпенсированы. Например, магнитный момент протона может быть найден, если применить метод ядерного магнитного резонанса к молекуле H_2 . Конечно, для получения молекулы с поляризованными протонами используется не прохождение их через намагниченное железо (через железо молекула H_2 не пройдет), а расщепление пучка путем пропускания его через неоднородное магнитное поле аналогично тому, как это сделано в опытах Штерна — Герлаха. Этот способ измерения магнитного момента протона был использован впервые Раби (1934), еще до опытов Блоха — Альвареса.

Магнитный момент протона имеет положительный знак, т. е. он параллелен механическому моменту и равен (в единицах ядерного магнетона) $\mu_p = +2,7928$. Это значение магнитного момента протона содержит две части. Одна часть $\mu_p^{\text{дир.}} = 1$ соответствует дираковскому магнитному моменту, а $\mu_p^{\text{аном.}} = 1,7928$ — аномальному магнитному моменту. Аномальные магнитные моменты протона и нейтрона примерно равны и имеют противоположный знак. Аналогичным способом был определен также магнитный момент дейтрона $\mu_D = +0,8573$ и других тяжелых ядер.

Одной из основных особенностей при определении магнитных моментов ядер явилось то обстоятельство, что они имеют порядок ядерного магнетона, в то время как магнитные моменты атомов имеют порядок борковского магнетона, т. е. в (m_p/m_e) раз больше. Такое различие значений магнитных моментов явилось в свое время сильным аргументом в пользу протонно-нейтронной модели атомного ядра, согласно которой электроны (обладающие большим магнитным моментом) не могут присутствовать в ядрах.

е. Сверхтонкая структура спектра атома водорода

Сверхтонкая структура спектральных линий связана с взаимодействием магнитного момента ядра с магнитным моментом электрона.

Если ядро атома водорода ($Z=1$) обладает магнитным моментом $\mu_p = \mu_p \sigma'_p$, где σ'_p — матрицы Паули, действующие на волновые функции ядра, то оно создает магнитное поле:

$$A = \text{rot} \frac{\mu_p \sigma'_p}{r}, \quad H = \text{rot} A.$$

Это магнитное поле ядра должно действовать на магнитный момент электрона $\mu = -\mu_0 \sigma'$ (σ' действует на волновые функции электрона), в результате чего между ядром и электроном возникает дополнительное взаимодействие, приводящее к сверхтонкой структуре энергетических уровней:

$$\begin{aligned} V^{c. r.} &= -(\mu H) = \mu_0 \mu_p \left(\sigma' \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{\sigma'_p}{r} \right) = \\ &= \mu_0 \mu_p \left((\sigma' \nabla)(\sigma'_p \nabla) \frac{1}{r} - (\sigma' \sigma'_p) \nabla^2 \frac{1}{r} \right). \end{aligned} \quad (21.40)$$

В первом приближении можно считать, что нет выделенных направлений и поэтому, учитывая равенства:

$$(\sigma' \nabla)(\sigma'_p \nabla) = \frac{1}{3} (\sigma' \sigma'_p) \nabla^2 \quad (21.41)$$

и

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi \delta(r),$$

будем иметь:

$$V^{c. r.} = \frac{8\pi}{3} \mu_0 \mu_p (\sigma' \sigma'_p) \delta(r), \quad (21.42)$$

т. е. в первом приближении взаимодействие магнитных моментов, так же как и контактное взаимодействие, окажет влияние лишь на s -состояния. Выражение $(\sigma' \sigma'_p)$, входящее в формулу (21.42), может быть найдено из следующих простых соображений.

Спиновые матрицы протона σ'_p и электрона σ' должны удовлетворять соотношению:

$$\frac{1}{4} \hbar^2 (\sigma' + \sigma'_p)^2 = \hbar^2 S(S+1), \quad (21.43)$$

где S — абсолютное значение суммарного спина, который может равняться либо нулю (спины антипараллельны), либо единице (спины параллельны). Тогда

$$\frac{1}{4} [\sigma'^2 + \sigma_p'^2 + 2(\sigma' \sigma'_p)] = S(S+1).$$

Принимая во внимание, что $\sigma'^2 + \sigma_p'^2 = 6$, будем иметь:

$$(\sigma' \sigma'_p) = 2S(S+1) - 3. \quad (21.44)$$

Поскольку интегрирование при наличии δ -функции дает:

$$\int d^3x \psi^\dagger \psi \delta(r) = |\psi(0)|^2,$$

для сдвига s -уровней атома водорода (сверхтонкая структура) получим следующее выражение:

$$\Delta E_S = \frac{8}{3} \mu_0 \mu_p \frac{1}{n^3 a_0^3} [2S(S+1) - 3], \quad (21.45)$$

где $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2}$ — радиус первой боровской орбиты, а значение для $|\psi(0)|^2$ взято из равенства (20.14).

В последней формуле следует различать два случая:

1) спины протона и электрона антипараллельны ($S=0$); тогда

$$\Delta E_{S=0} = -8 \mu_0 \mu_p \frac{1}{n^3 a_0^3}; \quad (21.46)$$

2) спины протона и электрона параллельны ($S = 1$); тогда:

$$\Delta E_{S=1} = \frac{8}{3} \mu_0 \mu_p \frac{1}{n^3 a_0^3}. \quad (21.47)$$

Разность между этими уровнями будет характеризовать расщепление s -терма благодаря взаимодействию электрона с магнитным моментом ядра:

$$\Delta \omega = \frac{\Delta E_{S=1} - \Delta E_{S=0}}{\hbar} = \frac{32}{3} \frac{\mu_0 \mu_p}{\hbar} \frac{1}{n^3 a_0^3}. \quad (21.48)$$

Если подсчитать по последней формуле расщепление s -терма для случая $n=1$, подставив туда значение μ_p , найденное из эксперимента Раби, а вместо μ_0 — магнетон Бора, то найдем:

$$\Delta \omega^{\text{теор.}} = 1417 \text{ Мгц.}$$

С другой стороны, тщательная экспериментальная проверка расщепления этого уровня с помощью радиоспектроскопических методов дала значение:

$$\Delta \omega^{\text{эсп.}} = 1420 \text{ Мгц.}$$

Учет релятивистских поправок или конечности массы ядра не дает увеличение частоты $\Delta \omega^{\text{теор.}}$ до требуемого $\Delta \omega^{\text{эсп.}}$. Магнитный момент протона также весьма точно измерен экспериментально. Поэтому для объяснения этой аномалии осталось лишь одно, а именно принять, что магнитный момент электрона не равен точно магнетону Бора, а несколько больше его. Чтобы получить согласие с экспериментом, как было показано Кушем и Фолли, для магнитного момента электрона следует взять значение:

$$\mu_{\text{эл.}} = -\mu_0 (1 + \delta), \quad (21.49)$$

причем, согласно последним данным,

$$\delta = 0,00116.$$

Таким образом, электрон наряду с дираковским, т. е. кинематическим ($-\mu_0$), магнитным моментом должен обладать весьма малым аномальным магнитным моментом $\mu_{\text{эл.}}^{\text{аном.}} = -\mu_0 \delta$. На природе аномальных магнитных моментов мы остановимся в следующем параграфе.

В заключение этого параграфа необходимо сказать несколько слов о том, нельзя ли с помощью сверхтонкой структуры объяснить лэмбовский сдвиг уровня $2s_{1/2}$, которой по частоте смещен относительно уровня $2p_{1/2}$ на величину 1058 Мгц. Прежде всего заметим, что, как видно из формулы (21.48), расщепление $2s_{1/2}$ -терма составляет величину порядка 200 Мгц. Кроме того, центр тяжести s -термов остается при этом несмещенным. В самом деле, если уровень с $S=1$ (спины электрона и протона параллельны) повышается на какую-то величину [см. (21.47)], то уровень с $S=0$ (спины электрона и протона антипараллельны) понижается на величину, в три раза большую [см. (21.46)].

Поскольку состояния с $S=1$ в три раза вероятнее состояния с $S=0$ (при $S=1$ спин может быть направлен по оси z , против оси z и перпендикулярно к оси z), то центр тяжести уровней s -состояний остается при этом неизменным, т. е. будет соответствовать тому положению, которое было найдено без учета магнитного момента ядра. Таким образом, сверхтонкая структура не может объяснить лэмбовский сдвиг уровней, на теории которого мы остановимся в следующем параграфе.

Задача 21.1. Найти сдвиг уровней $1s$ в легких мю-мезоатомах вследствие влияния структуры ядра, учитывая движение ядра, а также изменение волновой функции в пределах объема ядра.

Указание. Сдвиг уровней следует подсчитывать по теории возмущений при помощи (21.5) и (21.7) с волновыми функциями водородоподобного атома, в которых масса электрона заменена массой мезона. Движение ядра вследствие конечности его массы на уровне мезоатома оказывает значительно большее влияние, чем на уровни обычных электронных атомов, и поэтому при более точных вычислениях надо брать приведенную массу мезона. Волновые функции мезона заметно меняются внутри ядра, поэтому величину $|\psi|^2$ можем заменить ее значением в нуле лишь при сравнительно грубой качественной оценке, как это было сделано при выводе формулы (21.14).

О т в е т. В общем случае:

$$\Delta E_{10} = -2E_{10} \left\{ 1 - \frac{3}{2b} + \frac{3}{2b^3} - \left[\frac{3}{2b^3} + \frac{3}{b^2} + \frac{3}{2b} \right] e^{-2b} \right\},$$

где

$$b = \frac{R_N Z}{a_\mu}, \quad E_{10} = - \frac{m_\mu e_0^4 Z^2}{2\hbar^2 \left(1 + \frac{m_\mu}{M} \right)}.$$

При малых b и $M \rightarrow \infty$ последнее выражение может быть получено из формулы (21.12).

§ 22. ПОНЯТИЕ ОБ ЭЛЕКТРОННО-ПОЗИТРОННОМ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ВАКУУМАХ

а. Дираковская теория «дырок». Открытие позитрона

Поскольку в теории Дирака были учтены не только релятивистские, но и спиновые эффекты, с помощью ее удалось дать правильное объяснение тонкой структуры спектральных линий водородоподобного атома; а также построить теорию аномального и нормального эффектов Зеемана.

Вместе с тем теория Дирака привела к ряду фундаментальных трудностей, связанных с интерпретацией отрицательных энергий, которые на первый взгляд могли показаться даже неустраиваемыми. В действительности же более подробный их анализ привел к новым фундаментальным открытиям релятивистской квантовой механики.

В § 17 при решении задачи о движении свободной частицы мы отметили, что уравнение Дирака допускает решения, соответствующие как положительным, так и отрицательным значениям энергии. Заметим, что решения с отрицательной энергией не являются характерными только для теории Дирака — они должны появляться в любой релятивистской теории, включая даже классическую. В самом деле, в релятивистской механике энергия свободной частицы, как известно, связана с ее импульсом и массой покоя соотношением:

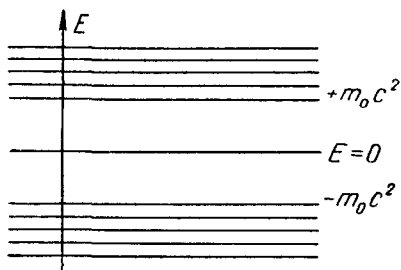
$$E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4,$$

допускающим два равноправных решения:

$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4},$$

причем две области значений энергии (положительных и отрицательных) оказываются разделенными интервалом $2m_0 c^2$ (см. фиг. 22.1). Состояния,

соответствующие отрицательной энергии, с первого взгляда кажутся не реальными, поскольку область отрицательных энергий простирается до бесконечности ($E = -\infty$) и поэтому не должно существовать наинизшего энергетического состояния. Это означает,



Фиг. 22.1. Схема возможных уровней энергии свободной дираковской частицы.

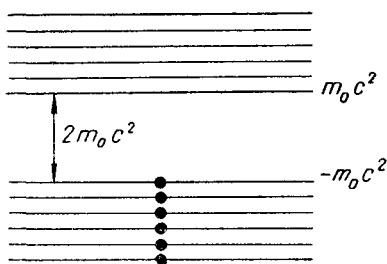
массой должен его «догонять», так чтобы центр тяжести (с учетом отрицательной массы) оставался бы неподвижным.

В классической физике состояния с отрицательной энергией трудностей не вызывают, ибо при движении частицы ее энергия может изменяться только непрерывным образом, и переходы из состояний с положительной энергией в состояния с отрицательной скачком на величину $\Delta E \cong 2m_0c^2$, являются невозможными. Поэтому, исключив в начальный момент времени состояния с отрицательной энергией, мы можем в дальнейшем их вообще не рассматривать.

Совершенно иное положение в квантовой теории, согласно которой возможны переходы между состояниями не только непрерывного, но и дискретного спектра. Теперь состояния с отрицательной энергией не могут быть механически исключены, так как вероятность перехода между уровнями с энергией $+m_0c^2$ и $-m_0c^2$ оказывается отличной от нуля.

Чтобы избежать перехода электронов в состояния с отрицательной энергией, Дирак предложил (1931) считать все уровни с отрицательной энергией заполненными электронами (см. фиг. 22.2), благодаря чему электроны с положительной энергией не могут в обычных условиях переходить на эти уровни¹⁾.

Допустим теперь, что гамма-квант с энергией $\epsilon > 2m_0c^2$, действуя на электрон вакуума, т. е. на электрон с отрицательной энергией, переводит его в состояние с положительной энергией. В этом случае вместо поглощенного ядром гамма-кванта [см. фиг. 22.3] появляются электрон с положительной энергией и одновременно «дырка» в фоне заполненных электронами отрицательных энергетических уровней.



Фиг. 22.2. Схема нулевого состояния электронно-позитронного вакуума.

¹⁾ В соответствии с принципом Паули (см., например, § 6) любое состояние может быть занято не более чем одним электроном.

Решающий успех гипотезы Дирака заключается в том, что эту «дырку» он интерпретировал как частицу с положительной массой, равной массе электрона, но с зарядом, противоположным заряду электрона (позитрон)¹⁾. Действительно, пусть в начальный момент частицы отсутствуют, тогда «нулевая» энергия фона $E_{\text{вак.}}$ равна сумме энергий электронов в отрицательных энергетических состояниях n_- :

$$E_{\text{вак.}} = \sum_{n'_-} E_{n'_-}, \quad (22.1)$$

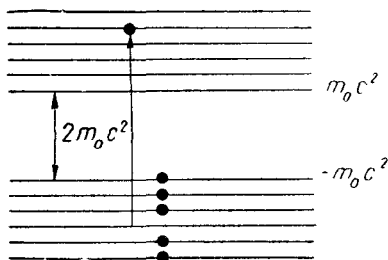
а «нулевой» заряд равен:

$$e_{\text{вак.}} = - \sum_{n'_-} e_0.$$

Таким образом, когда реальная частица отсутствует с точки зрения теории «дырок», это означает, что все состояния с положительной энергией свободны, а все состояния с отрицательной энергией заняты. Это состояние мы примем за нулевое состояние (см. фиг. 22.2).

В случае же перехода электрона из состояния с отрицательной энергией n_- в некоторое состояние с положительной энергией n_+ общее изменение энергии системы:

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{n_+} + \sum_{n'_-} E_{n'_-} - \sum_{n'_-} E_{n'_-} = \\ &= E_{n_+} - E_{n_-} = E_{n_+} + |E_{n_-}| \end{aligned} \quad (22.2)$$



Фиг. 22.3. Схема образования пары электрон — позитрон.

будет уже соответствовать сумме положительных энергий двух образующихся частиц²⁾. Аналогичные рассуждения, проведенные в отношении заряда, показывают, что знак заряда одной из образовавшихся при этом частиц, соответствующей «дырке», противоположен знаку заряда электрона:

$$e = -e_{n_+} - \sum_{n'_-} e_0 + \sum_{n'_-} e_0 = -e_{n_+} + e_{n_-} = -e_0 + e_0. \quad (22.3)$$

Таким образом, переход электрона из состояния с отрицательной энергией в состояние с положительной энергией (очевидно, в результате поглощения гамма-кванта с энергией больше, чем $2m_0c^2$) ведет к рождению двух частиц. В этом случае незаполненное состояние электрона с отрицательной энергией («дырка») может рассматриваться как состояние, занятое частицей с положительным зарядом $+e_0$ и положительной энергией³⁾. Такая частица, пред-

¹⁾ Аналогичный вывод мы сделали при рассмотрении дырочной теории полупроводников (см. зонную теорию проводимости кристаллической решетки, § 6).

²⁾ Штрих у символа суммы (\sum') означает, что суммирование производится по всем состояниям n'_- за исключением состояния $n'_- = n_-$.

³⁾ Заметим, что, используя методы квантовой теории поля, можно построить симметричную относительно знака заряда теорию электронно-позитронного вакуума. Однако даже с помощью данной, несимметричной относительно электронов и позитронов теории (электрон — частица, позитрон — «дырка») удается весьма наглядно объяснить многие явления, связанные с превращением частиц.

сказанная Дираком, получила название «позитрон» и была открыта Андерсоном (1932) в составе космических лучей.

Теперь теория Дирака естественным образом включает в рассмотрение наряду с электроном (частицей) позитрон — античастицу, волновая функция которого подчиняется уравнению Дирака с положительным значением энергии и положительным знаком заряда (см. задачу 18.5).

Последняя теория не исключает возможности процесса, обратного только что рассмотренному: при наличии «дырки» электрон с положительной энергией может перейти на свободный уровень состояний с отрицательной энергией. В этом случае электрон и позитрон превращаются в гамма-кванты.

При этих превращениях строго соблюдается закон сохранения энергии и импульса. Как было уже отмечено, образование пары за счет поглощения гамма-кванта может происходить только в присутствии третьей частицы (например, ядра, в поле которого возникает пара), принимающей на себя избыток импульса фотона:

$$\gamma + Ze_0 \rightarrow Ze_0 + e_+ + e_- \quad (22.4)$$

Точно так же превращение пары (электрон—позитрон) в гамма-кванты (т. е. аннигиляция) происходит в соответствии с законами сохранения энергии и импульса, в результате чего образуется минимум два гамма-кванта:

$$e_+ + e_- = 2\gamma \quad (22.5)$$

Для того чтобы это показать, можно (не нарушая общности) выбрать систему, в которой электрон и позитрон будут двигаться с противоположно направленными импульсами ($k_- = -k_+ = k$, система центра инерции).

Тогда, согласно закону сохранения импульса, общий импульс двух образовавшихся квантов также должен равняться нулю:

$$\hbar(k_1 + k_2) = 0 \quad (22.5a)$$

Учитывая еще закон сохранения энергии:

$$c\hbar(k_1 + k_2) = 2\sqrt{m_0^2c^4 + c^2\hbar^2k^2}, \quad (22.5b)$$

находим $k_1 = -k_2$, а энергии каждого из фотонов равны:

$$\epsilon = c\hbar k_1 = c\hbar k_2 = \sqrt{m_0^2c^4 + c^2\hbar^2k^2}.$$

Наименьшим значением энергии фотоны будут обладать при $k=0$ (электрон и позитрон покоятся). Тогда $\epsilon_{\text{мин.}} = m_0c^2$. Эти два гамма-кванта разлетаются с одинаковой энергией и противоположно направленными импульсами. Отсюда также легко видеть, что пара электрон—позитрон не может превращаться в один гамма-квант ($k_2=0$), поскольку при наличии одного гамма-кванта мы не сможем одновременно удовлетворить законам сохранения энергии и импульса.

Большую роль при аннигиляции играет закон сохранения полного момента количества движения (орбитальный плюс спиновый). Если электрон движется с нерелятивистской скоростью, то последний закон (как было показано в § 18) может распасться на два: закон сохранения орбитального момента количества движения и закон сохранения спина.

Особенно отчетливо закон сохранения спина можно наблюдать при аннигиляции атома позитрония, представляющего собой атом водорода, у которого протон заменен позитроном, точнее, электрон и позитрон вращаются вокруг общего центра тяжести. В этом случае ядро, т. е. позитрон, а также электрон имеют одну и ту же массу и поэтому приведенная масса равна $\frac{m_0}{2}$.

Благодаря этому энергия уровней в атоме позитрония будет в два раза меньше, чем в атоме водорода:

$$E_n = -\frac{R\hbar}{2n^2},$$

а радиус орбиты, наоборот, в два раза больше. Скорости электрона и позитрона, так же как и в атоме водорода, можно считать нерелятивистскими. Если спины электрона и позитрона антипараллельны (пара-позитроний), то позитроний может распадаться на два гамма-кванта, и соответствующее время жизни равно $1,25 \cdot 10^{-10}$ сек.

Для пара-позитрония общий спин равен нулю, и поэтому два фотона разлетаются с противоположно направленными спинами, т. е. в сумме их спин равен нулю.

Если же спины электрона и позитрона параллельны (орто-позитроний), то такая система может аннигилировать лишь на три гамма-кванта и соответственно время жизни составляет $1,4 \cdot 10^{-7}$ сек.

Спин орто-позитрония равен единице. Он не может распадаться на один гамма-квант со спином, равным единице, так как в этом случае не будет выполняться закон сохранения импульса. При распаде же на два гамма-кванта не будет выполнен закон сохранения спина, так как общий спин двух гамма-квантов равняется или двум, или нулю. Только при распаде орто-позитрония на три гамма-кванта можно удовлетворить одновременно и закону сохранения импульса, и закону сохранения спина.

С открытием позитрона начался новый этап в развитии учения об элементарных частицах, а именно было открыто новое их фундаментальное свойство — взаимопревращаемость, а также существование античастиц. В частности, возникновение позитрона можно рассматривать как превращение гамма-кванта в пару электрон — позитрон, а аннигиляцию пары электрон — позитрон — как обратное превращение пары в гамма-кванты.

6. Лэмбовский сдвиг уровней атомных электронов

При движении электрона в атоме он взаимодействует не только с атомным ядром и с электронно-позитронным вакуумом, а также с электромагнитным вакуумом. Особенно сильно на движение электрона в атоме влияет взаимодействие его с электромагнитным вакуумом, что фактически и объясняет сдвиг уровня $2s_{1/2}$ в атоме водорода вверх относительно уровня $2p_{1/2}$.

Полная теория этого явления может быть построена только с помощью квантовой электродинамики, в основе которой лежит теория вторичного квантования. Однако, не прибегая к теории вторичного квантования, можно получить соответствующие формулы с точностью до коэффициентов порядка единицы, исходя из сравнительно простых физических соображений.

Электростатическое поле можно разложить в ряд Фурье, т. е. схематически представить как набор осцилляторов с различными частотами. Аналогичное разложение должно иметь место также и для вакуумного поля так называемых «псевдофотонов»:

$$E_{п.ф.} = \sum_{\omega} E(\omega) \cos \omega t. \quad (22.6)$$

Согласно основной идее теории квантованных полей каждой волне или полю мы можем сопоставить соответствующие частицы, например, ψ -волнам Дирака сопоставляются электроны и позитроны, световым волнам сопоставляются фотоны. Однако мы хорошо знаем, что уравнение Максвелла описывает не только световые волны, но и электростатическое и магнитное поля, зависящие от зарядов и их скоростей (ускоренно движущийся заряд создает

электромагнитные или световые волны). Этому электростатическому или магнитному поля мы и сопоставим «псевдофотоны», которые могут реально проявляться только при наличии зарядов. Поскольку масса покоя «псевдофотонов» равна нулю, то для них можно написать следующую связь между частотой ω и волновым числом k :

$$\omega = \frac{\epsilon}{\hbar} = \frac{cp}{\hbar} = c \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}. \quad (22.7)$$

Составляющие k_x , k_y , k_z связаны с целыми числами n_1 , n_2 , n_3 и длиной стороны куба периодичности L (см. § 6) соотношениями:

$$k_x = \frac{2\pi n_1}{L} \text{ и т. д.,}$$

где $n_i = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Отсюда находим:

$$\Delta k_x = \frac{2\pi \Delta n_1}{L} = \frac{2\pi}{L} = \Delta k_y = \Delta k_z.$$

Учитывая, что

$$\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = k^2 dk d\Omega,$$

имеем:

$$\frac{\omega^2 d\omega}{c^3} d\Omega = \frac{8\pi^3}{L^3},$$

Если рассматриваемая система обладает сферической симметрией, то последнее соотношение можно представить в виде:

$$\frac{1}{L^3} = \frac{\omega^2 d\omega}{c^3} \frac{1}{2\pi^2}. \quad (22.8)$$

С помощью формулы (22.6) для энергии электростатического поля внутри области объемом L^3 находим значение

$$\epsilon_{\text{п.ф.}} = \frac{1}{4\pi} \int (E)^2 d^3x = \frac{L^3}{8\pi} \sum_{\omega} (E(\omega))^2. \quad (22.9)$$

При выводе последней формулы мы приняли во внимание, что

$$\overline{(\cos \omega t \cos \omega' t)} = \frac{1}{2} \delta_{\omega\omega'}.$$

Так же как и в теории гармонического осциллятора, эта энергия не может обращаться в нуль и равняется нулевой энергии гармонических осцилляторов (см. § 10):

$$\epsilon_0 = 2 \sum_{\omega} \frac{1}{2} \hbar \omega. \quad (22.10)$$

Коэффициент 2 перед знаком суммы учитывает, что каждой возможной гармонике соответствуют два различных состояния поляризации «псевдофотонов».

В случае отсутствия реальных фотонов полная энергия электромагнитного поля (вакуума) должна равняться этой нулевой энергии $\epsilon_{\text{п.ф.}} = \epsilon_0$. Отсюда, принимая во внимание (22.8), находим:

$$(E(\omega))^2 = \frac{8\pi}{L^3} \hbar \omega = \frac{4\hbar \omega^3 d\omega}{\pi c^3}. \quad (22.10a)$$

При отсутствии реальных частиц и внешних полей вакуум (в том числе электромагнитный, содержащий фотоны и «псевдофотоны») ввиду его изо-

тропности, как правило, не сказывается ни в каких явлениях. При наличии же реальных частиц и внешних полей указанная изотропия нарушается, благодаря чему оказывается возможным образование виртуальных частиц («псевдофотонов» или пар электронов — позитронов) с последующим их поглощением (нулевые флуктуации).

Наглядный смысл основной идеи теории вакуума весьма удачно, хотя и не очень строго, пояснил Вельтон на примере полуклассической нерелятивистской теории движения электрона с учетом его взаимодействия с этими флуктуациями вакуума.

Для того чтобы проиллюстрировать этот расчет, мы попытаемся придать более конкретный смысл нулевым флуктуациям (22.10). В грубом приближении учтем воздействие вакуумного поля «псевдофотонов» на электрон с помощью обычного классического уравнения:

$$m_0 \ddot{\mathbf{r}} = e \mathbf{E}_{\text{п.ф.}} \quad (22.11)$$

Разлагая напряженность вакуумного поля $E_{\text{п.ф.}}$ в ряд Фурье:

$$\mathbf{E}_{\text{п.ф.}} = \sum_{\omega} \mathbf{E}(\omega) \cos \omega t \quad (22.12)$$

и интегрируя уравнение (22.11), находим смещение координаты электрона под действием вакуумного поля:

$$\mathbf{r} = -\frac{e}{m_0} \sum_{\omega} \mathbf{E}(\omega) \frac{\cos \omega t}{\omega^2}; \quad (22.13)$$

при этом для среднего квадрата отклонения координаты получаем:

$$\overline{(\Delta \mathbf{r})^2} = \overline{(\mathbf{r})^2} - \overline{(\bar{\mathbf{r}})^2} = \frac{e^2}{2m_0^2} \sum_{\omega} \frac{(\mathbf{E}(\omega))^2}{\omega^4}, \quad (22.14)$$

поскольку

$$\overline{\cos \omega t} = 0, \quad \overline{\cos \omega t \cos \omega' t} = \frac{1}{2} \delta_{\omega \omega'}$$

и поэтому $\bar{\mathbf{r}} = 0$. Отсюда, учитывая (22.10а), приходим, вообще говоря, к расходящемуся интегралу:

$$\overline{(\Delta \mathbf{r})^2} = \frac{2}{\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{\hbar}{m_0 c} \right)^2 \int \frac{d\omega}{\omega}, \quad (22.15)$$

в котором можно выделить конечную (наблюдаемую) часть, если область изменения частот оборвать сверху на частоте, соответствующей энергии покоя электрона:

$$\omega_{\text{макс.}} \approx \frac{m_0 c^2}{\hbar}, \quad (22.16)$$

а снизу на частоте, соответствующей минимальному значению энергии, которую может принимать электрон в атоме¹⁾:

$$\omega_{\text{мин.}} = \frac{|E|}{\hbar} = \frac{m_0 e^4}{2\hbar^3 n^2}. \quad (22.17)$$

Подставляя (22.17) и (22.16) в (22.15), находим:

$$\overline{(\Delta \mathbf{r})^2} = \frac{2}{\pi} \alpha \left(\frac{\hbar}{m_0 c} \right)^2 \ln \frac{2n^2}{\alpha^2}. \quad (22.18)$$

¹⁾ Более аккуратно ограничение интервала изменения ω этими пределами производится в теории регуляризации.

Таким образом, мы приходим к важному выводу о том, что под влиянием вакуумного поля «псевдофотонов» электрон совершает нечто вроде броуновского движения с определенным средним квадратом смещения. Как известно, движение броуновской частицы связано с ударами хаотически движущихся молекул окружающей среды, приводящими к отклонениям от среднего нулевого значения. Точно так же на движение элементарной частицы оказывают влияние своеобразные «удары» множества виртуальных частиц, образующих вакуум.

Как было показано Н. Боголюбовым и С. Тябликовым, вакуумные колебания приводят к некоторой эффективной размазанности точечного электрона, благодаря чему величина соответствующего радиуса оказывается средним геометрическим между классическим радиусом электрона и комптоновской длиной волны:

$$r_{п.ф.} \approx \sqrt{\frac{e^2 \hbar}{m_0 c^2 m_0 c}} = V \alpha \frac{\hbar}{m_0 c}. \quad (22.19)$$

Наличие подобного эффективного радиуса должно сказаться на ряде эффектов, в частности на изменении взаимодействия электрона с зарядом ядра, что в свою очередь, приводит к дополнительной энергии связи, т. е. к сдвигу уровней. Действительно, потенциальная энергия электрона в поле ядра вместо обычного выражения ($e = -e_0$):

$$V = -e_0 \Phi(r) \quad (22.20)$$

примет вид:

$$V' = -e_0 \Phi(r + \Delta r) = -e_0 \left[1 + (\Delta r \nabla) + \frac{1}{2} (\Delta r \nabla)^2 + \dots \right] \Phi(r), \quad (22.21)$$

или, переходя к средним значениям с учетом соотношений:

$$\overline{\Delta r} = 0, \quad \overline{(\Delta r \nabla)^2} = \frac{1}{3} \overline{(\Delta r)^2} \nabla^2, \quad (22.22)$$

получаем:

$$V' = -e_0 \left\{ 1 + \frac{1}{6} \overline{(\Delta r)^2} \nabla^2 + \dots \right\} \Phi(r). \quad (22.23)$$

Дополнительная энергия взаимодействия электрона с ядром равна разности этих выражений, т. е.

$$\Delta V_{п.ф.} = V' - V = -\frac{e_0}{6} \overline{(\Delta r)^2} \nabla^2 \Phi = \frac{4}{3} e_0^2 \alpha \left(\frac{\hbar}{m_0 c} \right)^2 \ln \frac{2n^2}{\alpha^2} \delta(r), \quad (22.24)$$

поскольку потенциал кулоновского поля ядра атома водорода удовлетворяет уравнению Пуассона:

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi e_0 \delta(r). \quad (22.25)$$

Чтобы найти окончательное выражение для сдвига энергетических уровней в атоме водорода, необходимо усреднить величину дополнительной энергии взаимодействия по соответствующему состоянию. Тогда формула для сдвига уровней примет вид:

$$\Delta E_{п.ф.} = \int (V' - V) |\psi(r)|^2 d^3x = \frac{4}{3} e_0^2 \alpha \left(\frac{\hbar}{m_0 c} \right)^2 |\psi(0)|^2 \ln \frac{2n^2}{\alpha^2}. \quad (22.26)$$

Этот сдвиг имеет место только для s -состояний, поскольку для других состояний ($l = 1, 2, \dots$) величина $|\psi(0)|^2$ в рассматриваемом приближении обращается в нуль. Но для s -состояния:

$$|\psi(0)|^2 = \frac{1}{\pi n^3 a_0^3}, \quad (22.27)$$

где $a_0 = \hbar^2/m_0e^2$ — радиус первой бортовской орбиты атома водорода, а n — главное квантовое число. Если теперь подставить это значение в (22.26), то для сдвига s -уровней получим формулу:

$$\Delta E_{п.ф.} = \frac{8}{3\pi} \alpha^3 \frac{R\hbar}{n^3} \ln \frac{2n^2}{\alpha^2}, \quad (22.28)$$

впервые установленную Бете.

Численная оценка результата для $2s$ -состояния ($n = 2$):

$$\Delta E_{п.ф.} = 17,8R = 1040 \text{ Мгц} \quad (22.29)$$

показывает сравнительно хорошее согласие с последними экспериментальными данными ($\Delta E = 1057,77 \text{ Мгц}$) для лэмбовского сдвига уровней (см. § 20).

Заметим, что полное исследование сдвига уровней атомных электронов, проведенное на базе релятивистской квантовой теории поля, дало значительно лучшее количественное совпадение результатов теории и эксперимента, чем по полуклассической формуле (22.28). Расхождение составляет менее 1 Мгц .

Мы не имеем возможности здесь более подробно останавливаться на современной теории вакуума и поэтому ограничиваемся простым перечислением основных ее достижений, имеющих первостепенное значение.

в. Электронно-позитронный вакуум

Формула (22.28) для лэмбовского сдвига уровней была получена в результате учета взаимодействия электронов с электромагнитным вакуумом. Но наряду с электромагнитным вакуумом существует электронно-позитронный вакуум и вакуум других частиц. Метод вторичного квантования, являющийся в известной степени общим для всех полей, позволяет учесть влияние электронно-позитронного вакуума.

В современной квантовой теории поля изучение свойств вакуумов различных частиц играет исключительно важную роль. Вакуум обуславливает прежде всего взаимодействие между частицами. В частности, электромагнитное взаимодействие (закон Кулона) можно рассматривать как результат взаимодействия между двумя зарядами через электромагнитный вакуум, когда один электрон испускает «псевдофотон», а другой — его поглощает. Таким образом, электростатическое поле представляет собой возбужденное состояние электромагнитного вакуума.

С другой стороны, вакуум представляет собой своеобразный резервуар, откуда «извлекаются» реальные частицы при их порождении и куда они «переходят» в результате аннигиляции. Электронно-позитронный вакуум по существу является уже знакомым нам фоном электронов в состояниях с отрицательной энергией. К сожалению, он не имеет классического аналога и поэтому не допускает полуклассического исследования, которое возможно в случае электромагнитного вакуума. Кулоновское поле ядра может поляризовать этот вакуум (т. е. электрон находится как бы в диэлектрике), благодаря чему возникает дополнительная энергия взаимодействия, определяемая выражением:

$$V_{э.-п.} = -\frac{4}{15} e_0^2 \alpha \left(\frac{\hbar}{m_0 c} \right)^2 \delta(r). \quad (22.30)$$

Сопоставляя последнюю формулу с формулой (22.24), мы видим, что сдвиг уровней, обусловленный взаимодействием с электронно-позитронным вакуумом, почти в 40 раз меньше сдвига уровней, связанного с флуктуациями электромагнитного поля, и имеет противоположный знак.

Особенно сильное влияние электронно-позитронный вакуум оказывает на магнитные свойства электрона, благодаря чему магнитный момент элек-

трона, как показал Швингер, становится несколько большим, чем магнетон Бора:

$$\mu_{э.-п.} = -\mu_0 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi}\right). \quad (22.31)$$

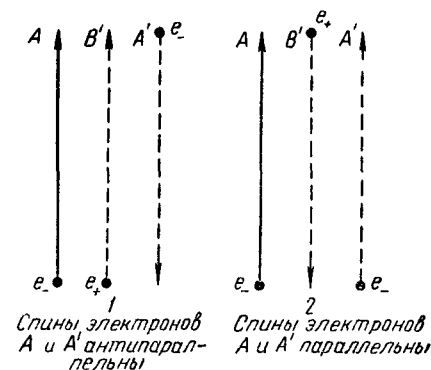
Дополнительная поправка к магнитному моменту электрона, вычисленная с учетом следующего члена,

$$\Delta\mu_{э.-п.} = -\left(\frac{\alpha}{2\pi} - 0,328 \frac{\alpha^2}{\pi^2}\right)\mu_0 = -0,0011596\mu_0 \quad (22.32)$$

находится в хорошем согласии с экспериментальными данными, полученными с помощью радиоспектроскопических методов (см. § 21). Качественно возникновение дополнительного магнитного момента электрона, включая даже его знак, можно объяснить следующим образом. Начальный электрон A [см. фиг. 22.4], спин которого мы направим вверх (этим самым мы зададим выделенное направление), может виртуально породить пару: электрон A' и позитрон B' , которая образуется преимущественно с противоположно направленными спинами.

Поскольку мы имеем выделенное направление, задаваемое спином электрона A , спин электрона A' (а вместе с тем и позитрона B') может быть направлен двояким образом: во-первых, спин начального электрона A антипараллелен спину электрона A' и параллелен спину виртуального позитрона B' [случай 1 (см. фиг. 22.4)]. Во-вторых, спин электрона A параллелен спину электрона A' и антипараллелен спину позитрона B' [случай 2 (см. фиг. 22.4)].

Поскольку мы имеем выделенное направление, задаваемое спином электрона A , спин электрона A' (а вместе с тем и позитрона B') может быть направлен двояким образом: во-первых, спин начального электрона A антипараллелен спину электрона A' и параллелен спину виртуального позитрона B' [случай 1 (см. фиг. 22.4)]. Во-вторых, спин электрона A параллелен спину электрона A' и антипараллелен спину позитрона B' [случай 2 (см. фиг. 22.4)].



Фиг. 22.4. Виртуальное рождение электроном пары электрон—позитрон.

Спины реальных и виртуальных частиц изображены соответственно сплошной и пунктирной стрелками.

При определении дополнительного момента необходимо учесть следующие возможности порождения и аннигиляции пары.

а) Порождается пара $A'B'$, а затем она же и аннигилирует. Это возможно как в случае 1, так и в случае 2. Никакого добавка к магнитному моменту при этом не должно возникать, так как вероятности процессов возникновения обеих этих случаев одинаковы, а магнитные моменты в каждом из них будут прямо противоположны.

б) Поскольку в случае 2 спины электрона A и позитрона B' будут противоположны, то позитрон B' может аннигилировать не только с электроном A , но и с начальным электроном A . В случае же 1 этот процесс менее вероятен, так как спины пары A и B' будут параллельными друг другу.

Последний процесс даст преимущественное состояние, когда дополнительный магнитный момент параллелен первоначальному магнитному моменту электрона A , поскольку, как нетрудно сообразить, магнитные моменты всех частиц (A , A' и B') будут направлены вниз. Благодаря этому и возникает дополнительный (аномальный) магнитный момент электрона, равный:

$$\Delta\mu_{э.-п.} = -2\mu_0\gamma,$$

где γ — доля времени, определяющая вероятность аннигиляции начального электрона A с позитроном B' .

Эти простые рассуждения сразу дают правильный знак для этого дополнительного, т. е. аномального, магнитного момента. Более же строгие расчеты приводят к формуле (22.32).

Таким образом, наряду с дираковским магнитным моментом $\mu_d = -\mu_0\sigma$ электрон должен обладать аномальным магнитным моментом $\mu_{ан.} = -\frac{\alpha}{2\pi}\mu_0\beta_3\sigma$, имеющим полевое происхождение и возникающим благодаря взаимодействию с электронно-позитронным вакуумом.

Аномальный же магнитный момент нуклонов, т. е. нейтрона и протона, объясняется мезонной теорией, правда, далеко не с такой поразительной точностью, какая достигнута в расчетах аномального магнитного момента электрона. Это связано с тем обстоятельством, что мезонная теория еще далека от той степени завершенности, какой достигла квантовая электродинамика.

Согласно мезонной теории протоны и нейтроны взаимодействуют с пи-мезонным полем. Поскольку протон может диссоциировать на нейтрон и положительно заряженный пи-мезон, а нейтрон — на протон и отрицательно заряженный пи-мезон, аномальные части магнитных моментов этих частиц, обязанные пи-мезонному полю, должны быть примерно равными по величине и противоположными по знаку.

Возникновение дополнительного магнитного момента нейтрона находит следующее объяснение. Нейтрон обладает определенной вероятностью диссоциировать на протон и отрицательный пи-мезон. Поскольку спин пи-мезона равен нулю, то он не обладает собственным магнитным моментом. Поэтому вклад в магнитный момент нейтрона будет давать пи-мезон, находящийся, например, в p -состоянии (напомним, что в s -состоянии орбитальный момент также равняется нулю). Магнитный момент пи-мезона в $\frac{m_p}{m_\pi} \approx 7$ раз больше ядерного магнетона, и поэтому пи-мезон вносит основной вклад в аномальный магнитный момент нейтрона. Чтобы при этом виртуальном процессе выполнялся закон сохранения момента, необходимо, чтобы направление орбитального момента количества движения виртуального пи-мезона, равною единице, совпадало с направлением спина нейтрона, а спин виртуального протона, который, так же как и спин нейтрона, равен $1/2$, был бы направлен противоположно спину нейтрона, т. е. $s_n = s_\pi - s_p$, $s_n = s_p = \frac{1}{2}$, $s_\pi = 1$. Так как пи-мезон обладает отрицательным зарядом, а его момент количества движения параллелен спину нейтрона, то он и создает отрицательный магнитный момент нейтрона.

Чтобы объяснить не только знак, но и величину аномального магнитного момента нейтрона, следует предположить, что нейтрон $1/4$ часть своего времени существует в этом диссоциированном состоянии. Эта оценка представляется весьма разумной и дает правильный знак и порядок величины магнитного момента нейтрона ($\mu_n^{ан.} \sim -2\mu_{яд.}$). Аналогичным путем можно показать, что вследствие диссоциации протона на нейтрон и π^+ -мезон возникает положительный аномальный магнитный момент протона ($\mu_p^{ан.} \sim +2\mu_{яд.}$). Кроме того, протон обладает дираковским магнитным моментом ($\mu_p^д. = \mu_{яд.}$). Более точные данные о величине магнитных моментов протона и нейтрона приведены в предыдущем параграфе.

Таким образом, мы имеем основания считать, что аномальный магнитный момент дираковских частиц является вторичным и имеет полевую природу.

В исходных уравнениях этот момент не должен фигурировать, он появляется как результат взаимодействия либо электрического заряда с электронно-позитронным полем (электрон), или ядерного мезонного заряда с пи-мезонным полем (протон, нейтрон).

г. Понятие о методах регуляризации

Одним из важнейших вопросов современной квантовой теории поля является вопрос о регуляризации, т. е. перенормировках. Этот вопрос далек еще от своей математической завершенности, однако здесь получен ряд важных результатов, имеющих большое принципиальное и практическое значение.

В чем же заключается основная идея регуляризации? Она сводится к тому, чтобы выделить в бесконечных членах энергии взаимодействия электрона с электромагнитным или электронно-позитронным вакуумом такие конечные члены, которые можно было бы сравнить с экспериментом, отбрасывая при этом остальную (бесконечную) часть.

Вопрос о регуляризации был поставлен по существу уже в классической электродинамике, например, в теории электромагнитной массы электрона.

Если предположить, что заряд электрона распределен внутри сферы радиуса r_0 , то его классическая электромагнитная масса (полевая) будет равна:

$$m^{\text{пол.}} = \gamma \frac{e^2}{r_0 c^2}, \quad (22.33)$$

где γ — коэффициент порядка единицы, зависящий от характера распределения заряда внутри сферы. Попытки построить классическую электродинамику с конечным значением радиуса $r_0 \sim 10^{-13}$ см, который давал бы разумное значение для $m^{\text{пол.}}$ (теория Лоренца, нелинейная теория Борна—Инфельда, теория с высшими производными Боппа—Подольского и т. д.), не дали каких-либо убедительных результатов. Более того, все эти теории встретили принципиальные затруднения при их квантовом обобщении.

С другой стороны, теория точечного электрона приводит при $r_0 \rightarrow 0$ к бесконечному значению массы как в классическом, так и в квантовом вариантах теории. Поэтому большим достижением теории регуляризации в современной квантовой теории поля явилось разумное выделение в бесконечной энергии взаимодействия конечных членов, отвечающих лэмбовскому сдвигу атомных уровней и дополнительному магнитному моменту электрона, что находится в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Современная теория регуляризации распространяется на проблемы собственной массы и заряда электрона. При этом оказалось, что с учетом не только электромагнитного, но и электронно-позитронного вакуума электромагнитная масса (22.33) вообще выпадает из рассмотрения. Поэтому природа основной массы электрона, т. е. так называемой «затравочной» массы, должна носить неполевой характер. Благодаря же взаимодействию с вакуумом (причем основной вклад здесь получается при одновременном учете электромагнитного и электронно-позитронного вакуумов) получается дополнительная масса, расходящаяся лишь логарифмически:

$$\Delta m^{\text{пол.}} = \alpha m_{\text{затр.}} \ln \frac{\epsilon_{\text{макс.}}}{m_0 c^2}. \quad (22.34)$$

Перед теорией регуляризации встает важнейшая задача — решить вопрос, на каком значении $\epsilon_{\text{макс.}}$ следует обрывать логарифмически расходящиеся выражения. Эта проблема, бесспорно, имеет теоретическое значение, хотя практически логарифмически расходящиеся члены можно считать порядка единицы и поэтому величина Δm будет сохранять порядок $\frac{1}{137} m_{\text{затр.}}$ в сравнительно широком диапазоне значений $\epsilon_{\text{макс.}}$

Точно так же взаимодействие электрона в данном случае уже не с электромагнитным, а с электронно-позитронным вакуумом приводит к уменьшению его основного затравочного заряда на величину:

$$\Delta e^{э.-п.} = -\alpha e_{\text{затр.}} \ln \frac{\epsilon_{\text{макс.}}}{m_0 c^2}. \quad (22.35)$$

Полевые добавки к массе и заряду электрона экспериментально еще не выделены и этот важный вопрос требует своего дальнейшего развития¹⁾. Таким образом, квантованное электромагнитное поле, а также электронно-позитронный вакуум более полно отражают реальные свойства объективно существующего микромира, а именно взаимодействие и взаимное превращение элементарных частиц.

Задача 22.1. Когда при свободном движении электрона в среде с показателем преломления $n > 1$ возможно излучение фотонов (эффект Черенкова)?

Почему в вакууме ($n = 1$) такое излучение становится невозможным?

Решение. Чтобы излучение стало возможным, необходимо, чтобы выполнялись законы сохранения энергии:

$$\sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2} = \hbar \omega + \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p'^2}$$

и импульса:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \hbar \mathbf{k},$$

где \mathbf{p} и \mathbf{p}' — начальный и конечный импульсы электрона, а $\hbar \mathbf{k}$ — импульс фотона.

Возводя в квадрат указанные соотношения и вычитая затем одно соотношение из другого, для косинуса угла вылета фотона получаем выражение:

$$\cos \theta = \frac{\omega}{c k \beta} + \frac{\hbar k}{2p} \left[1 - \frac{\omega^2}{c^2 k^2} \right].$$

Учитывая далее, что для среды с показателем преломления n имеет место соотношение:

$$\epsilon = \hbar \omega = c' \hbar k = \frac{\hbar k c}{n}$$

($c' = \frac{c}{n}$ — фазовая скорость света в среде), получаем;

$$\cos \theta = \frac{1}{\beta n} + \frac{\hbar k}{2p} \left(1 - \frac{1}{n^2} \right).$$

При $\beta n > 1$, т. е. когда скорость электрона v , оставаясь меньше фазовой скорости света в вакууме, становится больше скорости света в среде

¹⁾ См. сборники: «Сдвиг уровней атомных электронов» (ИЛ, М., 1950), «Новейшее развитие квантовой электродинамики» (ИЛ, М., 1954) под редакцией Д. Д. Иваненко; Н. Н. Боголюбов и Д. В. Ширков, Введение в теорию квантованных полей, ГИТТЛ, М., 1957; А. А. Соколов, Введение в квантовую электродинамику, Физматгиз, М., 1958.

$c > v' > c'$, излучение становится возможным. В классическом случае ($\hbar = 0$) угол, под которым излучается фотон, удовлетворяет соотношению:

$$\cos \theta = \frac{1}{\beta n}.$$

В вакууме подобное излучение невозможно, так как при $n = 1$ имеем: $\cos \theta = \frac{c}{v}$, а скорость v не может стать больше скорости света c .

§ 23. ТЕОРИЯ АТОМА ГЕЛИЯ БЕЗ УЧЕТА СПИНОВЫХ СОСТОЯНИЙ

а. Основные положения теории многоэлектронных атомов

Атом гелия представляет собой простейший многоэлектронный атом. Вокруг его ядра с $Z = 2$ движутся два электрона. Однако уже в такой простой системе отчетливо проявляются основные качественные особенности квантовой теории многих частиц.

В классической теории, при наличии двух электронов всегда можно одному электрону приписать индекс 1, а второму — индекс 2, а затем проследить от начала до конца за движением каждого из этих электронов по отдельности.

Согласно квантовой теории, только в том случае, когда электроны находятся на большом расстоянии друг от друга, практически их можно перенумеровать.

Если же электроны 1 и 2 находятся настолько близко друг к другу, что будут такие точки в пространстве, где обе волновые функции отличны от нуля, то в силу тождественности электронов мы не сможем различить, в какой точке пространства находится электрон 1 и в какой — электрон 2.

Подобная неразличимость (или тождественность) электронов является специфической особенностью микромира. Она приводит к специфическим обменным силам, не имеющим классического аналога.

Кроме того, в многоэлектронных атомах доминирующее значение имеют спиновые свойства, которые ни в классической, ни в боровской теории не учитываются и принимаются во внимание лишь в квантовой механике. Кстати заметим, что только в атоме с одним электроном спиновые силы играют роль поправок, которыми в первом приближении вообще можно пренебречь. Поэтому теория Бора смогла объяснить ряд явлений только в водородо-подобных атомах с одним электроном. Теорию же атомов с двумя и более электронами по боровской теории нельзя было построить, так как в ней нельзя было учесть ни обменных сил, ни спиновых состояний.

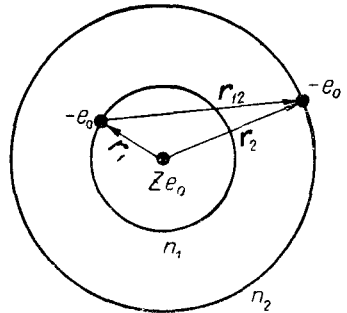
Чтобы уяснить сущность квантовой теории многих частиц со всеми ее особенностями, рассмотрим более подробно проблему

гелиеподобных атомов, каковыми являются, например, сам нейтральный атом гелия, однократно ионизованный атом Li^+ , дважды ионизованный атом Be^{++} и т. д.

б. Решение задачи атома гелия методом теории возмущений

Прежде всего выясним физическую природу обменных сил, связанную с тождественностью, т. е. неразличимостью электронов. При этом мы не будем учитывать спиновых свойств частиц¹⁾.

Допустим, что положение первого и второго электронов характеризуется соответственно радиус-векторами \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 (при этом их начало совпадает с неподвижным ядром; см. фиг. 23.1). Состояния с квантовыми числами (n_1, l_1, m_1) и (n_2, l_2, m_2) соответственно будем обозначать ради краткости через n_1 и n_2 , подразумевая под ними совокупность квантовых чисел (n, l, m) . Для определения движения каждого из электронов в отдельности, при условии отсутствия взаимодействия между ними, мы имели бы уравнение Шредингера вида:



Фиг. 23.1. Атом гелия.

$$(E_{n_j} - H_j) \psi_{n_j}(\mathbf{r}_j) = 0, \quad (23.1)$$

где

$$H_j = T_j + V_j, \quad T_j = \frac{1}{2m_0} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_j \right)^2, \quad V_j = -\frac{Ze_0^2}{r_j}, \quad (23.2)$$

а индекс j принимает два значения: $j=1$ — в случае первого электрона и $j=2$ — в случае второго.

Для энергии E_{n_j} при этом получаются значения (см. § 13):

$$E_{n_j} = -\frac{R\hbar Z^2}{n_j^2}, \quad (23.3)$$

а собственные функции ψ_{n_j} будут совпадать с волновыми функциями водородоподобного атома, удовлетворяющими условию ортонормированности:

$$\int \psi_{n_j}^*(\mathbf{r}) \psi_{n_{j'}}(\mathbf{r}) d^3x = \delta_{n_j n_{j'}}. \quad (23.4)$$

¹⁾ Это можно сделать, так как задача в данном приближении допускает решение в виде разделяющихся пространственных и спиновых переменных (более подробно см. § 24).

Если теперь учесть еще взаимодействие двух электронов:

$$V' = \frac{e_0^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{e_0^2}{r_{12}}, \quad (23.5)$$

то их движение уже нельзя будет рассматривать как независимое, и поэтому для описания полной системы, имеющей гамильтониан:

$$H = H_1 + H_2 + V' \equiv H^0 + V', \quad (23.6)$$

мы должны взять уравнение Шредингера в виде:

$$(E - H^0 - V') \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0, \quad (23.7)$$

где E — полная энергия, а $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — полная волновая функция, зависящая от координат как первого, так и второго электронов.

Здесь, как и в случае одноэлектронной задачи, величина $\psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ характеризует плотность вероятности обнаружения первого электрона в положении \mathbf{r}_1 , а второго — в положении \mathbf{r}_2 . Поэтому для $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ условие нормировки принимает вид:

$$\int \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3x_1 d^3x_2 = 1, \quad (23.8)$$

где интегрирование проводится по координатам обеих частиц.

Поскольку точное решение уравнения (23.7) встречает непреодолимые трудности, воспользуемся развитым в § 14 методом возмущений¹⁾, предполагая, что взаимодействие электронов между собой (энергия V') вносит лишь малое изменение в независимое движение каждого электрона в кулоновском поле ядра (в дальнейшем возможность такого приближения мы оценим более подробно).

Рассмотрим сначала нулевое приближение, в котором энергией возмущения V' можно пренебречь. Тогда уравнение Шредингера (23.7) принимает вид:

$$(E^0 - H^0) \psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0. \quad (23.9)$$

Очевидно, в связи с тем, что гамильтониан H^0 распадается на сумму двух гамильтонианов $H_1 + H_2$, каждый из которых зависит только от одной переменной (либо от \mathbf{r}_1 , либо от \mathbf{r}_2), волновая функция в нулевом приближении может быть записана в виде ($\psi^0 = u$):

$$u = \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2). \quad (23.10)$$

¹⁾ Поставленная задача представляет собой проблему трех тел и не может быть решена точно даже в классическом приближении. Поэтому ее изучение мы проведем с помощью приближенного метода теории возмущений.

В самом деле, подставляя (23.10) в (23.9) и учитывая (23.1), имеем:

$$\begin{aligned} (E^0 - H^0) u &\equiv \{E^0 - (H_1 + H_2)\} \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) = \\ &= E^0 u - \{\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) H_1 \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) + \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) H_2 \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2)\} = \\ &= E^0 u - \{\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) E_{n_1} \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) + \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) E_{n_2} \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2)\} = \\ &= \{E^0 - (E_{n_1} + E_{n_2})\} u = 0. \end{aligned}$$

Отсюда находим значение энергии в нулевом приближении:

$$E^0 = E_{n_1} + E_{n_2}, \quad (23.11)$$

где E_{n_1} и E_{n_2} — энергии каждого из не взаимодействующих между собой электронов. Этот результат можно пояснить следующим образом. При отсутствии возмущения V' движение электронов определяется их взаимодействием с ядром Ze_0 , т. е. полностью описывается уравнением Шредингера (23.1), имеющим в качестве решений собственные значения E_{n_j} [см. (23.3)] и собственные функции ψ_{n_j} . Так как один из электронов находится в состоянии n_1 , а второй — в состоянии n_2 , то при $V' = 0$ полная энергия системы будет равна $E_{n_1} + E_{n_2}$.

В силу же независимости движения электронов общая волновая функция, имеющая, как известно, статистический характер, будет произведением соответствующих двух независимых одноэлектронных волновых функций одноэлектронной задачи. Однако путем непосредственной подстановки в уравнение (23.9) нетрудно убедиться, что наряду с первым решением (23.10) при том же собственном значении энергии (23.11) существует еще второе решение ($\psi^0 = v$):

$$v = \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1), \quad (23.12)$$

отличающееся от u перестановкой электронов. Теперь уже первый электрон будет находиться в состоянии n_2 , а второй — в состоянии n_1 .

Таким образом, рассматриваемое состояние системы имеет дополнительное вырождение, которое целиком и полностью обусловлено неразличимостью электронов; его называют *обменным вырождением*.

Если оба электрона находятся в одинаковых состояниях $n_1 = n_2$, то волновые функции u и v будут тождественными и обменное вырождение не должно иметь места, так как

$$u = v = \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2). \quad (23.12a)$$

В случае же $n_1 \neq n_2$ функции u и v различны и поэтому в качестве общего решения ψ^0 уравнения Шредингера (23.9) следует взять линейную комбинацию:

$$\psi^0 = C_1 u + C_2 v, \quad (23.13)$$

где C_1 и C_2 — произвольные постоянные коэффициенты, связанные между собой лишь условием нормировки:

$$\int \psi^{0*} \psi^0 d^3x_1 d^3x_2 = 1.$$

Для того чтобы найти значения коэффициентов C_1 и C_2 , а также уровни энергии E возмущенной системы (т. е. при учете взаимодействия V'), будем искать, следуя методу возмущений, решения для E и ψ в виде:

$$\begin{aligned} E &= E^0 + E'; \\ \psi &= \psi^0 + \psi'. \end{aligned} \quad (23.14)$$

Для решения этой задачи используем первое приближение уравнения Шредингера (23.7), которое в данном случае может быть записано в форме:

$$(E^0 - H^0) \psi' = -(E' - V')(C_1 u + C_2 v). \quad (23.15)$$

Пользуясь теоремой об ортогональности, согласно которой решение однородного уравнения невозмущенной задачи должно быть ортогональным правой части соответствующего неоднородного уравнения, т. е. в нашем случае для функции первого приближения [см. (14.13)], и замечая, что решениями невозмущенной задачи являются функции u и v , имеем:

$$\int u^* (E' - V') (C_1 u + C_2 v) d^3x_1 d^3x_2 = 0, \quad (23.16)$$

$$\int v^* (E' - V') (C_1 u + C_2 v) d^3x_1 d^3x_2 = 0. \quad (23.17)$$

Если теперь в уравнении (23.17) сделать замену \mathbf{r}_2 на \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_1 на \mathbf{r}_2 , то в силу того, что функция v [см. (23.12)] при этом перейдет в функцию u [см. (23.10)], а u в v , причем энергия возмущения V' остается прежней, так как $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$, это уравнение примет форму:

$$\int u^* (E' - V') (C_2 u + C_1 v) d^3x_2 d^3x_1 = 0. \quad (23.17a)$$

Поэтому, проделав в дальнейшем преобразования лишь с уравнением (23.16) мы можем обобщить полученные результаты также и на уравнение (23.17a) путем замены в конечных результатах коэффициентов $C_1 \rightarrow C_2$ и $C_2 \rightarrow C_1$.

Подставим в уравнение (23.16) вместо функций u и v их явные выражения из (23.10) и (23.12) и введем обозначения:

$$\psi_{n_1}^* (\mathbf{r}_1) \psi_{n_1} (\mathbf{r}_1) = \rho_{11} (\mathbf{r}_1), \quad (23.18)$$

$$\psi_{n_2}^* (\mathbf{r}_2) \psi_{n_2} (\mathbf{r}_2) = \rho_{22} (\mathbf{r}_2), \quad (23.19)$$

$$\psi_{n_1}^* (\mathbf{r}_1) \psi_{n_2} (\mathbf{r}_1) = \rho_{12} (\mathbf{r}_1), \quad (23.20)$$

$$\psi_{n_2}^* (\mathbf{r}_2) \psi_{n_1} (\mathbf{r}_2) = \rho_{21} (\mathbf{r}_2). \quad (23.21)$$

Здесь $\rho_{11}(\mathbf{r}_1)$ и $\rho_{22}(\mathbf{r}_2)$ характеризуют распределение плотности вероятности в пространстве электронов, находящихся соответственно в состояниях n_1 и n_2 , а $\rho_{12}(\mathbf{r}_1)$ и $\rho_{21}(\mathbf{r}_2)$ описывают так называемую плотность смешанного¹⁾ (или обменного) состояния, когда каждый из электронов частично находится и в состоянии n_1 , и в состоянии n_2 .

Принимая во внимание также, что в силу условия ортонормированности:

$$\int u^* u d^3x_1 d^3x_2 = \int \rho_{11}(\mathbf{r}_1) d^3x_1 \int \rho_{22}(\mathbf{r}_2) d^3x_2 = 1,$$

а

$$\int u^* v d^3x_1 d^3x_2 = \int \rho_{12}(\mathbf{r}_1) d^3x_1 \int \rho_{21}(\mathbf{r}_2) d^3x_2 = 0,$$

приводим (23.16) к виду:

$$E' C_1 - \left\{ C_1 e_0^2 \int \frac{\rho_{11}(\mathbf{r}_1) \rho_{22}(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3x_1 d^3x_2 + \right. \\ \left. + C_2 e_0^2 \int \frac{\rho_{12}(\mathbf{r}_1) \rho_{21}(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3x_1 d^3x_2 \right\} = 0. \quad (23.22)$$

Первый из интегралов в выражении (23.22) представляет собой не что иное, как обычное кулоновское взаимодействие двух размазанных электронов:

$$K = e_0^2 \int \frac{\rho_{11}(\mathbf{r}_1) \rho_{22}(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3x_1 d^3x_2. \quad (23.23)$$

Второй же интеграл характеризует так называемую *обменную энергию*:

$$A = e_0^2 \int \frac{\rho_{12}(\mathbf{r}_1) \rho_{21}(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3x_1 d^3x_2, \quad (23.24)$$

соответствующую взаимодействию двух электронов, когда каждый из них находится в смешанном состоянии n_1 и n_2 .

В противоположность кулоновской энергии K обменная энергия A не имеет классического аналога и имеет сугубо квантовую природу.

Пользуясь соотношениями (23.23) и (23.24), вместо (23.22) получаем уравнение:

$$C_1(E' - K) - C_2 A = 0. \quad (23.25)$$

Второе уравнение [т. е. уравнение (23.17а)] мы найдем, если, как было уже указано, в (23.25) произведем замену: $C_2 \rightarrow C_1$ и $C_1 \rightarrow C_2$:

$$C_2(E' - K) - C_1 A = 0. \quad (23.26)$$

Из двух последних уравнений находим:

$$1) E' = K + A, \quad C_1 = C_2, \quad (23.27)$$

и

$$2) E' = K - A, \quad C_1 = -C_2. \quad (23.28)$$

¹⁾ Заметим, что эти плотности не имеют классического аналога.

В соответствии с этим для волновой функции [см. (23.13)] и для полной энергии будем иметь также два решения:

1) симметричное:

$$\psi^c = C_1(u + v), \quad (23.29)$$

$$E^c = E^0 + K + A, \quad (23.30)$$

и

2) антисимметричное¹⁾:

$$\psi^a = C_1(u - v), \quad (23.31)$$

$$E^a = E^0 + K - A. \quad (23.32)$$

Чтобы определить коэффициент C_1 , воспользуемся условием нормировки волновых функций ψ^c и ψ^a :

$$\int \psi^{*c} \psi^c d^3x_1 d^3x_2 = \int \psi^{*a} \psi^a d^3x_1 d^3x_2 = 1.$$

Тогда получим $2C_1^2 = 1$, или $C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Таким образом, для ψ^c и ψ^a окончательно имеем:

$$\psi^c = \frac{1}{\sqrt{2}}(u + v), \quad (23.29a)$$

$$\psi^a = \frac{1}{\sqrt{2}}(u - v). \quad (23.31a)$$

В том случае, когда оба электрона находятся в одном и том же квантовом состоянии ($n_1 = n_2$), функции u и v , как уже отмечалось выше, будут тождественными. В этом случае уравнения (23.16) и (23.17) сводятся к одному:

$$\int u^* (E' - V') u d^3x_1 d^3x_2 = 0. \quad (23.33)$$

Отсюда легко видеть, что

$$E' = K, \quad (23.34)$$

т. е. никакой обменной энергии здесь уже не будет.

Для волновой же функции получается одно-единственное симметричное решение:

$$\psi^c = u = \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2), \quad (23.35)$$

соответствующее энергии системы:

$$E^c = E^0 + K. \quad (23.36)$$

Резюмируя, можно сказать, что, применяя метод возмущений к рассматриваемой проблеме, мы приходим к одному из двух

¹⁾ Напомним, что при перестановке координат (т. е. при замене \mathbf{r}_2 на \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_1 на \mathbf{r}_2) функции u и v переходят одна в другую. В связи с этим волновая функция ψ^c в результате такой операции не меняет своего знака (симметричная функция), в то время как функция ψ^a меняет его на противоположный (антисимметричная функция).

видов решений — либо симметричным, либо антисимметричным¹⁾, что находится в полном согласии с общей теорией систем тождественных частиц (см. ниже).

в. Кулоновское взаимодействие электронов

Найдем выражение кулоновской энергии двух электронов, которые находятся в низшем энергетическом состоянии ($n_1 = n_2 = 1$). В этом случае энергия каждого электрона и его волновая функция будут соответственно равны:

$$E_1 = -\frac{Z^2 e_0^2}{2a_0}, \quad \psi_1(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}}, \quad (23.37)$$

где $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2}$ — радиус первой боровской орбиты.

Для кулоновской энергии взаимодействия двух электронов будем иметь следующее выражение:

$$K = \int \psi_1^2(\mathbf{r}_1) \psi_1^2(\mathbf{r}_2) \frac{e_0^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3x_1 d^3x_2. \quad (23.38)$$

Здесь $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \vartheta}$, а ϑ — угол между векторами \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 .

При интегрировании в (23.38) мы направим ось z по направлению вектора \mathbf{r}_1 . Тогда, подставляя сюда вместо волновых функций их выражение (23.37), в результате интегрирования по углам находим²⁾:

$$K = \frac{32Z^6 e_0^2}{a_0^6} \int_0^\infty r_1^2 dr_1 e^{-\frac{2Zr_1}{a_0}} \int_{r_1}^\infty r_2 e^{-\frac{2Zr_2}{a_0}} dr_2. \quad (23.38a)$$

¹⁾ Это связано с тем обстоятельством, что возмущение снимает вырождение, и поэтому коэффициенты C , которые в нулевом приближении из-за вырождения оставались неопределенными, принимают определенное значение (см. также § 14, эффект Штарка).

²⁾ При интегрировании по углу ϑ ($x = \cos \vartheta$) мы учли соотношение:

$$I = \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x}} = \begin{cases} \frac{2}{r_2} & \text{при } r_1 < r_2, \\ \frac{2}{r_1} & \text{при } r_1 > r_2. \end{cases}$$

Принимая во внимание, что выражение $\psi_1^2(\mathbf{r}_1) \psi_1^2(\mathbf{r}_2)$ симметрично относительно переменных \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , мы можем при вычислении интеграла заменить в случае $r_1 > r_2$ радиус r_1 на r_2 и радиус r_2 на r_1 . Тогда найдем для (23.38) тот же результат, если положим

$$I = \begin{cases} \frac{4}{r_2} & \text{при } r_1 < r_2, \\ 0 & \text{при } r_1 > r_2. \end{cases}$$

Далее, интегрируя по r_1 и r_2 , окончательно получаем:

$$K = \frac{5}{8} \frac{Ze_0^2}{a_0}. \quad (23.39)$$

Учитывая, что нулевая энергия в этом случае будет равна:

$$E^0 = 2E_1 = -\frac{Z^2 e_0^2}{a_0}, \quad (23.40)$$

получаем для полной энергии двух электронов, находящихся в низшем состоянии, следующее выражение:

$$E = E^0 + K = -\frac{Z^2 e_0^2}{a_0} + \frac{5}{8} Z \frac{e_0^2}{a_0}. \quad (23.41)$$

Найдем теперь энергию ионизации атома гелия, т. е. ту энергию, которую необходимо затратить, чтобы вырвать из атома один электрон, находящийся на первой орбите.

Для однократно ионизованного атома гелия (т. е. водородоподобного атома) энергия связи электрона с ядром равна просто E_1 [см. (23.37)]. Отсюда для энергии однократной ионизации гелиевого атома находим:

$$E^{\text{ион.}} = E_1 - E = \frac{e_0^2}{2a_0} \left(Z^2 - \frac{5}{4} Z \right), \quad (23.42)$$

т. е. для гелия ($Z=2$) будем иметь:

$$E^{\text{ион.}} = 0,75 \frac{e_0^2}{a_0}. \quad (23.43)$$

Энергия ионизации гелия хорошо известна из эксперимента:

$$E_{\text{эксп.}}^{\text{ион.}} = 0,9 \frac{e_0^2}{a_0} = 24,48 \text{ эв.} \quad (23.43a)$$

Такое расхождение теоретического значения с экспериментальными данными связано с тем обстоятельством, что энергия возмущения $K = \frac{5}{4} \frac{e_0^2}{a_0}$ не очень мала по сравнению с нулевой энергией $|E^0| = \frac{4e_0^2}{a_0}$ (их отношение оказывается $\sim 1/3$). Поэтому метод возмущений в данной задаче позволяет сделать лишь ряд правильных качественных заключений. Точность же этого метода, в силу того что K и $|E^0|$ сравнимы между собой, не очень велика.

г. Вариационный метод

Вариационные методы, развитые в работах Ритца, Хиллерааса и других, были с успехом использованы для нахождения энергий основных состояний атомов. В последние годы их стали применять также и в теории столкновений.

Как известно, средняя энергия системы может быть найдена с помощью формулы:

$$\langle E \rangle = \int \psi^* H \psi d^3x. \quad (23.44)$$

Если волновую функцию представить в виде:

$$\psi = \sum C_n \psi_n \quad (23.44a)$$

где коэффициенты C_n характеризуют вероятность пребывания электрона в состоянии n , то, как было показано в § 7, среднее значение энергии будет определяться формулой [см. (7.21)]:

$$\langle E \rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n. \quad (23.45)$$

Заменяя в последней сумме каждое собственное значение E_n наименьшим собственным значением $E^{\text{мин.}}$ и принимая во внимание, что для нормированных функций:

$$\sum_n |C_n|^2 = 1,$$

находим, что

$$E^{\text{мин.}} \leq \int \psi^* H \psi d^3x, \quad (23.46)$$

т. е. наименьшее значение интеграла $\int \psi^* H \psi d^3x$ дает возможность определить верхний предел энергии основного состояния системы.

Вариационный метод оказался весьма продуктивным в том случае, когда дополнительная энергия взаимодействия E' соизмерима с энергией E_0 нулевого приближения, благодаря чему метод возмущений (например, при вычислении основного состояния атома гелия) не может дать хороших результатов. При решении задачи вариационным методом в гамильтониане H уравнения (23.7) можно оставить на равных правах не только основную часть, но и дополнительную энергию взаимодействия V' . Затем следует подобрать пробную функцию ψ как функцию некоторых параметров таким образом, чтобы интеграл мог быть вычислен точно. После этого энергия E становится функцией введенных параметров. Минимальное значение этой функции, очевидно, будет близко к действительности, если пробная близка к истинной.

Наибольшая трудность в этой задаче заключается в выборе наиболее удачной пробной функции. При выборе ее используется любая доступная информация о свойствах системы.

В общем случае нельзя указать определенного выбора пробной функции, и здесь порой вопрос решает изобретательность или, точнее, физическая, а также математическая интуиция автора.

Очень часто пробные функции подбираются таким образом, чтобы они хотя бы по форме напоминали решения уравнения без возмущения.

С помощью вариационного метода решим задачу об определении низшего энергетического состояния атома гелия (Хиллераас, 1927). Мы только что показали, как эта задача решается методом теории возмущений, и поэтому сможем сравнить результаты обоих методов.

В качестве пробной функции Хиллераас выбрал функцию основного состояния атома водорода (23.37), заменив в ней заряд Z некоторым эффективным зарядом Z' . Величина Z' и представляет собой тот неизвестный параметр, который следует определить из вариационного принципа. Пробная функция:

$$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z'}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Z'r}{a_0}}, \quad (23.47)$$

очевидно, будет, так же как и функция (23.37), нормирована на единицу, поскольку ее нормировка не зависит от значения Z' .

Гамильтониан же H в соотношении (23.46) должен будет включать не только гамильтониан H^0 в нулевом приближении, но и потенциальную энергию возмущения. Тогда будем иметь:

$$H = T_1 + V_1 + T_2 + V_2 + V', \quad (23.48)$$

где T_j и V_j ($j=1, 2$) определяются равенством (23.2), а потенциальная энергия возмущения V' задается соотношением (23.5).

Учитывая нормировку волновых функций, а также независимость $T_1 + V_1$ от координаты \mathbf{r}_2 и независимость $T_2 + V_2$ от \mathbf{r}_1 , для среднего значения гамильтониана находим:

$$\langle H \rangle = 2\langle T_1 \rangle + 2\langle V_1 \rangle + \langle V' \rangle, \quad (23.49)$$

где

$$\langle T_1 \rangle = \frac{1}{2m_0} \int \psi_1(\mathbf{r}_1) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_1 \right)^2 \psi_1(\mathbf{r}_1) d^3x_1, \quad (23.50)$$

$$\langle V_1 \rangle = - \int \psi_1^2(\mathbf{r}_1) \frac{Ze_0^2}{r_1} d^3x_1, \quad (23.50a)$$

$$\langle V' \rangle = \int \psi_1^2(\mathbf{r}_1) \psi_1^2(\mathbf{r}_2) \frac{e_0^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3x_1 d^3x_2. \quad (23.50b)$$

Поскольку интеграл (23.50b) точно совпадает с интегралом (23.38), если в последнем положить $Z = Z'$ для $\langle V' \rangle$, согласно (23.39), будем иметь:

$$\langle V' \rangle = \frac{5}{8} \frac{Z'e_0^2}{a_0}. \quad (23.51)$$

В формуле (23.49) величина $\langle T_1 \rangle$ представляет собой среднее значение кинетической энергии водородоподобного атома с порядковым номером Z' , когда электрон находится в низшем состоянии.

Это среднее значение, как известно, связано с соответствующей полной энергией водородоподобного атома соотношением:

$$\langle T_1 \rangle = -E_1 = \frac{Z'^2 e_0^2}{2a_0}. \quad (23.52)$$

Точно так же мы получили бы среднее значение для потенциальной энергии водородоподобного атома, которая, как известно, равна удвоенной полной энергии ($\langle V_1 \rangle = 2E_1$), если в формуле (23.50a) вместо Z поставили бы Z' . Следовательно, будем иметь:

$$\langle V_1 \rangle = \frac{Z}{Z'} 2E_1 = -\frac{ZZ' e_0^2}{a_0}. \quad (23.53)$$

Отсюда для среднего значения энергии, согласно формуле (23.49), находим выражение:

$$E(Z') = \frac{e_0^2}{a_0} \left(Z'^2 - 2ZZ' + \frac{5}{8} Z' \right), \quad (23.54)$$

являющееся функцией параметра Z' .

Найдем теперь значение параметра Z' , соответствующее минимуму энергии системы.

Дифференцируя выражение для $E(Z')$ по Z' и приравнявая нулю полученное выражение, находим.

$$Z' = Z - \frac{5}{16}.$$

Отсюда для минимальной энергии электронов в атоме гелия находим выражение:

$$E_{\text{мин}} = -\left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 \frac{e_0^2}{a_0}. \quad (23.55)$$

При этом для энергии ионизации будем иметь:

$$E_{\text{ион}} = E_1 - E_{\text{мин}} = \frac{e_0^2}{2a_0} \left(Z^2 - \frac{5}{4} Z + \frac{25}{128} \right)$$

В частности, для атома гелия ($Z=2$) получаем:

$$E_{\text{ион}} \approx 0,85 \frac{e_0^2}{a_0}. \quad (23.56)$$

Это значение значительно ближе к экспериментальному [см. (23.43a)], чем (23.43), найденное методом возмущений. Хиллераас впоследствии получил еще лучшее совпадение с экспериментом, вводя не один, а несколько вариационных параметров.

Результат (23.55) для $E_{\text{мин}}$ находит простую физическую интерпретацию, а именно: действие одного электрона на другой сводится к экранировке положительного заряда ядра.

Вариационный метод можно использовать также для нахождения верхнего предела энергий одного или нескольких возбуж-

денных состояний. Для этого пробную функцию следует выбрать таким образом, чтобы она была ортогональной всем волновым функциям более низких состояний. Тогда, располагая уровни энергии в возрастающей последовательности: E_0, E_1, E_2, \dots , легко убедиться, что коль скоро ψ будет ортогональной функциям $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots$, то все соответствующие коэффициенты C_0, C_1, C_2, \dots в разложении обращаются в нуль, и для энергии, согласно (23.45), мы будем иметь значение:

$$\langle E \rangle = \sum_{n=n_0}^{\infty} E_n |C_n|^2, \quad (23.57)$$

где n_0 — квантовое число, характеризующее соответствующий возбужденный уровень. Учитывая соотношение $\sum_n |C_n|^2 = 1$, находим, что минимальное значение этой энергии будет соответствовать искомой энергии E_{n_0} возбужденного состояния.

Однако применение этого метода к расчету более высоких возбужденных уровней оказывается затруднительным, ввиду необходимости введения большого количества дополнительных условий, обуславливающих ортогональность волновой функции этого возбужденного состояния соответствующим волновым функциям более низких энергетических состояний.

д. Получение уравнения Шредингера вариационным методом

Рассмотрим один из наиболее общих случаев вариационной задачи, когда выбор пробной волновой функции ψ при отыскании среднего значения гамильтониана:

$$\langle E \rangle = \int \psi^* H \psi \, d^3x \quad (23.58)$$

при движении одной частицы ограничен только условием нормировки:

$$\int \psi^* \psi \, d^3x = 1. \quad (23.59)$$

Варьируя $\langle E \rangle$ по ψ и учитывая самосопряженность оператора H , получаем:

$$\delta \langle E \rangle = \int (\delta \psi^* H \psi + \delta \psi H^* \psi^*) \, d^3x = 0. \quad (23.60)$$

Здесь вариации $\delta \psi$ и $\delta \psi^*$ мы не можем считать независимыми, так как они связаны между собой условием нормировки (23.59); чтобы эти вариации сделать независимыми, проварьируем условие (23.59):

$$\int \psi \, \delta \psi^* \, d^3x + \int \psi^* \, \delta \psi \, d^3x = 0.$$

Умножая последнее равенство на постоянный множитель Лагранжа λ и подбирая его так, чтобы вариации были уже независимыми, сложим полученное равенство с (23.60).

Поскольку теперь все вариации $\delta \psi$ и $\delta \psi^*$ произвольны, из вариационного принципа автоматически следует уравнение Шредингера для ψ и ψ^* :

$$(H - E) \psi = 0, \quad (H^* - E) \psi^* = 0, \quad (23.61)$$

и физический смысл параметра λ , который равен энергии с обратным знаком ($\lambda = -E$).

Таким образом, вариационный принцип с учетом лишь условия нормировки приводит к уравнению Шредингера. Из полученного результата видно, что собственные значения уравнения Шредингера (23.61) дают экстремумы вариационного интеграла. Более детальный анализ показывает, что эти экстремумы являются минимумами, причем энергии основного состояния соответствует абсолютный минимум — наименьшее возможное значение энергии. Расчет возбужденных состояний, как было только что отмечено, требует подчинения волновых функций не только условию нормировки, но и дополнительным условиям ортогональности к волновым функциям более низких энергетических состояний, что в теории Шредингера выполняется автоматически.

е. Метод самосогласованного поля Хартри—Фока .

Мы рассмотрели два крайних случая вариационного метода решения задачи. В одном случае (метод Ритца — Хиллерааса) вариация волновой функции сводилась к нахождению «наилучших» значений параметров, введенных заранее в выбранное выражение для волновой функции. В другом же выбор подобных функций ничем (кроме условия нормировки) не ограничивался. Последний случай привел нас к уравнению Шредингера.

Возможен также и промежуточный случай. Волновая функция хотя и остается неопределенной, но равняется произведению функций, каждая из которых зависит лишь от координат, характеризующих положение одного электрона. Конкретный вид этих отдельных функций может быть найден путем решения методом последовательных приближений некоторого уравнения, следующего из вариационного принципа.

Один из таких методов был предложен Хартри (1928). Суть этого метода с точки зрения вариационного принципа, который впоследствии был сформулирован Фоком, состоит в следующем.

Запишем вариационный принцип для двух частиц в общем виде¹⁾:

$$\langle E \rangle = \int \psi^* (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H \psi (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3x_1 d^3x_2. \quad (23.62)$$

В качестве дополнительного условия потребуем, чтобы общая волновая функция равнялась произведению функций, зависящих от координат каждой из частиц в отдельности:

$$\psi (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1 (\mathbf{r}_1) \psi_2 (\mathbf{r}_2). \quad (23.63)$$

Кроме того, необходимо учесть условие нормировки:

$$\int \psi_1^* \psi_2^* \psi_1 \psi_2 d^3x_1 d^3x_2 = 1, \quad (23.64)$$

¹⁾ Аналогичным путем этот принцип можно обобщить также на случай трех и более частиц.

которое может быть записано отдельно для каждой частицы:

$$\int \psi_1^* \psi_1 d^3x_1 = \int \psi_2^* \psi_2 d^3x_2 = 1.$$

Подставляя пробную функцию (23.63) в выражение для энергии (23.62) и варьируя его отдельно по ψ_1 и ψ_2 , получаем:

$$\begin{aligned} & \int [(\psi_2^* \delta \psi_1^* + \psi_1^* \delta \psi_2^*) (H_1 + H_2 + \frac{e_0^2}{r_{12}}) \psi_1 \psi_2 + \\ & + \psi_1^* \psi_2^* (H_1 + H_2 + \frac{e_0^2}{r_{12}}) (\psi_2 \delta \psi_1 + \psi_1 \delta \psi_2) d^3x_1 d^3x_2 = 0, \end{aligned} \quad (23.65)$$

где $H_j = \frac{1}{2m_0} p_j^2 + V_j(\mathbf{r}_j)$ — гамильтониан, описывающий движение одного электрона ($j = 1, 2$), а $\frac{e_0^2}{r_{12}}$ представляет собой энергию взаимодействия двух электронов.

Из условия нормировки (23.64) находим связь между вариациями:

$$\int (\delta \psi_1^* \psi_2^* \psi_1 \psi_2 + \psi_1^* \delta \psi_2^* \psi_1 \psi_2 + \psi_1^* \psi_2^* \delta \psi_1 \psi_2 + \psi_1^* \psi_2^* \psi_1 \delta \psi_2) d^3x_1 d^3x_2 = 0.$$

Умножая последнее соотношение на множитель Лагранжа $\lambda = -E$ и складывая его с (23.65), можем выбрать λ таким образом, что все вариации $\delta \psi_1^*$, $\delta \psi_2^*$ и т. д. были бы независимыми. Отсюда получаем уравнения Хартри:

$$\begin{aligned} & \left(H_1 + \int \psi_2^* H_2 \psi_2 d^3x_2 + \int \psi_2^* \frac{e_0^2}{r_{12}} \psi_2 d^3x_2 - E \right) \psi_1 = 0, \\ & \left(H_2 + \int \psi_1^* H_1 \psi_1 d^3x_1 + \int \psi_1^* \frac{e_0^2}{r_{12}} \psi_1 d^3x_1 - E \right) \psi_2 = 0. \end{aligned} \quad (23.66)$$

Аналогичные уравнения находим также и для комплексно-сопряженных функций.

Умножая первое уравнение на ψ_1^* и интегрируя его по всему пространству первой частицы, а второе на ψ_2^* и интегрируя его по всему пространству второй частицы, и взяв полусумму от полученных уравнений, находим выражение для энергии:

$$E = \sum_j \int \psi_j^* H_j \psi_j d^3x_j + \frac{1}{2} \sum_j \sum_{j'} \int \psi_j^* \psi_{j'}^* \frac{e_0^2}{r_{jj'}} \psi_j \psi_{j'} d^3x_j d^3x_{j'}, \quad (23.66 \text{ а})$$

причем в случае двух частиц $j, j' = 1, 2$. Однако этим же выражением с успехом можно пользоваться также и в случае большого числа частиц.

Если пренебречь энергией взаимодействия, т. е. положить члены, содержащие $\frac{e_0^2}{r_{12}}$, равными нулю, то, принимая во внимание, что

$$E = E_1 + E_2$$

и

$$E_j = \int \psi_j^* H_j \psi_j d^3x_j,$$

уравнение Хартри можно разбить на систему двух независимых уравнений:

$$(H_j - E_j)\psi_j = 0,$$

описывающих движение каждой частицы в отдельности.

Поскольку в задачах, решаемых методом Хартри, электроны (или другие частицы), как правило, движутся во внешнем поле (например, в поле ядра) и в поле самих же электронов, этот метод получил название *метода самосогласованного поля*.

Фок (1930) обобщил метод Хартри, последовательно проводя учет обменных эффектов. Согласно Фоку, пробная функция в первоначальном уравнении (23.62) выбирается с учетом принципа Паули. Поэтому класс пробных функций ограничивается еще требованием антисимметрии (более подробно выбор антисимметричных функций, удовлетворяющих принципу Паули, будет рассмотрен нами в следующем параграфе).

Система уравнений Хартри (а также Фока), например для электронной оболочки атома, решается методом последовательных приближений. Вначале определяется волновая функция в нулевом приближении (без учета потенциала взаимодействия между электронами). Учитывая далее потенциал взаимодействия между электронами, получают уравнения первого приближения. Затем решение с учетом первого приближения вновь подставляется в уравнения Хартри — Фока и находится следующее приближение и т. д.

Расчет повторяется до тех пор, пока решения не начнут воспроизводить друг друга, т. е. пока не будет получено самосогласованное решение. Заметим, что эффективное решение этой системы возможно только численными методами интегрирования. С помощью современных счетных машин удалось определить энергии, а также волновые функции не только для легких, но и для тяжелых элементов.

Кроме этих приближенных методов, для исследования тяжелых атомов применяется также *статистический метод Томаса — Ферми*, который, хотя и не является столь точным, как метод самосогласованного поля Хартри — Фока, но позволяет вскрыть сравнительно просто многие закономерности в сложных атомах. Этот метод мы используем в наших дальнейших исследованиях и рассмотрим его в § 25, а также 26, в связи с теорией периодической системы элементов Менделеева.

ж. Исследование обменной энергии

Остановимся несколько подробнее на выяснении физической сущности полученной нами выше обменной энергии (23.24), которая, как мы уже упоминали, представляет собой среднее значе-

ние кулоновской энергии взаимодействия двух электронов, когда оба они находятся в смешанных состояниях, т. е. частично в состоянии n_1 и частично в состоянии n_2 . Согласно формулам (23.30) и (23.32), общая энергия системы связана с кулоновской энергией K и обменной A соотношением:

$$E = E^0 \pm K \pm A, \quad (23.67)$$

причем здесь знак плюс соответствует ψ^c , а минус — ψ^a .

Чтобы проанализировать обменную энергию более детально, рассмотрим поведение системы с течением времени при учете обменной энергии. Волновые функции симметричного и антисимметричного состояний можно записать в виде:

$$\psi^c(t) = \psi^c e^{-\frac{i}{\hbar} E^c t} \quad \text{и} \quad \psi^a(t) = \psi^a e^{-\frac{i}{\hbar} E^a t}. \quad (23.68)$$

Вводя обозначения:

$$\frac{E^0 + K}{\hbar} = \omega, \quad \frac{A}{\hbar} = \delta, \quad (23.69)$$

соотношение (23.68) можно представить в виде:

$$\begin{aligned} \psi^c(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u + v) e^{-i\omega t - i\delta t}, \\ \psi^a(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u - v) e^{-i\omega t + i\delta t}. \end{aligned} \quad (23.70)$$

Рассмотрим состояние системы, описываемое суперпозицией решений $\psi^c(t)$ и $\psi^a(t)$:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \equiv \Psi(t) = C^c \psi^c(t) \pm C^a \psi^a(t). \quad (23.71)$$

Нетрудно убедиться, что функция $\Psi(t)$ будет представлять собой общее решение уравнения Шредингера (23.7) для первого приближения теории возмущений.

Предположим далее, что в начальный момент времени ($t=0$) один из электронов находится в состоянии n_1 , а второй — в состоянии n_2 . Тогда функция:

$$\Psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ (C^c + C^a) u + (C^c - C^a) v \} \quad (23.72)$$

должна быть просто равна функции u . Отсюда следует, что

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (C^c + C^a) = 1, \quad \text{а} \quad C^c - C^a = 0,$$

т. е.

$$C^c = C^a = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (23.73)$$

По истечении же некоторого промежутка времени t функция $\Psi(t)$, согласно (23.71), (23.70) и (23.73), будет:

$$\Psi(t) = e^{-i\omega t} \{u \cos \delta t - i v \sin \delta t\} = e^{-i\omega t} \{C_u u + C_v v\}, \quad (23.74)$$

где
$$C_u = \cos \delta t, \quad C_v = -i \sin \delta t. \quad (23.75)$$

Очевидно, что амплитуды C_u и C_v , удовлетворяющие условию нормировки:

$$|C_u|^2 + |C_v|^2 = 1, \quad (23.76)$$

характеризуют соответственно вероятности пребывания системы в состоянии, описываемом либо функцией u , либо функцией v .

Поскольку при $t=0$ коэффициент $C_v=0$, а $C_u=1$, это означает, что система в начальный момент времени находится в состоянии, представляемом функцией u . Однако, спустя время:

$$\tau = \frac{\pi}{2\delta} \quad (23.77)$$

(при этом $\delta t = \frac{\pi}{2}$), коэффициенты C_u и C_v , согласно (23.75), будут иметь следующие значения:

$$C_u = 0 \text{ и } C_v = -i.$$

Таким образом, в момент времени $t=\tau$ состояние системы будет описываться уже не функцией u , а функцией v . Это говорит о том, что если в момент времени $t=0$ один из электронов системы находится в состоянии n_1 , а другой — в состоянии n_2 , то по истечении промежутка времени $\Delta t = \tau$, наоборот, первый электрон окажется уже в состоянии n_2 , в то время как второй перейдет в состояние n_1 . Время τ (23.77), за которое происходит «обмен» электронными состояниями, называется в связи с этим «временем обмена». Оно связано с обменной энергией A простым соотношением:

$$\tau = \frac{\pi}{2\delta} = \frac{\pi \hbar}{2A}. \quad (23.78)$$

В частности, отсюда легко видеть, что если обменная энергия отсутствует ($A=0$), то $\tau = \infty$.

В заключение оценим величину обменной энергии, когда первый электрон находится в состоянии $n_1=1s$, а второй — в состоянии $n_2=2s$. При этом волновая функция $\psi_{n_1} = \psi_1$ будет задаваться формулой (23.37); для волновой же функции $\psi_{n_2} = \psi_2$, согласно (13.26) и (13.28), будем иметь¹⁾:

$$\psi_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right). \quad (23.79)$$

¹⁾ См. также задачу 13.1.

Тогда для обменной энергии из (23.24) находим:

$$A = \int \psi_1(r_1) \psi_2(r_2) \frac{e_0^2}{|r_1 - r_2|} \psi_1(r_2) \psi_2(r_1) d^3x_1 d^3x_2. \quad (23.80)$$

Выполняя интегрирование, как это было сделано при вычислении энергии, вместо (23.38а) будем иметь:

$$A = \frac{4Z^6 e_0^2}{a_0^6} \int_0^\infty r_1^2 \left(1 - \frac{Zr_1}{2a_0}\right) e^{-(3/2)\frac{Zr_1}{a_0}} dr_1 \int_{r_1}^\infty r_2 \left(1 - \frac{Zr_2}{2a_0}\right) e^{-(3/2)\frac{Zr_2}{a_0}} dr_2.$$

Вычислив последние интегралы, которые берутся сравнительно элементарно, находим, что

$$A \cong \frac{2^4 Z e_0^2}{3^6 a_0}. \quad (23.81)$$

Отсюда для времени обмена электронов в атоме гелия ($Z=2$), находящихся в состоянии $1s$ и $2s$, согласно формуле (23.78), получаем значение:

$$\tau = \frac{3^6 \pi \hbar a_0}{2^6 e_0^2} \approx 0,8 \cdot 10^{-18} \text{ сек.}$$

Если же подсчитать время обмена электронными состояниями в том случае, когда один из электронов находится в состоянии $1s$, а другой — в состоянии $10s$, то оно будет порядка нескольких лет, т. е. фактически обмен будет отсутствовать.

Следовательно, можно сказать, что обменная энергия будет играть заметную роль только в том случае, когда распределения плотности вероятности $|\psi_{n_i}|^2$ различных состояний в значительной степени перекрываются между собой. Если же перекрывание волновых функций незначительно, то обменная энергия A будет очень мала. Все это в целом напоминает до некоторой степени перекачку энергии от одного связанного маятника к другому. Известно, что если в начальный момент качается только один из связанных маятников, то через некоторый промежуток времени его амплитуда станет равной нулю, поскольку вся энергия колебаний перейдет ко второму маятнику. При этом время обмена энергией колебаний будет в большей мере зависеть от соотношения между собственными частотами колебания маятников, достигая максимального значения, когда эти частоты совпадают (случай резонанса).

Следует подчеркнуть, что приведенная аналогия является чисто внешней и имеет место только в силу проявления волновых свойств в обоих явлениях.

§ 24. ОСНОВЫ ТЕОРИИ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ С УЧЕТОМ СПИНОВЫХ СОСТОЯНИЙ

а. Симметричные и антисимметричные состояния

Как мы уже указывали в начале § 23, квантовомеханическая теория систем, состоящих из одинаковых частиц, обладает рядом новых особенностей по сравнению с классической теорией. Главная особенность квантовомеханического рассмотрения вытекает из особого физического свойства микрообъектов, которое известно как принцип тождественности, или неразличимости частиц.

Согласно этому принципу, состояние системы остается неизменным при обмене частиц местами. Рассмотрим общие свойства волновой функции системы, состоящей из двух тождественных частиц. Состояние системы будем характеризовать радиус-вектором \mathbf{r} , тремя пространственными квантовыми числами (n — главное, l — орбитальное, m — магнитное числа), обозначаемыми сокращенно просто через n , и спиновым квантовым числом s . Волновая функция двух частиц, согласно принятым обозначениям, имеет вид:

$$\Psi(n_1 s_1 \mathbf{r}_1; n_2 s_2 \mathbf{r}_2), \quad (24.1)$$

где индексы 1 и 2 относятся соответственно к первой и второй частице.

Введем далее оператор перестановки частиц P , действие которого на волновую функцию заключается в том, что он меняет местами либо координаты \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , либо квантовые числа n_1, s_1 и n_2, s_2 :

$$P\Psi(n_1 s_1 \mathbf{r}_1; n_2 s_2 \mathbf{r}_2) = \Psi(n_1 s_1 \mathbf{r}_2; n_2 s_2 \mathbf{r}_1); \quad (24.2)$$

нетрудно найти собственные значения этого оператора:

$$P^2\Psi(n_1 s_1 \mathbf{r}_1; n_2 s_2 \mathbf{r}_2) = \lambda\Psi(n_1 s_1 \mathbf{r}_1; n_2 s_2 \mathbf{r}_2). \quad (24.3)$$

Действительно, как следует из (24.2), двукратное применение этого оператора P должно привести к исходному состоянию:

$$P^2\Psi(n_1 s_1 \mathbf{r}_1; n_2 s_2 \mathbf{r}_2) = P\Psi(n_1 s_1 \mathbf{r}_2; n_2 s_2 \mathbf{r}_1) = \Psi(n_1 s_1 \mathbf{r}_1; n_2 s_2 \mathbf{r}_2). \quad (24.4)$$

С другой стороны, из (24.3) следует, что

$$P^2\Psi(n_1 s_1 \mathbf{r}_1; n_2 s_2 \mathbf{r}_2) = \lambda^2\Psi(n_1 s_1 \mathbf{r}_1; n_2 s_2 \mathbf{r}_2). \quad (24.5)$$

Таким образом, собственные значения оператора перестановки равны ± 1 :

$$\lambda = \pm 1. \quad (24.6)$$

Этот результат означает, что при перестановке частиц местами волновая функция либо остается без изменений: $\lambda = 1$ (такие функции называются *симметричными*):

$$\Psi^c(n_1 s_1 \mathbf{r}_1; n_2 s_2 \mathbf{r}_2) = \Psi^c(n_1 s_1 \mathbf{r}_2; n_2 s_2 \mathbf{r}_1), \quad (24.7)$$

либо меняет знак: $\lambda = -1$ (такие функции называются *антисимметричными*):

$$\Psi^a.(n_1s_1r_1; n_2s_2r_2) = -\Psi^a.(n_1s_1r_2; n_2s_2r_1). \quad (24.8)$$

Квантовая механика утверждает, что совокупность тождественных частиц может находиться в состояниях только с определенным типом симметрии. В частности, в природе реализуются либо симметричные состояния (волновая функция симметрична), либо состояния антисимметричные (волновая функция антисимметрична), причем квантовые переходы между этими состояниями оказываются невозможными; состояния разного типа симметрии не смешиваются между собой. Очевидно, что такие фундаментальные следствия должны быть обусловлены в первую очередь природой самих элементарных частиц. Возникает мысль о том, что существующие в природе частицы могут быть двух родов, для каждого из которых осуществляются состояния определенного типа симметрии.

б. Статистики Ферми — Дирака и Бозе — Эйнштейна. Принцип Паули

Экспериментальные и теоретические исследования свойств систем тождественных частиц показали, что в природе существуют два рода частиц, обладающих принципиально различными статистическими свойствами, причем различия в статистических свойствах оказываются существенно связанными со спином частиц.

В частности, оказывается, что частицы с полуцелым спином (в единицах постоянной Планка \hbar ; $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$) подчиняются статистике Ферми — Дирака (фермионы). К числу фермионов относятся, например, электроны, протоны, нейтроны, мю-мезоны, гипероны (спин у всех равен $\frac{1}{2}$). В отличие от фермионов частицы с целым спином ($s = 0, 1, \dots$) подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна (бозоны). К числу бозонов относятся, например, пи-мезоны, ка-мезоны (спин равен 0), фотоны (спин равен 1) и т. д.

Не имея возможности детально останавливаться на анализе статистических свойств совокупности частиц, укажем только, что согласно статистике Бозе — Эйнштейна в каждом состоянии может находиться любое (без ограничения) число частиц. Согласно же статистике Ферми — Дирака в каждом состоянии, характеризуемом четырьмя квантовыми числами, может находиться лишь одна частица. Эта характерная для фермионов особенность была установлена эмпирически Паули (1923) еще до создания квантовой

механики и открытия квантовой статистики и известна под названием *принципа Паули* (принцип запрета).

Для того чтобы установить связь типа симметрии состояния с видом статистики, рассмотрим систему двух частиц, взаимодействием между которыми можно пренебречь. В этом случае соответствующая волновая функция может быть записана в виде произведения:

$$\Psi(n_1s_1\mathbf{r}_1; n_2s_2\mathbf{r}_2) = \psi_{n_1s_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2s_2}(\mathbf{r}_2), \quad (24.9)$$

где $\psi_{n_1s_1}$ и $\psi_{n_2s_2}$ — волновые функции отдельных частиц. Решение (24.9) соответствует состоянию, когда частицы с координатами \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 находятся соответственно в состояниях, характеризующихся квантовыми числами n_1s_1 и n_2s_2 . В силу тождественности частиц состояние системы не меняется при перестановке частиц местами, т. е. наряду с (24.9) равноправным будет также решение:

$$\Psi(n_2s_2\mathbf{r}_1; n_1s_1\mathbf{r}_2) = \psi_{n_2s_2}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_1s_1}(\mathbf{r}_2) \quad (24.10)$$

(частицы с координатами \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 находятся соответственно в состояниях n_2s_2 и n_1s_1).

Обе функции (24.9) и (24.10) описывают одно и то же физическое состояние системы. Следует заметить, что и любая линейная комбинация этих функций будет описывать то же физическое состояние системы. Одну из возможных линейных комбинаций можно взять в виде суммы решений (24.9) и (24.10):

$$\Psi^c = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{n_1s_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2s_2}(\mathbf{r}_2) + \psi_{n_1s_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{n_2s_2}(\mathbf{r}_1) \} \quad (24.11)$$

(мы предполагаем, что функции $\psi_{n_1s_1}$ и $\psi_{n_2s_2}$ — взаимно ортогональны и нормированы на единицу; поэтому для нормировки Ψ^c нами введен множитель $\frac{1}{\sqrt{2}}$). Это решение симметрично относительно перестановки пространственных и спиновых переменных:

$$\Psi^c(n_1s_1\mathbf{r}_1; n_2s_2\mathbf{r}_2) = \Psi^c(n_2s_2\mathbf{r}_1; n_1s_1\mathbf{r}_2). \quad (24.12)$$

Другой линейной комбинацией является разность (24.9) и (24.10):

$$\Psi^a = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{n_1s_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2s_2}(\mathbf{r}_2) - \psi_{n_1s_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{n_2s_2}(\mathbf{r}_1) \}, \quad (24.13)$$

которая приводит к антисимметричному решению, поскольку

$$\Psi^a(n_1s_1\mathbf{r}_1; n_2s_2\mathbf{r}_2) = -\Psi^a(n_2s_2\mathbf{r}_1; n_1s_1\mathbf{r}_2). \quad (24.14)$$

Из вида решений Ψ^c и Ψ^a непосредственно следует, что частицы, подчиняющиеся статистике Ферми — Дирака, могут описываться только антисимметричными функциями. Действительно, принципу Паули (статистика Ферми) удовлетворяет только ре-

Сложение этих четырех величин возможно двумя различными способами. Сначала можно сложить по отдельности орбитальные и спиновые моменты, а затем уже найти их общую сумму:

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2, \quad \mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2, \quad \mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \quad (24.21)$$

Такая связь частиц в атоме носит название *нормальной (LS)-связи*, или *связи Рессела — Саундерса*. Этот случай связи, соответствующий выполнению закона сохранения по отдельности для орбитального и для спинового моментов, чаще всего встречается у легких элементов.

Возможна и другая схема сложения моментов, а именно можно вначале сложить для каждого электрона орбитальный и спиновый моменты, а затем уже сложить полные моменты обоих электронов:

$$\mathbf{J}_1 = \mathbf{L}_1 + \mathbf{S}_1, \quad \mathbf{J}_2 = \mathbf{L}_2 + \mathbf{S}_2, \quad \mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2. \quad (24.22)$$

Такая связь называется *(jj)-связью* и встречается преимущественно у тяжелых элементов. Этот случай связи соответствует выполнению закона сохранения лишь для полного момента и, следовательно, оказывается существенным в условиях сильного спин-орбитального взаимодействия.

Сравним теперь порядок величины кулоновского и спин-орбитального взаимодействий в задаче атома гелия. Кулоновская энергия [см. формулу (23.39)] имеет вид:

$$K = e_0^2 \int \frac{\rho_{11}(\mathbf{r}_1) \rho_{22}(\mathbf{r}_2) d^3x_1 d^3x_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \sim ZR\hbar \quad (24.23)$$

и определяет (LS)-связь, поскольку при кулоновском взаимодействии сохраняются в отдельности орбитальный и спиновый моменты. Спин-орбитальное же взаимодействие в задаче атома гелия:

$$E^{c.-o.} = \frac{Ze_0^2}{2m_0^2c^2} \langle (\mathbf{L}\mathbf{S}) \frac{1}{r^3} \rangle \cong R\hbar Z^4 \alpha^2 \quad (24.24)$$

($\alpha = 1/137$) оказывается значительно меньше кулоновского. Поэтому для атома гелия имеет место случай рессел-саундерсовской связи.

Как видно из последней формулы, порядок величины спин-орбитального взаимодействия сильно зависит от заряда ядра Z ($\sim Z^4$), так что для больших значений Z (тяжелые элементы) величина $E^{c.-o.}$ может оказаться существенной. В этом случае реализуется (jj)-связь.

Рассмотрим теперь задачу о сложении орбитальных моментов количества движения двух частиц и найдем собственную функцию Y_{LM} (1,2) операторов проекции полного момента $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$ на ось z :

$$L_z Y_{LM}(1,2) = (L_{1z} + L_{2z}) Y_{LM}(1,2) = \hbar M Y_{LM}(1,2), \quad (24.25)$$

а также оператора квадрата полного момента:

$$L^2 Y_{LM}(1,2) = \{L_1^2 + L_2^2 + (L_{1x} - iL_{1y})(L_{2x} + iL_{2y}) + (L_{1x} + iL_{1y})(L_{2x} - iL_{2y}) + 2L_{1z}L_{2z}\} Y_{LM}(1,2) = \hbar^2 \lambda Y_{LM}(1,2); \quad \lambda = L(L+1). \quad (24.26)$$

Как мы сейчас покажем, собственная функция $Y_{LM}(1,2)$ может быть представлена в виде линейной комбинации произведений:

$$Y_{LM}(1,2) = \sum_{m_1 m_2} b_{m_1 m_2} Y_{l_1}^{m_1}(1) Y_{l_2}^{m_2}(2), \quad (24.27)$$

где волновые функции $Y_{l_1}^{m_1}(1)$ и $Y_{l_2}^{m_2}(2)$ относятся соответственно к первой и второй частице, причем

$$\begin{aligned} L_{1z} Y_{l_1}^{m_1}(1) &= \hbar m_1 Y_{l_1}^{m_1}(1); \quad L_{2z} Y_{l_2}^{m_2}(2) = \hbar m_2 Y_{l_2}^{m_2}(2); \\ L_1^2 Y_{l_1}^{m_1}(1) &= \hbar^2 l_1(l_1+1) Y_{l_1}^{m_1}(1); \quad L_2^2 Y_{l_2}^{m_2}(2) = \hbar^2 l_2(l_2+1) Y_{l_2}^{m_2}(2). \end{aligned} \quad (24.28)$$

Числовые коэффициенты $b_{m_1 m_2}$ в линейной суперпозиции (24.27) называются коэффициентами векторного сложения, или *коэффициентами Клебша — Жордана*.

В дальнейшем для простоты мы ограничимся случаем $l_1 = l_2 = 1$. Подставляя (24.27) в уравнение для собственных значений (24.25):

$$L_z Y_{LM}(1,2) = \sum_{m_1 m_2} b_{m_1 m_2} \hbar (m_1 + m_2) Y_{l_1}^{m_1}(1) Y_{l_2}^{m_2}(2) = \hbar M Y_{LM}(1,2), \quad (24.29)$$

мы получаем, что $M = m_1 + m_2$ и $b_{m_1 m_2} = b_{m_2}$.

Не ограничивая общности рассуждений, положим $M = 0$, т. е. ось z направим перпендикулярно полному моменту количества движения. Тогда из суммы (24.27) следует, что

$$Y_{L0}(1,2) = b_{-1} Y_1^{-1}(1) Y_1^{-1}(2) + b_1 Y_1^{-1}(1) Y_1^1(2) + b_0 Y_1^0(1) Y_1^0(2). \quad (24.30)$$

Учитывая далее соотношение для шаровых функций [см. (11.88)]:

$$(L_{1x} \pm iL_{1y}) Y_{l_1}^{m_1}(1) = -\hbar \sqrt{(l_1 \mp 1 \pm m_1)(l_1 \mp m_1)} Y_{l_1}^{m_1 \pm 1}(1), \quad (24.31)$$

с помощью (24.26) получаем уравнение:

$$L^2 Y_{L0}(1,2) = \hbar^2 \{b_{-1} [2Y_1^{-1} Y_1^{-1} + 2Y_1^0 Y_1^0] + b_1 [2Y_1^{-1} Y_1^1 + 2Y_1^0 Y_1^0] + b_0 [4Y_1^0 Y_1^0 + 2Y_1^{-1} Y_1^{-1} + 2Y_1^{-1} Y_1^1]\} = \lambda \hbar^2 (b_{-1} Y_1^{-1} Y_1^{-1} + b_1 Y_1^{-1} Y_1^1 + b_0 Y_1^0 Y_1^0), \quad (24.32)$$

которое эквивалентно системе трех однородных уравнений для определения неизвестных коэффициентов Клебша — Жордана:

$$\begin{aligned} 2b_0 + (2-\lambda)b_1 &= 0 \\ 2b_0 &+ (2-\lambda)b_{-1} = 0 \\ (4-\lambda)b_0 &+ 2b_1 + 2b_{-1} = 0. \end{aligned} \quad (24.33)$$

Эта система имеет отличное от нуля решение, если ее определитель равен нулю:

$$\begin{vmatrix} 2 & 2-\lambda & 0 \\ 2 & 0 & 2-\lambda \\ 4-\lambda & 2 & 2 \end{vmatrix} = 0. \quad (24.34)$$

Вычисляя этот определитель и подчиняя волновую функцию Y_{LM} условию нормировки:

$$\int |Y_{LM}|^2 d\Omega_1 d\Omega_2 = 1,$$

т. е.

$$b_0^2 + b_1^2 + b_{-1}^2 = 1,$$

мы окончательно получаем следующие три возможных решения:

$$1. \quad \lambda = 0, \quad b_1 = b_{-1} = -b_0 = \frac{1}{\sqrt{3}},$$

причем из условия $\lambda = L(L+1)$ находим, что $L=0$, т. е. это решение соответствует случаю, когда векторы l_1 и l_2 антипараллельны:

$$l_1 \uparrow \downarrow l_2.$$

$$2. \quad \lambda = 2, \quad b_0 = 0, \quad -b_1 = b_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad L = 1;$$

этот случай соответствует сложению моментов под углом 60° :

$$3. \quad \lambda = 6, \quad L = 2, \quad b_0 = \frac{2}{\sqrt{6}}, \quad b_1 = b_{-1} = \frac{1}{\sqrt{6}},$$

это решение соответствует параллельным l_1 и l_2 :

$$l_1 \uparrow \uparrow l_2.$$

Таким образом, мы приходим к выводу, что при сложении двух векторов l_1 и l_2 , абсолютное значение которых характеризуется целыми квантовыми числами, эти векторы могут ориентироваться под такими углами, чтобы вектор их суммы L также характеризовался целыми числами, т. е. при $l_1 \geq l_2$ эти значения должны равняться:

$$L = l_1 + l_2, \quad l_1 + l_2 - 1, \dots, \quad l_1 - l_2 + 1, \quad l_1 - l_2, \quad (24.35)$$

принимая $2l_2 + 1$ значений.

Подобное сложение векторов называется сложением по векторной модели. Наши предыдущие результаты мы получим, полагая $l_1 = l_2 = 1$ и $M = 0$. Интересно отметить, что эти же значения для коэффициентов Клебша — Жордана мы получили бы при сложении орбитального момента со спиновым, равным единице (например, для фотонов). Однако в этом случае вместо шаровой функции $Y_{l_2}^{m_2}$ следовало бы взять нормированную спиновую функцию. Легко показать, что коэффициенты Клебша — Жордана будут удовлетворять следующим условиям:

$$\sum_{m_2} b_{m_2}^{LM} b_{m_2}^{L'M} = \delta_{LL'} \quad \sum_L b_{m_2}^{LM} b_{m_2}^{LM} = \delta_{m_2 m_2'}.$$

Вообще коэффициенты Клебша — Жордана b_{m_2} должны зависеть, кроме квантового числа $m_2 = M - m_1$, еще от L и M . Если орбитальный момент второй частицы $l_2 = 1$, то при сложении двух орбитальных моментов будем иметь:

$$Y_{LM} = \sum_{m_2=-1}^1 b_{m_2}^{LM} Y_{l_1}^{M-m_2}(1) Y_{l_2=1}^{m_2}(2),$$

причем коэффициенты Клебша — Жордана можно записать в виде одной таблицы (см. табл. 24.1).

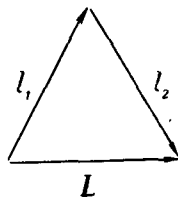


Таблица коэффициентов Клебша — Жордана (для $l_s = 1$)

L m_s	$l_1 + 1$	l_1	$l_1 - 1$
-1	$\sqrt{\frac{(l_1 - M)(l_1 - M + 1)}{2(l_1 + 1)(2l_1 + 1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1 - M)(l_1 + M + 1)}{2l_1(l_1 + 1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1 + M)(l_1 + M + 1)}{2l_1(2l_1 + 1)}}$
0	$\sqrt{\frac{(l_1 + M + 1)(l_1 - M + 1)}{(l_1 + 1)(2l_1 + 1)}}$	$\frac{M}{\sqrt{l_1(l_1 + 1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l_1 + M)(l_1 - M)}{l_1(2l_1 + 1)}}$
1	$\sqrt{\frac{(l_1 + M)(l_1 + M + 1)}{2(l_1 + 1)(2l_1 + 1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l_1 + M)(l_1 - M + 1)}{2l_1(l_1 + 1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1 - M)(l_1 - M + 1)}{2l_1(2l_1 + 1)}}$

 $b_{m_s}^{LM} =$

г. Волновая функция атома гелия с учетом спина

Рассмотрим теперь более подробно волновую функцию атома гелия, взаимодействие спинов и орбитальных моментов электронов в котором, как мы уже отмечали, имеет характер рессел-саундерсовской связи.

Поскольку в случае (*LS*)-связи независимо складываются орбитальные и спиновые моменты, волновая функция может быть записана в виде произведения двух частей, одна из которых зависит от спинов частиц, а другая — от их координат.

Учтем, что волновая функция должна быть антисимметрична относительно перестановки четырех квантовых чисел:

$$\begin{aligned} \Psi^a &= C(s_1, s_2) \psi_{n_1 n_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -C(s_2, s_1) \psi_{n_2 n_1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \\ &= -C(s_2, s_1) \psi_{n_1 n_2}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1), \end{aligned} \quad (24.36)$$

причем в случае (*LS*)-связи перестановка координат эквивалентна перестановке не четырех квантовых чисел (пространственных и спиновых), как в (24.13), а только трех пространственных. Это реализуется в двух случаях: либо в случае, когда функция является симметричной относительно спинов и антисимметричной относительно координат, либо наоборот. Поэтому мы имеем следующие два типа решений:

$$\Psi^a = C^c(s_1, s_2) \psi_{n_1 n_2}^a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (24.37)$$

$$\Psi^a = C^a(s_1, s_2) \psi_{n_1 n_2}^c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (24.38)$$

Напомним, что координатная часть волновой функции нами уже получена (см. § 23). При $n_1 \neq n_2$:

$$\psi_{n_1 n_2}^c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u + v), \quad (24.39)$$

$$\psi_{n_1 n_2}^a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u - v), \quad (24.40)$$

где

$$\begin{aligned} u &= \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2), \\ v &= \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1). \end{aligned} \quad (24.41)$$

Обратимся теперь к исследованию спиновой части волновой функции двух электронов. Как уже было отмечено в случае связи Рессела—Саундерса, спиновые моменты складываются независимо от орбитальных, поэтому в основе решения задачи о построении спиновой волновой функции системы из двух электронов, так же как и в случае сложения двух орбитальных моментов, должен быть закон сохранения спина.

Спиновые функции каждого электрона будем выбирать в виде собственных функций оператора проекции спина на ось z :

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_3, \quad (24.42)$$

а также оператора квадрата спинового момента:

$$S^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2). \quad (24.43)$$

Здесь двухрядные матрицы Паули σ (см. § 16) мы будем писать без штриха:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Спиновая функция $C = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ одной частицы удовлетворяет таким образом двум уравнениям:

$$S_z C = \frac{\hbar}{2} \sigma_3 C = \frac{\hbar}{2} \sigma_3 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \hbar \lambda_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (24.44)$$

$$S^2 C = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 \lambda_2 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (24.45)$$

Учитывая, что $\sigma_i^2 = 1$ и т. д., из уравнения (24.45) находим значения $\lambda_2 = \frac{3}{4}$. Матричное же уравнение (24.44) для определения λ_1 эквивалентно системе двух однородных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} c_1 \left(\frac{1}{2} - \lambda_1 \right) &= 0, \\ c_2 \left(\frac{1}{2} + \lambda_1 \right) &= 0, \end{aligned} \quad (24.46)$$

из которых следует, что существуют два решения, соответствующие двум возможным ориентациям спина относительно оси z :

$$1. \lambda_1 = \frac{1}{2}, \quad c_1 = 1, \quad c_2 = 0. \quad (24.47)$$

При этом спин направлен параллельно оси z . Волновая функция, принадлежащая собственному значению $\frac{1}{2}$, имеет вид:

$$C \left(\frac{1}{2} \right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (24.48)$$

$$2. \lambda_1 = -\frac{1}{2}, \quad c_1 = 0, \quad c_2 = 1. \quad (24.49)$$

В этом случае спин направлен антипараллельно оси z . Соответствующая волновая функция равна:

$$C \left(-\frac{1}{2} \right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (24.50)$$

В решениях (24.48) и (24.50) в скобках у амплитуд C указано значение проекции спина на ось z . Нетрудно заметить, что обе

спиновые части волновой функции удовлетворяют условию ортонормированности. Действительно, если под сопряженной (точнее, эрмитово-сопряженной) спиновой функцией понимать, как обычно, матрицу из одной строки:

$$C^+ = (c_1^* c_2^*),$$

то из (24.48) и (24.50) следует, что

$$C^+ \left(\frac{1}{2} \right) C \left(\frac{1}{2} \right) = C^+ \left(-\frac{1}{2} \right) C \left(-\frac{1}{2} \right) = 1,$$

а

$$C^+ \left(\frac{1}{2} \right) C \left(-\frac{1}{2} \right) = 0.$$

Действие же матриц Паули на спиновую функцию, согласно (24.50), (24.48) и (24.44), будет следующим:

$$\begin{aligned} \sigma_1 C \left(\pm \frac{1}{2} \right) &= C \left(\mp \frac{1}{2} \right); & \sigma_2 C \left(\pm \frac{1}{2} \right) &= \pm i C \left(\mp \frac{1}{2} \right); \\ \sigma_3 C \left(\pm \frac{1}{2} \right) &= \pm C \left(\pm \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (24.51)$$

Спиновую функцию C двух электронов атома гелия будем искать в виде суперпозиции:

$$\begin{aligned} C &= a_1 C_1 \left(\frac{1}{2} \right) C_2 \left(\frac{1}{2} \right) + a_2 C_1 \left(\frac{1}{2} \right) C_2 \left(-\frac{1}{2} \right) + \\ &+ a_3 C_1 \left(-\frac{1}{2} \right) C_2 \left(\frac{1}{2} \right) + a_4 C_1 \left(-\frac{1}{2} \right) C_2 \left(-\frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (24.52)$$

где $C_1 \left(\pm \frac{1}{2} \right)$ и $C_2 \left(\pm \frac{1}{2} \right)$ — спиновые функции соответственно 1-го и 2-го электронов, а a_1, a_2, a_3, a_4 — коэффициенты Клебша—Жордана, которые следует определить.

Попробуем теперь подобрать коэффициенты a_μ функции (24.52) таким образом, чтобы она была собственной функцией оператора проекции полного спина на ось z :

$$S_z = S'_z + S''_z = \frac{\hbar}{2} (\sigma'_3 + \sigma''_3), \quad (24.53)$$

а также оператора квадрата полного спина:

$$\begin{aligned} S^2 &= (\mathbf{S}' + \mathbf{S}'')^2 = \frac{\hbar^2}{4} \{ \sigma'^2 + \sigma''^2 + 2(\boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{\sigma}'') \} = \\ &= \hbar^2 \left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{\sigma}'') \right). \end{aligned} \quad (24.54)$$

Здесь штрих и два штриха у матриц Паули означают, что эти матрицы действуют на спиновые функции соответственно первого и второго электронов.

Тогда будем иметь два матричных уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} (\sigma'_3 + \sigma''_3) C &= \hbar \lambda_1 C, \\ \hbar^2 \left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2} (\sigma' \sigma'') \right) C &= \hbar^2 \lambda_2 C. \end{aligned} \quad (24.56)$$

Подставляя сюда значение общей спиновой функции (24.52) и учитывая действие матриц Паули на спиновые функции отдельных электронов [см. (24.51)], найдем из матричного равенства (24.55):

$$\begin{aligned} a_1 C_1 \left(\frac{1}{2} \right) C_2 \left(\frac{1}{2} \right) - a_4 C_1 \left(-\frac{1}{2} \right) C_2 \left(-\frac{1}{2} \right) &= \\ = \lambda_1 \left[a_1 C_1 \left(\frac{1}{2} \right) C_2 \left(\frac{1}{2} \right) + a_2 C_1 \left(\frac{1}{2} \right) C_2 \left(-\frac{1}{2} \right) + \right. \\ \left. + a_3 C_1 \left(-\frac{1}{2} \right) C_2 \left(\frac{1}{2} \right) + a_4 C_1 \left(-\frac{1}{2} \right) C_2 \left(-\frac{1}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Отсюда, приравнявая коэффициенты при одинаковых спиновых функциях, найдем уравнения для определения параметра λ_1 , а также коэффициентов a_μ :

$$a_1(1 - \lambda_1) = 0, \quad a_2 \lambda_1 = 0, \quad a_3 \lambda_1 = 0, \quad a_4(1 + \lambda_1) = 0. \quad (24.57)$$

Аналогично, учитывая при вычислении (24.56) соотношение:

$$\begin{aligned} (\sigma' \sigma'') C &= a_1 C_1 \left(\frac{1}{2} \right) C_2 \left(\frac{1}{2} \right) - a_2 \left[C_1 \left(\frac{1}{2} \right) C_2 \left(-\frac{1}{2} \right) - \right. \\ &- \left. 2 C_1 \left(-\frac{1}{2} \right) C_2 \left(\frac{1}{2} \right) \right] - a_3 \left[C_1 \left(-\frac{1}{2} \right) C_2 \left(\frac{1}{2} \right) - 2 C_1 \left(\frac{1}{2} \right) C_2 \left(-\frac{1}{2} \right) \right] + \\ &+ a_4 C_1 \left(-\frac{1}{2} \right) C_2 \left(-\frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (24.58)$$

которое также может быть получено с помощью (24.51), имеем:

$$\begin{aligned} 2a_1 &= \lambda_2 a_1, \quad 2a_4 = \lambda_2 a_4, \\ a_3 &= (\lambda_2 - 1) a_2, \quad a_2 = (\lambda_2 - 1) a_3. \end{aligned} \quad (24.59)$$

Как обычно, положим $\lambda_2 = S(S + 1)$, где S — собственное значение полного спина. Заметим, что системы уравнений (24.57) и (24.59) должны выполняться одновременно. Из этих уравнений следует, что возможные отличные от нуля решения имеют вид:

$$\begin{aligned} 1. \quad \lambda_2 &= 2, \quad a_1 = 1, \\ \lambda_1 &= 1, \quad a_3 = a_2 = a_4 = 0. \end{aligned}$$

Полный спин равен единице и направлен по оси z . Спины обеих частиц параллельны. Соответствующее решение, согласно (24.52), является симметричным:

$$C^c = C_1 \left(\frac{1}{2} \right) C_2 \left(\frac{1}{2} \right) (s_1 \uparrow \uparrow s_2). \quad (24.60)$$

$$\begin{aligned} 2. \quad \lambda_2 &= 2, \quad a_4 = 1, \\ \lambda_1 &= -1, \quad a_1 = a_2 = a_3 = 0. \end{aligned}$$

Полный спин равен единице и антипараллелен оси z . Спины обеих частиц параллельны. Второе симметричное решение будет:

$$C^c = C_1\left(-\frac{1}{2}\right)C_2\left(-\frac{1}{2}\right)(s_1\downarrow\downarrow s_2). \quad (24.61)$$

$$\begin{aligned} 3. \lambda_2 = 2, & \quad a_2 = a_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \lambda_1 = 0, & \quad a_1 = a_4 = 0. \end{aligned}$$

Полный спин направлен перпендикулярно оси z и равен единице. Спины обеих частиц параллельны. Соответствующее третье симметричное решение имеет вид:

$$C^c_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ C_1\left(\frac{1}{2}\right)C_2\left(-\frac{1}{2}\right) + C_1\left(-\frac{1}{2}\right)C_2\left(\frac{1}{2}\right) \right\} \begin{pmatrix} s_1 \\ \rightarrow \\ s_2 \end{pmatrix}. \quad (24.62)$$

$$\begin{aligned} 4. \lambda_2 = 0, & \quad a_2 = -a_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \lambda_1 = 0, & \quad a_1 = a_4 = 0. \end{aligned}$$

Полный спин равен нулю. Спины обеих частиц антипараллельны. В этом случае решение является антисимметричным:

$$C^a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ C_1\left(\frac{1}{2}\right)C_2\left(-\frac{1}{2}\right) - C_1\left(-\frac{1}{2}\right)C_2\left(\frac{1}{2}\right) \right\}. \quad (24.63)$$

Заметим, что все четыре решения благодаря сделанному выбору отличных от нуля коэффициентов Клебша — Жордана нормированы на единицу.

Возвращаясь теперь снова к координатной части волновой функции атома гелия и учитывая, что полное решение должно быть антисимметричным, согласно (24.37) и (24.38), имеем:

$$\Psi^{a.} = C^c(s_1, s_2)\psi^{a.}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (24.64)$$

(три состояния) и

$$\Psi^{a.'} = C^a(s_1, s_2)\psi^{c.}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (24.65)$$

(одно состояние). При этом спиновые функции определены соотношениями (24.60) — (24.63), а координатная часть волновой функции при $n_1 \neq n_2$ имеет вид:

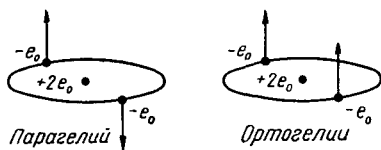
$$\psi^{a.} = \frac{1}{\sqrt{2}}(u \pm v). \quad (24.66)$$

В случае, если оба электрона находятся в одном и том же состоянии $n_1 = n_2$, существует только одно решение с симметричной координатной частью:

$$\Psi^{a.'} = C^a(s_1, s_2)\psi^{c.}; \quad \psi^c = u = \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_1}(\mathbf{r}_2). \quad (24.67)$$

д. Пара- и ортогелий

Мы получили волновые функции, которые характеризуют две системы состояний. Одна система состояний (парагелий) характеризуется антипараллельно ориентированными спинами электронов [симметричная относительно перестановки координат волновая функция (24.65)], другая (ортогелий) — параллельно направленными спинами [антисимметричная относительно перестановки координат волновая функция (24.64), см. фиг. (24.1)].



Фиг. 24.1. Ориентация спинов электронов в атоме гелия.

Весьма интересным свойством этих систем является то, что оба типа атомов гелия: парагелий и ортогелий являются замкнутыми, т. е. не переходящими друг в друга¹). В такой замкнутости обеих систем можно убедиться непосредственным расчетом. Действительно, матричный элемент дипольного момента, соответствующий дипольному переходу из ортогелия в парагелий,

$$\begin{aligned} \langle r_{c. a.} \rangle &= \int \psi^{*c.}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \psi^a(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) d^3x_1 d^3x_2 = \\ &= \int \psi^{*c.}(\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1) (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \psi^a(\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1) d^3x_2 d^3x_1 = \\ &= - \int \psi^{*c.}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \psi^a(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) d^3x_1 d^3x_2, \end{aligned} \quad (24.68)$$

оказывается равным нулю, поскольку

$$\langle r_{c. a.} \rangle = - \langle r_{c. a.} \rangle = 0 \quad (24.69)$$

[мы произвели в (24.68) замену переменных интегрирования и воспользовались свойством симметрии волновых функций]. Поэтому дипольные переходы из одного состояния в другое запрещены.

Вместе с тем не исключено взаимное превращение этих состояний вследствие воздействия третьих частиц. Например, бомбардировкой ортогелия электронами можно заместить выбитый электрон другим электроном с противоположной ориентацией спина, т. е. возможно образование парагелия из ортогелия и наоборот.

е. Энергетический спектр атома гелия

Как мы уже отмечали, полный орбитальный момент L в результате сложения орбитальных моментов двух электронов l_1 и l_2 (рессел-саундерсовская связь) принимает целочисленные значения.

¹) В естественной смеси отношение количества ортогелия к парагелию должно равняться 3:1.

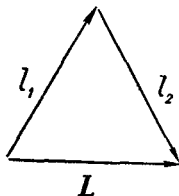
В частном случае, если $l_1 = l_2 = 1$ (оба электрона в p -состоянии), полный орбитальный момент принимает значения $L = 2, 1, 0$. Это соответствует сложению моментов в векторной модели:

1. $L = 2$. Моменты параллельны:

$$l_1 \uparrow \uparrow l_2 \quad L = l_1 + l_2 = 2.$$

2. $L = 1$. Складываемые моменты расположены под углом 60° :

$$L = l_1 + l_2 - 1 = 1.$$



3. $L = 0$. Моменты антипараллельны:

$$l_1 \uparrow \downarrow l_2 \quad L = l_1 - l_2 = 0.$$

В общем случае $l_1 \geq l_2$ число L принимает всевозможные целые значения:

$$L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 2, \dots, l_1 - l_2. \quad (24.70)$$

Для обозначения энергетических уровней сложных атомов применяются те же правила, что и в случае водородоподобного атома, однако состояния с определенным орбитальным моментом L обозначаются большими латинскими буквами:

$$L = 0 \quad S\text{-состояние}$$

$$L = 1 \quad P\text{-состояние}$$

$$L = 2 \quad D\text{-состояние}$$

$$L = 3 \quad F\text{-состояние и т. д.}$$

Перечислим уровни энергии атома гелия. Низший уровень соответствует полному орбитальному моменту $L = 0$: оба электрона находятся в s -состоянии. Этот синглетный терм парагелия имеет обозначение:

$$(1s1s)^1S_0$$

и соответствует антипараллельной ориентации спинов. Индекс вверху слева у буквы, характеризующей терм атома, указывает на число состояний (мультиплетность).

Следующий терм соответствует случаю, когда один из электронов находится в $1s$ -состоянии, а другой в $2s$ -состоянии. Тогда возможен и парагелий:

$$(1s2s)^1S_0$$

и ортогелий:

$$(1s2s)^3S_1.$$

Ортогелий (в отличие от парагелия) обладает спиновым моментом и обнаруживает аномальное зеемановское расщепление в магнитном поле.

Отметим, что уровень ортогелия $(1s2s)^3S_1$ оказывается метастабильным, ибо переход в более низкое энергетическое состояние, принадлежащее парагелию, запрещен правилами отбора. Заметим, что система уровней парагелия является синглетной (спин нуль), а ортогелия — триплетной (спин единица).

Такое расщепление легко может быть понято на основании геометрической модели сложения орбитального и спинового моментов. Согласно векторной модели, при сложении двух векторов L и S их сумма (т. е. вектор, характеризующий вектор полного момента количества движения) может принимать следующие значения:

$$J = L + S, \quad L + S - 1, \dots, |L - S|. \quad (24.71)$$

Число этих значений равно при $L > S$:

$$2S + 1, \quad (24.72)$$

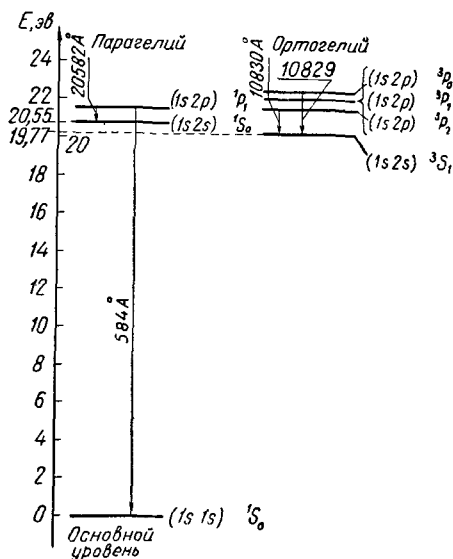
а при $L < S$:

$$2L + 1. \quad (24.73)$$

Отсюда следует, что для S -терма ($L = 0$) число возможных состояний не только для пара-, но и для ортогелия равняется единице. Точно так же и для атома водорода (один валентный электрон) s -терм является синглетным и лишь для p -, d - и т. д. термов, когда $l > s$, число состояний равно двум, т. е. будем иметь дублеты.

Для атома гелия полный спин S принимает два значения: $S = 0, 1$. При $S = 0$ число состояний ($2S + 1$) равно единице, а при $S = 1$ — трем ($2S + 1 = 3$), т. е. будем иметь триплеты. Общая схема энергетических уровней для атома гелия приведена на фиг. 24.2. Для элементов третьей группы ($S = \frac{3}{2}$ и $S = \frac{1}{2}$) мы будем иметь соответственно квартеты и дублеты и т. д.

Для атома гелия полный спин S принимает два значения: $S = 0, 1$. При $S = 0$ число состояний ($2S + 1$) равно единице, а при $S = 1$ — трем ($2S + 1 = 3$), т. е. будем иметь триплеты. Общая схема энергетических уровней для атома гелия приведена на фиг. 24.2. Для элементов третьей группы ($S = \frac{3}{2}$ и $S = \frac{1}{2}$) мы будем иметь соответственно квартеты и дублеты и т. д.



Фиг. 24.2. Схема энергетических уровней атома гелия. Расщепление 3P -уровней дано не в масштабе.

Длина волны задается в ангстремах \AA , причем $1 \text{\AA} = 10^{-8} \text{ см}$ и соответствует частоте $\nu = 3 \cdot 10^{18} \text{ сек}^{-1}$.

Таким образом, число валентных электронов (более подробно см. § 25) полностью определяет характер расщеплений спектральных линий.

Теория многоэлектронных атомов изложена в ряде монографий¹⁾.

Задача 24.1.²⁾ Частица находится в потенциальной яме потенциала Юкава:

$$V = -g^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r}.$$

Выбрав пробную функцию в виде $\psi_1 = A_1 e^{-\beta_1 r}$, определить верхний предел значения α , при котором возможно существование хотя бы одного дискретного уровня.

С помощью полученного решения рассмотреть частный случай кулоновского потенциала ($g^2 = e_0^2$, $\alpha = 0$).

Показать, что для кулоновского потенциала всегда должны существовать дискретные уровни. Определить низший энергетический уровень, а также соответствующую ему волновую функцию.

Решение. Нормированная волновая функция должна иметь вид [см. (23.47)]:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \beta_1^{3/2} e^{-\beta_1 r}.$$

Для среднего значения кинетической и потенциальной энергии соответственно находим [см. (23.52), (23.53)]:

$$\langle T \rangle = \frac{\beta_1^2 \hbar^2}{2m_0}, \quad \langle V \rangle = -\frac{4\beta_1^3 g^2}{(2\beta_1 + \alpha)^2}.$$

Появление первого дискретного уровня будет определяться соотношениями:

$$\langle E_1 \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = 0, \quad \frac{\partial \langle E_1 \rangle}{\partial \beta_1} = 0.$$

Отсюда находим:

$$\alpha_{\text{макс.}} = \frac{m_0 g^2}{\hbar^2}.$$

Дискретные уровни будут существовать в том случае, когда $\langle E \rangle < 0$. Это будет иметь место при $\alpha < \alpha_{\text{макс.}}$, так как для кулоновского поля $\alpha = 0$, то последнее условие будет всегда выполнено.

Средняя энергия в этом случае будет равна:

$$\langle E_1 \rangle = \frac{\beta_1^2 \hbar^2}{2m_0} - \beta_1 e_0^2.$$

Откуда из условия минимума $\langle E_1 \rangle$ находим:

$$\beta_1 = \frac{1}{a_0},$$

где $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2}$ — радиус первой борвской орбиты. Выражение же для волновой функции и средней энергии будет точно совпадать с соответствующими

¹⁾ См., например, Д. И. Блохинцев, Основы квантовой механики, М., 1949; П. Гомбаш, Проблема многих частиц в квантовой механике, М., 1952.

²⁾ Эти задачи относятся к § 23 и 24.

щими выражениями для уровня $1s$, найденными в задаче атома водорода путем решения уравнения Шредингера (см. § 13).

Задача 24.2. Вычислить диамагнитную восприимчивость основного состояния грамм-атома парагелия, воспользовавшись для волновой функции выражением (23.47), найденным с помощью вариационного метода.

Решение. В основном состоянии атомов парагелия орбитальный и спиновый моменты равны нулю ($j=0$), и поэтому он должен быть диамагнитным (см. задачу 20.1).

Для диамагнитной восприимчивости, рассчитанной на грамм-атом, согласно (20.48), имеем выражение:

$$\chi = -\frac{e_0^3 N}{6m_0 c^3} (\langle r_1^2 \rangle + \langle r_2^2 \rangle), \quad (24.74)$$

где N — число Авогадро, а

$$\langle r_1^2 \rangle + \langle r_2^2 \rangle = \int (r_1^2 + r_2^2) |\psi(r_1, r_2)|^2 d^3 x_1 d^3 x_2. \quad (24.75)$$

Приближенное выражение для $\psi(r_1, r_2)$, согласно (23.47), равно:

$$\psi(r_1 r_2) = \frac{Z'^3}{\pi a_0^3} e^{-Z'(r_1+r_2)/a_0},$$

причем для атома гелия:

$$Z' = Z - \frac{5}{16} = \frac{27}{16}.$$

Вычисляя интеграл (24.75) с этим выражением для ψ , получаем:

$$\langle r_1^2 \rangle + \langle r_2^2 \rangle = \frac{2a_0^2}{Z'^2}.$$

Отсюда находим значение диамагнитной восприимчивости:

$$\chi^{\text{теор.}} = -1,67 \cdot 10^{-6},$$

довольно хорошо согласующееся с экспериментальным значением:

$$\chi^{\text{эксп.}} = -1,90 \cdot 10^{-6}.$$

§ 25. ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

а. Общие сведения о строении сложных атомов

Как было указано, положение атома в периодической системе элементов Менделеева определяется его порядковым номером Z . Например, для водорода $Z=1$, для гелия $Z=2$, для натрия $Z=11$, для урана $Z=92$ и т. д. Физический смысл величины Z был выявлен в процессе создания современной модели атома. Порядковый номер Z характеризует заряд ядра (в единицах e_0), т. е. является целым числом, определяющим число про-

тонов в ядре, а также число электронов в нейтральном атоме. Таким образом, у натрия имеется 11 электронов ($Z = 11$), у урана — 92 ($Z = 92$) и т. д.

Основным вопросом теории сложного атома является вопрос о распределении плотности электронов в атоме и его энергетический спектр.

При этом необходимо учесть не только притяжение электронов к ядру, которое приводит к энергии электрона в атоме:

$$E = -\frac{Z^2 R \hbar}{n^2}, \quad (25.1)$$

но и взаимодействие между всеми электронами, которое должно уменьшить по абсолютному значению эту энергию (25.1).

Каждый электрон в сложном атоме, так же как и в атоме водорода, характеризуется четырьмя квантовыми числами. При наличии связи Рессела — Саундерса, когда спиновые и орбитальные моменты отдельных электронов заданной оболочки складываются независимо друг от друга, этими квантовыми числами являются:

- | | |
|----------------------------|---|
| 1) главное квантовое число | $n = 1, 2, 3, 4, \dots,$ |
| 2) орбитальное | $l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1),$ |
| 3) магнитное | $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ и |
| 4) спиновое | $m_s = \pm \frac{1}{2}$, характеризующее проекцию спина на ось z . |

При наличии же (jj)-связи в качестве четырех квантовых чисел берутся:

- 1) главное n ,
- 2) орбитальное l ,
- 3) внутреннее $j = \left| l \pm \frac{1}{2} \right|$ и
- 4) $m_j = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$, характеризующее проекцию полного момента количества движения на ось z .

Как известно, для легких элементов имеет место связь Рессела — Саундерса, а для тяжелых (jj)-связь. Оказывается, оба типа связи дают одинаковое число уровней.

Группа близких энергетических уровней, отделенная от других уровней значительным интервалом энергий, образует так называемую оболочку, состоящую в свою очередь из подоболочек. Так же как и в атоме водорода, классификация по оболочкам производится, как правило, по главному квантовому числу n . При этом имеется следующее соотношение между главным кван-

товым числом n и буквенными обозначениями, введенными в рентгеновскую спектроскопию для оболочек:

n	Символ оболочки
1	K
2	L
3	M
4	N
5	O
6	P
7	Q

Внутри оболочки электроны, обладающие одинаковыми значениями орбитального квантового числа $l=0, 1, 2, 3, \dots$, образуют s -, p -, d -, f - и т. д. подоболочки. При заполнении оболочек и подоболочек следует учитывать принцип Паули, согласно которому в каждом квантовом состоянии, характеризующем четырьмя квантовыми числами, не может находиться более одного электрона. Поэтому в состоянии с фиксированными значениями n, l, m может находиться максимум два электрона, отличающихся друг от друга направлением спина. Принимая также во внимание, что квантовое число m , изменяющееся в пределах от $-l$ до $+l$, может принимать $2l+1$ значений, находим следующее выражение для максимального числа электронов в заданной подоболочке¹⁾:

$$N_{nl} = N_l = 2(2l+1) \quad (25.1a)$$

Из последней формулы следует, что число электронов, находящихся в целиком заполненных подоболочках $s(l=0)$, $p(l=1)$, $d(l=2)$ и $f(l=3)$, будет соответственно равно:

$$N_s = 2, \quad N_p = 6, \quad N_d = 10, \quad N_f = 14.$$

Подоболочки с более высоким значением l в невозбужденных атомах не встречаются, и поэтому здесь мы их не будем рассматривать.

¹⁾ Аналогичное значение для N_l можно найти также исходя из (jj) -связи.

В самом деле, в этом случае при заданных значениях трех квантовых чисел n, l, j четвертое квантовое число m_j может принимать значения $-j, \dots, -1/2, 1/2, \dots, j$, соответствующие $2j+1$ состояниям. Откуда находим то же самое значение для N_l :

$$N_l = \sum_j (2j+1) = 2(2l+1),$$

где

$$j = \left| l \pm \frac{1}{2} \right|.$$

Наконец, найдем максимальное число электронов, которое может находиться в заданной оболочке:

$$N_n = \sum_{l=0}^{n-1} N_l = 2(1 + 3 + \dots + (2n - 1)) = 2n \frac{1 + 2n - 1}{2} = 2n^2. \quad (25.2)$$

Отсюда видно, что в K -оболочке может находиться максимум 2 электрона, в L -оболочке — 8 электронов, в M -оболочке — 18 электронов, в N -оболочке — 32 электрона и т. д. Заметим, что приведенные здесь соотношения, которые позволяют определить порядок заполнения уровней в тех или иных оболочках, соответствуют, вообще говоря, водородоподобным атомам.

Чтобы установить порядок заполнения оболочек, и в особенности подоболочек в сложных атомах, необходимо учесть взаимодействие между электронами. Как мы не раз подчеркивали, эта задача не может быть решена точно.

Однако квантовая механика в применении к системе многих электронов позволила в общем виде вскрыть весьма важные свойства подобных систем. К числу этих свойств в первую очередь следует отнести обменное взаимодействие.

Кроме того, квантовая механика позволила развить приближенные методы, которые в применении к сложным атомам дают весьма удовлетворительные результаты.

Наиболее простыми в этом отношении являются, как уже указывалось в § 23, вариационные методы (Ритца, Хиллерааса и др.), которые дают сравнительно хорошие результаты при исследовании легких атомов (примерно до калия). Более полный анализ строения атома можно производить с помощью так называемого метода самосогласованного поля, развитого в работах Хартри и Фока. Этим методом удалось определить распределение электронов не только в легких, но и в тяжелых атомах, а также найти энергию атома (см. § 23). Метод «самосогласованного поля» позволяет также обнаружить оболочечную структуру сложных атомов¹⁾.

К сожалению, использование этого метода связано с очень большой вычислительной работой, которая может быть выполнена только при помощи сложных счетных машин; при этом для собственных функций, характеризующих распределения электронов, получаются не аналитические выражения, а числовые таблицы.

¹⁾ Более подробно см. Д. Хартри, Расчеты атомных структур, ИЛ, 1960, перевод с английского под редакцией и со вступительной статьей В. А. Фока.

б. Статистический метод Томаса—Ферми

Наряду с упомянутыми приближенными методами, в которых фактически используются методы квантовой механики, развивались, в особенности применительно к случаю тяжелых атомов, статистические методы, основы которых были заложены в работах Томаса и Ферми.

При статистическом подходе электроны атома рассматриваются, так же как и в теории металлов (см. § 6), как вырожденный электронный газ при $T=0$. Статистический метод Томаса—Ферми дает, конечно, меньшую точность, чем метод самосогласованного поля Хартри—Фока, поскольку при статистическом подходе не будут, естественно, учтены многие детали, относящиеся к поведению отдельных электронов.

Несмотря на эти общие недостатки, метод Томаса—Ферми играет существенную роль, поскольку он позволяет достаточно просто объяснить многие важные свойства атома в среднем.

Хотя этот метод и не позволяет обнаружить оболочечную структуру атома, оказалось возможным объяснить некоторые важные особенности заполнения электронных оболочек. С помощью этого метода были также вычислены различные характеристики атомов, так, например, общая энергия связи электронов в атоме, радиусы атомов, радиусы ионов, а также было учтено влияние экранирующих электронных оболочек на различные эффекты, например, на рассеяние быстрых электронов атомами, на тормозное излучение или на рождение электронно-позитронных пар в результате поглощения гамма-кванта полем ядра.

В настоящее время статистические методы с успехом используются также при построении теории тяжелых ядер и теории вещества, находящегося под высоким давлением, например внутри звезд.

В сравнительно тяжелых атомах положительно заряженное ядро окружено облаком отрицательно заряженных электронов, которые частично экранируют электрический заряд ядра. В ионизированном атоме на расстояниях, превышающих его размеры, потенциал в первом приближении будет определяться выражением:

$$\Phi_{\infty} = \frac{(Z-N)e_0}{r}, \quad (25.3)$$

где Z — порядковый номер, а N — число электронов.

Для нейтрального атома $N=Z$, и поэтому $\Phi_{\infty}=0$, т. е. электроны полностью экранируют заряд ядра.

При построении статистической теории следует учесть три вида энергии.

1. Электростатическую энергию притяжения электронов к ядру. Эта энергия связана с плотностью электронов ρ_0 (число электронов, находящихся в единице объема) соотношением:

$$V_{\text{я.-э.}} = -e_0 \int \rho_0 \Phi_{\text{я.}} d^3x, \quad (25.4)$$

где $e = -e_0$ — заряд электрона, а $\Phi_{я.} = \frac{Ze_0}{r}$ — потенциал, создаваемый ядром.

2. Электростатическую энергию отталкивания между электронами:

$$V_{э.-э.} = -\frac{e_0^2}{2} \int \rho_0 \Phi_{э.} d^3x, \quad (25.4a)$$

где

$$\Phi_{э.}(r) = -e_0 \int \frac{\rho_0(r')}{|r-r'|} d^3x'.$$

3. Кинетическую энергию электронов, входящих в атом. Так же как и при построении теории твердого тела при абсолютном нуле температуры, средняя кинетическая энергия отдельного электрона, согласно формулам (6.33a) и (6.33)¹⁾, будет связана с плотностью электронов ρ_0 соотношением:

$$T_{ср.} = \alpha \rho_0^{2/3}, \quad (25.4б)$$

где

$$\alpha = \frac{3}{10} \frac{\hbar^2}{m_0} (3\pi^2)^{2/3} = \frac{3}{10} e_0^2 a_0 (3\pi^2)^{2/3}. \quad (25.5)$$

Отсюда для кинетической энергии электронов находим:

$$T = \alpha \int \rho_0^{5/3} d^3x. \quad (25.6)$$

Таким образом, полная энергия электронного газа в поле ядра, равная сумме потенциальной, состоящей из двух частей [см. (25.4) и (25.4a)], и кинетической [см. (25.6)], будет иметь вид:

$$E = T + V_{я.э.} + V_{э.э.} = \alpha \int \rho_0^{5/3} d^3x - e_0 \int \rho_0 \Phi_{я.} d^3x + \frac{1}{2} e_0^2 \int \frac{\rho_0(r) \rho_0(r') d^3x d^3x'}{|r-r'|}. \quad (25.7)$$

При этом плотность электронного газа должна удовлетворять условию:

$$\int \rho_0 d^3x = N, \quad (25.8)$$

где N — число электронов в атоме.

Исходя из вариационного принципа, который при дополнительном условии (25.8) можно сформулировать следующим образом:

$$\delta \{E + e_0 \Phi_0 N\} = 0, \quad (25.9)$$

находим соотношение между полным потенциалом $\Phi = \Phi_{я.} + \Phi_{э.}$ и плотностью электронов ρ_0 :

$$\rho_0 = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} (2m_0 e_0 (\Phi - \Phi_0))^{3/2}, \quad (25.10)$$

¹⁾ Эти формулы были нами получены в предположении, что в каждом квантовом состоянии, характеризуемом тремя квантовыми числами, не может быть более двух электронов. Таким образом, статистическая теория Томаса—Ферми автоматически учитывает принцип Паули, играющий фундаментальную роль в теории сложных атомов.

где множитель Лагранжа Φ_0 , играющий роль некоторого постоянного потенциала, должен быть найден из граничных условий. При выводе последнего соотношения мы учли, что

$$\begin{aligned} \delta \int \rho_0^{5/3} d^3x &= \frac{5}{3} \int \rho_0^{2/3} \delta \rho_0 d^3x, \\ \delta \int \rho_0 \Phi_{\text{я}} d^3x &= \int \Phi_{\text{я}} \delta \rho_0 d^3x, \\ \delta \frac{e_0^2}{2} \int \frac{\rho_0(r) \rho_0(r')}{|r-r'|} d^3x d^3x' &= \\ = \frac{e_0^2}{2} \int \frac{[\delta \rho_0(r) \rho_0(r') + \rho_0(r) \delta \rho_0(r')] d^3x d^3x'}{|r-r'|} &= -e_0 \int \Phi_{\text{я}} \delta \rho_0 d^3x; \\ \delta \int \rho_0 d^3x &= \delta N. \end{aligned} \quad (25.11)$$

Подставляя найденное выражение (25.10) для плотности электронов в уравнение Пуассона (в случае сферически симметричного распределения электронов):

$$\nabla^2 \Phi = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \Phi = 4\pi e_0 \rho_0 \quad (25.12)$$

и принимая во внимание, что $\Phi_0 = \text{const}$, получаем уравнение Томаса—Ферми, лежащее в основе статистической модели атома:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r (\Phi - \Phi_0) = \frac{4e_0}{3\pi \hbar^3} (2m_0 e_0)^{3/2} (\Phi - \Phi_0)^{3/2}. \quad (25.13)$$

Для исследования конкретных вопросов уравнение (25.13) следует решать при определенных граничных условиях. В случае атома граничные условия могут быть заданы в виде:

$$\Phi - \Phi_0 = \frac{Z e_0}{r} \quad \text{при } r \rightarrow 0 \quad (25.14)$$

и

$$\Phi = \frac{(Z-N) e_0}{r_0} \quad \text{при } r = r_0. \quad (25.15)$$

Здесь r_0 определяется условием, что при $r = r_0$ плотность электронов можно считать равной нулю, т. е. $\rho_0(r_0) = 0$. Отсюда, согласно (25.10), находим:

$$\Phi_0 = \frac{(Z-N) e_0}{r_0}. \quad (25.16)$$

Принимая во внимание уравнение Пуассона (25.12) и уравнение (25.13), условие (25.8) можно представить в виде:

$$\int_0^{r_0} r \frac{d^2 r (\Phi - \Phi_0)}{dr^2} dr = N e_0. \quad (25.17)$$

Из (25.16) следует, что для нейтрального атома ($N = Z$) $\Phi_0 = 0$, а $r_0 = \infty$. Поэтому вместо (25.17) будем иметь:

$$\int_0^{\infty} r \frac{d^2 r \Phi}{dr^2} dr = Z e_0.$$

Последнее условие будет иметь место, если выполняется второе граничное условие:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \Phi = 0. \quad (25.18)$$

Заметим, что уравнение Томаса—Ферми (25.13) имеет одно точное решение:

$$\Phi - \Phi_0 = \frac{81\pi^2 \hbar^6}{8m_0^3 e_0^3} \frac{1}{r^4}, \quad (25.19)$$

в чем нетрудно убедиться, подставляя (25.19) в (25.13).

Это решение для нейтрального атома ($\Phi_0 = 0$) будет удовлетворять одному из граничных условий при $r \rightarrow \infty$ [см. (25.18)]. Однако второе граничное условие при $r \rightarrow 0$ [см. (25.14)] при этом не будет удовлетворено.

К сожалению, решения уравнения Томаса—Ферми, удовлетворяющие обоим граничным условиям¹⁾, не могут быть выражены в аналитической форме.

Подставляя (25.14) в (25.10), находим закон изменения плотности ρ_0 при $r \rightarrow 0$, который имеет вид:

$$\rho_0 = \text{const } r^{-3/2}. \quad (25.20)$$

Решение (25.19) для нейтрального атома дает завышенное значение для Φ при $r \rightarrow \infty$. При $r \rightarrow \infty$ более точный метод Хартри—Фока показывает, что плотность электронов должна изменяться по экспоненциальному закону.

Поскольку нас интересует лишь принципиальная сторона вопроса, то мы построим статистическую теорию атома приближенно с помощью вариационного метода, что позволит сформулировать решение задачи в аналитической форме, с несущественными для нас количественными отступлениями.

в. Решение задачи Томаса—Ферми вариационным методом Ритца

При решении задачи вариационным методом Ритца можно предложить бесчисленное множество пробных функций, зависящих от различных вариационных параметров λ .

Подберем пробную функцию, исходя из следующих соображений: потребуем, чтобы она примерно совпадала с решением уравнения Томаса—Ферми

¹⁾ Заметим, что численное интегрирование этого уравнения имеет известное преимущество перед численным интегрированием уравнений Хартри—Фока в двух отношениях: во-первых, уравнение Томаса—Ферми значительно проще уравнений Хартри—Фока, во-вторых, это уравнение, а также граничные условия (например, для нейтрального атома $Z = N$, $\Phi = 0$) можно преобразовать к универсальному виду, не зависящему от Z .

Для этого мы должны вместо $\Phi(r)$ ввести новую функцию

$$\Phi(r) = \frac{Ze_0}{r} f(x),$$

где

$$x = \frac{r}{a}, \quad a = a_0 \left(\frac{9\pi^2}{128Z} \right)^{1/3}.$$

Тогда как уравнение (25.13), принимающее для функции $f(x)$ вид:

$$\sqrt{x} \frac{d^2 f}{dx^2} = f^{3/2}, \quad (25.13a)$$

так и граничные условия (25.14) и (25.18):

$$f(x) = 1 \text{ при } x \rightarrow 0, \quad f(x) = 0 \text{ при } x \rightarrow \infty \quad (25.14a)$$

будут носить универсальный характер, т. е. не должны зависеть от величины Z . Поэтому, проинтегрировав численно уравнение Томаса—Ферми, мы можем с помощью изменения масштаба (зависящего от Z) использовать его для исследования любых тяжелых атомов, что не имеет места для уравнения Хартри—Фока.

при $r \rightarrow 0$ (эта область является наиболее существенной при решении всей проблемы в целом), а также имела бы сравнительно простой вид, допускающий при вычислении полной энергии точное интегрирование. В качестве такой пробной функции, удовлетворяющей этим требованиям, возьмем следующую:

$$\rho_0 = \frac{N\lambda^{3/2}}{16\pi r^{3/2}} e^{-V\sqrt{\lambda}r}. \quad (25.21)$$

Эта функция уже нормирована на общее число электронов:

$$\int \rho_0 d^3x = \frac{N\lambda^{3/2}}{4} \int_0^\infty V\sqrt{\lambda} e^{-V\sqrt{\lambda}r} dr = N, \quad (25.21a)$$

и поэтому дополнительное условие (25.8) будет при этом выполняться автоматически.

При $r \rightarrow 0$ пробная функция (25.21) изменяется по тому же закону ($\rho_0 \sim r^{-3/2}$), что и решение уравнения Томаса—Ферми [см. (25.20)]; этим, по-видимому, и объясняется, как мы увидим дальше, хорошее количественное совпадение результатов, найденных, с одной стороны, с помощью пробной функции (25.21), а с другой — с помощью потенциала, удовлетворяющего уравнению Томаса—Ферми.

Потенциал, создаваемый электронами атома, при этом будет равен:

$$\Phi_{\text{э.}} = -\frac{Ne_0}{r} (1 - e^{-V\sqrt{\lambda}r} - V\sqrt{\lambda}r e^{-V\sqrt{\lambda}r}). \quad (25.22)$$

В этом нетрудно убедиться, подставив соответственно выражения (25.21) и (25.22) для ρ_0 и $\Phi_{\text{э.}}$ в уравнение:

$$\nabla^2 \Phi_{\text{э.}} = 4\pi e_0 \rho_0.$$

Кроме того, учитывая выражение для $\Phi_{\text{я.}} = \frac{Ze_0}{r}$, находим, что общий потенциал удовлетворяет граничному условию (25.15) при $r = r_0 \rightarrow \infty$, когда плотность заряда, а вместе с тем экспоненциальный член $e^{-V\sqrt{\lambda}r_0}$ обращаются в нуль.

Найдем, далее, выражение для кинетической энергии T через вариационный параметр λ . Согласно формулам (25.6) и (25.21), будем иметь:

$$T = 4\pi x \left(\frac{N}{16\pi} \right)^{5/3} \lambda^{5/2} \int_0^\infty \frac{e^{-5/3 V\sqrt{\lambda}r}}{V\sqrt{\lambda}r} dr = \frac{9}{400} \left(\frac{3\pi}{2} \right)^{2/3} N^{5/3} \lambda^2 e_0^2 a_0. \quad (25.23)$$

Для потенциальной энергии взаимодействия ядра с электроном [см. (25.4)], а также для энергии взаимодействия между электронами [см. (25.4a)] соответственно находим выражения:

$$V_{\text{я.-э.}} = -\frac{ZNe_0^2}{8} \lambda^{3/2} \int_0^\infty \frac{e^{-V\sqrt{\lambda}r}}{V\sqrt{\lambda}r} dr = -\frac{ZNe_0^2 \lambda}{2}, \quad (25.24)$$

$$\begin{aligned} V_{\text{э.-э.}} &= \frac{N^2 e_0^2}{8} \lambda^{3/2} \int_0^\infty \frac{dr}{V\sqrt{\lambda}r} e^{-V\sqrt{\lambda}r} (1 - e^{-V\sqrt{\lambda}r} - V\sqrt{\lambda}r e^{-V\sqrt{\lambda}r}) = \\ &= \frac{N^2 e_0^2 \lambda}{16}. \end{aligned} \quad (25.25)$$

Складывая выражения (25.23) — (25.25), для полной энергии электронного облака (25.7) получаем:

$$E = A\lambda^2 - B\lambda, \quad (25.26)$$

где

$$A = \frac{9}{400} \left(\frac{3\pi}{2}\right)^{2/3} N^{5/3} e_0^2 a_0, \quad B = \frac{1}{2} N e_0^2 \left(Z - \frac{N}{8}\right).$$

Вариационный параметр λ , который играет роль обратной величины эффективного радиуса атома, может быть найден из условия минимума полной энергии E атома, т. е. $\frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0$. Отсюда находим:

$$R_{\text{эфф.}} = \frac{1}{\lambda} = \frac{9}{100} \left(\frac{3\pi}{2}\right)^{2/3} \frac{N^{2/3}}{\left(Z - \frac{N}{8}\right)} a_0, \quad (25.28)$$

$$E = \frac{1}{2} V = -\frac{B^2}{4A} = -\frac{25}{9} \left(\frac{2}{3\pi}\right)^{2/3} \frac{e_0^2}{a_0} N^{1/3} \left(Z - \frac{N}{8}\right)^2. \quad (25.29)$$

В частности, для нейтрального атома ($N=Z$) имеем:

$$R_{\text{эфф.}} \approx 0,3 \cdot \frac{a_0}{Z^{1/3}},$$

$$E = -\frac{25}{9} \frac{49}{64} \left(\frac{2}{3\pi}\right)^{2/3} \frac{e_0^2}{a_0} Z^{7/3} = -0,758 \dots \frac{e_0^2}{a_0} Z^{7/3}. \quad (25.30)$$

Интересно отметить, что численное интегрирование уравнения Томаса—Ферми приводит к весьма близкому значению для энергии атома:

$$E^{\text{T.-Ф.}} = -0,769 \dots \frac{e_0^2}{a_0} Z^{7/3} = -20,94 Z^{7/3} \text{ эв.} \quad (25.31)$$

Последнее выражение, взятое со знаком минус, характеризует полную энергию связи (ионизации) W нейтрального атома, т. е. энергию, необходимую для удаления всех электронов из атома.

Теоретические значения для W , найденные по формуле (25.31), хотя и дают весьма разумные результаты даже для атома водорода, но все же они несколько превышают соответствующие экспериментальные значения, причем с увеличением Z относительная ошибка уменьшается (см. табл. 25.1).

Таблица 25.1

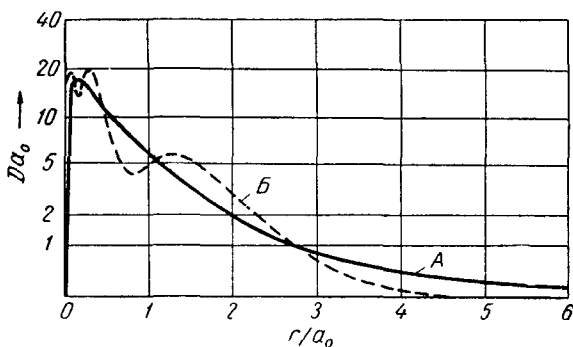
Вычисленные и экспериментальные значения полной энергии ионизации W атомов (в единицах e_0^2/a_0)

Элемент	$W^{\text{теор.}}$	$W^{\text{эксп.}}$
H	0,769	0,5
Li	9,982	7,5
Na	206,9	162
Hg	21207	18130

В заключение сравним кривую, характеризующую распределение плотности заряда в нейтральном атоме Ag ($Z=18$) по статистической теории

Томаса—Ферми с результатами квантовомеханической теории самосогласованного поля Хартри—Фока (см. фиг. 25.1).

Как видно из графика, ρ_0 , рассчитанное по методу Хартри—Фока (кривая *Б*), позволяет обнаружить характерные максимумы и минимумы, соответствующие электронным оболочкам, в то время как по статистической теории Томаса—Ферми (кривая *А*) плотность электронов описывается лишь в среднем и никаких относительных максимумов, естественно, обнаруживаться на ней не должно. При больших значениях r имеется также заметное



Фиг. 25.1. Сравнение распределений плотности электронов в атоме аргона ($Z=18$), вычисленных методом Томаса—Ферми (кривая *А*) и методом Хартри—Фока (кривая *Б*).

По оси ординат выбрана псевдологарифмическая шкала, т. е. откладывается величина $\ln(1 + D a_0)$, где $D = 4\pi r^2 \rho_0$. Поэтому график при малых $D a_0$ будет линейным, а при больших — логарифмическим. Такой масштаб позволяет проследить изменение ρ_0 не только при $r < a_0$, но и при больших значениях r .

расхождение между обеими кривыми: метод Хартри—Фока дает экспоненциальное убывание функции с увеличением r , в то время как в статистической теории это убывание характеризуется лишь степенной (r^{-4}) функцией (25.19)¹⁾.

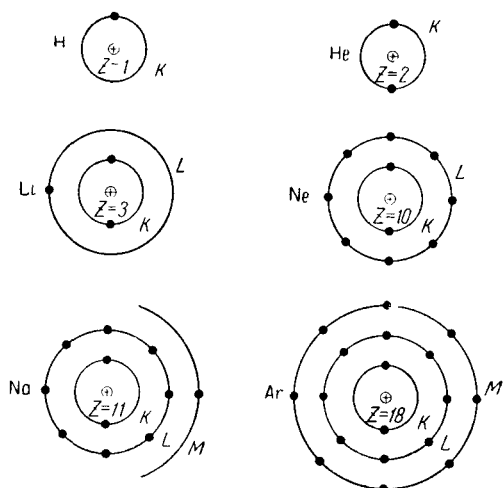
г. Энергетические уровни атомов щелочных металлов

При исследовании спектральных линий в сложных атомах следует различать внешние и внутренние оболочки.

В атоме водорода имеется только внешняя оболочка, на которой находится один электрон (*К*-оболочка). У гелия ($Z=2$) заканчивается построение *К*-оболочки (благородный газ). У лития ($Z=3$) внутренняя оболочка (*К*-оболочка) заполнена, а на внешней, *L*-оболочке, находится один электрон (щелочной металл, эле-

¹⁾ Нахождение электронных оболочек в атоме с помощью метода Томаса—Ферми будет рассмотрено в § 26 п. «е». Подробному изложению статистической теории атома посвящена книга П. Гомбаша «Статистическая теория атома и ее применение», М., 1951.

мент первой группы). У Ne ($Z=10$) заканчивается заполнение L -оболочки. Далее у натрия ($Z=11$) внутренние оболочки K и L заполнены полностью, а на внешней, M -оболочке, находится один электрон (щелочной металл) и т. д. Заполнение оболочек у этих атомов изображено на фиг. 25.2.



Фиг. 25.2. Схема заполнения электронных оболочек в различных атомах.

Слева — атомы, у которых начинается заполнение оболочек (водород, щелочные металлы); справа — атомы с заполненными оболочками (инертные газы). Черными точками обозначены электроны, а светлыми (с плюсом) — ядра.

Следует заметить, что энергия связи на один электрон, находящийся на внутренней оболочке, гораздо больше, чем для электрона, находящегося на внешней оболочке. Об этом можно судить по энергии ионизации, которая для инертных газов выше 20 эв , в то время как у щелочных металлов она немного превышает 5 эв . Более того, отрыв первого валентного электрона у лития требует затраты энергии всего $5,39 \text{ эв}$. При отрыве же второго и третьего электронов, лежащих во внутренних оболочках, требуется затратить уже соответственно энергию 76 и 122 эв .

Поскольку у атомов первой группы (Li, Na, K, Rb, Cs и т. д.), получивших название щелочных металлов, на внешней оболочке находится, так же как и у атома водорода, по одному электрону, то поэтому их оптические и химические свойства в основном должны напоминать свойства атома водорода (напри-

мер, как известно, все эти элементы являются одновалентными и у всех у них обнаруживается дублетное расщепление спектральных термов).

Оптический спектр возникает, когда переход совершает валентный электрон (т. е. электрон внешней орбиты), оказавшийся до этого благодаря возбуждению атома на более высоком уровне. Возбуждение же электронов внутренних орбит требует, как правило, значительно большей энергии, а переходы электронов из возбужденных состояний обратно на основные состояния внутренних орбит сопровождаются рентгеновским излучением (см. § 26). Ядро атома вместе с электронами внутренних орбит образует так называемый атомный остов, заряд которого равен $Z_a = Z - N$, где N — число электронов на внутренних орбитах. Для щелочных металлов (Li, Na и т. д.) величина $N = Z - 1$ и поэтому заряд «атомного остова» для них равен единице ($Z_a = 1$). Поэтому основная часть потенциальной энергии, удерживающая внешний электрон в щелочном металле, будет такая же, как и в атоме водорода, т. е.

$$V_0 = -\frac{e_0^2}{r} Z_a = -\frac{e_0^2}{r}, \quad (25.31)$$

и в основу исследования спектра щелочных металлов мы можем положить соответствующее выражение энергии, полученное для атома водорода (см. § 13):

$$E_n^0 = -\frac{R\hbar}{n^2}. \quad (25.32)$$

Точно так же за основное приближение волновых функций мы можем взять волновые функции атома водорода:

$$\psi^0 = \psi_{nlm}. \quad (25.33)$$

Однако в щелочных металлах при рассмотрении взаимодействия между валентным электроном и атомным остовом, помимо кулоновского взаимодействия, которым можно ограничиться в атоме водорода, следует также учитывать силы поляризации и эффект размазанности атомного остова по некоторому объему, что дает в энергии (25.32) некоторые добавки, а главное — снимает вырождение по l , которое имеет место для атома водорода.

В боровской полуклассической теории орбиты валентных электронов строго разделялись на «непроникающие» и «проникающие» внутрь атомного остова.

В случае «непроникающих» орбит (каковыми являются орбиты с траекторией, близкой к круговой) следует учитывать лишь силы поляризации, так как потенциал за пределами атомного остова (т. е. за пределами внутренних орбит) при сферически-симметричном распределении заряда совершенно не зависит от закона рас-

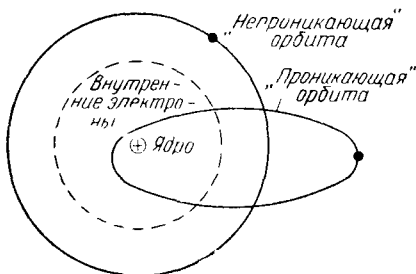
пределения этого заряда по радиусу. Только для «проникающих» орбит (вытянутых эллипсов) этот закон распределения заряда является весьма существенным (см. фиг. 25.3).

В квантовой теории понятие траектории теряет свой смысл; само же разделение на «непроникающие» и «проникающие» орбиты является условным и означает: можно ли положить внутри атомного остова волновую функцию, описывающую движение валентного электрона, равной нулю (для «непроникающих» орбит), или нет (для «проникающих» орбит).

В связи с этим следует заметить, что s-орбита электрона в сложном атоме всегда является «проникающей», так как ее волновая функция отлична от нуля не только внутри атомного остова, но даже в центральной части атома, т. е. в области ядра:

$$|\psi(0)|^2 = \frac{1}{\pi n^3 a_0^3}. \quad (25.34)$$

Вычислим прежде всего силы поляризации, которые возникают между внешним электроном и атомным остовом. Внешний электрон, очевидно, будет отталкивать электроны внутренних оболочек и притягивать ядро. Благодаря этому атомный остов поляризуется и между ним и внешним электроном возникают дополнительные силы поляризации:



Фиг. 25.3. «Непроникающие» и «проникающие» орбиты в атомах щелочных металлов.

$$F_{II} = -(Z - 1) e_0^2 \left[\frac{1}{r^2} - \frac{1}{(r+x)^2} \right] = -\frac{2e_0^2 (Z-1) x}{r^3}. \quad (25.35)$$

Величина $e_0 (Z - 1) x = p$ представляет собой поляризацию атомного остова.

Рассматривая атомный остов как упругий диполь, мы можем, с другой стороны, положить:

$$p = \beta \mathcal{E}, \quad (25.36)$$

где β -- поляризуемость атома, а

$$\mathcal{E} = \frac{e_0}{r^2} \quad (25.37)$$

— электрическое поле, создаваемое внешним электроном в центре атомного остова. Учитывая последние соотношения, получаем

следующее выражение для потенциальной энергии поляризации¹⁾:

$$V_{п.} = \int_r^{\infty} F_{п.} dr = - \int_r^{\infty} \frac{2z e_0^2}{r^5} dr = - \frac{\beta e_0^2}{2r^4}. \quad (25.38)$$

Тогда для дополнительной энергии поляризации, которую в данной задаче можно рассматривать как возмущение, получаем:

$$\Delta E_{п.} = \int \psi_{nlm}^* V_{п.} \psi_{nlm} d^3x = - \frac{\beta e_0^2}{2} \left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle. \quad (25.39)$$

Так как, согласно (13.29а),

$$\left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle = \frac{3}{2a_0^4} \frac{1 - \frac{l(l+1)}{3n^2}}{n^3 \left(l - \frac{1}{2}\right) l \left(l + \frac{1}{2}\right) (l+1) \left(l + \frac{3}{2}\right)},$$

соотношение (25.39) можно привести к виду:

$$\Delta E_{п.} = - \frac{e_0^2}{2a_0} \frac{2\delta}{n^3}, \quad (25.40)$$

где

$$\begin{aligned} \delta &= \delta_1 - \frac{\delta_2}{n^2}, \\ \delta_1 &= \frac{3\beta}{4a_0^3 \left(l - \frac{1}{2}\right) l \left(l + \frac{1}{2}\right) (l+1) \left(l + \frac{3}{2}\right)}, \\ \delta_2 &= \frac{l(l+1)}{3} \delta_1. \end{aligned} \quad (25.41)$$

Отсюда для полной энергии, которая в данном случае будет зависеть не только от n , но и от l (спиновые поправки мы пока что не учитываем), находим:

$$E_{nl} = - \frac{R\hbar}{n^2} + \Delta E_{п.}$$

Подставляя сюда вместо $\Delta E_{п.}$ значение (25.40) и принимая во внимание соотношение:

$$\frac{R\hbar}{n^2} = \frac{e_0^2}{2a_0 n^2},$$

получаем:

$$E_{nl} = - \frac{e_0^2}{2a_0 n^2} - \frac{e_0^2}{2a_0} \frac{2\delta}{n^3} \approx - \frac{e_0^2}{2a_0 (n - \delta)^2}, \quad (25.42)$$

поскольку

$$\frac{1}{(n - \delta)^2} = \frac{1}{n^2} \left(1 - \frac{\delta}{n}\right)^{-2} \approx \frac{1}{n^2} + \frac{2\delta}{n^3}.$$

¹⁾ Коэффициент поляризации β определяется, как правило, на базе полуэмпирических формул. Численные его значения в единицах 10^{-24} см^3 для ионов щелочных металлов, т. е. для его остова, равны:

0,03 (Li⁺); 0,19 (Na⁺); 0,89 (K⁺); 1,50 (Rb⁺); 2,60 (Cs⁺).

Вводя далее эффективное главное квантовое число $n_{\text{эфф.}} = n - \delta$, имеем:

$$E_{nl} = - \frac{e_0^2}{2a_0 n_{\text{эфф.}}^2}.$$

Заметим, что формулой (25.41) мы не можем пользоваться для s -состояний, поскольку при $l=0$ коэффициент δ_l обращается в бесконечность. Это обусловлено тем обстоятельством, что силы поляризации имеет смысл вводить лишь в случае, когда внешний электрон удален достаточно далеко от атомного остова. Для s -термов волновая функция не обращается в нуль даже при $r=0$ [см. (25.34)].

Влияние внутренних электронов на s -орбиты, которые являются «проникающими», будет связано главным образом с размазанностью электронного облака атомного остова. Вообще же дополнительная энергия, обусловленная размазанностью электронов по объему атомного остова, будет определяться выражением:

$$\Delta E_{\text{об.}} = \int |\psi(\mathbf{r})|^2 V_{\text{об.}} d^3x, \quad (25.44)$$

где $V_{\text{об.}}$ — разность потенциальных энергий, создаваемых электронами атомного остова с учетом реального распределения их по некоторому объему и эквивалентным зарядом, сосредоточенным в центре.

Для того чтобы оценить хотя бы порядок величины поправки δ для s -термов, предположим, что $Z-1$ электронов внутренних орбит равномерно заполняют объем радиуса R . Тогда будем иметь:

$$V_{\text{об.}} = - \frac{(Z-1)e_0^2}{r} \left(1 - \frac{3}{2} \frac{r}{R} + \frac{1}{2} \frac{r^3}{R^3} \right). \quad (25.45)$$

Далее, заменяя волновую функцию s -термов ее значением в нуле [см. (25.34)], найдем следующее приближенное выражение для дополнительной энергии s -термов¹⁾:

$$\Delta E_{\text{об.}} \approx - \frac{2}{5} \frac{Z e_0^2 R^2}{a_0^3 n^3} = - \frac{e_0^2}{2a_0} \frac{2\delta}{n^3}, \quad (25.46)$$

где

$$\delta = \frac{2}{5} \frac{ZR^2}{a_0^3}, \quad (25.47)$$

которое уже не будет расходиться.

¹⁾ Строго говоря, «непроникающие» и «проникающие» орбиты в квантовой механике до некоторой степени являются понятиями условными. В самом деле, на сдвиг уровней будет оказывать влияние как поляризация атомного остова, так и его размазанность. Если влияние поляризации будет превалировать, то орбита называется «непроникающей». Наоборот, для «проникающей» орбиты будет сказываться главным образом размазанность остова, дающая при этом сравнительно большое значение δ . Для определения величины δ существуют хорошие полумпирические формулы, приведенные в специальной литературе (см., например, В. Н. Кондратьев, Структура атомов и молекул, М., 1959, стр. 182).

Здесь следует учесть, что, согласно модели Томаса — Ферми, радиус атома [см. (25.28)] равен:

$$R = \frac{\gamma a_0}{Z^{1/3}}, \quad (25.48)$$

где γ — коэффициент, характеризующий закон распределения заряда внутри атома, имеет порядок единицы.

Следовательно, для полной энергии электрона в случае «проникающих» s -орбит вновь получаем формулу вида (25.42)

$$E_{n, l=0} = - \frac{R\hbar}{(n-\delta)^2} = - \frac{e_0^2}{2a_0 n^2_{\text{эфф}}}, \quad (25.49)$$

где $n_{\text{эфф}} = n - \delta$, но теперь δ будет определяться выражением (25.47)

Для того чтобы проанализировать различие поправок δ для «проникающих» и «непроникающих» орбит, рассмотрим для примера атом Li.

У этого атома p -орбита ($l=1$) является «непроникающей». Формула (25.41) дает для наимизшего состояния ($n=2$) значение $\delta_p \sim 0,04$.

В то же самое время для «проникающей» s -орбиты соответствующее выражение для δ_s , согласно формуле (25.47), должно быть на порядок больше.

Следует заметить, что с увеличением n при $l = \text{const}$ эксцентриситет орбиты будет приближаться к единице, т. е. эллиптические орбиты будут становиться все более вытянутыми

$$\varepsilon^2 = 1 - \frac{l(l+1)}{n^2}, \quad (25.50)$$

благодаря чему к числу «проникающих» орбит для тяжелых ядер следует постепенно отнести не только орбиты с $l=0$, но и с большими значениями l .

Это сказывается на поправках δ к спектрам щелочных металлов, значения которых приведены в таблице 25.2.

Таблица 25.2

Поправка δ к спектрам щелочных металлов ¹⁾

Z	Элемент	δ_s	δ_p	δ_d	δ_f
1	H	0,000	0,000	0,000	0,000
3	Li	0,412*	0,041	0,002	0,000
11	Na	1,373*	0,883*	0,010	0,001
19	K	2,230*	1,776*	0,146*	0,007
37	Rb	3,195*	2,711*	1,233*	0,012
55	Cs	4,131*	3,649*	2,448*	0,022

¹⁾ См. В. Н. Кондратьев, Структура атомов и молекул, М, 1959, стр. 181. Звездочкой отмечены значения δ для «проникающих» орбит.

Из формулы (25.49), а также из таблицы 25.2 следует, что при заданном n наиболее сильный сдвиг вниз (т. е. в сторону уменьшения энергии) благодаря размазанности электронов остова по конечному объему испытывают состояния с более низким l , т. е. наибольший сдвиг будет у s -термов¹⁾.

Только у атома водорода ни одна из орбит не является «проникающей». У атома Li ($Z=3$), т. е. у следующего за водородом элемента первой группы, «проникающей» орбитой является лишь внешняя s -орбита.

Далее, у следующего щелочного металла, а именно атома Na ($Z=11$), «проникающими» оказываются s - и p -орбиты и т. д.

д. Основные серии

Как известно, энергетические уровни атома водорода без учета релятивистских поправок определяются соотношением:

$$- \frac{E_{nl}}{\hbar} = \frac{R}{n^2}. \quad (25.51)$$

Отсюда для спектральных термов находим значения:

$$\begin{aligned} (1s) &= \frac{R}{1^2} = R, \\ (2s) &= (2p) = \frac{R}{2^2} = \frac{R}{4}, \\ (3s) &= (3p) = (3d) = \frac{R}{3^2} = \frac{R}{9}, \end{aligned} \quad (25.52)$$

т. е. в атоме H состояния являются вырожденными не только по m , но и по l . Схема энергетических уровней в атоме водорода изображена на фиг. 25.4.

В случае атома Li энергетические уровни K -оболочки ($n=1$) заполнены (см. фиг. 25.2), и поэтому внешней оболочкой является L -оболочка. Как видно из таблицы 25.2, наиболее сильное влияние K -оболочка будет оказывать на s -термы, причем для соответствующих термов будем иметь:

$$(ns) = \frac{R}{(n - 0,412)^2} = \frac{R}{(n - 1 + 0,588)^2}.$$

Этот сдвиг оказался настолько большим, что трудно было экспериментально определить, к какому состоянию n или $n-1$ он относится. Поэтому, чтобы обозначение термов напоминало

¹⁾ Наибольший сдвиг для s -термов был получен также в § 21 при учете конечных размеров ядра. Однако поскольку там был размазан положительный (а не отрицательный) заряд, то эти термы сдвигались не вниз, как здесь, а вверх.

обозначение термов атома водорода, спектроскописты первоначально относили его к состоянию $n - 1$ ¹⁾:

$$(ns) = (n^*s) = \frac{R}{(n - \delta_s)^2} = \frac{R}{(n^* + s)^2}, \quad (25.52a)$$

где $n^* = n - 1$, $s = 1 - \delta_s = 0,588$. Для отличия первоначального обозначения этого терма (n^*s) от истинного (ns) мы в первом случае будем ставить звездочку.

Сдвиг других термов атома лития ($l = 1, 2$) по сравнению с соответствующими термами атома водорода будет ничтожным:

$$(np) = (n^*p) = \frac{R}{(n + p)^2},$$

$$(nd) = (n^*d) = \frac{R}{(n + d)^2},$$

где

$$p = -\delta_p = -0,041,$$

$$d = -\delta_d = -0,002$$

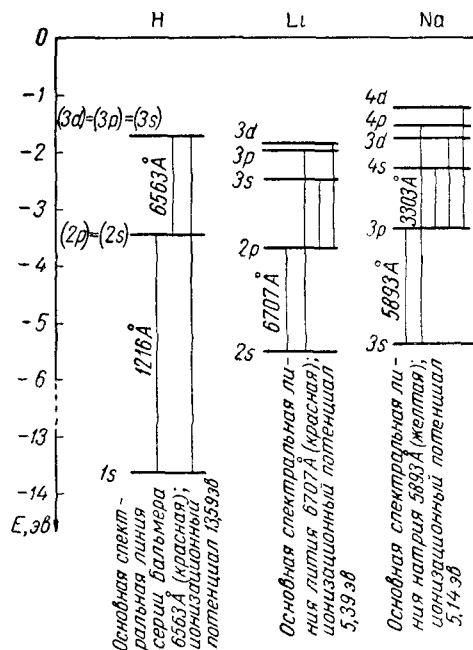
и принадлежность их к той или иной оболочке решается однозначно.

Таким образом, в старых обозначениях в атоме Li термы p , d и т. д. помещались в тех оболочках, которые были найдены затем для них теоретически ($n^* = n$), а оболочка для s -терма была понижена по сравнению с теоретической на единицу ($n^* = n - 1$) (см. фиг. 25.4).

В случае следующего щелочного металла Na ($Z = 11$) внутренними (заполненными) оболочками являются K - и L -оболочки (см. фиг. 25.2).

Как видно из таблицы 25.2, для Na внутренние оболочки оказывают сильное влияние не только на s -, но и на p -термы,

¹⁾ Если для лития главное квантовое число n принимает значения $n = 2, 3, 4$ (терм $n = 1$ занят двумя электронами и образует внутреннюю оболочку), то квантовое число n^* принимает значения $n^* = 1, 2, 3, \dots$



Фиг. 25.4. Схема энергетических уровней одновалентных атомов.

для которых первоначально были введены другие обозначения квантовых чисел по сравнению с теоретическими. Действительно, в этом случае для s -термов:

$$(ns) = (n^*s) = \frac{R}{(n-1,373)^2} = \frac{R}{(n^*+0,627)^2}, \quad (25.53)$$

где $n^* = n - 2$, а $s = -\delta_s + 2 = 0,627$, т. е. первоначально спектроскописты фактически уменьшали для s -терма натрия значения главного квантового числа на две единицы¹⁾.

Для p -термов будем иметь:

$$(np) = (n^*p) = \frac{R}{(n-0,883)^2} = \frac{R}{(n^*+p)^2}, \quad (25.54)$$

где $n^* = n - 1$, $p = 1 - \delta_p = 0,117$, т. е. главное квантовое число для p -термов уменьшается на единицу. Состояния d , f и т. д., для которых указанные поправки будут ничтожны, оставались в тех же оболочках, которые впоследствии были найдены теоретически. Схема уровней Na изображена также на фиг. 25.4.

В спектрах щелочных металлов известны следующие серии, которые обозначаются различными буквами, входящими в переменном терме:

1. Главная серия. Переменным термом является p -терм (np — главный). Для этой серии можно записать:

$$\omega = (1^*s) - (n^*p),$$

что означает

$$\begin{aligned} &\text{для H:}(1s) - (np), \text{ (серия Лаймана)} \\ &\text{для Li:}(2s) - (np), \\ &\text{для Na:}(3s) - (np). \end{aligned} \quad (25.55)$$

2. Вторая побочная (или резкая) серия. Переменным термом является s -терм ($sharp$ — резкий);

$$\omega = (2^*p) - (n^*s),$$

что означает

$$\begin{aligned} &\text{для H:}(2p) - (ns), \text{ (серия Бальмера)} \\ &\text{для Li:}(2p) - (ns), \\ &\text{для Na:}(3p) - (ns). \end{aligned} \quad (25.56)$$

3. Первая побочная (или диффузная) серия. Переменным термом является d -терм ($diffuse$ — размытый);

$$\omega = (2^*p) - (n^*d). \quad (25.57)$$

4. Фундаментальная серия:

$$\omega = (3^*d) - (n^*f). \quad (25.58)$$

Переменным является f -терм ($fundamental$).

¹⁾ В настоящее время спектроскописты также перешли на обозначения термов, следующие из теоретических расчетов, что и изображено на фиг. 25.4.

Эти серии приведены с учетом правила отбора, согласно которому:

$$\Delta l = \pm 1.$$

Названия этих серий отчасти отражают характер их мультиплетной структуры.

е. Мультиплетная структура спектральных линий

Как и в атоме водорода, мультиплетная структура спектральных линий щелочных металлов объясняется влиянием спиновых и релятивистских эффектов.

Чтобы найти расщепление термов, воспользуемся формулой, учитывающей релятивистские и спин-орбитальные поправки для водородоподобного атома [см. (20.18)]:

$$-\frac{\Delta E_{nlj}}{\hbar} = \frac{RZ^4\alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right), \quad (25.59)$$

где $\alpha = e_0^2/\hbar c = \frac{1}{137}$ — постоянная тонкой структуры.

В щелочных металлах действие электронов внутренних оболочек можно учесть, заменив, например, Z на некоторое эффективное значение $Z_{\text{эфф.}} < Z$:

$$-\frac{\Delta E_{nlj}}{\hbar} = \frac{R\alpha^2}{n^4} Z_{\text{эфф.}}^4 \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right). \quad (25.60)$$

Для «непроникающих» орбит, очевидно, можно положить $Z_{\text{эфф.}} = 1$, так как для них все $Z - 1$ электронов экранируют положительный заряд ядра. Для проникающих орбит $Z_{\text{эфф.}}$ лучше всего подобрать из сравнения с экспериментом.

Поскольку внутреннее квантовое число j принимает значения:

$$j = \frac{1}{2} \quad \text{при } l = 0$$

и

$$j = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{при } l \neq 0,$$

то отсюда можно заключить, что все спектральные термы щелочных металлов должны быть дублетными, кроме s -терма, который вообще не расщепляется.

Чтобы найти величину расщепления, вычислим значение спектральных термов для двух случаев. Во-первых, когда спин и орбитальный момент параллельны друг другу:

$$-\frac{\Delta E_{j=l+1/2}}{\hbar} = \frac{R\alpha^2 Z_{\text{эфф.}}^4}{n^4} \left(\frac{n}{l+1} - \frac{3}{4} \right) \quad (25.61)$$

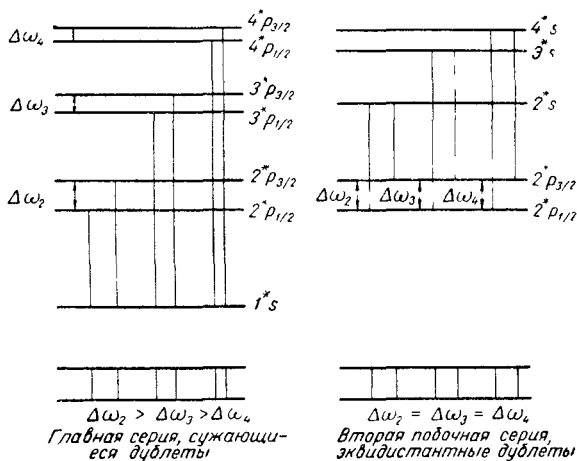
и, во-вторых, когда они антипараллельны:

$$-\frac{\Delta E_{J=l-1/2}}{\hbar} = \frac{R\alpha^2 Z_{\text{эфф.}}^4}{n^4} \left(\frac{n}{l} - \frac{3}{4} \right). \quad (25.62)$$

Отсюда для расщепления термов, равного разности выражений (25.62) и (25.61), получаем¹⁾:

$$\Delta\omega = \frac{R\alpha^2 Z_{\text{эфф.}}^4}{n^3 l(l+1)}. \quad (25.63)$$

Применим эту формулу для объяснения дублетного расщепления



Фиг. 25.5. Спектры щелочных металлов.

главной серии, т. е. переходов с p -термов. В этом случае, полагая $l=1$, находим:

$$\Delta\omega_n = \frac{R\alpha^2 Z_{\text{эфф.}}^4}{2n^3}. \quad (25.64)$$

Отсюда видно, что расщепление будет убывать обратно пропорционально кубу главного квантового числа n , т. е. спектральные линии главной серии будут представлять собой сужающиеся дублеты (см. фиг. 25.5).

¹⁾ Были предложены также и несколько другие формулы для дублетного расщепления. Например, Ланде на основе квазиклассической картины проникающих орбит предложил формулу не с одним, а с двумя эмпирическими параметрами. Ее можно получить, заменяя в (25.63) n на $n_{\text{эфф.}} = n - \delta$ и $Z_{\text{эфф.}}^4$ на $Z_a^2 Z_i^2$, где Z_a — полный заряд иона, Z_i — эффективный заряд ядра во внутренней области [см. формулу (25.43)], куда проникает орбита. За подробностями мы отсылаем читателя к специальной литературе (см., например, Е. Кондон и Г. Шортли, Теория атомных спектров, ИЛ, Москва, 1949, стр. 146, а также цитированную выше монографию В. Н. Кондратьева, стр. 215–216).

При исследовании второй побочной серии дублетным уровнем является начальный, а конечный (с переменным значком s) — одиночным (см. фиг. 25.5).

Тогда расстояние между дублетами во второй побочной серии будет постоянным (эквидистантные дублеты):

$$\begin{aligned} \Delta\omega_2 = \Delta\omega_3 = \dots = \Delta\omega_n = \\ = \frac{R\alpha^2 Z_{\text{эфф}}^4}{16}. \end{aligned}$$

В частности, для спектра Li будем иметь $Z_{\text{эфф}} = 1$, а $n^* = 2$ (p -орбита является «непроницающей»), так что это постоянное расщепление будет равно:

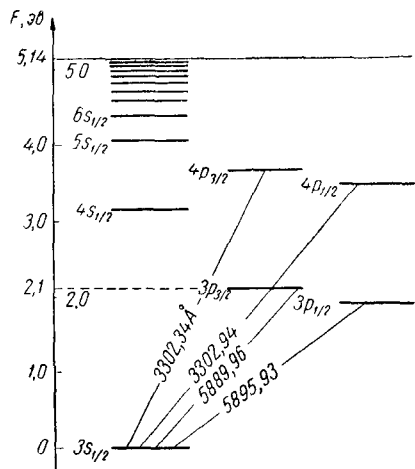
$$\Delta\omega_2 = \frac{R\alpha^2}{16}.$$

Схема мультиплетной структуры главной и второй побочной серии натрия ($Z = 11$) изображена на фиг. 25.6.

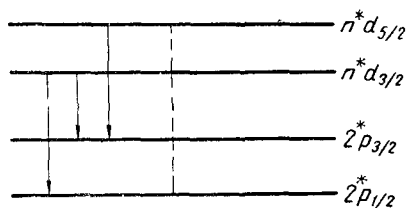
Для первой побочной (диффузной) серии такого яркого закона для расщепления спектральных линий нет. Каждая линия будет расщеплена при этом на три, а не на четыре (см. фиг. 25.7), так как в этом случае наряду с правилом отбора $\Delta l = \pm 1$ следует учесть также правила отбора для внутреннего квантового числа:

$$\Delta j = 0, \pm 1.$$

Для фундаментальной серии мы также будем иметь расщепление на три компонента.



Фиг. 25.6. Схема спектральных термов атома натрия с учетом тонкой структуры.



Фиг. 25.7. Расщепление первой побочной серии.

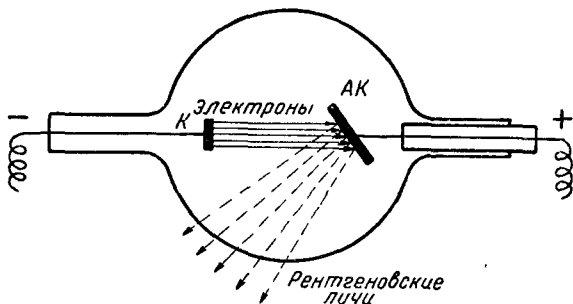
Сплошной стрелкой показаны разрешенные переходы, $\Delta j = 0, \pm 1$; пунктирной линией — запрещенный переход $\Delta j = 2$.

• Мультиплетное расщепление спектральных линий одновалентных атомов может быть объяснено только с учетом спиновых свойств электронов, поскольку, как мы не раз подчеркивали, только полуцелые квантовые числа, которые характеризуют спин, могут привести (так же как и в опытах Штерна и Герлаха) к дублетному расщеплению термов.

§ 26. ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ МЕНДЕЛЕЕВА

а. Рентгеновские спектры атомов

Экспериментальные сведения о строении внутренних оболочек атома, что является весьма существенным при выяснении вопроса о их заполнении электронами, были получены при изучении рентгеновских спектров. Напомним, что рентгеновские лучи возникают при бомбардировке пучком быстрых электронов антикатада электронной трубки (см. фиг. 26.1).



Фиг. 26.1. Схема рентгеновской трубки:

K — катод; AK — антикатод, с которым соединен также анод, что является не обязательным.

Анализ спектров рентгеновского излучения обнаруживает два различных типа спектров: сплошной и линейчатый. Сплошной спектр возникает вследствие торможения электронов при попадании их в антикатод, в связи с чем его называют еще также спектром торможения. Если ускорение тормозящихся электронов равно ω ($\omega < 0$), то, согласно классической электродинамике, излучаемая ими в единицу времени энергия должна определяться формулой:

$$-\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{2}{3} \frac{e_0^2 \omega^2}{c^3}.$$

Характерной особенностью спектра торможения является то, что он обладает коротковолновой границей $\lambda_{\text{мин.}}$, которая уменьшается с увеличением разности потенциалов между катодом и анодом. Эта коротковолновая граница может быть найдена из закона сохранения энергии:

$$V = \hbar\omega + \frac{m_0 v^2}{2},$$

где $V = e_0\Phi$ — энергия электрона до столкновения с антикатодом, Φ — разность потенциалов между анодом и катодом, $\hbar\omega$ — энер-

гия излучаемого тормозного кванта, а $\frac{m_0 v^2}{2}$ — кинетическая энергия электрона после столкновения с антикатодом.

Вводя вместо частоты ω длину волны $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$, находим, что

$$\lambda = \frac{ch}{V - \frac{1}{2} m_0 v^2}.$$

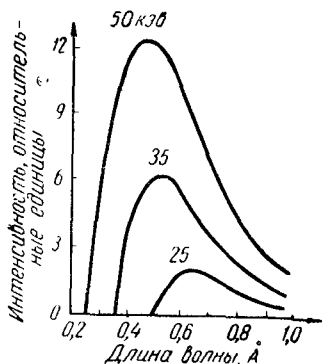
Из этой формулы видно, что λ может изменяться в пределах от $\lambda = \infty$, когда электрон при соударении с антикатодом не теряет энергии ($\frac{1}{2} m_0 v^2 = V$), до некоторого минимального значения:

$$\lambda_{\text{мин.}} = \frac{ch}{V}, \quad (26.1)$$

когда, наоборот, при соударении с антикатодом электрон теряет всю свою энергию ($\frac{m_0 v^2}{2} = 0$).

График зависимости интенсивности излучения от λ изображен на фиг. 26.2 для трех значений энергии первичных электронов: 25, 35 и 50 кэВ. Из этого графика видно, что с увеличением Φ в согласии с формулой (26.1) уменьшается длина волны $\lambda_{\text{мин.}}$, соответствующая коротковолновой границе.

Фиг. 26.2. Коротковолновая граница сплошного рентгеновского спектра.



Соотношение (26.1) с успехом было использовано для определения более точного значения постоянной Планка h , чем с помощью закона Вина и Стефана Больцмана (см. § 1).

Когда энергия падающих на антикатод электронов превосходит некоторую критическую величину, значение которой определяется материалом антикатада, то на фоне сплошного возникает линейчатый спектр, который называется также характеристическим. Последний характеризует вещество антикатада (точнее, строение внутренних оболочек материала, из которого он изготовлен) в той же степени, в какой оптический спектр характеризует строение внешних оболочек атомов. Например, в случае родиевого антикатада при энергии электронов 23,2 кэВ спектр рентгеновского излучения является еще сплошным, а при энергии 31,8 кэВ на него начинает накладываться линейчатый спектр.

Свойства линейчатого спектра остаются неизменными для всех химических соединений данного вещества. Здесь проявляется отличие характеристического спектра от оптического спектра, поскольку последний зависит от того, находится вещество в атом-

ном или молекулярном состоянии (например, оптические спектры атома O , молекулы O_2 или H_2O совершенно различны), что становится понятным, если вспомнить, что в химических соединениях участвуют только электроны внешних орбит.

Спектральные линии характеристического излучения, так же как и оптические линии атомов, образуют закономерные последовательности, или серии. Эти серии обозначаются латинскими буквами K , L , M , N и т. д., из которых самой коротковолновой является K -серия, затем идет L -серия и т. д.

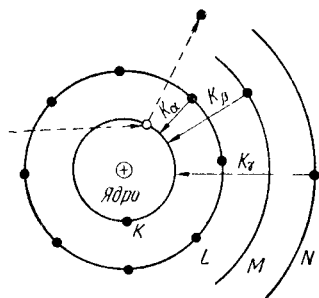
б. Характеристические спектры атомов и строение их внутренних оболочек

Механизм возникновения характеристического (рентгеновского) спектра, зависящего от материала антикатада, был объяснен Косселем (1914). Падающий на антикатод электрон, выбивая электрон, например из K -оболочки атома антикатада, оставляет в K -оболочке одно вакантное место (см. фиг. 26.3). На это вакантное место может перейти электрон с оболочек L , M , N , ..., образуя тем самым рентгеновские линии, обозначаемые K_α , K_β , K_γ ,

При таком переходе электронов с одной внутренней оболочки на другую и возникает характеристический спектр. Поскольку энергия связи электронов на внутренних орбитах гораздо больше энергии связи внешних электронов, для возбуждения характеристического рентгеновского спектра следует использовать электроны гораздо больших энергий (несколько десятков $kэ$), чем для возбуждения оптических спектров (несколько десятков $э$).

При построении теории сложного атома с учетом взаимодействия атомных электронов возможны два подхода. В первом за основной потенциал можно взять потенциал ядра, полностью экранированного внутренними электронами. Этот подход был нами использован при построении теории оптических спектров щелочных металлов. При этом основной потенциал определялся зарядом ядра Ze_0 и зарядом электронов внутренних орбит: $-(Z-1)e_0$. Суммарный потенциал в этом случае равнялся:

$$\Phi = \frac{e_0}{r} (Z - (Z - 1)) = \frac{e_0}{r} \quad (26.2)$$



Фиг. 26.3. Схема возникновения характеристического спектра по Косселю;
● — электроны.

Пунктирной линией показан процесс выбивания электрона с K -оболочки.

Затем в качестве возмущенного потенциала выбирался дополнительный потенциал, учитывающий поляризацию и объемное распределение электронного облака. Этот путь целесообразно использовать для описания движения внешних электронов, например, в атомах щелочных металлов.

Наоборот, при исследовании движения электронов внутренних оболочек за основу удобно взять потенциал ядра:

$$\Phi = \frac{Ze_0}{r}, \quad (26.3)$$

а дополнительный потенциал, создаваемый электронной оболочкой, рассматривать как поправку. В этом случае учет электронной оболочки приводит к экранировке (эффективному уменьшению) заряда ядра Ze_0 на величину $S_n e_0$, благодаря чему общий потенциал становится равным:

$$\Phi = \frac{(Z - S_n) e_0}{r}. \quad (26.4)$$

Например, при исследовании гелиеподобных атомов было показано, что учет взаимодействия электронов K -оболочки сводится в конечном счете к уменьшению эффективного заряда ядра [см. (23.55)], который формально можно положить равным: $Z' \rightarrow Z - \frac{5}{16}$, т. е. величина S_n в этом случае равнялась $\frac{5}{16}$.

Поправка на экранирование S_n должна быть функцией не только n , но и l . С увеличением n эта поправка возрастает, так как следует учитывать все большее число электронов, экранирующих ядро. С увеличением же l она также должна (но не так сильно) возрастать, так как орбиты будут становиться все менее «проникающими», и поэтому эффективный заряд должен в среднем несколько убывать. В первом приближении можно считать, что поправка на экранирование не зависит от l .

Потенциал (26.4) дает для спектральных термов формулу, полученную для водородоподобного атома, в которой величину Z следует заменить на $Z - S_n$:

$$E_n = - \frac{(Z - S_n)^2 R \hbar}{n^2}. \quad (26.5)$$

Из последней формулы для частоты линии K_α находим выражение:

$$\omega_{K_\alpha} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = R \left[\frac{(Z - S_1)^2}{1^2} - \frac{(Z - S_2)^2}{2^2} \right]. \quad (26.6)$$

Отсюда видно, что частота линии рентгеновского спектра монотонно возрастает с увеличением порядкового номера Z . Этот закон впервые был открыт из анализа эмпирических данных

Мозли (1914), который записал его в несколько другом виде:

$$\omega_{K\alpha} = R(Z - S)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right). \quad (26.7)$$

Эта формула может быть получена из (26.6), если в последней положить, что поправка на экранирование для K - и L -оболочки одна и та же, т. е. $S_1 = S_2 = S$.

Однако мы знаем, что это не совсем так, и поэтому при исследовании рентгеновских спектров, как и при исследовании оптических спектров, следует сделать пересчет частот на соответствующие термы, которые, согласно (26.5), можно представить в виде:

$$\sqrt{\frac{T_n}{R}} = \sqrt{-\frac{E_n}{Rh}} = \frac{Z - S_n}{n}. \quad (26.8)$$

Последняя зависимость и получила название закона Мозли; она, как правило, исследуется графически. Придавая главному квантовому числу n различные значения, будем иметь (см. фиг. 26.4):

для K -термов ($n=1$)

$$\sqrt{\frac{T_1}{R}} = \frac{Z - S_1}{1}, \quad (26.9a)$$

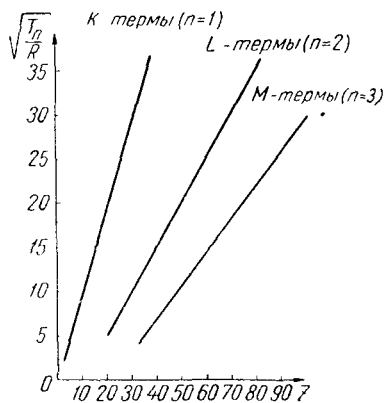
для L -термов ($n=2$)

$$\sqrt{\frac{T_2}{R}} = \frac{Z - S_2}{2}, \quad (26.9б)$$

для M -термов ($n=3$)

$$\sqrt{\frac{T_3}{R}} = \frac{Z - S_3}{3}. \quad (26.9в)$$

Исследование экспериментальных кривых $\sqrt{\frac{T_n}{R}} \approx f(Z)$ позволило найти значения поправок на экранирование, которые в среднем оказались равными: $S_1 = 1$, $S_2 = 3,5$, $S_3 = 10,5$ и т. д.¹⁾ Кроме того, было установлено, что рентгеновские спектры изменяются с увеличением Z монотонно и никаких периодических закономерностей не наблюдается. Это представляет собой еще одно отличие их от оптических спектров, где обнаруживается периодичность (см. п. в).



Фиг. 26.4. Диаграмма Мозли.

¹⁾ См. А. Зоммерфельд, Строение атома и спектры, 1, М., 1956, гл. 4 и 5.

Следовательно, периодические свойства присущи фактически лишь валентным, а не внутренним электронам. Изучение рентгеновских спектров позволило окончательно доказать, что порядковый номер элемента Z , введенный Менделеевым, определяется зарядом ядра, а не его массой. Оказалось, что Менделеев правильно разместил элементы $\text{Co} - \text{Ni}$, $\text{Ag} - \text{K}$, $\text{Te} - \text{J}$ в порядке, противоречащем возрастанию их атомных весов.

Точно так же в свое время были сомнения в правильности порядка размещения редких земель (элементов с $Z = 58 - 71$), химические свойства которых очень сходны друг с другом. Закон Мозли помог подтвердить правильность их расположения в периодической системе. Кроме того, изучение рентгеновских спектров позволило обнаружить заполнение соответствующих внутренних оболочек у ферромагнитных металлов и лантанидов, где кривые Мозли претерпевали некоторый излом.

в. Мультиплетная структура рентгеновских спектров

Как известно, рентгеновские термы определяются прежде всего квантовым состоянием с квантовыми числами n , l и j , из которого удален электрон и в котором, как говорят, образовалась «дырка».

Для внешних электронов, как правило, реализуется LS -связь, тогда как для внутренних электронов (не слишком легких атомов) — jj -связь. В случае самых тяжелых атомов jj -связь начинает играть существенную роль также и для внешних электронов.

Благодаря относительной близости внутренних электронов к ядру они находятся преимущественно в поле последнего, и поэтому их энергетические состояния близки к состояниям «водородоподобного атома», т. е. в основу теории можно положить следующую формулу:

$$E_{nl} = - \frac{RhZ^2}{n^2} - \frac{RhZ^4}{n^4} \alpha^2 \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right), \quad (26.10)$$

где постоянная тонкой структуры:

$$\alpha = \frac{c_0^2}{ch} \approx \frac{1}{137}.$$

Чтобы учесть влияние экранировки соседних электронов, мы должны в последней формуле сделать замену: $Z \rightarrow Z - S_{nl}$, т. е. в данном приближении считать, что постоянная экранирования зависит не только от n , но и от l . Тогда для рентгеновских спектров будем иметь:

$$\frac{T_{nlj}}{R} = - \frac{E_{nlj}}{R\hbar} = \frac{(Z - S_{nl})^2}{n^2} + \frac{(Z - S_{nl})^4 \alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right).$$

Отсюда, извлекая приближенно квадратный корень, находим обобщение закона Мозли на случай учета релятивистских и спиновых эффектов:

$$\sqrt{\frac{T_{nlj}}{R}} \approx \frac{Z - S_{nl}}{n} + \frac{1}{2} \frac{(Z - S_{nl})^2 \alpha^2}{n^3} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right). \quad (26.11)$$

Из последней формулы видно, что в кривых Мозли наряду с линейным членом, пропорциональным Z , появляется член $\sim Z^3$, действие которого должно стать заметным лишь при больших значениях Z . Этот вывод полностью согласуется с экспериментальными данными.

Кроме того, формула (26.11) позволяет объяснить мультиплетную структуру рентгеновских термов. Прежде всего заметим, что в K -термах нет расщепления, так как возможно лишь одно состояние $1s_{1/2}$: $n=1$, $l=0$, $j=\frac{1}{2}$.

Для L -термов имеем три компоненты: $L_I \sim 2s_{1/2}$, $n=2$, $l=0$, $j=\frac{1}{2}$, $L_{II} \sim 2p_{1/2}$, $n=2$, $l=1$, $j=\frac{1}{2}$ и $L_{III} \sim 2p_{3/2}$ ($n=2$, $l=1$, $j=\frac{3}{2}$).

Чтобы формула (26.11) согласовалась с экспериментальными данными для поправок на экранирование, следует положить:

$$S_{2s} = 3, \quad S_{2p} = 4.$$

Тогда для термов получаем следующие формулы:

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{T_{2s_{1/2}}}{R}} &= \frac{Z-3}{2} + \frac{\alpha^2}{16} (Z-3)^2 \frac{5}{4} \quad (L_I\text{-термы}), \\ \sqrt{\frac{T_{2p_{1/2}}}{R}} &= \frac{Z-4}{2} + \frac{\alpha^2}{16} (Z-4)^2 \frac{5}{4} \quad (L_{II}\text{-термы}), \\ \sqrt{\frac{T_{2p_{3/2}}}{R}} &= \frac{Z-4}{2} + \frac{\alpha^2}{16} (Z-4)^2 \frac{1}{4} \quad (L_{III}\text{-термы}), \end{aligned} \quad (26.12)$$

которые представлены графически на фиг. 26.5.

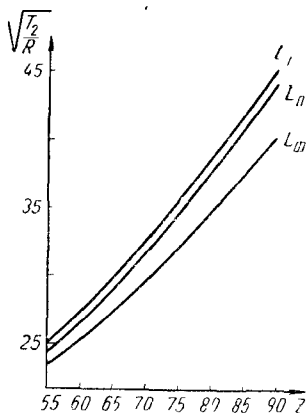
Точно так же легко показать, что рентгеновские M -термы будут содержать пять компонент:

$$M_I(3s_{1/2}), \quad M_{II}(3p_{1/2}), \\ M_{III}(3p_{3/2}), \quad M_{IV}(3d_{3/2}), \quad M_V(3d_{5/2}),$$

причем постоянные экранирования будут соответственно равны: $S_{3s} = 8,5$, $S_{3p} = 10$, $S_{3d} = 13$. Для N -термов мы будем иметь семь компонент и т. д.

Параллельные дублеты L_1 и L_{II} [см. (26.12)], связанные с экранировкой ядра электронами, получили название *иррегулярных дублетов*, расходящиеся же L_1 и L_{III} — *регулярных дублетов*.

Эта исторически сложившаяся терминология связана с первым этапом развития теории мультиплетного расщепления рентгеновских спектров. В связи с этим напомним, что тонкая структура была вначале построена Зоммерфельдом, исходя из релятивистского обобщения теории Бора. Формула Зоммерфельда дала правильное значение для величины расщепления спектрального термина (см. § 2), но не учитывала спиновых свойств. В применении к рентгеновским спектрам эта формула имеет вид:



Фиг. 26.5. Мультиплетная структура рентгеновских L -термов.

$$\sqrt{\frac{T_{nn\varphi}}{R}} = \frac{(Z - S_{nn\varphi})}{n} + \frac{1}{2} \frac{(Z - S_{nn\varphi})^3}{n^3} \left(\frac{n}{n_\varphi} - \frac{3}{4} \right) \alpha^2,$$

где $n_\varphi = l + 1$. Применяя эту формулу для исследования L -термов, можно показать, что они должны расщепляться лишь на две компоненты, которые в наших обозначениях соответствуют L_1 и L_{III} , т. е. расходящемуся дублету. Таким образом, только этот дублет получил свое объяснение в релятивистской теории Зоммерфельда. Он и был назван регулярным. Дублет L_1 и L_{II} , долгое время остававшийся теоретически необъяснимым, получил название иррегулярного.

После появления теории Дирака нашли свое объяснение не только регулярные, но и иррегулярные дублеты. Поэтому такая терминология для дублетов расщепления наряду с терминологией «нормальный и аномальный эффект Зеемана» носит исторический отпечаток; правильная теория мультиплетной структуры рентгеновских спектров могла быть построена (так же как и теория аномального эффекта Зеемана) только с учетом спиновых свойств электронов, теория которых была создана значительно позже.

г. Открытие периодического закона Менделеева

Менделеев расположил известные в то время элементы в порядке возрастания атомного веса и обнаружил, что через определенное число элементов химические свойства элементов повто-

ряются. Например, натрий, калий и т. д. (щелочные металлы) повторяют химические свойства лития; хлор, бром, йод и т. д. (группа галогенов) повторяют химические свойства фтора.

Менделеев приписал каждому элементу порядковый номер, определяющий его положение в периодической системе. Хотя возрастание Z идет обычно параллельно возрастанию массы атома элемента, имеется, как мы уже указывали, ряд исключений: (${}_{27}\text{Co} - {}_{28}\text{Ni}$), (${}_{18}\text{Ag} - {}_{19}\text{K}$), (${}_{32}\text{Te} - {}_{33}\text{J}$), в которых элемент с большим атомным весом предшествует более легкому элементу. Кроме того, в настоящее время открыто множество изотопов, т. е. разновидностей атомов, обладающих одинаковым Z , но разной массой (например, ${}_{1}\text{H}^1$, ${}_{1}\text{H}^2$, ${}_{1}\text{H}^3$).

Сам Менделеев не раз подчеркивал, что будущее не грозит периодическому закону разрушением, а обещает только надстройку и дальнейшее развитие.

В свете последних открытий в области строения атома и ядра периодический закон приобрел особенно важное значение.

В частности, изучение рентгеновских спектров и в особенности эксперименты по рассеянию альфа-частиц на атомах окончательно доказали, что порядковый номер Z характеризует заряд ядра, а вместе с тем и количество электронов в нейтральном атоме.

Во время открытия периодического закона (1869 г.) было известно 63 элемента. Менделеев предсказал существование еще более 10 элементов, причем для трех впоследствии открытых элементов были предсказаны даже их основные химические и физические свойства: скандий (${}_{21}\text{Sc}$), галлий (${}_{31}\text{Ga}$) и германий (${}_{32}\text{Ge}$). В конце XIX в. были открыты благородные газы. Во времена Менделеева были известны только три элемента из группы редких земель (лантанидов): церий, дидим (смесь празеодима и неодима) и эрбий. В настоящее время изучены свойства всех 14 редкоземельных элементов.

К 1937 г. были известны 92 элемента, за исключением четырех элементов, которые, как потом выяснилось, оказались радиоактивными и практически не встречаются в природе. Эти четыре элемента были получены в ядерных реакциях в лабораторных условиях.

В 1937 г. Э. Сегре путем бомбардировки молибдена дейтронами получил элемент с $Z=43$, названный технецием. Период полураспада наиболее устойчивого изотопа ${}_{43}\text{Tc}^{97}$ равен $2,6 \cdot 10^6$ лет.

Первое сообщение о получении изотопа последнего редкоземельного элемента с $Z=61$ в результате бомбардировки неодима дейтронами было сделано в 1938 г. Однако в сравнительно большом количестве (1,5 г) он был получен Д. Маринским и

Л. Гленденином (назвавшими его прометием) лишь в 1947 г. при хроматографическом разделении фракций редкоземельных элементов, образующихся в результате деления U^{235} тепловыми нейтронами. Период полураспада наиболее устойчивого изотопа ${}_{61}\text{Pm}^{145}$ составляет около 20 лет.

В 1940 г. Э. Сегре открыл элемент с $Z=85$, названный им астатином, который получается при облучении висмута альфа-частицами. Период полураспада наиболее устойчивого изотопа ${}_{85}\text{At}^{210}$ составляет всего 8,3 часа.

Короткоживущий элемент с $Z=87$, названный францием, был открыт в 1939 г. французом М. Пере. Он может быть получен в результате альфа-распада ${}_{89}\text{Ac}^{227}$. Период полураспада наиболее устойчивого изотопа ${}_{87}\text{Fr}^{223}$ равен 22 минутам.

Наконец, следует подчеркнуть, что с развитием ядерной физики оказалось возможным получить трансурановые элементы, начиная с нептуния ($Z=93$) и кончая лоуренсием ($Z=103$)¹⁾.

Таким образом, периодическая система на сегодняшний день содержит без каких-либо пропусков 103 элемента.

д. Заполнение электронных оболочек

Заполнение уровней электронных оболочек согласно квантовой механике происходит в соответствии со следующими правилами.

а) В силу принципа Паули в каждом квантовом состоянии не может быть более одного электрона; поэтому максимальное число электронов с данным l равно $2(2l+1)$ (см. § 25). Так, в оболочках s , p , d и f может содержаться соответственно не больше 2, 6, 10 и 14 электронов.

б) Электроны стремятся занять более низкие энергетические уровни. Поэтому вначале должны заполняться оболочки с $n=1$, затем с $n=2$, с $n=3$ и т. д.

Такое заполнение имело бы место в так называемой идеальной схеме, когда в атоме с порядковым номером Z действие ядра и оставшихся $Z-1$ электронов определяется потенциалом в предположении, что все эти заряды находятся в центре. Тогда для оставшегося электрона мы получаем вырожденную по l систему уровней атома водорода. Однако, как было показано при исследовании щелочных металлов, распределение электронов в некотором конечном объеме снимает вырождение по l . Термы при фиксированном значении главного квантового числа n , т. е.

¹⁾ Наибольшее число трансурановых элементов было открыто Г. Сиборгом и его учениками. Недавно получено сообщение об открытии элемента 103, который предложено назвать лоуренсий (символ Lw), а также 104 элемента (см. стр. 476).

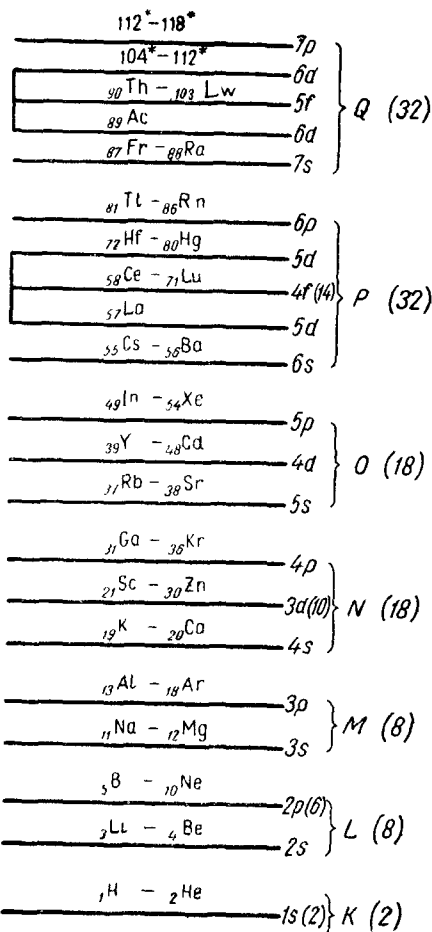
в определенной оболочке, располагаются в порядке возрастания l . Поэтому сначала заполняются s -, затем p - и, наконец, d -термы. Более того, подоболочка $4s$ оказывается расположенной ниже подоболочки $3d$ (также $5s$ ниже $4d$), а подоболочка $6s$ ниже не только подоболочки $5d$, но даже ниже подоболочки $4f$ (аналогично $7s$ ниже $5f$).

В итоге оказывается, что внешняя оболочка (для невозбужденных атомов) может состоять только из подоболочек s и p .

Подоболочки d и f могут заполняться, когда они лежат соответственно в первой и во второй внутренних оболочках, если за первую внутреннюю оболочку взять оболочку, расположенную непосредственно вблизи к внешней и т. д.¹⁾

Фиг. 26.6. Схема заполнения электронными энергетическими уровнями в атомах периодической системы элементов Менделеева.

Подоболочки s и p могут лежать во внешней оболочке. Подоболочки d могут лежать, начиная с первой внутренней оболочки. Подоболочки f могут лежать, начиная со второй внутренней оболочки. Первая внутренняя оболочка $3d$ включает ферромагнитные элементы (Fe, Co, Ni). Вторая внутренняя оболочка $4f$ включает лантаниды (редкие земли) ($58\text{Ce} - 71\text{Lu}$). Вторая внутренняя оболочка $5f$ включает актиниды ($90\text{Th} - 103$). Звездочками отмечены атомные номера не открытых еще элементов. В скобках указано максимальное число электронов в заданной оболочке или подоболочке. Элемент с $Z = 86$ (радон Rn) называют иногда также эманацией Em.



¹⁾ Последовательность образования электронных подоболочек наиболее просто можно запомнить исходя из следующего эмпирического правила: заполнение уровней происходит в порядке возрастания суммы главного и орбитального квантовых чисел $n + l$, причем уровни с одинаковым значением этой суммы заполняются, как правило, в порядке возрастания n . Учитывая, что l принимает значения $0, 1, 2, \dots, n - 1$, мы найдем правило заполнения термов в любой оболочке. Например, последовательность заполнения четвертого периода (см. ниже) должна быть:

$$4s (n + l = 4); \quad 3d (n + l = 5); \quad 4p (n + l = 5)$$

или шестого периода:

$$6s (n + l = 6); \quad 4f (n + l = 7); \quad 5d (n + l = 7); \quad 6p (n + l = 7)$$

и т. д. (см. например, В. М. Клечковский, ДАН СССР, **80**, 603, 1951).

Попробуем это обосновать на исследовании конкретных атомов при переходе от одного атома к другому с атомным номером на единицу больше, т. е. когда к атому добавляется один электрон (см. фиг. 26.6).

В пределах 1-го и 2-го периодов системы Менделеева порядок заполнения уровней примерно согласуется со схемой уровней в атоме водорода (т. е. идеальной схеме), причем в оболочках с $n=1, 2$ сначала заполняются уровни s , а затем и p .

Если бы для сложных атомов была применима эта идеальная схема, то можно было бы ожидать, что у калия с $Z=19$ должна начать заполняться подоболочка $3d$.

Однако, согласно таблице, приведенной в § 25 на стр. 452, для калия $\delta_d=0,146$, а $\delta_s=2,23$, а поэтому энергии электронов, находящихся в состояниях $3d$ и $4s$, будут соответственно равны:

$$\begin{aligned} E_{3d} &= -\frac{Rh}{(3-0,146)^2} = -\frac{Rh}{2,854^2}, \\ E_{4s} &= -\frac{Rh}{(4-2,23)^2} = -\frac{Rh}{1,77^2}. \end{aligned} \quad (26.13)$$

Как следует из (26.13), $E_{3d} > E_{4s}$, а поэтому раньше будет заполняться более глубокий уровень $4s$ и лишь затем $3d$. Следовательно, третий период будет содержать так же, как и второй период, только восемь элементов ($_{11}\text{Na} - _{18}\text{Ar}$).

После того как подоболочка $4s$ у Ca ($Z=20$) будет заполнена, можно ожидать, что у скандия ($Z=21$) начнет образовываться $4p$ -подоболочка. Однако изучение спектров показывает, что у последующих элементов ($_{21}\text{Sc} - _{28}\text{Ni}$) заполняется сначала подоболочка $3d$, куда переходят также электроны и из подоболочки $4s$, а затем уже, начиная с $_{29}\text{Cu}$ и кончая $_{30}\text{Zn}$, вновь повторяется заполнение $4s$ -подоболочки, после чего продолжается нормальное заполнение $4p$ -подоболочки. Таким образом, 4-й период содержит 18 элементов и состоит из подоболочек $4s$, $3d$, $4p$ (см. фиг. 26.6).

Следующий, пятый период целиком повторяет четвертый период ($_{37}\text{Rb} - _{54}\text{Xe}$), т. е. содержит также 18 элементов (заполняются подоболочки $5s$, $4d$, $5p$).

Шестой период содержит 32 элемента ($_{55}\text{Cs} - _{86}\text{Rn}$), так как наряду с внешней оболочкой $6s$, $6p$ (8 состояний) будет заполняться первая внутренняя подоболочка $5d$ (10 электронов) и вторая внутренняя подоболочка $4f$ (14 электронов группы лантанидов или редких земель).

Точно так же седьмой период должен был бы целиком повторить шестой период, т. е. содержать 32 элемента (подоболочки $7s$, $5f$, $6d$, $7p$). Однако к настоящему времени открыто лишь 17 элементов этого периода. Так называемые актиниды, у которых

происходит заполнение второй внутренней подболочки $5f$ ($_{90}\text{Th} -$
 $_{102}\text{Lw}$), должны повторить свойства лантанидов.

Итак, первый период содержит всего 2 элемента, второй и третий по 8, четвертый и пятый по 18, а шестой и седьмой по 32, причем седьмой период является незаконченным. Порядок заполнения термов в атомах изображен на фиг. 26.6.

е. Применение метода Томаса — Ферми к теории периодической системы элементов

Попробуем теперь более строго обосновать порядок заполнения электронных подболочек.

Ферми в своей первой работе, посвященной статистической теории атома (1928), применил предложенный им метод, известный теперь как метод Томаса—Ферми (см. § 25), для объяснения периодической системы элементов. В частности, он получил минимальные значения Z , при которых в атомах возможно заполнение s -, p -, d - и f -состояний.

Согласно Ферми, эти значения Z могут быть найдены, исходя из следующих квазиклассических представлений.

• Как известно, в классической теории момент количества движения частицы L связан с импульсом p соотношением:

$$L = [rp].$$

Отсюда следует, что

$$p_n^2 = \frac{L^2}{r^2},$$

где p_n — проекция импульса на направление, перпендикулярное радиус-вектору r .

Очевидно, что квадрат проекции импульса p_n^2 не может превосходить значения квадрата максимального импульса, который мы обозначим через P . Поэтому при заданном P и r возможны такие значения момента количества движения L , которые удовлетворяют неравенству:

$$P^2 > \frac{L^2}{r^2}. \quad (26.14)$$

Как было показано в § 13, при квазиклассическом рассмотрении проблемы атома, квадрат момента количества движения следует полагать равным [см. (13.62)]:

$$L^2 = \hbar^2 \left(l + \frac{1}{2} \right)^2; \quad (26.15)$$

последняя формула практически является некоторым компромиссом между боровской $L_B^2 = \hbar^2 (l + 1)^2$ и квантовомеханической $L^2 = \hbar^2 l(l + 1)$ формулами для квадрата момента количества движения.

Как известно, максимальный импульс P связан с плотностью электронного газа (электронов в атоме) ρ_0 выражением (6.32):

$$P^2 = \hbar^2 (3\pi^2 \rho_0)^{2/3}. \quad (26.16)$$

Плотность электронов ρ_0 может быть найдена из уравнения Томаса—Ферми (см. § 25), которое, как мы уже указывали, решается лишь приближен-

ными или численными способами. Хорошей аппроксимацией ρ_0 , следующей из решения уравнения Томаса—Ферми, является выражение [см. (25.21)]:

$$\rho_0 = \frac{Z\lambda^{3/2}}{16\pi r^{3/2}} e^{-V\lambda r}, \quad (26.17)$$

причем коэффициент λ был найден нами вариационным методом Ритца.

Подставляя указанные значения для P^2 и L^2 в неравенство (26.14), получаем:

$$\left(\frac{3\pi Z}{16}\right)^{2/3} \frac{\lambda}{r} e^{-\frac{2}{3}V\lambda r} > \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{r^2}. \quad (26.18)$$

Вводя новую переменную $\lambda r = x$, будем иметь:

$$e^{-\frac{2}{3}Vx} > \frac{D}{x}, \quad (26.19)$$

где

$$D = \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 \left(\frac{16}{3\pi Z}\right)^{2/3}. \quad (26.20)$$

Из неравенства (26.19) видно, что, как при $x \rightarrow 0$ ($r \rightarrow 0$), так и при $x \rightarrow \infty$, правая часть (26.19) становится больше левой. Поэтому электроны в атоме смогут обладать заданным значением l , если x будет лежать в области $x_1 < x < x_2$, при которых удовлетворяется неравенство (26.19). Здесь x_1 и x_2 — корни уравнения:

$$e^{-\frac{2}{3}Vx} = \frac{D}{x}. \quad (26.21)$$

Условием же появления состояний с заданным значением l является равенство обоих корней:

$$x_1 = x_2.$$

В этом случае мы должны приравнять не только сами функции, но и их производные, т. е. наряду с равенством (26.21) будем иметь:

$$\frac{1}{3\sqrt{x}} e^{-\frac{2}{3}Vx} = \frac{D}{x^2}. \quad (26.22)$$

Эти два соотношения будут удовлетворены при

$$\sqrt{x} = 3,$$

т. е. при

$$D = 9e^{-2}.$$

Подставляя сюда значение для D из (26.20), находим значение Z , при котором впервые появляются электроны с заданным l :

$$Z = \frac{2e^3}{81\pi} (2l+1)^3 = \gamma (2l+1)^3, \quad (26.23)$$

где $e = 2,718 \dots$ — основание натуральных логарифмов, а коэффициент $\gamma = 0,158$.

Если в аналогичном расчете воспользоваться численным решением уравнения Томаса—Ферми, то для коэффициента γ найдем весьма близкое значение:

$$\gamma_{г.-ф.} = 0,155.$$

Здесь мы еще раз убеждаемся, что плотность (26.17) представляет собой хорошую аппроксимацию плотности, следующей из численного решения уравнения Томаса — Ферми.

Подсчитаем с помощью формулы (26.23) значения Z , при которых могут начать заполняться s -, p -, d -, f -состояния.

Результаты вычисления даны в табл. 26.1. Первая строка дает дробные значения Z , вычисленные по формуле (26.23) с $\gamma_{Т.-Ф.} = 0,155$. Числа первого появления, найденные с $\gamma = 0,158$, полученным здесь, практически совпадают с вычисленными для плотности, следующей из уравнения Томаса — Ферми. Во второй строке даны ближайшие со стороны больших значений целые значения Z . В последней строке таблицы приведены эмпирические значения чисел первого появления Z , а также наименование соответствующего элемента.

Таблица 26.1

Числа первого появления уровней с данным l

l	s 0	p 1	d 2	f 3
Теоретическое значение (по Томасу — Ферми)	$Z \left\{ \begin{array}{l} 0,15 \\ 1 \end{array} \right.$	4,2 5	19,4 20	53,2 54
Эмпирическое значение	$Z 1$ (H)	5 (B)	21 (Sc)	58 (Ce)

Из этой таблицы видно, что подобная приближенная теория находится в хорошем согласии с экспериментальными данными. Заметим кстати, что совсем точное совпадение получается, если для коэффициента γ вместо 0,155 взять 0,169.

Хорошо известно, что у легких элементов ($Z = 1, 2, 3, 4$) могут заполняться только s -термы. Заполнение p -термов начинается с бора ($Z = 5$), что полностью совпадает с теоретическими данными. Из таблицы 26.1 видно (несмотря на некоторую грубость статистической модели), что заполнение подоболочки $3d$ не начинается, как можно было ожидать у калия ($Z = 19$), но несколько отодвигается до элемента Sc ($Z = 21$), т. е. пока не будет построена $4s$ -подоболочка. Точно так же модель Томаса — Ферми объясняет некоторую «задержку» в заполнении $4f$ -подоболочки, которая могла бы начать заполняться у Ag ($Z = 47$). Однако в согласии с теорией ее заполнение должно быть отодвинуто и начинается лишь у церия ($Z = 58$), образуя группу лантанидов. Из формулы (26.23) следует, что заполнение $5g$ -подоболочки ($l = 4$) впервые могло бы начаться у элемента с $Z = 124$.

Таким образом, модель Томаса — Ферми дает весьма убедительное объяснение важной детали порядка образования подоболочек в сложных невозбужденных атомах и объясняет отклонения от порядка заполнения уровней в идеальной схеме (типа атома водорода) вследствие «размазанности» электронного облака.

ж. Периодичность свойств элементов

Периодичность свойств элементов, открытая Менделеевым, получает на основе квантовой механики естественное объяснение. Она связана с периодичностью в заполнении внешней оболочки, на которой может быть максимум 8 электронов (s - и p -термы) и которая определяет не только оптические, но и химические (см. § 27) свойства атомов. Поэтому в зависимости от числа электронов на

внешней орбите все элементы делятся на восемь групп (см. периодическую систему элементов Менделеева, помещенную в конце книги).

У элементов первой группы (водород и щелочные металлы) на внешней оболочке имеется один электрон. Это приводит к тому, что оптические термы (за исключением *s*-терма) имеют дублетную структуру, а сами элементы, как будет показано ниже, являются одновалентными. У элементов второй группы — щелочноземельные металлы (бериллий, магний, кальций и т. д.) — имеется два валентных электрона и поэтому спектральные термы их должны быть синглетными и триплетными, а валентность равняться двум. У элементов третьей группы на внешней оболочке находится три электрона, и поэтому максимальное расщепление их оптических термов должно равняться четырем (квартеты), а максимальная валентность — трем.

В 7-й группе галогенов (фтор, хлор и т. д.), наоборот, не хватает до заполнения оболочки одного электрона. Поэтому наряду с максимальной (положительной) валентностью, равной 7, они могут быть в так называемых ионных соединениях одновалентными, т. е. обладать отрицательной валентностью, которая определяется (см. § 27) числом недостающих до полной конфигурации (т. е. до восьми) электронов.

Наконец, в группе инертных газов (неон, аргон, криптон и т. д.) внешняя оболочка полностью заполнена или, точнее, если исходить из того факта, что энергия связи электронов, находящихся на этой оболочке, наибольшая, то правильнее ее отнести к внутренней. Поэтому можно считать, что внешняя оболочка у этих элементов совсем отсутствует, благодаря чему они относятся к нулевой группе. Элементы нулевой группы, если их внешняя оболочка не возбуждена, т. е. она заполнена только *s* и *p* электронами, не должны, как правило, вступать ни в какие химические реакции, и их называют инертными¹⁾.

Однако из этого общего правила (наличие в каждом периоде восьми элементов) имеется ряд исключений. Первое исключение представляет собой водород ($Z=1$) и гелий ($Z=2$), образующие первый период. В этом периоде имеется не восемь элементов, а всего лишь два. Это связано с тем обстоятельством, что *K*-оболочка не включает *p*-состояний. Следовательно, эти элементы обладают до некоторой степени двойственными свойствами.

В самом деле, по числу электронов на внешней оболочке водород, как мы уже отмечали, должен повторять химические и оптические свойства щелочных металлов. Как известно, у тех и других максимальное расщепление спектральных термов рав-

¹⁾ О недавно открытых химических соединениях инертных газов см. стр. 499.

няется двум, а валентность единице. Однако по числу недостающих электронов водород напоминает группу галогенов (не хватает до заполнения внешней оболочки одного электрона), и поэтому он может присоединять лишний, второй электрон, образуя, подобно галогенам, отрицательно заряженный ион.

Гелий по числу электронов на внешней оболочке (два электрона) должен напоминать собой щелочноземельные элементы второй группы. Как у гелия, так и у щелочноземельных элементов спектральные термы должны представлять собой либо синглеты (спин равен нулю), либо триплеты (спин равен единице). Однако по своим химическим свойствам гелий является типичным представителем инертных газов, так как у него внешняя K -оболочка полностью заполнена, и поэтому он ни в какие химические реакции не вступает.

Максимальная валентность элементов определяется, как правило, количеством электронов, находящихся на внешней оболочке, т. е. период валентности элементов должен изменяться от единицы (для электронов 1-й группы) до семи (группа галогенов). Однако некоторое исключение могут представлять элементы, у которых заполняются внутренние оболочки.

Как видно из периодической таблицы Менделеева, начиная со скандия ($Z=21$) и кончая никелем ($Z=28$), на внешней оболочке будет по два (а у хрома один) электрона.

Однако за счет переходов электронов с термов $3d$ на $4p$ максимальная валентность скандия ($Z=21$) может равняться трем, а марганца ($Z=25$) — семи. Следовательно, эти элементы необходимо было поставить в группы, соответствующие их максимальной валентностям, что правильно было сделано в свое время Менделеевым. Железо ($Z=26$), кобальт ($Z=27$) и никель ($Z=28$) были помещены Менделеевым в особую, восьмую группу. Введение этой группы становится оправданным с точки зрения современной квантовой механики, так как более восьми электронов на внешней оболочке у них появиться не может. Вообще же железо проявляет себя как двух- или трехвалентный элемент. По своим свойствам все три элемента похожи друг на друга. В частности, они обладают особыми ферромагнитными свойствами, обусловленными нескомпенсированными спинами $3d$ -электронов во внутренней оболочке. Это связано с тем обстоятельством, что при образовании кристаллической решетки термы $3d$ оказываются энергетически более выгодными, чем оставшиеся термы, где спины этих электронов могут быть скомпенсированы¹⁾.

¹⁾ Кстати заметим, что ферромагнитными свойствами могут обладать элементы, у которых нескомпенсированы спины и во второй внутренней оболочке ($4f$ -подоболочка). Такой ферромагнитный элемент был открыт в группе редких земель; им оказался гадолиний ($Z=64$).

После ферромагнитных атомов, начиная с меди ($Z=29$) и кончая криптоном ($Z=36$), заполняются сначала $4s$, а затем $4p$ -подоболочки.

Криптон завершает построение M -оболочки ($n=4$) и поэтому по своим оптическим и химическим свойствам относится к инертным газам.

Как мы уже отметили, пятый период, начиная со щелочного металла рубидия ($Z=37$) и кончая инертным газом ксеноном ($Z=54$), целиком повторяет четвертый период и никаких новых особенностей не содержит.

Квантовая теория позволила также вскрыть особенности заполнения электронных оболочек элементов группы лантанидов или редких земель. Для атомов этих элементов характерно последовательное заполнение глубоко лежащей $4f$ -подоболочки (вторая внутренняя N -оболочка), в то время как их первая внутренняя оболочка (O) и внешняя (P) еще не заполнены до конца.

В четырнадцати элементах группы редких земель, следующих непосредственно за лантаном: от церия ($Z=58$) до лютеция ($Z=71$), последовательно заполняется $4f$ -подоболочка. Поскольку химические свойства определяются в основном электронами внешних оболочек, все элементы редких земель оказываются еще более близкими в химическом отношении, чем элементы, у которых заполняется первая внутренняя подоболочка d .

В связи с анализом группы лантанидов следует заметить, что долгое время гафний ($Z=72$) также относился к этой группе. Однако теоретический анализ, проведенный Бором, показал, что в этой группе не может быть более 14 элементов (возможное число f -состояний) и поэтому гафний должен быть химическим аналогом циркония. Тщательные эксперименты подтвердили это теоретическое заключение.

Аналогом группы лантанидов в последнем, седьмом периоде является группа актинидов. Для элементов этой группы, следующих за актинием ($Z=89$), начиная с тория ($Z=90$), характерно заполнение глубоко лежащих $5f$ -термов O -оболочки при полностью заполненных $6s$ -, $6p$ -, $7s$ -термов и частично $6d$ -термов. К числу актинидов относятся также протактиний ($Z=91$), уран ($Z=92$), а также все трансурановые элементы, полученные искусственным путем: нептуний ($Z=93$), плутоний ($Z=94$), америций ($Z=95$), кюрий ($Z=96$), берклий ($Z=97$), калифорний ($Z=98$), эйнштейний ($Z=99$), фермий ($Z=100$), менделевий ($Z=101$), nobelium ($Z=102$), лоуренсий ($Z=103$) и, наконец, только что открытый советскими учеными (Г. Н. Флеров и др.) в г. Дубне элемент 104. Элемент 102 вначале был открыт в Нобелевском институте в Стокгольме и был назван nobelium (No). Впоследствии

советскими и американскими учеными были открыты другие изотопы этого элемента¹⁾, а существование первоначального поставлено под сомнение.

Вопрос о возможном числе элементов, которые могут быть приготовлены искусственным путем и обнаружены экспериментально, а также вопрос о конце периодической системы пока окончательно еще не решен. Однако уже сейчас ясно, что граница периодической системы обусловлена неустойчивостью ядер, главным образом относительно спонтанного деления. На этом вопросе мы более подробно остановимся в § 28.

§ 27. ТЕОРИЯ ПРОСТЕЙШИХ МОЛЕКУЛ

а. Основные виды химической связи

Химические свойства элементов, так же как их оптические спектры, определяются в основном внешними электронами атома. Поэтому закономерности в строении внешней электронной оболочки, лежащие в основе оптической периодичности (например, повторяемость расщепления термов в атомных спектрах и т. д.), должны служить также основой и в построении теории периодически повторяющихся химических свойств элементов. Кстати заметим, что последние свойства проявляются не у изолированного атома, как оптические, а лишь при наличии других атомов, с которыми рассматриваемый атом вступает в химические соединения.

Внутренние электроны почти не оказывают влияния на химические процессы, так как они гораздо сильнее связаны с ядром, чем внешние. Поэтому энергия, выделяемая при химических реакциях, гораздо меньше, чем энергия связи внутренних электронов.

Таким образом, химические свойства элемента (например, валентность) обусловлены в первую очередь свойствами внешних электронов атома. При этом следует различать два основных типа химической связи: ионная (или гетерополярная) и атомная (или гомеополярная). Рассмотрим более подробно каждые из этих типов химической связи.

б. Гетерополярные молекулы

Известно, что неорганические соли построены из положительных и отрицательных ионов, между которыми имеет место электрическое (кулоновское) притяжение, удерживающее атомы в молекуле.

¹⁾ Со свойствами и открытием новых элементов можно познакомиться по следующим книгам: В. И. Гольданский, Новые элементы в периодической системе Д. И. Менделеева, М., 1955; И. Хайд, Г. Сибори, Трансурановые элементы, ИЛ, М., 1959.

Соединения этого типа называются ионными, а соответствующие молекулы — гетерополярными. Как известно, ионы могут быть двоякого рода: положительные и отрицательные. Знак заряда иона зависит, с одной стороны, от потенциала ионизации, т. е. от той энергии, которую необходимо затратить, чтобы удалить внешний электрон, а с другой — от степени сродства к электрону, т. е. от той энергии, с которой атом на внешней оболочке может удерживать дополнительный электрон.

Допустим, что нейтральный атом с порядковым номером Z содержит N электронов на внутренних орбитах и $Z_a = Z - N$ — на внешней. Тогда электроны внутренних орбит будут полностью экранировать соответствующую часть заряда ядра только за пределами внутренней оболочки (начиная с внешней), где кулоновская потенциальная энергия, удерживающая электроны, будет равна:

$$V = -\frac{Z_a e_0^2}{r}.$$

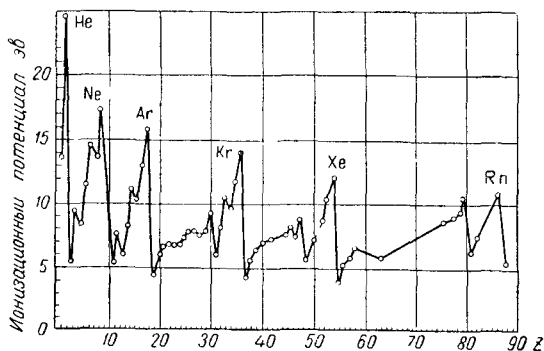
Внутри же атомного остова следует брать заряд $Z_i > Z_a$, т. е. там будет иметь место неполная экранировка заряда ядра (см. § 25). Точно так же внешние электроны будут полностью экранировать оставшуюся часть заряда ядра $Z_a e_0$ лишь на оболочках, лежащих за пределами внешней (т. е. для возбужденных состояний). Правда, в этом случае возникают силы поляризации, пропорциональные r^{-5} , но они не в состоянии удержать дополнительный электрон. На самой же внешней оболочке этот заряд будет скомпенсирован неполностью, и поэтому лишь при наличии в ней незаполненных состояний (число внешних электронов меньше восьми, например атом принадлежит к I—VII группам) неполностью экранированная часть заряда ядра способна удержать на внешней оболочке дополнительные электроны, что может привести к образованию отрицательных ионов атома. Поэтому, чем меньше внешних электронов имеет нейтральный атом, тем сильнее будет общая экранировка для электрона на внешней орбите, благодаря чему атом щелочного металла скорее отдаст свой электрон, чем приобретет дополнительный¹⁾.

Кривая зависимости потенциала ионизации от Z изображена на фиг. 27.1. Она имеет минимум для щелочных металлов и дос-

¹⁾ Например, у натрия ($Z=11$) десять электронов внутренней орбиты полностью экранируют десять единиц заряда ядра и только один электрон внешней оболочки экранирует одиннадцатый единичный заряд частично. У хлора же ($Z=17$) десять электронов полностью экранируют десять единиц заряда ядра, а семь электронов внешней оболочки экранируют остальной заряд лишь частично. Поэтому атом хлора легче удержит дополнительный электрон и тем самым превратится в отрицательный ион Cl^- , чем атом натрия, и наоборот, атом натрия легче отдаст свой внешний электрон и тем самым образует положительный ион Na^+ .

тигает максимального значения у инертных газов. Вообще же эта кривая повторяет периодичность чисел электронов во внешней оболочке.

Прежде всего следует заметить, что для инертных газов, у которых потенциал ионизации достигает наибольшего значения, энергетически невыгодно отдавать внешний электрон другому атому. Точно так же в атоме инертного газа не смогут удерживаться дополнительные электроны на последней орбите, которая целиком заполнена и на которую, согласно принципу Паули, больше не может быть помещен ни один электрон. Поэтому



Фиг 27.1. Зависимость энергии ионизации нейтрального атома от атомного номера.

долгое время считалось, что инертные газы существуют лишь в атомном состоянии, и только недавно были открыты их химические соединения (см. стр. 499).

Атомы щелочных и щелочноземельных металлов легко отдают свой валентный электрон другому атому (потенциал ионизации для них наименьший), превращаясь при этом в положительный ион (например, в ион Na^+).

Наоборот, атомы VII группы (галогены), включая даже и водород, который, как мы уже указывали, по числу недостающих электронов должен напоминать эту группу, а также VI группы (кислород и др.) обладают наибольшим по сравнению с другими элементами значением потенциала сродства к электрону, который приведен в таблице 27.1.

Энергия сродства к электрону у натрия практически, так же как и у инертных газов, равна нулю.

Первая удачная попытка построить теорию ионной связи была сделана Косселем (1916 г.), исходившим из представлений боровской теории атома.

В основу его теории была положена замкнутость восьмиэлектронных оболочек атомов инертных газов, не обладающих никакой валентностью.

Положительная валентность (или валентность по отношению к водороду) определяется числом электронов на внешней оболочке, которая особенно легко теряет электроны (атомы I или II группы). Отрицательная же валентность (т. е. валентность относительно фтора или удвоенная относительно кислорода) определяется числом электронов, которые может присоединить к себе атом, т. е. числом вакантных мест (недостающих до восьми) на внешней оболочке (см. также § 26). Особенно ярко выраженная отрицательная валентность

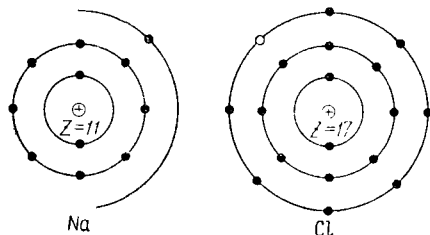
Таблица 27.1

Энергия сродства к электрону

Элемент	Энергия сродства к электрону (эв)
H	0,71
F	4,13
Cl	3,72
O	3,07

наблюдается у элементов VI и VII групп, хотя у каждого элемента может проявляться как та, так и другая валентность.

Например, в типичном гетерополярном соединении HCl у хлора явно проявляется одна отрицательная валентность, хотя возможны и другие соединения, где у хлора проявляется семь положительных валентностей. Примером последнего может служить Cl_2O_7 . Мы не собираемся здесь особенно подробно развивать теорию химической связи¹⁾ и ограничимся в общих чертах рассмотрением образования одной из типичных ионных молекул, а именно гетерополярной молекулы NaCl. В атомном состоянии энергия связи внешнего электрона²⁾ натрия равна -5,1 эв. При переходе же валентного электрона натрия на внешнюю орбиту хлора, т. е. при образовании ионов Na^+ и Cl^- (см. фиг. 27.2), хотя мы и имеем



Фиг. 27.2. Два независимых и нейтральных атома Na и Cl.

Черными точками указаны электроны; светлой — свободное для электронов место, которое может занять электрон благодаря энергии сродства.

¹⁾ Более подробно см.: В. Н. Кондратьев, Структура атомов и молекул, Физматгиз, М., 1959, стр. 268; Г. Герцберг, Атомные спектры и строение атомов, ИЛ, М., 1948, стр. 237.

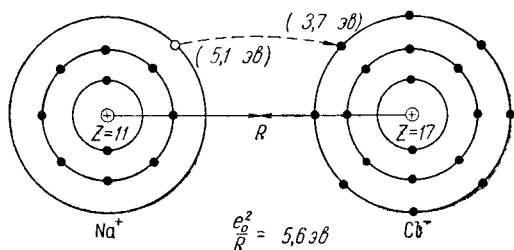
²⁾ Энергия связи электрона в атоме (или молекуле) равна энергии, которую необходимо затратить для отрыва электрона. Поэтому она равняется взятой со знаком минус ($W = -V$) энергии, удерживающей электрон в соединении, т. е. будет положительной величиной.

некоторую потерю энергии связи, так как энергия сродства электрона с атомом хлора ($W_{\text{Cl}}^{\text{срод.}} = 3,7 \text{ эв}$) несколько меньше энергии ионизации натрия ($W_{\text{Na}}^{\text{ион.}} = 5,1 \text{ эв}$), однако эта потеря компенсируется при образовании молекулы кулоновской энергией притяжения между ионами Na^+ и Cl^- (см. фиг. 27.3).

Для суммарной энергии связи атомов в молекуле мы будем иметь при этом выражение:

$$W_{\text{NaCl}}^{\text{св.}} = W^{\text{кул.}} + W_{\text{Cl}}^{\text{срод.}} - W_{\text{Na}}^{\text{ион.}}$$

Энергия связи Na и Cl в молекуле NaCl хорошо известна из эксперимента. Она равна: $W_{\text{NaCl}}^{\text{св.}} = 4,2 \text{ эв}$.



Фиг. 27.3. Образование молекулы NaCl из ионов Na^+ и Cl^- .

В скобках указаны энергия ионизации натрия (5,1 эв) и энергия сродства атома хлора к электрону (3,7 эв). Кулоновская энергия связи между ионами в молекуле равна 5,6 эв.

Отсюда для кулоновской энергии связи между ионами находим:

$$W^{\text{кул.}} = -W_{\text{Cl}}^{\text{срод.}} + W_{\text{Na}}^{\text{ион.}} + W_{\text{NaCl}}^{\text{св.}} = 5,6 \text{ эв.}$$

Принимая во внимание, что $V^{\text{кул.}} = -W^{\text{кул.}} = -\frac{e_0^2}{R}$, для размеров молекулы NaCl получаем вполне разумное значение: $R = 2,5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$.

Следует заметить, что здесь мы учитываем далеко не все взаимодействия, которые имеют место в гетерополярной молекуле. В самом деле, наряду с кулоновскими силами притяжения должны действовать также и силы отталкивания (на малых расстояниях превышающие кулоновские), которые не позволяют двум атомам сблизиться на расстояние, меньшее, чем R . Во всяком случае, данное здесь элементарное рассмотрение позволяет выявить основные черты физической природы возникновения гетерополярной молекулы, а также хотя бы качественно понять их ионную структуру кристаллической решетки, а также диссоциацию этих молекул на отдельные ионы в растворах.

в. Ион молекулы водорода

Наряду с ионными соединениями существуют молекулы, которые образуются не из ионов, а непосредственно из нейтральных атомов. Простейшими из них являются, например, молекулы H_2 , O_2 , N_2 и т. д. Они получили название атомных или гомеополлярных молекул.

Образование гомеополлярных молекул нельзя понять на основе классической или полуклассической боровской теории. Эти теории могли подойти к объяснению лишь соединений, в основе образования которых лежат силы электростатического происхождения, например ионные соединения. Прежде чем приступить к анализу образования гомеополлярной молекулы, рассмотрим простейшую молекулу, каковой является ион молекулы водорода H_2^+ , состоящий из двух водородных ядер и одного электрона.

Этот анализ имеет не только практическое значение, но он весьма интересен и в методическом отношении, так как позволяет в сравнительно простой математической форме сформулировать особенности связи между двумя ядрами водорода благодаря обмену электроном (обменные силы), которые лежат также в основе образования гомеополлярной молекулы водорода H_2 .

Обозначим расстояния между двумя ядрами водорода a и a' через R и будем считать, что величина R изменяется адиабатически, т. е. меняется настолько медленно, что при решении уравнения Шредингера можем принять ее постоянной. Вообще же при более точном рассмотрении необходимо еще учесть колебания ядер около положения равновесия (вибрационный спектр), а также вращение ядер вокруг центра тяжести (ротационный спектр). Все эти вопросы были подробно рассмотрены нами в § 12.

Пусть r и r' — расстояния электрона соответственно от ядер a и a' . Тогда уравнение Шредингера для ионизованной молекулы водорода может быть записано в виде:

$$(E - \text{H})\psi = 0. \quad (27.1)$$

Здесь оператор Гамильтона равен:

$$\text{H} = \text{T} - \frac{e_0^2}{r} - \frac{e_0^2}{r'} + \frac{e_0^2}{R}, \quad (27.2)$$

а оператор кинетической энергии имеет вид:

$$\text{T} = \frac{1}{2m_0} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 = \frac{1}{2m_0} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla' \right)^2, \quad (27.3)$$

где $\nabla_x = \nabla'_x$, причем $\nabla_x = \frac{\partial}{\partial x}$, $\nabla'_x = \frac{\partial}{\partial x'}$, так как

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{R}, \quad (27.4)$$

а R в рассматриваемой задаче можно считать величиной постоянной.

Ограничимся исследованием основного состояния и будем проводить вычисления на основе теории возмущений. Спиновые эффекты при наличии одного электрона можно не учитывать.

В нулевом приближении примем, что электрон находится под действием либо только ядра a , либо только ядра a' (см. фиг. 27.4). Уравнения Шредингера, описывающие эти два возможных невозмущенных состояния, имеют вид:

$$\left(E_a - T + \frac{e_0^2}{r}\right) \psi_a = 0, \quad (27.5)$$

$$\left(E_{a'} - T + \frac{e_0^2}{r'}\right) \psi_{a'} = 0.$$

Оба собственных значения и обе собственные функции идентичны и соответствуют состоянию $1s$ атома водорода. Принимая во внимание, что одна из волновых функций относится к ядру a , а другая — к ядру a' , можем написать ($n=1, l=m=0$):

$$E_a = E_{a'} = E_1 = -R\hbar, \\ \psi_a = \psi_{100}(r), \quad \psi_{a'} = \psi_{100}(r'), \quad (27.6)$$

где $\psi_{nlm} = \psi_{100}$ — волновая функция основного состояния атома водорода, которая равна [см. (13.32)]:

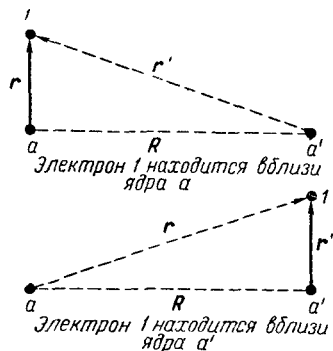
$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}. \quad (27.7)$$

Общая же энергия системы, а также собственная функция в нулевом приближении будут соответственно равны:

$$E^0 = E_1 = -R\hbar, \\ \psi^0 = C_1 \psi_a + C_2 \psi_{a'}. \quad (27.8)$$

Неопределенность выражения ψ_0 связана с тем обстоятельством, что наличие двух ядер приводит к вырожденному состоянию системы. При решении уравнения (27.1) методом теории возмущений мы должны положить

$$E = E^0 + E' + \dots, \\ \psi = \psi^0 + \psi' + \dots \quad (27.9)$$



Сплошные стрелки определяют взаимодействия в нулевом приближении. Стрелки, изображенные штриховой линией, определяют взаимодействия, соответствующие возмущению.

Подставляя (27.9) в (27.1) и ограничиваясь величинами первого порядка малости, находим:

$$\begin{aligned} \left(E^0 - T + \frac{e_0^2}{r} + \frac{e_0^2}{r'}\right) \psi' = & -C_1 \left(E' + \frac{e_0^2}{r'} - \frac{e_0^2}{R}\right) \psi_a - \\ & -C_2 \left(E' + \frac{e_0^2}{r} - \frac{e_0^2}{R}\right) \psi_{a'}, \end{aligned} \quad (27.10)$$

причем для решения ψ_a (электрон вблизи ядра a) взаимодействие $-\frac{e_0^2}{r}$ является основным, а $-\frac{e_0^2}{r'}$ — возмущением. В случае же решения $\psi_{a'}$ (электрон вблизи ядра a'), наоборот, основным является взаимодействие $-\frac{e_0^2}{r'}$, а возмущением $-\frac{e_0^2}{r}$.

Из последнего уравнения мы найдем дополнительную энергию E' , а также соотношение между коэффициентами C_1 и C_2 в волновой функции ψ^0 . Это можно сделать, так как энергия возмущения снимает (так же как и в случае атома гелия) вырождение.

Для решения этой задачи используем теорему, согласно которой решение однородного уравнения [т. е. одно из решений уравнений (27.5)] должно быть ортогональным правой части этого же уравнения. Точнее, предполагая, что электрон находится у ядра a , в левой части уравнения член $\frac{e_0^2}{r'}$ как энергию возмущения, дающую при умножении на ψ' члены второго порядка малости, можно отбросить. Тогда решением однородного уравнения является функция ψ_a , которая должна быть ортогональна правой части:

$$C_1 \int \psi_a \left(E' + \frac{e_0^2}{r'} - \frac{e_0^2}{R}\right) \psi_a d^3x + C_2 \int \psi_a \left(E' + \frac{e_0^2}{r} - \frac{e_0^2}{R}\right) \psi_{a'} d^3x = 0. \quad (27.11)$$

Здесь учтено, что волновая функция основного состояния атома водорода ψ_a является вещественной.

Точно так же, предполагая, что первый электрон находится у ядра a' , мы должны в левой части уравнения (27.10) отбросить энергию возмущения, которой в данном случае уже является энергия $\frac{e_0^2}{r}$. Поскольку решением однородного уравнения при этом является функция $\psi_{a'}$, аналогичным способом получаем второе уравнение для определения искомых величин:

$$\begin{aligned} C_1 \int \psi_{a'} \left(E' + \frac{e_0^2}{r'} - \frac{e_0^2}{R}\right) \psi_a d^3x + \\ + C_2 \int \psi_{a'} \left(E' + \frac{e_0^2}{r} - \frac{e_0^2}{R}\right) \psi_{a'} d^3x = 0. \end{aligned} \quad (27.12)$$

Принимая во внимание, что при замене r на r' и наоборот, ψ_a переходит в $\psi_{a'}$, а $\psi_{a'}$ — в ψ_a , а элемент объема d^3x при этом остается неизменным ($d^3x = d^3x'$), мы приводим уравнение (27.12) к виду, совпадающему с (27.11), но с переставленными коэффициентами C_1 и C_2 :

$$C_2 \int \psi_a \left(E' + \frac{e_0^2}{r'} - \frac{e_0^2}{R} \right) \psi_a d^3x + \\ + C_1 \int \psi_a \left(E' + \frac{e_0^2}{r} - \frac{e_0^2}{R} \right) \psi_{a'} d^3x = 0. \quad (27.13)$$

При дальнейших преобразованиях уравнения (27.11) мы должны учесть, что функция ψ_a нормирована на единицу:

$$\int \psi_a^2 d^3x = 1, \quad (27.14)$$

но не ортогональна функции $\psi_{a'}$:

$$\int \psi_a \psi_{a'} d^3x = S(R). \quad (27.15)$$

Это видно из того обстоятельства, что хотя при $R \rightarrow \infty$ выражение $S(R)$ обращается в нуль (не будет общих точек, где обе функции ψ_a и $\psi_{a'}$ отличны от нуля), но при $R = 0$ оно обращается в единицу ($\psi_a = \psi_{a'}$).

Введем далее обозначения:

$$K = \int \psi_a^2 \left(\frac{e_0^2}{R} - \frac{e_0^2}{r} \right) d^3x$$

и

$$A = \int \psi_a \psi_{a'} \left(\frac{e_0^2}{R} - \frac{e_0^2}{r} \right) d^3x, \quad (27.16)$$

где K — кулоновская энергия взаимодействия атома водорода с ионом атома водорода, а A — обменная энергия, не имеющая классического аналога. Эта энергия возникает благодаря тому, что электрон наряду с состоянием ψ_a может одновременно находиться и в состоянии $\psi_{a'}$, т. е. между состояниями a и a' имеет место обмен. Формально наличие обменной энергии приводит к тому, что в выражение для ψ , кроме ψ_a , входит $\psi_{a'}$. Как мы увидим в дальнейшем, эта обменная энергия и создает притяжение между ядрами, которое на известных расстояниях превышает силу отталкивания, благодаря чему и образуется ион молекулы водорода H_2^+ . Заметим, что в теории Бора это смешанное состояние не может возникнуть, и поэтому существование ионизованной молекулы водорода находит объяснение только в квантовой механике.

Учитывая соотношения (27.14) — (27.16), уравнения (27.11) и (27.13) можно привести к виду:

$$\begin{aligned} C_1(E' - K) + C_2(E'S - A) &= 0, \\ C_1(E'S - A) + C_2(E' - K) &= 0. \end{aligned} \quad (27.17)$$

Отсюда находим два решения: симметричное ($C_1 = C_2$) и антисимметричное ($C_1 = -C_2$). Для симметричного решения будем иметь:

$$\begin{aligned} \psi^c &= \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} (\psi_a + \psi_{a'}), \\ E'^c &= V^c(R) = K + \frac{A - SK}{1+S}. \end{aligned} \quad (27.18)$$

Для антисимметричного решения мы получаем:

$$\begin{aligned} \psi^a &= \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} (\psi_a - \psi_{a'}), \\ E'^a &= V^a(R) = K - \frac{A - SK}{1-S}. \end{aligned} \quad (27.19)$$

Здесь множитель $\frac{1}{\sqrt{2(1 \pm S)}}$ является нормировочным коэффициентом. Кстати заметим, что симметричное и антисимметричное решения будут уже ортогональными друг другу:

$$\int \psi^a \cdot \psi^c \cdot d^3x = 0.$$

Величину E' можно рассматривать как дополнительную энергию взаимодействия $V(R)$, связывающую атом H и ион H^+ в устойчивую молекулу водорода. Чтобы найти конкретный вид этого взаимодействия как функцию R , следует вычислить значения S , K и A . С этой целью воспользуемся следующим известным разложением функции $\frac{e^{-k_0 r}}{r}$ в трехкратный интеграл Фурье:

$$\frac{e^{-k_0 r}}{r} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3k}{k^2 + k_0^2}. \quad (27.20)$$

Дифференцируя последнее выражение по параметру k_0^2 , можно легко записать волновую функцию основного состояния атома водорода в виде интеграла Фурье:

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} = \left(\frac{k_0}{\pi}\right)^{5/2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{(k^2 + k_0^2)^2} d^3k, \quad (27.21)$$

причем в данном случае: $k_0 = \frac{1}{a_0}$.

Согласно (27.15), выражение для S имеет вид:

$$S = \int \psi_{100}(\mathbf{r}) \psi_{100}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3x. \quad (27.22)$$

Подставляя сюда вместо $\psi_{100}(\mathbf{r})$ и $\psi_{100}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ их выражения через интеграл Фурье (27.21) и принимая во внимание, что при интегрировании по объему:

$$\int e^{i(\mathbf{k}' + \mathbf{k})\mathbf{r}} d^3x = 8\pi^3 \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}'), \quad (27.23)$$

находим следующее значение для S :

$$S = \frac{8k_0^5}{\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{(k^2 + k_0^2)^4} d^3k = \left(1 + \frac{R}{a_0} + \frac{1}{3} \left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right) e^{-\frac{R}{a_0}}. \quad (27.24)$$

Последний интеграл был вычислен с помощью равенства (27.20), которое следует при этом продифференцировать три раза по параметру k_0^2 .

При вычислении дополнительной кулоновской энергии взаимодействия воспользуемся соотношением:

$$\psi_{100}^2(\mathbf{r}) = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} = \frac{k_0^4}{8\pi^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{(k^2 + k_0^2)^2} d^3k,$$

причем здесь следует принять $k_0 = \frac{2}{a_0}$. Далее, полагая в формуле (27.20) $k_0 = 0$, находим:

$$\frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{R} - \mathbf{r})}}{k'^2} d^3k'. \quad (27.25)$$

Точно так же представим величину $1/R$ в виде интеграла (27.25). Подставляя эти величины в формулу (27.16), после интегрирования по объему d^3x с помощью формулы (27.23) находим:

$$K = \frac{e_0^2}{2\pi^2} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \left(\frac{1}{k^2 + k_0^2} + \frac{k_0^2}{(k^2 + k_0^2)^2} \right). \quad (27.26)$$

Отсюда, учитывая равенство (27.20) и полагая $k_0 = \frac{2}{a_0}$, получаем выражение для дополнительной кулоновской энергии:

$$K = \frac{e_0^2}{R} e^{-\frac{2R}{a_0}} \left(1 + \frac{R}{a_0}\right). \quad (27.27)$$

При вычислении обменного взаимодействия:

$$A = \frac{e_0^2}{R} S - e_0^2 \int \frac{\psi_{100}(\mathbf{r})}{r} \psi_{100}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3x \quad (27.28)$$

используем для $\psi_{100}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ выражение (27.21), а для величины $\frac{\psi_{100}(\mathbf{r})}{r}$ — (27.20):

$$\frac{\psi_{100}(\mathbf{r})}{r} = \frac{k_0^{3/2}}{2\pi^{5/2}} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{k^2 + k_0^2} d^3k,$$

где $k_0 = \frac{1}{a_0}$. Тогда находим:

$$A = \frac{e_0^2}{R} S - \frac{4k_0^4 e_0^2}{\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} d^3k}{(k^2 + k_0^2)^2} = \frac{e_0^2}{R} \left\{ 1 - \frac{2}{3} \left(\frac{R}{a_0}\right)^2 \right\} e^{-\frac{R}{a_0}}. \quad (27.29)$$

Подставляя найденные значения для S , K и A в выражение для энергии взаимодействия [см. (27.18) и (27.19)], получаем следующее выражение ($R/a_0 = \xi$):

$$V^{a.c.} = \frac{e_0^2}{R} \frac{(1 + \xi) e^{-2\xi} \mp \left(1 - \frac{2}{3} \xi^2\right) e^{-\xi}}{1 \mp \left(1 + \xi + \frac{1}{3} \xi^2\right) e^{-\xi}}. \quad (27.30)$$

При этом верхние знаки (минус) относятся к антисимметричному решению V^a , а нижние знаки (плюс) — к симметричному решению. В области малых значений R ($R \ll a_0$) будем иметь:

$$V^a = V^c = \frac{e_0^2}{R} \text{ при } R \ll a_0, \quad (27.31)$$

т. е. энергия, как и следовало ожидать, будет определяться кулоновской энергией отталкивания обоих ядер. Для больших же расстояний ($R \gg a_0$) будем иметь:

$$V^{a.c.} = \pm \frac{2}{3} \frac{e_0^2}{a_0} \frac{R}{a_0} e^{-\frac{R}{a_0}}, \quad (27.32)$$

т. е. антисимметричное решение (знак «+») дает также отталкивание, а симметричное (знак «-») — притяжение.

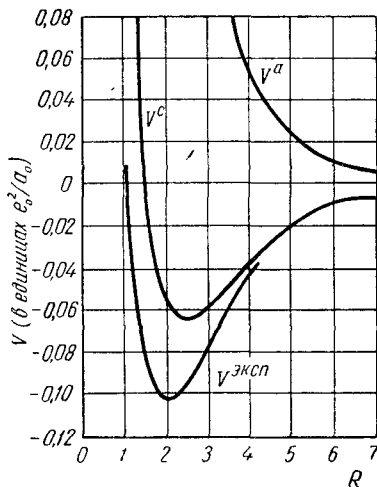
Общий характер изменения $V^{a.c.}$ как функции R для симметричного и антисимметричного решений изображен на фиг. 27.5, где приведены также и экспериментальные данные.

Отсюда видно, что в действительности может реализоваться только симметричное состояние.

Теоретические значения, полученные из графика, в случае равновесия дают $R_0 = 2,50a_0 = 1,32 \text{ \AA}$; тогда энергия ионизации будет¹⁾:

$$D = -V(R_0) = +0,0646 \frac{e_0^2}{a_0} = 1,76 \text{ эв}. \quad (27.33)$$

¹⁾ Кстати, заметим, что при $R = R_0$ (условие равновесия) обменная энергия [см. формулу (27.29)] становится отрицательной величиной. Таким образом, устойчивое равновесие в ионе атома водорода наступает, когда обменная энергия отрицательна.



Фиг. 27.5. Кривые зависимости энергии взаимодействия иона молекулы водорода от расстояния R между ядрами (в единицах a_0) для симметричного (V^c) и антисимметричного (V^a) состояний.

В то же время соответствующие экспериментальные значения равны:

$$R_{\text{экс.}} = 1,06 \text{ \AA}, \quad D_{\text{экс.}} = 2,79 \text{ эв}, \quad (27.34)$$

причем в этом случае нулевая энергия колебаний ядра исключена из соответствующих теоретических и экспериментальных данных.

Такое расхождение теоретических и экспериментальных данных связано с тем обстоятельством, что в рассматриваемом случае, так же как и в атоме гелия, энергия возмущения соизмерима с энергией нулевого приближения. Если эту задачу решать вариационным методом (как было сделано в атоме гелия по методу Хиллерааса), выбрав пробную функцию в виде:

$$\psi_a = \left(\frac{Z'}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-\frac{Z'r}{a_0}}, \quad (27.35)$$

где Z' — эффективный заряд ядра, который рассматривается как вариационный параметр, то для величин R_0 и D получается результат, значительно лучше совпадающий с экспериментом:

$$R_{\text{вар.}} = 1,06 \text{ \AA}, \quad D_{\text{вар.}} = 2,25 \text{ эв}.$$

При введении нескольких параметров вариационный метод дает результат, практически полностью совпадающей с экспериментальными данными.

Таким образом, основную роль в образовании иона молекулы водорода играют квантовомеханические обменные силы, которые в симметричном состоянии дают устойчивую молекулу. С физической точки зрения это можно объяснить следующим образом. Вероятность того, что электрон находится в симметричном состоянии, равна:

$$\rho_0^c = (\psi^c)^2 = \frac{1}{2(1+S)} (\psi_a^2 + \psi_{a'}^2 + 2\psi_a\psi_{a'}); \quad (27.36)$$

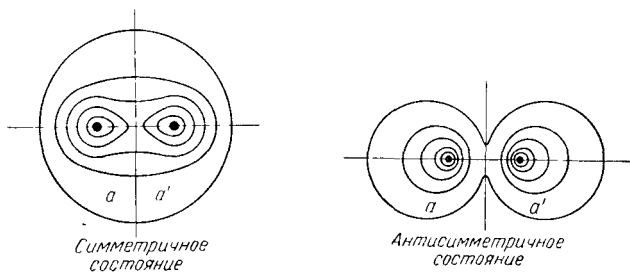
соответствующая вероятность для антисимметричного состояния определяется выражением:

$$\rho_0^a = (\psi^a)^2 = \frac{1}{2(1-S)} (\psi_a^2 + \psi_{a'}^2 - 2\psi_a\psi_{a'}). \quad (27.37)$$

Если изобразить графически кривые равной плотности электрона [см. фиг. 27.6], то мы получим, что вероятность пребывания электрона в середине линии, соединяющей оба ядра в случае симметричного решения, наибольшая, а в случае антисимметричного решения, наоборот, обращается в нуль. Поскольку в средней точке электрон наиболее сильно связывает оба ядра, то естественно ожидать, что первое решение скорее приведет к образованию молекулы, чем второе. Кроме того, в случае первого (т. е. симметричного) решения при сближении ядер кривые, характеризующие распределение электронов вокруг ядер, как бы

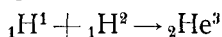
сливаются друг с другом, и это может наглядно характеризовать гомеоплярную связь¹⁾.

Заметим, что связь между двумя ядрами водорода, а также между ядрами водорода и дейтерия может быть осуществлена не только электроном, но и другими элементарными частицами. В этом отношении особый интерес представляет образование мю-мезомолекулы $(HD)^+$, где связь между водородом и дейтроном осуществляется с помощью отрицательного мю-мезона. Такая мезомолекула была получена Альварецом при пропускании отрицательных мю-мезонов через пузырьковую камеру. Радиус такой



Фиг. 27.6. Распределение плотности электронов в ионе молекулы водорода.

молекулы, определяемый формулой $R = 2,5 \frac{\hbar^2}{m_\mu e_0^2}$, будет в 200 раз меньше радиуса иона молекулы водорода, поскольку масса мю-мезона примерно в 200 раз больше массы электрона. Поэтому при таком сближении ядра атомов водорода и дейтерия образуют общее ядро, а именно ядро ${}_2\text{He}^3$:



с выделением энергии $5,4 \text{ Мэв}$, которая должна уноситься мю-мезоном.

Таким образом, мю-мезон в данном случае играет роль своеобразного катализатора ядерной реакции.

г. Гомеоплярные атомные молекулы

Первая успешная попытка теоретического объяснения гомеоплярной молекулы была сделана Гайтлером и Лондоном (1927) на базе квантовой механики. В подобной молекуле основную роль играют обменные силы.

¹⁾ Подробности см. П. Г о м б а ш, Проблема многих частиц в квантовой механике, ИЛ, М., 1952.

В основу теории Гайтлера и Лондона был положен метод теории возмущений, который, так же как и в теории иона молекулы водорода, дает не совсем точные количественные результаты. Однако этот метод позволяет со всей ясностью выявить физическую природу происхождения гомеоплярной связи.

Более точные количественные результаты можно получить, если в основу теории положить вариационный метод. Однако теория Гайтлера — Лондона позволяет в наиболее простом виде вскрыть физические особенности проявления гомеоплярной связи.

Обозначим через r_1 и r_2 радиус-векторы, характеризующие положение 1-го и 2-го электронов относительно ядра a , а через r'_1 и r'_2 — относительно ядра a' (см. фиг. 27.7), причем $r'_1 = r_1 - R$, $r'_2 = r_2 - R$. Тогда в нулевом приближении для волновой функции будем иметь два решения, представляющих собой произведения двух волновых функций атома водорода в основном состоянии:

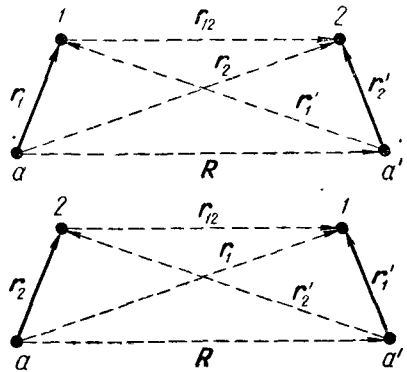
$$\begin{aligned} \psi_{aa'} &= \psi_a(r_1) \psi_{a'}(r'_2) = \\ &= \psi_{100}(r_1) \psi_{100}(r_2 - R), \\ \psi_{a'a} &= \psi_{a'}(r'_1) \psi_a(r_2) = \\ &= \psi_{100}(r_1 - R) \psi_{100}(r_2). \end{aligned} \quad (27.38)$$

Первое решение $\psi_{aa'}$ соответствует пребыванию 1-го электрона у ядра a (2-го у ядра a'), а второе $\psi_{a'a}$, наоборот, — пребыванию 1-го электрона у ядра a' , а второго — у ядра a . Обе эти возможности изображены на фиг. 27.7, где сплошными стрелками показаны связи атомные, а пунктирными — молекулярные. Если расстояние между ядрами R устремить к бесконечности ($R \rightarrow \infty$), то все молекулярные связи обратятся в нуль.

Так же как и при решении задачи для иона молекулы водорода, основные решения (27.38), которые дают системе дополнительное вырождение, не будут ортогональными 1):

$$\bar{S} = \int \psi_{aa'} \psi_{a'a} d^3x_1 d^3x_2 = \left\{ \int \psi_{100}(r) \psi_{100}(r - R) d^3x \right\}^2 = S^2, \quad (27.39)$$

где S определяется выражением (27.24) для иона H_2^+ . Для куло-



Фиг. 27.7. Схемы взаимодействий в молекуле H_2 .

Сплошные линии соединяют частицы, взаимодействие между которыми учтено в нулевом приближении. Штриховыми линиями обозначены взаимодействия, рассматриваемые как возмущения; a и a' — ядра атомов водорода; 1 и 2 — электроны.

1) Чертой над тем или иным символом мы будем обозначать соответствующие величины, относящиеся к нейтральной молекуле.

новской энергии взаимодействия двух атомов мы будем иметь следующее выражение:

$$\bar{K} = \int \psi_{aa'}^2 \left\{ \frac{e_0^2}{R} + \frac{e_0^2}{r_{12}} - \frac{e_0^2}{r_1} - \frac{e_0^2}{r_2} \right\} d^3x_1 d^3x_2, \quad (27.40)$$

где первый и второй члены, стоящие в скобках подынтегрального выражения, соответствуют потенциальной энергии отталкивания двух ядер и двух электронов, а третий и четвертый члены потенциальной энергии притяжения 1-го электрона к ядру a' и 2-го к ядру a .

Точно так же для обменной энергии будем иметь:

$$\bar{A} = \int \psi_{aa'} \psi_{a'a} \left\{ \frac{e_0^2}{R} + \frac{e_0^2}{r_{12}} - \frac{e_0^2}{r_1} - \frac{e_0^2}{r_2} \right\} d^3x_1 d^3x_2. \quad (27.41)$$

Выражения для \bar{K} и для \bar{A} могут быть вычислены примерно таким же способом, как это было сделано в теории иона H_2^+ . Для \bar{K} получается при этом сравнительно простой результат, а для \bar{A} более сложный, поскольку последнее выражение, как показал Сигура, определяется через интегральный логарифм. Однако общий характер решения остается тем же самым, что и в теории иона H_2^+ . В частности, основными силами, которые могут удерживать два нейтральных атома в молекуле, являются обменные. Эти силы при сравнительно большом расстоянии между атомами имеют знак минус и соответствуют притяжению. Так же как и в случае иона молекулы водорода, в данном случае имеем два решения. Первое решение будет симметричным:

$$\psi^c = \frac{1}{\sqrt{2(1+\bar{S})}} (\psi_{aa'} + \psi_{a'a}), \quad (27.42)$$

$$V^c(R) = \frac{\bar{K} + \bar{A}}{1 + \bar{S}};$$

второе — антисимметричным:

$$\psi^a = \frac{1}{\sqrt{2(1-\bar{S})}} (\psi_{aa'} - \psi_{a'a}), \quad (27.43)$$

$$V^a(R) = \frac{\bar{K} - \bar{A}}{1 - \bar{S}}.$$

Общий вид кривых для V^c для нейтральной молекулы водорода примерно повторяет соответствующие кривые для иона молекулы H_2 , т. е. только симметричное решение дает устойчивое состояние молекулы. Для радиуса, соответствующего положению равновесия (т. е. минимума потенциальной энергии $V^c(R)$ для симметричного решения), получаем значение: $R_0 = 1,51a_0 = 0,80 \text{ \AA}$.

Соответствующее значение для энергии диссоциации будет равно:

$$D = -V^c(R_0) = 0,115 \frac{e^2}{a_0} = 3,2 \text{ эв.} \quad (27.44)$$

Эксперимент же для этих величин дает:

$$R_0^{\text{эксп.}} = 0,74 \text{ \AA}, \quad D^{\text{эксп.}} = 4,73 \text{ эв,} \quad (27.44a)$$

причем здесь энергия нулевых колебаний $0,27 \text{ эв}$ (см. § 12) не включается ни в теоретические, ни в экспериментальные данные.

д. Спин и симметрия состояний

Если в теории иона H_2^+ учет спина одного электрона практически приводит, так же как и в атоме водорода, лишь к незначительным спин-орбитальным взаимодействиям, то в теории молекулы водорода H_2 , когда имеется два электрона, спин играет существенную роль, хотя абсолютное значение спин-орбитального и также спин-спинового взаимодействий дает лишь небольшие поправки. В молекуле водорода по аналогии с атомом гелия взаимные ориентации спинов двух электронов определяют свойство симметрии пространственной части волновой функции, что имеет в вопросах устойчивости молекулы первостепенное значение. Поэтому рассмотрим более подробно вопрос о связи спина со свойствами симметрии молекулы.

Полная волновая функция Ψ наряду с координатной частью должна содержать еще и спиновую часть. Когда можно пренебречь потенциальной энергией спин-орбитального взаимодействия, то, как и в случае связи Рессела — Саундерса, общую волновую функцию можно разбить на произведение координатной и спиновой частей. Учитывая, что для электронов (статистика Ферми) эта полная волновая функция должна менять свой знак при перестановке координат и спинов (антисимметричное решение), будем иметь две возможности:

$$\Psi_1 = C^a(s_1, s_2) \psi^c(r_1, r_2), \quad (27.45)$$

$$\Psi_2 = C^c(s_1, s_2) \psi^a(r_1, r_2). \quad (27.46)$$

Как было показано в § 24, антисимметричная спиновая функция C^a должна описывать состояния двух электронов с антипараллельными спинами, т. е. симметричная относительно координат функция ψ^c соответствует состоянию с общим спином, равным нулю. Точно так же симметричная спиновая функция C^c , а вместе с тем и антисимметричная координатная функция, описывают состояния с общим спином, равным единице (спины обоих электронов параллельны). В молекуле водорода лишь симметричное координатное решение приводит к силам притяжения; поэ-

тому устойчивая молекула может получиться только в том случае, когда спины электронов будут направлены антипараллельно.

Перейдем теперь к общему анализу состояний молекулы, используя возможные свойства симметрии. В связи с этим заметим, что в двухатомных молекулах силовое поле обладает аксиальной симметрией относительно линии, проходящей через оба ядра (ось симметрии молекулы). Абсолютное значение проекции общего орбитального момента на эту ось симметрии, который, кстати сказать, должен сохраняться, обозначают через Λ . Конкретные термы с различными Λ записывают буквами Σ (термы с $\Lambda = 0$), Π ($\Lambda = 1$), Δ ($\Lambda = 2$) и т. д.

Кроме того, каждое электронное состояние должно характеризоваться полным спином S всех электронов в молекуле. При заданном значении S возможны $\nu = 2S + 1$ -состояние. Величина ν , так же как и в атоме, определяет мультиплетность терма. В случае, если общий спин равен нулю ($S = 0$), то $\nu = 1$. Для состояний с $S = 1$ мультиплетность $\nu = 3$ и т. д. Таким образом, в молекуле суммарный спин электронов можно характеризовать мультиплетностью ν , причем соответствующий терм обозначается следующим образом: ${}^{\nu}\Lambda$.

В этих обозначениях симметричное решение для координатной части волновой функции (т. е. решение ψ^c) соответствует терму ${}^1\Sigma$ (т. е. $\Lambda = 0$, $S = 0$, $\nu = 1$), а антисимметричное (ψ^a) — терму ${}^3\Sigma$ ($\Lambda = 0$, $S = 1$, $\nu = 3$). Очевидно, что терму ${}^3\Sigma$ соответствуют три состояния. В двух состояниях спин направлен по оси симметрии молекулы (в одном или противоположном направлении), а в третьем — перпендикулярно оси симметрии.

Следует заметить, что в теории молекул (как простых, так и в особенности сложных) большую роль играют вопросы симметрии. Если, например, произвести зеркальное отражение в плоскости, проходящей через ось симметрии молекулы, которую мы направим по оси z , то энергия молекулы должна оставаться неизменной¹⁾. Однако если при этом проекция на ось симметрии орбитального момента количества движения или спинового отличны от нуля ($\Lambda \neq 0$ или $S_z \neq 0$), то вращения, которые можно сопоставить этим моментам²⁾, меняют свое направление на противоположное.

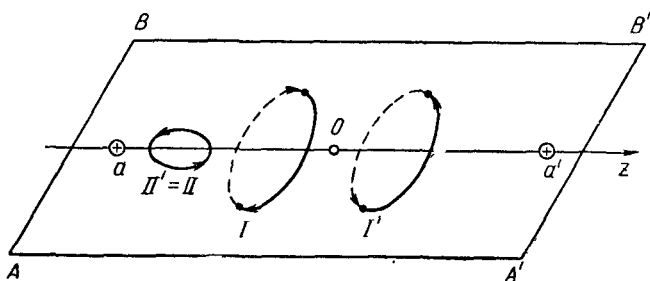
¹⁾ Если мы произведем отражение в плоскости xz , то это зеркальное отражение сведется к замене y на $-y$.

²⁾ Как известно, момент количества движения $L = [rp]$, равный векторному произведению, является аксиальным вектором, направление которого имеет лишь условный характер (в правой системе координат одно, а в левой — противоположное). Однако направление контура, ограничивающего площадь и построенного на векторах r и p как в правой, так и в левой системах координат остается в обеих системах неизменным.

Для простоты ограничимся рассмотрением состояний, когда орбитальный момент равен нулю, т. е. $\Lambda = 0$ (Σ -термы). В случае если при этом также и общий спин электронов обращается в нуль, т. е. $S = 0$, то при зеркальном отражении никакого изменения состояний не должно произойти.

Если же спины обоих электронов параллельны ($S = 1$), то возможны следующие случаи.

а) Проекция спина на ось симметрии равна нулю ($S_z = 0$). Тогда вращение, характеризующее спин, в результате этого зеркального отражения, в плоскости которого оно лежит, остается



Фиг. 27.8. Изменение момента количества движения при отражении в плоскости $AA'B'B$, проходящей через ось симметрии z .

Если вращение, характеризующее момент количества движения, происходит в плоскости, перпендикулярной к плоскости $AA'B'B$ (см. I), то после отражения направление этого вращения будет противоположным (см. I'). Если же вращение происходит в плоскости отражения, то при отражении оно не меняется ($II' = II$).

неизменным (см. фиг. 27.8; первоначальный и зеркально-отраженный спин характеризуется вращением, изображенным символами II и II'). Соответствующие термы с неизменным при зеркальном отражении спином обозначаются символом Σ^+ .

б) Проекция спина на ось симметрии z отлична от нуля ($S_z = \pm 1$). Тогда при зеркальном отражении вращение, которое мы можем сопоставить спину, изменит свое направление на обратное (см. фиг. 27.8; первоначальный спин характеризуется вращением I и зеркально-отраженный — вращением I').

Соответствующие термы, спин которых при зеркальном отражении изменяется, обозначаются символом Σ^- .

Таким образом, возможны следующие термы основного состояния молекулы водорода:

$$\begin{aligned} & {}^1\Sigma^+ (\Lambda = 0, S = 0), \\ & {}^3\Sigma^+ (\Lambda = 0, S = 1, S_z = 0), \\ & {}^3\Sigma^- (\Lambda = 0, S = 1, S_z = \pm 1), \end{aligned} \quad (27.47)$$

причем последний терм является, очевидно, двукратно вырожденным.

Если молекула состоит из двух одинаковых атомов, то появляется еще новое свойство симметрии, а вместе с тем и дополнительная характеристика электронных термов.

В самом деле, двухатомная молекула с одинаковыми ядрами должна обладать не только плоскостью, но еще и центром симметрии. Этим центром симметрии является точка, делящая пополам линию, соединяющую ядра. На фигуре 27.8 она находится в начале координат, т. е. в точке $z=0$. При этом преобразовании симметрии мы должны изменить знаки координат всех электронов. В частности, для молекулы водорода (при неизменных координатах ядер) при этом преобразовании симметрии электрон 1 и электрон 2 должны обменяться своими местами (т. е. координатами).

Тогда симметричная волновая функция ψ^c остается неизменной, т. е. будет четной (что обозначается индексом g), а антисимметричная функция ψ^a изменяет свой знак, т. е. будет нечетной (что обозначается буквой u). Таким образом, основные возможные состояния молекулы водорода с учетом обоих свойств симметрии следует обозначать так:

$${}^1\Sigma_g^+, {}^3\Sigma_u^+, {}^3\Sigma_u^-$$

и т. д.

Насколько важную роль играют вопросы симметрии при образовании молекулы, видно из того факта, что для большинства двухатомных молекул (здесь мы это показали для молекулы водорода) из всех возможных состояний осуществляется такое состояние, для которого волновая функция инвариантна по отношению ко всем преобразованиям симметрии молекул¹⁾, т. е. основным термом молекулы водорода является терм ${}^1\Sigma_g^+$. Однако в настоящей книге мы не имеем возможности останавливаться более подробно на всех этих вопросах симметрии.

Следует также заметить, что в устойчивом состоянии молекулы водорода спины двух электронов всегда имеют противоположное направление. В то же самое время известны два типа молекул водорода, называемых параводородом и ортоводородом. Эта терминология относится не к ориентации спинов электронов, а к ориентации спинов ядер. У параводорода спины ядер направлены антипараллельно, а у ортоводорода — параллельно. Поскольку число возможных состояний двух частиц с параллельными спинами в три раза больше, чем с антипараллельными, то поэтому при комнатной температуре обычный водород представляет собой равновесную смесь 25% параводорода и 75% ортоводорода. При понижении температуры

¹⁾ В качестве исключения из этого правила можно привести, например, молекулу O_2 , основным термом для которой является ${}^3\Sigma_g^-$.

при наличии катализатора (например, уголь) процент параводорода в равновесной смеси увеличивается и при 0°K достигает практически 100%. Полученный при низких температурах параводород весьма устойчив и может сохраняться в течение нескольких недель при комнатной температуре в такой неравновесной системе. Ортоводород в чистом виде не получен. Различие в теплопроводностях при низких температурах (у параводорода большая) используется для определения процентного содержания смеси. Точно так же у пара- и ортоводорода несколько различные энергии диссоциации и оптические свойства.

е. Теория валентности

Остановимся теперь на объяснении понятия химической валентности на основе квантовой механики. Как известно, под химической валентностью понимается свойство атома соединяться с определенным числом других атомов. Как было отмечено, первым успехом квантовой теории в области химических свойств атома явилось объяснение гетерополярных химических соединений (теория Косселя), образующихся благодаря перераспределению электронов во внешних оболочках атомов. По этой теории численная величина валентности определяется числом электронов, которые атом отдает другому атому (положительная ионная валентность) или приобретает от него (отрицательная ионная валентность). При образовании молекулы электроны во внешних оболочках атомов перераспределяются так, что валентности атомов насыщаются.

Дальнейшим успехом квантовой теории в исследовании образования молекулы явилась теория Гайтлера — Лондона. С помощью последней удалось объяснить образование простейшей гомеоплярной молекулы — H_2 , что явилось основой современных представлений о так называемой ковалентной связи. Согласно этой теории, при образовании гомеоплярной молекулы водорода имеет место взаимная компенсация спинов валентных электронов. Обобщая эти результаты, можно сделать вывод о том, что вообще образование гомеоплярных молекул происходит при условии взаимной компенсации спинов валентных электронов и поэтому подобную валентность иногда называют также спиновой.

Поскольку насыщение валентностей состоит во взаимной компенсации спинов валентных электронов, химическую валентность атомов следует определять числом электронов внешней оболочки с некомпенсированным спином.

С целью иллюстрации этих положений рассмотрим конкретные примеры. На фиг. 27.9 приведены конфигурации основных состояний нескольких элементов периодической системы. Элек-

тронные состояния изображены в виде ячеек, причем электроны изображены стрелками, направления которых соответствуют ориентации их спинов. На фиг. 27.9 видно, что конфигурация внешней оболочки атома водорода $(1s^1)S$ соответствует одновалентной связи. Валентность, равная единице для водорода, на единицу меньше мультиплетности его термов, равной двум (мультиплетность обозначается индексом слева сверху у символа термина S).

	$1s$	$2s$	$2p$				
H	↑						$(1s^1)$
He	↑↓						$(1s^2)$
B	↑↓	↑↓	↑				$(1s^2 2s^2 2p^1)$
B	↑↓	↑↓	↑	↑			$(1s^2 2s^1 2p^2)$
N	↑↓	↑↓	↑	↑	↑		$(1s^2 2s^2 2p^3)$
N	↑↓	↑↓	↑↓	↑			$(1s^2 2s^2 2p^3)$
N ⁺	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	$(1s^2 2s^1 2p^3)$
O	↑↓	↑↓	↑↓	↑			$(1s^2 2s^2 2p^4)$
O	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑		$(1s^2 2s^2 2p^5)$
F	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	$(1s^2 2s^2 2p^5)$
F ⁻	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	$(1s^2 2s^2 2p^6)$

Фиг. 27.9. Схема заполнения электронных оболочек некоторых атомов с учетом спина.

Гомеоплярная валентность атомов отмечена точкой, а ионная валентность — знаком «+» (положительная) или «-» (отрицательная).

Это объясняется наличие нескольких валентностей у элементов различных групп периодической системы (см. табл. 27.2).

Точно так же основное состояние атома гелия имеет конфигурацию $(1s^2)$. Откуда видно, что мультиплетность равняется единице (1S), а вместе с тем валентность равняется нулю.

Атом бора ($Z=5$) имеет основное состояние $(1s^2 2s^2 2p^1)$, соответствующее дублету (2P), и, следовательно, валентность, равную единице. Однако возможно возбужденное состояние $(1s^2 2s^1 2p^2)$, соответствующее квартету (4P) и являющееся трехвалентным. Таким образом, сравнительно просто

Таблица 27.2

Мультиплетность и гомеоплярная валентность

Группа периодической системы	I	II	III	IV	V	VI	VII
Мультиплетность	2	1, 3	2, 4	1, 3, 5	2, 4, 6	1, 3, 5, 7	2, 4, 6, 8
Валентность ¹⁾	1	0, 2	1, 3	0, 2, 4	1, 3, 5	0, 2, 4, 6	1, 3, 5, 7

¹⁾ Жирным шрифтом указана основная валентность.

Интересно отметить, что в то время как элементы группы кислорода и галогены в согласии с экспериментом могут обладать несколькими различными валентностями, атомы O и F обнаруживают лишь основную валентность. Последнее объясняется тем обстоятельством, что для повышения их мультиплетности электрон должен быть переведен в оболочку с большим значением главного квантового числа, что является энергетически невыгодным (подоболочка d у них отсутствует), в то время как у других элементов этих групп в тех же столбцах этот переход может быть совершен между состояниями, лежащими в той же оболочке, но обладающими другими значениями l .

Отметим также, что, согласно приведенной на фиг. 27.9 конфигурации, азот в основном состоянии ($1s^2 2s^2 2p^3$) является трехвалентным (три электрона в $2p$ -подоболочке имеют параллельные спины). Однако он может также быть одновалентным (спины двух электронов в $2p$ -подоболочке антипараллельны) и даже пятивалентным ($1s^2 2s^1 2p^3$) (к четырем спиновым валентностям, обусловленным тем, что спины электронов в $2s$ - и $2p$ -подоболочках параллельны, добавляется пятая ионная валентность, связанная с удалением второго электрона из подоболочки $2s$). В связи с этим отметим, что ионная валентность кислорода и фтора такая же, как и спиновая.

Следует заметить, что начиная с 1962 г. ученые начали открывать химические соединения инертных газов, например впервые возможность образования молекул с участием инертных газов была доказана Бартлеттом, получившим соединение с ионной связью:



Затем были открыты фториды: XeF_2 , XeF_4 , XeF_6 и т. д., образование которых, по-видимому, связано с переходом в атоме ксенона электронов из $5s$ - или $5p$ - состояний внешней оболочки в $5d$ -состояния, когда возможны появления некомпенсированных спинов. Эти атомные переходы сопровождаются известной затратой энергии, которая должна быть скомпенсирована энергией связи в молекуле.

В основном же состоянии атома ксенона все спины электронов внешней оболочки ($5s^2 5p^6$) будут скомпенсированы и ксенон не сможет вступать в химические реакции. Подчеркнем также, что строгое разделение химических связей на гомеополлярные и гетерополлярные, вообще говоря, невозможно. Оба типа связи соответствуют крайним случаям распределения электронной плотности в незаполненных оболочках. Случай крайней асимметрии в распределении электронной плотности между атомами соответствует гетерополлярной молекуле. Такая молекула обладает дипольным

моментом, и ее можно рассматривать как ионное образование. Случай одинакового закона распределения электронной плотности относительно атомов в молекуле соответствует гомеоплярной связи. Дипольный момент такой молекулы отсутствует, и ее необходимо рассматривать как образование из двух нейтральных атомов.

Квантовая теория дает общий подход к объяснению валентных сил и включает оба типа связи (гомео- и гетерополярную) в единую схему. Одним из важных достоинств квантовомеханической теории молекулы H_2 Гайтлера—Лондона является то, что она сумела объяснить насыщение гомеоплярных соединений как насыщение спинов электронных оболочек при объединении электронов в пары с антипараллельными спинами. При приближении атома водорода к молекуле H_2 дополнительных пар, имеющих скомпенсированные спины, не образуется и, следовательно, не получается какого-либо выигрыша в энергии. Поэтому молекула H_3 не может существовать.

Однако необходимо подчеркнуть, что теория Гайтлера—Лондона разработана только для молекул, состоящих из атомов, находящихся в s -состоянии, и поэтому распространение ее выводов на сложные атомы носит до некоторой степени качественный характер.

ж. Ферромагнетизм

Квантовая механика открыла возможность объяснения физической природы одного из весьма важных явлений— ферромагнетизма. Еще из первых опытов по наблюдению гиромагнитных эффектов (Эйнштейн—де-Гааз и др., см. § 16 п. «в») становилось очевидным, что существенная роль в явлении ферромагнетизма принадлежит «элементарным» магнитам— электронным спинам. Однако детальное развитие ферромагнетизма оказалось возможным лишь после создания квантовой механики.

Советский физик Я. И. Френкель и В. Гейзенберг (1928) впервые показали, что в объяснении ферромагнетизма ведущая роль принадлежит обменному взаимодействию электронов ферромагнетика. Обменные силы обуславливают устойчивость таких состояний ферромагнетика, для которых характерна параллельная ориентация всех электронных спинов.

Вначале Гейзенберг предположил, что прямое обменное взаимодействие между электронами соседних атомов ферромагнетика должно, так же как и при образовании гомеоплярной молекулы водорода, привести к определенной ориентации нескомпенсированных спинов электронов, причем энергетически более выгодной должна оказаться параллельная ориентация.

Однако расчеты по модели Гейзенберга, произведенные недавно на вычислительных машинах, показали, что энергия прямого обменного взаимодействия очень мала и не может обеспечить образование ферромагнитного состояния, а в некоторых случаях энергетически становится более выгодной антипараллельная ориентация спинов (так же как и у молекул водорода), что ведет фактически к антиферромагнетизму.

К сравнительно хорошим количественным результатам для редкоземельных ферромагнитных (например, Gd) и антиферромагнитных (например, Dy) металлов приводят расчеты (выполненные также на вычислительных машинах), основанные на представлении о так называемом косвенном обменном

взаимодействию, в осуществлении которого принимают участие электроны проводимости.

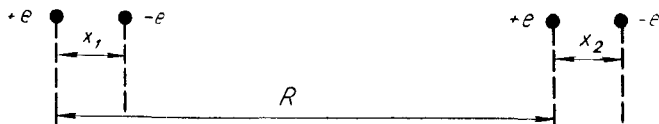
Возникновение ферромагнетизма в переходных металлах (Fe, Ni, Co) может быть также связано с косвенным обменом через электроны проводимости. Более эффективным в этом случае является обменное взаимодействие между электронами проводимости узких d полос, благодаря чему возникает разность энергии между подполосой с положительным и подполосой с отрицательным спином и неодинаковое заполнение этих полос (Слетер, Стонер, Вольфарт).

Исследование изменения электрического сопротивления никеля в магнитном поле в области полей порядка 10^5 эрстед при низких температурах, а также новые результаты исследования эффекта Керра позволили судить о форме поверхности Ферми в кристаллах никеля и оценить ширину энергетической щели между зонами с положительным и отрицательным направлением спина. Полученные оценки ширины этой щели (0,7 эв) подтверждают возможность существования ферромагнетизма некоторых групп электронов, участвующих в проводимости¹⁾.

3. Силы Ван-дер-Ваальса

Помимо рассмотренных нами валентных сил, существенную роль в межмолекулярных взаимодействиях играют особые силы притяжения — силы Ван-дер-Ваальса. Эти силы оказываются существенными на сравнительно больших расстояниях R , там, где короткодействующие валентные силы ничтожно малы.

Силы Ван-дер-Ваальса можно рассчитать в рассмотренной нами задаче о молекуле водорода, если перейти ко второму приближению теории возмущений. Мы, однако, обратимся к простому примеру, решение которого



Фиг. 27.10. Взаимодействие двух электрических диполей (силы Ван-дер-Ваальса).

методами квантовой механики не представляет труда и тем не менее дает известное представление о квантовой природе этих сил.

Рассмотрим взаимодействие двух электрических диполей с моментами $P_1 = ex_1$, $P_2 = ex_2$, находящимися на расстоянии R друг от друга (см. фиг. 27.10). Потенциальная энергия этого взаимодействия для случая расстояния R , значительно большего, чем размеры диполей, равна:

$$V = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R+x_2-x_1} - \frac{e^2}{R+x_2} - \frac{e^2}{R-x_1} = -2 \frac{x_1 x_2}{R^3} e^2 = -\frac{2P_1 P_2}{R^3}. \quad (27.48)$$

¹⁾ Современные представления о природе ферромагнетизма изложены в статьях Фримэна, Фриделя, Ватсона, Андерсона и др.; переводы опубликованы в сборнике: «Теория ферромагнетизма металлов и сплавов», ИЛ, М., 1963.

В качестве таких диполей можно рассмотреть два осциллятора, находящихся на большом расстоянии друг от друга. Величина дипольного момента определяется амплитудой колебаний. В случае, если оба осциллятора не колеблются ($x_1 = x_2 = 0$), с точки зрения классической теории взаимодействие между ними отсутствует: $V = 0$. Однако из общих соображений квантовой механики (см. § 10 «в») следует, что колебания осциллятора не прекращаются даже в том случае, когда осциллятор не возбужден (нулевые колебания). Это обстоятельство приводит к тому, что взаимодействие диполей осцилляторов не прекращается, даже если они находятся в наименьшем состоянии.

Рассмотрим связанные колебания двух гармонических осцилляторов, между которыми действуют силы притяжения с потенциалом (27.48). Уравнение Шредингера для стационарных состояний:

$$(E - H^0 - V)\psi(x_1, x_2) = 0, \quad (27.49)$$

где

$$H^0 = \frac{1}{2m_0} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^2 + \frac{1}{2m_0} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^2 + \frac{m_0 \omega^2 x_1^2}{2} + \frac{m_0 \omega^2 x_2^2}{2},$$

$$V = -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}, \quad (27.50)$$

после введения постоянных:

$$\alpha = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}, \quad \beta = \frac{m_0 \omega}{\hbar}, \quad \gamma = \frac{2m_0 e^2}{R^3 \hbar^2}, \quad (27.51)$$

принимает вид:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \alpha - \beta^2 x_1^2 - \beta^2 x_2^2 + 2\gamma x_1 x_2 \right\} \psi(x_1, x_2) = 0, \quad (27.52)$$

где m_0 — приведенная масса осциллятора.

В случае отсутствия взаимодействия ($\gamma = 0$) решение представляет собой произведение волновых функций независимых осцилляторов, а энергия равна сумме энергий соответствующих колебаний:

$$E = E_1 + E_2 = \hbar\omega(n + 1/2) + \hbar\omega(n' + 1/2), \quad (27.53)$$

причем в основном состоянии системы (в отсутствие возбуждения $n = n' = 0$) нулевая энергия равна:

$$E^0 = \hbar\omega. \quad (27.54)$$

Учет взаимодействия нетрудно провести введением нормальных координат:

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(y_1 + y_2), \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(y_1 - y_2). \quad (27.55)$$

При этом (27.52) переходит в уравнение с разделяющимися переменными:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \alpha - (\beta^2 - \gamma)y_1^2 - (\beta^2 + \gamma)y_2^2 \right\} \psi = 0, \quad (27.56)$$

решение которого очевидно (см. § 10). Собственные значения энергии имеют вид:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ \sqrt{\beta^2 - \gamma} + \sqrt{\beta^2 + \gamma} \right\}. \quad (27.57)$$

Для больших расстояний между осцилляторами параметр γ исчезающе мал: $\gamma = \frac{2m_0 c^2}{\hbar^2 R^3} \rightarrow 0$, в этом случае из последней формулы следует предыдущий

результат: $E^0 = \hbar\omega$. Поправку следующего приближения мы найдем, если разложим радикалы (27.57) в ряд Тейлора по величине γ/β^2 :

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ \sqrt{1 - \frac{\gamma}{\beta^2}} + \sqrt{1 + \frac{\gamma}{\beta^2}} \right\} = \hbar\omega + V, \quad (27.58)$$

где

$$V = -\frac{1}{2} \hbar\omega \frac{e^4}{m_0^2 \omega^4} \frac{1}{R^6}. \quad (27.59)$$

Из этой формулы следует, что взаимодействие осцилляторов приводит к уменьшению нулевой энергии. Потенциал V , зависящий от расстояния между осцилляторами, имеет отрицательный знак, таким образом, сила взаимодействия осцилляторов обладает характером притяжения.

Силы притяжения, определенные потенциалом (27.59), являются типично квантовыми и исчезают при переходе к классическому приближению ($\hbar \rightarrow 0$). Эти силы называются силами Ван-дер-Ваальса.

Рассмотренное нами взаимодействие двух гармонических осцилляторов может служить в известном приближении моделью взаимодействия двух электрически нейтральных систем.

Согласно полученным результатам нулевые колебания приводят к тому, что атомы вызывают друг в друге малые дипольные моменты, в результате чего между атомами возникают характерные силы притяжения — силы Ван-дер-Ваальса.

Силы Ван-дер-Ваальса убывают на бесконечности достаточно быстро $\sim 1/R^7$, однако не по экспоненциальному закону. Это приводит, в частности, к весьма важной особенности этих сил: они играют существенную роль не только на расстояниях порядка радиуса молекулы, но и на значительно больших расстояниях (вне молекулы). Последнее обстоятельство является принципиальным для теории газов: этими силами объясняется отступление уравнения Ван-дер-Ваальса от уравнения состояния идеального газа.

На малых расстояниях взаимодействие сводится к быстрорастущему отталкиванию.

н. Понятие о квантовых усилителях и генераторах

Рассмотрим ансамбль атомов или молекул, которые могут находиться в некоторых определенных энергетических состояниях $E_1 < E_2 < E_3 \dots$

Как мы уже отмечали в § 9, если атомная система находится на возбужденном уровне E_2 , то она может перейти на более низкий E_1 двояким способом: во-первых, возможны спонтанные переходы, т. е. переход без какой-либо связи со внешним излучением, и, во-вторых, возможны вынужденные переходы, вызываемые электромагнитным излучением соответствующей частоты.

Спонтанное излучение, обязанное самопроизвольным переходам (вероятность перехода A_{21}), испускается по различным направлениям с беспорядочной фазой, т. е. представляет собой некогерентное излучение.

Направление распространения, фаза и поляризация вынужденного или индуцированного излучения (вероятность перехода $\rho_{\omega} B_{21}$, ρ_{ω} — спектральная плотность внешнего излучения) должны совпадать с направлением распространения, фазой и поляризацией внешнего электромагнитного поля. Это приводит к тому, что вынужденное излучение отдельных атомов должно быть когерентным.

Полная вероятность перехода с более высокого уровня на нижний ($E_2 \rightarrow E_1$) определяется выражением:

$$\omega_{21} = A_{21} + \rho_{\omega} B_{21}. \quad (27.60)$$

При наличии излучения, обладающего резонансной частотой, система может также переходить с нижнего на более высокий энергетический уровень, поглощая при этом соответствующий квант энергии. Вероятность такого процесса равна:

$$\omega_{12} = \rho_{\omega} B_{12}. \quad (27.61)$$

Следует также подчеркнуть, что никакое излучение не является строго монохроматическим. Оно должно обладать определенной шириной линии. Однако в рассматриваемом здесь случае мы эти детали рассматривать не будем и предположим, что излучение атомов строго монохроматично:

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}. \quad (27.62)$$

Рассмотрим прохождение электромагнитных волн через систему, имеющую два невырожденных уровня E_2 и $E_1 < E_2$. Обозначим число атомов в единице объема с энергией E_2 через N_2 , а с энергией E_1 через N_1 .

Величины N_2 и N_1 носят название населенностей уровней. Тогда интенсивность (мощность индуцированного излучения) единицы объема будет равна:

$$P_{21} = \hbar \omega_{21} N_2 B_{21} \rho_{\omega},$$

а для поглощения будет иметь место соотношение:

$$P_{12} = -\hbar \omega_{21} N_1 B_{12} \rho_{\omega}.$$

Принимая во внимание, что согласно формуле (9.21):

$$B_{12} = B_{21}^{-1}, \quad (27.63)$$

для суммарной мощности индуцированного излучения находим следующее выражение:

$$P = P_{21} + P_{12} = \hbar \omega_{21} B_{21} (N_2 - N_1). \quad (27.64)$$

В случае термодинамического равновесия температура T вполне определяет распределение атомов по энергетическим состояниям:

$$N_2 = C e^{-\frac{E_2}{kT}}, \quad N_1 = C e^{-\frac{E_1}{kT}}, \quad (27.65)$$

и приводит, в частности, к тому, что $N_1 > N_2$. Поэтому проходящее сквозь вещество, находящееся в состоянии термодинамического равновесия, электромагнитное излучение должно всегда им поглощаться ($P < 0$).

Для того чтобы излучение не поглощалось, а, наоборот, усиливалось, т. е. имелось бы отрицательное поглощение, необходимо нарушить состояние термодинамического равновесия и создать такой ансамбль атомов или молекул, для которого населенность нижнего уровня была бы меньше верхнего, т. е. $N_1 < N_2$. Говорят, что такой ансамбль имеет инверсную населенность. Эта идея усиления излучения высказывалась рядом ученых, в том числе советскими физиками — Н. Г. Басовым, А. М. Прохоровым.

¹⁾ Соотношение (27.63) имеет место для невырожденной системы, рассмотрением которой мы здесь и ограничимся. Заметим, что в случае вырожденной системы равенство (27.63) принимает вид:

$$g_1 B_{12} = g_2 B_{21},$$

где множители g_1 и g_2 характеризуют кратность вырождения соответствующего уровня.

Если при инверсной населенности воспользоваться для определения температуры также формулой (27.65), то мы найдем, что она будет характеризоваться отрицательным значением T ($T < 0$). Заметим, что понятие отрицательной температуры носит совершенно формальный характер и может относиться лишь к паре уровней и не характеризует как в случае термодинамического равновесия распределение населенностей по остальным энергетическим состояниям.

Следует заметить, что принцип квантового усиления электромагнитного излучения, основанный на инверсной населенности, применим для любой частоты.

Существенную роль в квантовых усилителях играет и спонтанное излучение.

Допустим, что переход $E_2 \rightarrow E_1$ является разрешенным, т. е., иными словами, имеет место дипольный переход. Тогда время пребывания электронов на верхнем уровне согласно (9.20) будет иметь порядок:

$$\frac{1}{\tau_{\text{спон.}}} = A_{12}^{\text{дип.}} \sim \frac{ca^3}{137\lambda^3}, \quad (27.66)$$

где $\frac{\hbar c}{e_0^2} = 137$ является обратной величиной постоянной тонкой структуры (см. § 15), а радиус $a \sim 10^{-8}$ см — 10^{-9} см.

В случае радиодиапазона ($\lambda \sim 1$ см) время спонтанного излучения будет сравнительно большой величиной ($\tau \sim 10^7$ сек), поскольку оно пропорционально λ^3 , в то время как время индуцированного излучения [см. (9.21)] не будет зависеть от λ и при сравнительно большом значении ρ_ω его можно сделать много меньше $\tau_{\text{спон.}}$.

В оптическом же диапазоне ($\lambda \sim 10^{-5}$ см) в случае разрешенных переходов для времени дипольного спонтанного перехода имеет место обычно малое значение $\tau_{\text{спон.}} \sim 10^{-7}$ сек. Для того чтобы его увеличить, желательно взять возбужденный уровень, переходы с которого на основной являются запрещенными (т. е. должны отсутствовать дипольные переходы). В действительности строго запрещенных переходов нет, но они менее вероятны, чем дипольные, и поэтому последние возбужденные уровни называются метастабильными. Например, в атоме водорода метастабильным уровнем является уровень $2s_{1/2}$, дипольный переход с которого на единственный более низкий уровень $1s_{1/2}$ запрещен (см. § 20). Точно так же в атомах с двумя валентными электронами запрещен переход из триплетного состояния (спины электрона параллельны) в синглетное (спины антипараллельны). В частности, у атома гелия, у которого уровень ортогогелия 3S_1 является метастабильным, переход на более низкий уровень парагелия 1S_0 является запрещенным.

Если имеются два четных¹⁾ (или нечетных) состояния, то, несмотря на то, что дипольный переход между ними запрещен, следующий по порядку величины может быть осуществлен квадрупольный переход, который согласно (9.26) дает значение времени перехода, определяемое выражением:

$$\frac{1}{\tau_{\text{спон.}}} = A_{21}^{\text{дип.}} + A_{21}^{\text{квад.}} \approx \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 \frac{ca^3}{137\lambda^3}. \quad (27.67)$$

¹⁾ Напомним, что для четных состояний волновая функция не меняет свой знак при инверсии пространства ($\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$), а для нечетных изменяет на противоположный. Для атома гелия инверсия пространства эквивалентна перестановке координат двух электронов. Для шаровых функций четность определяется четностью квантового числа, и поэтому дипольные переходы возможны только при $\Delta l = \pm 1$.

Последняя формула написана для запрещенных переходов, когда:

$$\text{Адип.} = 0.$$

В частности, для светового диапазона ($\lambda \sim 10^{-5}$ см) время запрещенного перехода может быть увеличено до $10^{-2} - 10^{-3}$ сек.

Существует несколько методов для получения в веществе состояний с инверсной населенностью, т. е. с отрицательной температурой. Эти методы были разработаны вначале для усиления и генерации излучения в радиодиапазоне. Затем они были перенесены также и для возбуждения других частот, в частности, для светового диапазона.

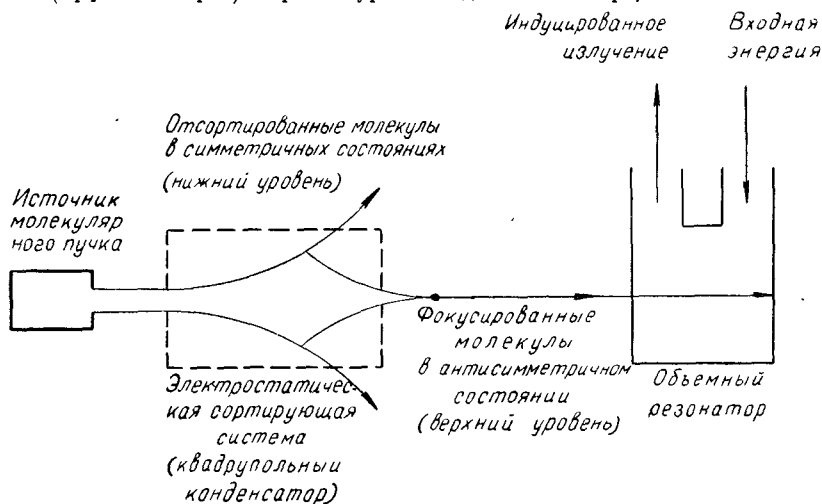
Наиболее простыми в этом отношении оказались двухуровневые системы, т. е. системы, которые усиливают излучения с помощью двух уровней.

В качестве примера можно привести парамагнитный кристалл. При помещении его в магнитное поле происходит расщепление энергетических уровней: уровень ионов с магнитным моментом, направленным против магнитного поля, несколько поднимается, а по полю — понижается, благодаря чему населенность нижнего уровня должна быть больше, чем верхнего. Если быстро изменить направление магнитного поля, то уровни, а вместе с тем и их населенности должны поменяться местами, т. е. образуются уровни с инверсной населенностью, которые могут усиливать электромагнитные волны с соответствующей резонансной частотой, лежащей при $H \sim 10^3$ э — 10^4 э в области радиодиапазона. Полученное состояние неустойчиво. Оно разрушается за время порядка времени релаксации, т. е. за время, когда система, поглотившая энергию электромагнитного поля, вернется в состояние термодинамического равновесия. Очевидно, что время изменения знака магнитного поля должно быть меньше времени релаксации. Для указанных полей при комнатной температуре время релаксации имеет порядок 10^{-6} сек и технически использовать инверсную населенность в этом случае практически невозможно. Однако, если понизить температуру до температуры жидкого гелия, время релаксации увеличивается до 0,1 сек, благодаря чему парамагнитные кристаллы при столь низких температурах могут служить хорошими усилителями. Поскольку инверсное состояние будет сохраняться в течение времени порядка времени релаксации, двухуровневые парамагнитные усилители могут работать только в импульсном режиме. Имеются и другие способы осуществления квантовых усилителей, наиболее удачным из которых является метод трех уровней (идея этого метода будет изложена ниже), позволяющий, в частности, создать квантовый усилитель, работающий в непрерывном режиме. Эти квантовые парамагнитные усилители дали возможность резко увеличить чувствительность радиоприемных установок, нашедших применение в астрономии и радиолокации.

Среды с отрицательной температурой могут быть использованы не только для создания усилителей, но и для создания квантовых генераторов, где необходимо обеспечить условия автоколебательного режима (условие самовозбуждения). В последнем случае с помощью обратной связи часть излученной энергии возвращается обратно в систему и вызывает в последующие моменты времени акты индуцированного излучения. Поскольку индуцированное излучение представляет собой волну, тождественную волне, вызывающей это индуцированное излучение, наличие обратной связи может привести к непрерывному излучению когерентных электромагнитных волн.

Для возникновения генерации наряду с наличием среды с отрицательной температурой необходимо также обеспечить, чтобы мощность индуцированного излучения превосходила мощность потерь в генераторе.

Такой молекулярный генератор, или так называемый *мазер*¹⁾, был создан в 1954—1955 гг. в США Таунсом и др., а также независимо у нас советскими физиками Басовым и Прохоровым²⁾, в котором они использовали молекулы аммиака NH_3 . Молекулы аммиака, так же как и молекулы водорода, имеют два энергетических состояния — нижнее, соответствующее симметричной волновой функции, и верхнее — антисимметричной. Инверсную населенность можно получить, если пропустить пучок молекул аммиака через сортирующую систему, представляющую собой квадрупольный конденсатор, электрическое поле которого увеличивается по мере удаления от оси. Эти уровни молекулы аммиака в электрическом поле сдвигаются в разные стороны (эффект Штарка): верхний уровень сдвигается вверх, а нижний — вниз.



Фиг. 27.11. Схема квантового усилителя и генератора на пучке молекул аммиака.

Поэтому в результате прохождения сквозь сортирующую систему около оси будут фокусироваться лишь молекулы, находящиеся на верхнем уровне (потенциальная энергия на оси достигает минимума), в то время как молекулы, находящиеся на нижнем, т. е. невозбужденном, уровне, стремясь к периферии, где электрическое поле имеет наибольшее значение, будут выталкиваться из пучка (на оси же потенциальная энергия будет максимальной). Благодаря этому в объемный резонатор попадает в основном пучок возбужденных молекул, т. е. молекул с отрицательной температурой, который может усиливать соответствующие резонансные колебания или служить генератором (см. фиг. 27.11). В генераторе должно выполняться условие самовозбуждения,

¹⁾ Термин «мазер» (по-английски «maser») образован начальными буквами следующих английских слов:

Microwave amplification by stimulated emission of radiation, что по-русски означает: «микроволновое усиление, вызываемое индуцированным испусканием». В советской же литературе используется также термин «молекулярный генератор».

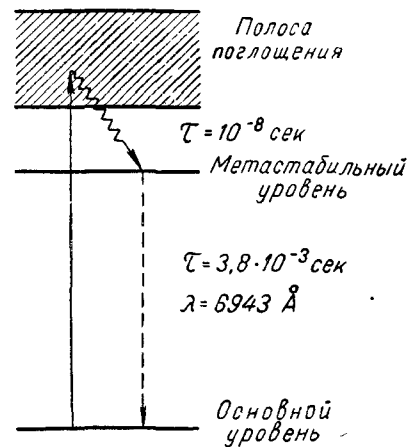
²⁾ За работы по квантовым генераторам Н. Г. Басову и А. М. Прохорову совместно с американским физиком Ч. Таунсом была присуждена Нобелевская премия 1964 года.

т. е. энергия вынужденного излучения должна превышать потери, и поэтому часть ее может быть использована для каких-либо практических целей. Поскольку частота индуцированного излучения определяется природой молекул аммиака, возможность частотной перестройки молекулярного генератора практически исключена. Частота индуцированного излучения равна $2,4 \cdot 10^{10} \text{ сек}^{-1}$ (или в длинах волн $1,27 \text{ см}$), а ширина линии, определяемая в основном временем пролета молекул через резонатор, составляет не более 10 сек^{-1} , т. е. относительное уширение имеет порядок 10^{-9} . Поэтому молекулярный генератор обладает очень высокой стабильностью частоты и может быть прежде всего использован как часы или как стандарт частоты. Учитывая столь малое значение ширины линии, можно подсчитать, что построенные на этом принципе часы должны иметь точность порядка 1 сек за 300 лет непрерывной работы¹⁾.

Атомы и молекулы могут быть использованы в качестве генераторов и приемников не только в сантиметровом, но и в световом диапазоне. Квантовый генератор когерентного света иногда называют «лазер» (первая буква в термине «лазер», M от Microwave, заменяется буквой Л, происходящей от английского слова Light — свет).

В чем же заключается различие между обычным источником света и оптическим генератором?

В обычном источнике (например, Солнце) спектр охватывает широкую полосу частот и отдельные некогерентные кванты, излучаемые, как правило, спонтанно, имеют произвольные фазы и направления. Квантовые генераторы когерентного света, излучая индуцированно, позволяют получить



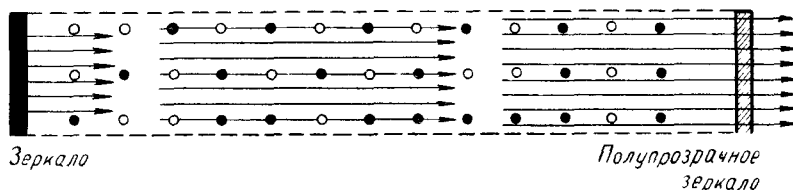
Фиг. 27.12. Схема уровней рубина с концентрацией хрома.

монохроматические пучки света высокой когерентности и чрезвычайно острой направленности. В первом оптическом генераторе, построенном Мейманом в 1960 г., был использован монокристалл бледно-розового рубина (окись алюминия, окрашенная в розовый цвет с небольшой 0,05% примесью хрома). Устройство этого генератора основано на так называемом принципе «трех уровней» (см. фиг. 27.12). Атомы хрома, присутствующие в рубине, поглощают свет от мощной импульсной лампы в широкой полосе, лежащей в зеленой области (см. сплошную стрелку). Затем они практически мгновенно ($\tau \approx 10^{-8} \text{ сек}$) отдают (без излучения) часть своей энергии кристаллической решетке, переходя на метастабильный уровень (см. волнистую стрелку), где они могут удерживаться сравнительно долго ($\tau \approx 3,8 \cdot 10^{-3} \text{ сек}$), причем после перехода на основной уровень (см. пунктирную стрелку) будут излучаться фотоны с длиной волны $\lambda = 6943 \text{ Å}$. Переходы эти индуцируются первыми спонтанно излученными квантами, которые задерживаются в рубине, представляющем собой стержень длиной порядка 10 см с круговым сечением диаметра примерно 1 см , ограниченный посеребренными параллельными

¹⁾ Более подробно о молекулярных генераторах см. статьи Н. Г. Басова с сотрудниками (УФН, 72, 161, 1960; 75, 3, 1961), а также Д. Зинер, Мазеры, ИЛ, М., 1961.

торцами, из которых один представляет собой зеркальную поверхность, а другой полупрозрачную (см. фиг. 27.13). Фотоны, летящие под углом к оси, выйдут наружу и не будут участвовать в дальнейшем процессе. Фотоны, летящие параллельно оси, будут индуцировать излучение новых фотонов, обладающих той же длиной волны ($\lambda = 6943 \text{ \AA}$) и летящих в том же направлении. Этот цепной процесс будет со временем возрастать, если испускание превалирует над поглощением, что должно иметь место при отрицательной температуре, т. е. когда число атомов на метастабильном уровне будет больше, чем на основном. Нарастание энергии излучения в объеме активного вещества (рубина) будет происходить до тех пор, пока каскад (лавина) когерентных фотонов не выйдет сквозь полупрозрачное зеркало.

В настоящее время используются и другие материалы для изготовления лазеров, например, ионы урана, введенные в решетку флюорита (четырёхуровневые лазеры), или газовые генераторы, построенные на смеси газов гелия и неона, и др.



Фиг. 27.13. Схема накопления индуцированного излучения в рубиновом лазере.

Точками обозначены возбужденные уровни, кружками — невозбужденные. Стрелками обозначено распространение когерентного индуцированного излучения.

Поиски новых материалов для лазеров являются поисками атомных структур с подходящим набором энергетических уровней.

Следует подчеркнуть, что как лазеры на твердом теле, так и газовые лазеры обладают сравнительно малым коэффициентом полезного действия (около процента). Это ограничение было неожиданно преодолено с открытием квантовых генераторов, работающих на полупроводниковых переходах: зона проводимости — валентная зона (или уровень примеси) и т. д. В принципе они обещают увеличить к. п. д. почти до 100%. Большую роль в создании полупроводниковых лазеров сыграли наши советские ученые лауреаты Ленинской премии Н. Г. Басов, Б. М. Вул, О. Н. Крохин, Ю. М. Попов и др.

Перспективы использования оптических генераторов огромны: острая направленность позволяет с помощью лучей лазера установить космическую связь. В частности, луч, посланный на Луну, имеет сечение порядка 16 км, в то время как луч обычного прожектора, дойдя до Луны, охватил бы площадь диаметром до 15 000 км. Джаван с сотрудниками с помощью лазеров повторили результат опытов Майкельсона—Марлея. Пуская лазерные пучки по различным направлениям относительно движения Земли, они могли судить, использовал ли другой лазер (т. е. «вторые часы», фактически поставив опыты более высокого порядка), об изменении скорости света по изменению частоты выходящего пучка. Чувствительность их установки давала возможность обнаружить изменение скорости порядка 3 мм/сек.¹⁾ Точно так

¹⁾ Метод Майкельсона (т. е. опыты с «одними часами», которые позволяют измерить величины лишь второго порядка относительно v/c) дает точность до 150 мм/сек.

же с большой точностью был повторен классический опыт Саньяка по обнаружению вращения Земли. Для этого по замкнутому четырехугольнику исследовалось изменение частот, генерируемое четырьмя газовыми лазерами.

Лазеры должны найти большое применение в системах связи. Объем информации, которую можно передать по каналу, пропорционален его рабочей частоте, и в световом диапазоне в принципе можно разместить до 80 миллионов телевизионных каналов, хотя практическое осуществление этой возможности пока что дело далекого будущего. Весьма перспективные результаты следует ожидать в связи с получением в рубиновых лазерах гигантских импульсов света мощностью до 1000 миллионов ватт, длящихся примерно 10^{-8} сек (*гигантский импульс*). Сфокусировав эту мощность в пучок до одной тысячной доли сантиметра в диаметре, можно получить интенсивность 10^{15} вт/см², а электрическое поле около 1 миллиарда вольт на сантиметр, что значительно превышает электрическое поле, связывающее электроны в атоме.

Для сравнения напомним, что с помощью современных приборов удалось сконцентрировать солнечный свет во всем диапазоне частот лишь с интенсивностью 7000 вт/см², а в узкой полосе зеленого света шириной 1 Мгц, где наблюдается максимум излучения Солнца (4800 Å), на Землю падает мощность всего 10^{-3} вт/см². При пропускании гигантских импульсов от лазера сквозь вещество было открыто, что диэлектрическая проницаемость для столь высоких импульсных полей становится функцией поля. В этом случае наряду с основной частотой падающего импульса света будут также излучаться гармоники основной частоты, что приводит, в частности, к удвоению частоты. Эти нелинейные эффекты наблюдаются экспериментально, и для их описания создается новая отрасль науки, так называемая нелинейная оптика. Лазеры позволяют поставить эксперименты с одиночными фотонами (например, исследовать интерференцию двух фотонов, образующихся в результате одной вспышки в двух различных лазерах), где должны наблюдаться, так же как и в опытах Вавилова (см. стр. 33), отклонения (флуктуации) от квантовых (волновых) закономерностей, являющихся по существу статистическими.

На основании вышесказанного не удивительно, что сотни исследовательских групп у нас и за рубежом заняты исследованием и созданием новых конструкций оптических квантовых генераторов, и можно быть уверенным, что в этой области могут неожиданно появиться удивительные новинки и открытия ¹⁾.

¹⁾ Более подробно о квантовых генераторах (лазерах) и их применении см. статьи А. Шавлова (УФН, **75**, 569 (1961); **81**, 745 (1963)), обзоры В. Беннет, Газовые лазеры и О. Хивенса, Лазеры на твердых веществах, изд. «Мир», 1964, а также монографию Б. Лендьева, Лазеры, изд. «Мир», 1964. О полупроводниковых лазерах см. дополнение к последней монографии, написанное О. Н. Крехиным и Ю. М. Поповым. Там же приведен список оригинальных статей. С. А. Ахманов, Р. В. Хохлов, Проблемы нелинейной оптики, изд. АН СССР, 1964.

ЧАСТЬ III

ОСНОВЫ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ И ТЕОРИИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

§ 28. НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ТЕОРИИ ЯДРА

а. Основные сведения об атомном ядре

Как указывалось, опыты Резерфорда (1911) позволили установить существующую модель атома. Было показано, в частности, что атом состоит из центрального положительно заряженного ядра, в котором сосредоточена почти вся масса атома, и вращающихся вокруг ядра электронов (планетарная модель). Вопросы, связанные с движением электронов вокруг ядра и строением электронной оболочки атома, что определяет в основном свойства атома, были подробно рассмотрены в предыдущих частях книги.

В настоящей части мы кратко остановимся на современных представлениях о структуре атомного ядра. Несмотря на большие успехи, достигнутые за последнее десятилетие в изучении строения ядра и ядерных сил, теория атомного ядра к настоящему времени разработана значительно хуже, чем теория атома.

Опыты Резерфорда положили начало не только изучению структуры атома, но и исследованию строения ядра.

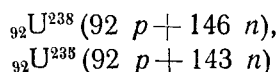
Перечислим коротко основные сведения о ядре.

Строение ядра

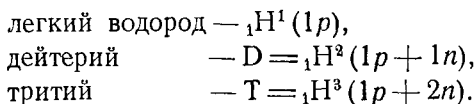
Согласно современным представлениям, ядра всех элементов состоят из протонов и нейтронов (протоны и нейтроны обычно объединяют общим названием — нуклоны). Представление о нейтронно-протонном составе ядра впервые было выдвинуто независимо Иваненко и Гейзенбергом (1932 г.) вслед за открытием нейтрона. Атомное ядро характеризуется числом протонов (порядковый номер Z) и общим числом частиц, т. е. числом протонов и нейтронов (массовое число A).

Протон — элементарная частица с положительным электрическим зарядом $e_0 = 4,803 \cdot 10^{10}$ эл. стат. ед., по абсолютному значению равным заряду электрона, и массой, равной $M_p = 1836,12 m_0$ ($m_0 = 9,108 \cdot 10^{-28}$ г — масса электрона). Нейтрон — элементарная частица с массой, большей массы протона примерно на 2,5 m_0 и равной $M_n = 1838,65 m_0$, не обладающая электрическим зарядом.

Для обозначения ядра, содержащего Z протонов и N нейтронов, а следовательно, $Z + N = A$ нуклонов, т. е. имеющего массовое число A , используется следующая запись: ${}_Z X^A$, где X — символ химического элемента, соответствующего данному Z . Атомы, содержащие одинаковое число протонов, но отличающиеся числом нейтронов, называются *изотопами*. Например, изотопы урана:



имеют одно и то же число протонов — 92. Одинаковое число протонов (один протон) имеют изотопы водорода:



Ядра с одинаковым массовым числом A называют *изобарами*, а ядра с одинаковым числом нейтронов, но с различным числом протонов называют иногда *изотонами*.

Моменты ядер

Подобно атомам, ядра, вообще говоря, обладают механическими моментами, или спинами. Механические моменты ядер имеют двойное происхождение: они связаны, во-первых, с движением нуклонов по орбите в ядре и, во-вторых, с наличием у составляющих ядро нейтронов и протонов собственных механических моментов. Спин у протона и нейтрона в точности такой же, как у электрона, т. е. равен $\hbar/2$. Поскольку орбитальные моменты могут принимать лишь значения, кратные \hbar , ядра с четным числом нуклонов имеют целочисленные спины, а ядра с нечетным числом нуклонов — полуцелые. Более того, экспериментально установлено, что спины всех четно-четных ядер (т. е. ядер с четным числом протонов и четным числом нейтронов) равны нулю.

Помимо механических моментов, атомные ядра обладают также и магнитными моментами, которые связаны отчасти с орбитальным движением протонов и отчасти с собственными магнитными моментами нуклонов. Магнитные моменты ядер примерно на три порядка меньше магнитного момента электрона и измеряются в

ядерных магнетонах $\frac{e\hbar}{2M_p c}$, где M_p — масса протона. В этих единицах магнитные моменты протона и нейтрона оказываются соответственно равными 2,793 и —1,913 (более подробно см. § 21). У ядер известны как положительные, так и отрицательные магнитные моменты, которые имеют тот же порядок величины, что и магнитные моменты самих нуклонов.

Размеры ядер

Еще в экспериментах Резерфорда по рассеянию альфа-частиц было обнаружено, что линейные размеры ядра примерно в 10^3 раз меньше размеров атома ($\sim 10^{-8}$ см), т. е. оказываются $\sim 10^{-13}$ см. Новейшие эксперименты Хофштадтера по рассеянию электронов высоких энергий на ядрах, а также экспериментальные данные о положении уровней в мю-мезоатомах позволили уточнить наши сведения о размерах ядер. При этом были обнаружены следующие особенности структуры атомных ядер. 1) Ядра не имеют резкой границы; однако плотность ядерного вещества на границе спадает быстро (примерно по экспоненциальному закону). 2) Плотность ядерного вещества во внутренней области примерно постоянна у всех ядер, кроме самых легких. 3) Линейные размеры ядер в общем растут пропорционально кубическому корню из массового числа A . У не слишком легких ядер толщина поверхностного слоя остается примерно постоянной. Кроме того, различные данные ядерной физики указывают на то, что не все ядра являются сферически-симметричными. Таким образом, понятие о радиусе ядра не является вполне однозначным. Однако во многих случаях оказывается достаточным характеризовать ядро некоторым средним радиусом R . Различные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что радиусы ядер R возрастают в общем пропорционально $A^{1/3}$ (т. е. объем ядра пропорционален числу частиц):

$$R = R_0 A^{1/3} \text{ см,}$$

где R_0 — некоторая постоянная, значения которой, определяемые из сравнения теории того или иного эффекта с экспериментом, лежат в пределах от $1,2 \cdot 10^{-13}$ (электромагнитные эффекты) до $1,4 \cdot 10^{-13}$ см (ядерные эффекты).

Масса ядра и энергия связи

В атомной физике энергию частиц принято выражать в электронвольтах (эв) и в миллионах электронвольт ($M\text{эв}$)¹⁾.

¹⁾ Напомним, что электронвольт соответствует энергии электрона, которую он получает, пройдя разность потенциалов в 1 вольт. Легко подсчитать, что $1 \text{ эв} = 1,602 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$.

В этих единицах, в частности, энергии покоя электрона, протона и нейтрона оказываются соответственно равными:

$$\begin{aligned} m_0c^2 &= 0,51 \text{ Мэв}, \\ M_p c^2 &= 938,3 \text{ Мэв}, \\ M_n c^2 &= 939,5 \text{ Мэв}. \end{aligned}$$

В ядерной физике с 1961 г. за единицу массы выбирается $1/12$ часть массы атома изотопа углерода ${}^{12}_6\text{C}$. Эта единица называется атомной единицей массы (сокращенно *а. е. м.*) и равна:

$$1 \text{ а. е. м.} = 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ г}$$

(соответствующая энергия равна $931,15 \text{ Мэв}$). В атомных единицах массы масса нейтрона равна $1,00880$, а масса атома водорода равна $1,00797$.

Измерения масс атомных ядер, проведенные с достаточной точностью, показывают, что масса ядра всегда меньше (на несколько десятых процента) суммы масс свободных протонов и нейтронов, составляющих ядро. Это уменьшение массы ΔM обусловлено взаимодействием нуклонов. Таким образом, масса M ядра равна:

$$M = M_p Z + M_n (A - Z) - \Delta M.$$

Энергия, удерживающая нуклоны в ядре, как часть полной энергии ядра, должна быть отрицательной ($E = -\Delta M c^2 < 0$), т. е., так же как и в атоме, силы притяжения между частицами ($V < 0$) должны превалировать над их кинетической энергией ($T > 0$). Однако связь нуклонов в ядре более удобно характеризовать работой W , которую необходимо совершить, чтобы разделить ядро на составные части, т. е. на невзаимодействующие покоящиеся протоны и нейтроны:

$$W = c^2 (M_p Z + M_n (A - Z) - M) = c^2 \Delta M.$$

Последняя энергия связана с энергией E соотношением $W = -E$ и называется энергией связи ядра.

Эмпирические данные указывают на примерно линейный рост энергии связи с увеличением массового числа A . Действительно, как явствует из фиг. 28.1, удельная энергия связи (приходящаяся на одну частицу), определяемая как W/A , оказывается примерно постоянной и лежит в пределах от 7 до $8,5 \text{ Мэв}$.

Исключение составляют лишь несколько самых легких ядер, у которых величина W/A быстро растет (с $1,1 \text{ Мэв}$ у ${}^1_1\text{H}^2$ до $2,8 \text{ Мэв}$ у ${}^4_2\text{He}$) и достигает практически насыщения у ${}^4_2\text{He}$ ($\sim 7 \text{ Мэв}$). У тяжелых ядер наблюдается слабое систематическое понижение W/A . Факт насыщения удельной энергии связи W/A связывают с короткодействующим характером ядерных сил, вследствие чего в ядре каждый нуклон может взаимодействовать лишь с неболь-

шим числом своих ближайших соседей. Некоторое систематическое понижение W/A у тяжелых ядер объясняется кулоновским отталкиванием протонов, все возрастающим по мере увеличения числа протонов.

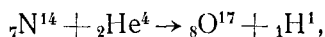
Из сказанного выше становится ясным, почему за (атомную) единицу массы удобнее выбрать не массу атома водорода (который практически не содержит энергии связи), а деленную на A массу какого-нибудь достаточно тяжелого атома. До 1961 г. за единицу массы выбиралась единица, равная $1/16$ массы атома кислорода. Однако после того, как в 1929 г. были открыты редкие изотопы кислорода ${}_8\text{O}^{17}$ и ${}_8\text{O}^{18}$, появились две кислородные единицы: химическая и физическая.

При определении атомной массы атома в химических единицах A_x за единицу измерения берут $1/16$ средней массы естественной смеси кислорода, а в физических единицах A_f — $1/16$ массы изотопа ${}_8\text{O}^{16}$. Существование двух параллельных шкал атомных масс¹⁾ создавало большие неудобства. Поэтому, естественно, возникла мысль об их унификации. Переход к физической шкале повел бы к заметному увеличению атомных весов ($A_f = A_x \cdot 1,000275$). Приемлемой для обеих сторон оказалась углеродная единица, равная $1/12$ части массы изотопа ${}_6\text{C}^{12}$. Эта единица с 1961 г. была окончательно принята. С прежними химическими атомными весами новые (A_c) связаны соотношением $A_c = A_x : 1,000043$, что практически на подавляющем большинстве химических расчетов просто не скажется.

Вследствие большой энергии связи атомного ядра вначале не удавалось превращать одни ядра в другие и поэтому они считались неделимыми.

Открытие естественной радиоактивности (Беккерель, 1896) свидетельствовало о превращении ядер и их сложном строении. Однако долгое время ученые оставались пассивными наблюдателями процессов распада и не могли на них повлиять (замедлить или ускорить).

Впервые искусственная ядерная реакция была осуществлена Резерфордом лишь в 1919 г., когда при обстреле ядер азота альфа-частицами возникали быстрые протоны. Эта реакция, протекающая по схеме²⁾:

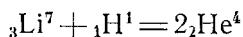


¹⁾ В периодической системе для атомных масс, как правило, использовалась (по 1961 г.) химическая шкала единиц.

²⁾ Следует заметить, что все ядерные реакции идут строго с сохранением массового числа A и порядкового номера Z . В данной реакции $\sum A = 18$, а $\sum Z = 9$.

наблюдалась в камере Вильсона, в которой был зарегистрирован тонкий след, принадлежащий протону, и короткий след, принадлежащий ядру кислорода.

Вскоре после этого другая искусственная реакция была осуществлена Уолтоном и Кокрофтом, которым удалось расщепить ядра Li быстрыми протонами на две альфа-частицы:



Последняя реакция интересна еще и в том отношении, что она идет с выигрышем энергии. В самом деле, масса двух атомов гелия-4 (в атомных единицах массы) равна:

$$2M_{\text{He}} = 2 \cdot 4,0037 = 8,0075.$$

Общая же масса атомов лития-7 и водорода-1 несколько больше:

$$M_{\text{Li}} + M_{\text{H}} = 7,0179 + 1,0081 = 8,0260.$$

Таким образом, в этой реакции происходит уменьшение массы:

$$\Delta M = M_{\text{Li}} + M_{\text{H}} - 2M_{\text{He}} = 0,0185,$$

которое и дает выигрыш энергии:

$$\Delta W = \Delta Mc^2 = 0,0185 \cdot 931,15 = 17,25 \text{ Мэв}.$$

Эта разность в энергиях связи превращается в кинетическую энергию двух разлетающихся альфа-частиц, что и было подтверждено экспериментально¹⁾.

Большое значение в развитии исследований по искусственным превращениям имело открытие нейтрона²⁾. Ядерные реакции под действием нейтронов весьма разнообразны. Это связано с тем обстоятельством, что для нейтрона отсутствует кулоновский потенциальный барьер и они совершенно свободно могут проникать внутрь ядра (напомним, что альфа-частица и протон отталкиваются от ядра и поэтому они должны преодолеть потенциальный барьер прежде, чем проникнуть в ядро).

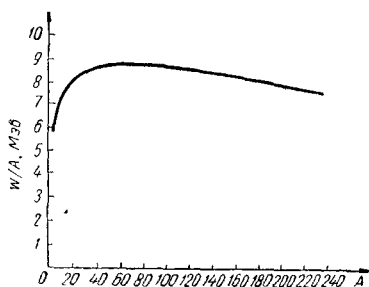
При попадании нейтрона в ядро и образовании составного ядра он приносит энергию, равную сумме его кинетической энергии и энергии связи нейтрона в составном ядре ($\sim 7 \text{ Мэв}$).

¹⁾ В литературе по ядерной физике и физике элементарных частиц часто встречается выражение «превращение массы в энергию». Оно имеет формальный смысл и связано с тем, что между массой (являющейся одной из основных характеристик вещества, а именно его инертности) и энергией (характеризующей, вообще говоря, меру движения) существует определенное количественное соотношение, хотя физические проявления их различны.

²⁾ Нейтрон был открыт Чадвиком в 1932 г. В качестве источников нейтронов можно взять смесь $(\text{Ra} + \text{Be})$ или $(\text{Rn} + \text{Be})$. Нейтрон возникает при этом в результате воздействия альфа-частиц (продукты распада Ra или Rn) на ядра бериллия по реакции ${}_4\text{Be}^9 + {}_2\text{He}^4 = {}_6\text{C}^{12} + {}_0\text{n}^1$.

Таким образом, образующееся при захвате нейтрона составное ядро оказывается сильно возбужденным, в результате чего могут последовать новые ядерные превращения.

При изучении захвата нейтронов ядрами урана было открыто явление деления ядер. Это явление легло в основу современной ядерной энергетики и ядерной техники, поскольку деление тяжелых ядер (урана, плутония) сопровождается большим выделением энергии. В самом деле, как видно из фиг. 28.1, удельная энергия связи тяжелых ядер, достигая максимума примерно у железа, затем начинает уменьшаться за счет кулоновских сил отталкивания, действующих между протонами. Выделяемая при делении энергия (около 1 Мэв на один нуклон) превращается в основном в кинетическую энергию осколков разделившегося ядра. Спонтанное деление (которое энергетически также возможно) наблюдается у естественных элементов сравнительно редко, поскольку для деления невозбужденного ядра должен быть преодолен сравнительно большой потенциальный барьер, связанный с наложением ядерных сил притяжения и кулоновских сил отталкивания (более подробно см. п. «ж» настоящего параграфа).



Фиг. 28.1. Зависимость энергии связи на нуклон W/A от массового числа A .

б. Общие свойства ядерных сил

Энергия связи ядра обязана главным образом специфическим ядерным силам, которые действуют между нуклонами обоих сортов. Кулоновское отталкивание между электрическими зарядами протонов несколько уменьшает эффект специфических ядерных сил.

Согласно гипотезе Юкавы, ядерные силы переносятся пи-мезонным полем, хотя точный закон ядерного взаимодействия (типа закона взаимодействия электрических зарядов) пока что не установлен.

Однако в настоящее время изучены основные особенности ядерных сил.

Прежде всего необходимо отметить очень большую величину сил в пределах их радиуса действия $\sim 10^{-13} \text{ см}$ и резкое падение на расстояниях, больших радиуса действия, иначе говоря, ядерные силы имеют короткодействующий характер.

Другой надежно установленной особенностью специфических ядерных сил между нуклонами является их зарядовая независи-

мость. Это значит, что в одинаковых состояниях ядерное взаимодействие между парой нейтронов такое же, как между парой протонов или же между нейтроном и протоном.

Экспериментально установлено также существование на очень малых расстояниях очень сильного отталкивания между нуклонами (сердцевина Ястрова).

Кроме того, ядерное взаимодействие зависит от ориентации спинов нуклонов, частично имеет нецентральный и обменный характер. Наконец, ядерные силы зависят от скоростей нуклонов, что приводит к спин-орбитальному взаимодействию.

Наиболее важной особенностью ядерных сил является их короткодействующий характер. Это позволяет упрощенно решать целый ряд ядерных задач, даже не зная точной формы ядерного взаимодействия.

в. Понятие о мезонной теории ядерных сил

До открытия ядерных сил были хорошо известны гравитационные и электромагнитные силы. На первый взгляд как гравитационные, так и электромагнитные силы по математической форме весьма сходны. Однако между ними имеется одно принципиальное различие, а именно все гравитационные массы притягиваются друг к другу по закону Ньютона:

$$V_g = -\frac{m_1 m_2}{r},$$

где $m_1' = \sqrt{\kappa} m_1$ — гравитационный заряд, равный произведению массы m_1 на корень квадратный из гравитационной постоянной κ , в то время как одноименные электрические заряды всегда отталкиваются:

$$V_e = \frac{e_1 e_2}{r}$$

и только для разноименных зарядов имеют место силы притяжения. Формально это различие связано со следующим обстоятельством. Ньютоновское гравитационное поле является скалярным и поэтому подчиняется уравнению:

$$\nabla^2 \varphi_g = 4\pi m' \delta(\mathbf{r}), \quad (28.2a)$$

причем потенциальная энергия взаимодействия равна:

$$V_g = m' \varphi_g.$$

В то же время электромагнитное поле является векторным (подчиняется уравнениям Максвелла) и характеризуется четырьмя составляющими вектор-потенциала. Электростатический же потенциал следует рассматривать как четвертую составляющую потенциала (Φ) , которая подчиняется уравнению:

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi e \delta(\mathbf{r}), \quad (28.2b)$$

причем потенциальная энергия взаимодействия равна:

$$V_e = e\Phi. \quad (28.3)$$

Из сопоставления уравнений (28.2a) и (28.2b) видно, что дифференциальные уравнения для скалярного поля и четвертой составляющей векторного поля отличаются знаками правых частей и поэтому дают различные знаки для потенциальной энергии.

Переходя к теории ядерного поля, мы остановимся прежде всего на первоначальном варианте теории Юкавы. Чтобы обеспечить короткодействующий характер ядерных сил, необходимо было предположить, что это взаимодействие переносится особым полем с отличной от нуля массой покоя.

В простейшем варианте теории ядерное поле является скалярным; оно будет описываться (скалярным релятивистским) уравнением Клейна—Гордона (см. § 15):

$$(E^2 - c^2 p^2 - m_\pi^2 c^4) \varphi = 0, \quad (28.4)$$

где $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$, а m_π — масса покоя пи-мезонов.

В случае статического поля, не зависящего от времени, получаем:

$$(\nabla^2 - k_0^2) \varphi = 0, \quad (28.5)$$

где

$$k_0 = \frac{m_\pi c}{\hbar}. \quad (28.6)$$

Если в последней формуле положить $k_0 = 0$, то будем иметь уравнение для гравитационного поля.

Попытаемся обобщить статическое уравнение ядерного поля (28.5) на случай наличия источников, т. е. нуклонов.

Так как это уравнение является скалярным, то при соответствующем обобщении в правую часть уравнения (28.5) необходимо подставить плотность источников нуклонов со знаком плюс.

Таким образом, потенциал Юкавы для ядерных сил в этом простейшем варианте теории будет удовлетворять следующему уравнению:

$$(\nabla^2 - k_0^2) \varphi = 4\pi g \delta(\mathbf{r}), \quad (28.7)$$

а для ядерной потенциальной энергии будем иметь:

$$V = g\varphi. \quad (28.8)$$

Подставляя в (28.7) выражение для трехмерной δ -функции:

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

путем деления на оператор [см. (4.77)], находим следующее выражение для потенциала Юкавы φ :

$$\varphi = -\frac{g}{2\pi^2} \int d^3k \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{k^2 + k_0^2}. \quad (28.9)$$

Вычисляя последний интеграл тем же методом, каким был вычислен интеграл (4.77), находим для потенциальной энергии нуклона в юкавском поле следующее выражение:

$$V = -\frac{g^2}{r} e^{-k_0 r}. \quad (28.10)$$

Здесь $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ — расстояние между двумя частицами. Потенциал Юкавы является одним из простейших потенциалов, с помощью которого можно объяснить короткодействующий характер ядерных сил. В самом деле, на малых расстояниях $k_0 r \ll 1$ потенциал Юкавы дает:

$$V = -\frac{g^2}{r}. \quad (28.11)$$

Мезонный заряд g всегда можно выбрать таким образом, чтобы обеспечить необходимую интенсивность взаимодействия между нуклонами внутри ядра. Заметим, что мезонный заряд g имеет ту же размерность, что и электрический e_0 . Для достижения наилучшего согласия с экспериментом следует положить $g \sim 10e_0$.

На сравнительно больших же расстояниях $k_0 r \gg 1$ благодаря наличию экспоненциального множителя потенциал Юкавы практически обращается в нуль. Таким образом, действие ядерных сил простирается практически на расстояние, не превышающее по порядку величины значение:

$$a = \frac{1}{k_0} = \frac{\hbar}{m_\pi c}. \quad (28.12)$$

Исходя из того факта, что эффективный радиус действия ядерных сил (28.12) должен быть порядка 10^{-13} см, Юкава нашел для массы мезонного поля значение, превышающее в 200 с лишним раз массу электрона. В настоящее время такими частицами считают пи-мезоны (более подробно см. § 31), которые сильно взаимодействуют с нуклонами. Скалярный вариант мезонной теории качественно объясняет ряд основных свойств ядерных сил и в первую очередь их короткодействующий характер.

Кроме того, он объясняет зарядовую независимость взаимодействия между нуклонами, согласно которой силы ядерного взаимодействия между двумя протонами или между двумя нейтронами или между протоном и нейтроном должны быть одинаковыми. Дело в том, что скалярному мезонному полю можно сопоставить нейтральные мезоны, которые могут поглощаться как протонами, так и нейтронами.

Однако этот вариант теории ядерных сил страдает существенным недостатком: он не содержит зависимости сил от ориентации спинов нуклонов. Кроме того, в нейтральной скалярной мезонной теории не учитывается (вопреки экспериментальным данным) взаимодействие нуклонов с помощью заряженных пи-мезонов, приводящее к так называемым обменным силам Гейзенберга — Майораны (см. ниже).

Чтобы учесть спиновый характер взаимодействия между нуклонами, необходимо взять не скалярное мезонное поле, а псевдоскалярное. Как известно, псевдоскаляр, оставаясь, как и скаляр, инвариантным при пространственных поворотах осей координат, отличается от скаляра тем, что при инверсии пространства (т. е. при замене $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow -z$) он изменяет свой знак, в то время как скаляр остается неизменным. В качестве примера псевдоскаляра можно привести объем параллелепипеда, построенного на трех векторах, который, как известно, равен:

$$V = (A [BC]) = \begin{pmatrix} A_x A_y A_z \\ B_x B_y B_z \\ C_x C_y C_z \end{pmatrix}. \quad (28.13)$$

При инверсии пространства все составляющие векторов, а вместе с тем и сам объем изменяют свой знак.

В результате анализа четности волновой функции φ пи-мезонного поля на основе процесса распада π^0 -мезона на два гамма-кванта, а также процесса захвата π^- -мезона дейтроном с образованием двух нейтронов и т. д. было окончательно установлено, что спин пи-мезонов равен нулю и что он описывается псевдоскалярной волновой функцией, т. е. функцией, изменяющей знак при инверсии пространства.

Поведение частиц, описываемых скалярным уравнением, и частиц, описываемых псевдоскалярным уравнением, будет совершенно одинаковым, если

эти частицы или свободны, или движутся в электромагнитном поле, поскольку учет взаимодействия с электромагнитным полем производится путем замены:

$$E \rightarrow E - e\Phi, \quad \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A},$$

которая будет совершенно одинаковой в обоих случаях.

Различие между этими полями возникает при составлении энергии взаимодействия мезонного и нуклонного полей.

В самом деле, в случае псевдоскалярного поля φ величина $g\varphi$ не является скаляром и поэтому она не может быть принята за энергию взаимодействия. Из псевдоскаляра φ можем образовать, например, следующую скалярную величину:

$$V = \frac{g}{k_0} (\boldsymbol{\sigma}\nabla)\varphi. \quad (28.14)$$

В самом деле, ∇ является полярным, а $\boldsymbol{\sigma}$ — аксиальным вектором (напомним, что $\boldsymbol{\sigma}$ — описывает момент количества движения, который как векторное произведение представляет собой аксиальный вектор). Поэтому скалярное произведение $(\boldsymbol{\sigma}\nabla)$ является псевдоскаляром, а все выражение (28.14), представляющее собой произведение двух псевдоскаляров, будет уже скаляром, т. е. может быть принято за энергию взаимодействия.

Благодаря наличию в равенстве (28.14) оператора $(\boldsymbol{\sigma}\nabla)$ энергия взаимодействия двух нуклонов будет равна¹⁾:

$$\begin{aligned} V &= (\boldsymbol{\sigma}_1\nabla) (\boldsymbol{\sigma}_2\nabla) \frac{g^2}{k_0^2} \frac{e^{-k_0 r}}{r} = \\ &= g^2 \left[\frac{1}{k_0^2} S_{12} \left(\frac{1}{r^2} + \frac{k_0}{r} + \frac{k_0^2}{3} \right) + \frac{1}{3} S_{\sigma} \right] e^{-k_0 r} \cdot \frac{1}{r} - \frac{4\pi g^2}{3k_0^2} (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) \delta(r), \end{aligned}$$

где $\boldsymbol{\sigma}_1$ и $\boldsymbol{\sigma}_2$ — спиновые матрицы Паули для обоих нуклонов²⁾.

Если скалярная теория дает объяснение короткодействующего характера ядерных сил, то псевдоскалярная теория позволяет выявить вид операторов, характеризующих спиновую $S_{\sigma} = (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)$ и тензорную часть $S_{12} = 3(\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{r}^0)(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{r}^0) - (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)$ ядерного взаимодействия. Заметим, что ни та, ни другая теория не дает точного совпадения со всей совокупностью экспериментальных данных. Общий спин двух нуклонов в единицах \hbar находится из операторного соотношения:

$$\frac{1}{4} (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)^2 = s(s+1), \quad (28.15)$$

причем спиновую функцию здесь и в дальнейшем мы будем опускать.

Отсюда, принимая во внимание, что $\boldsymbol{\sigma}_1^2 = \boldsymbol{\sigma}_2^2 = 3$, имеем:

$$S_{\sigma} = (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) = -3 + 2s(s+1),$$

или
$$S_{\sigma} = \begin{cases} -3 & \text{при } s=0 \text{ (спины нуклонов антипараллельны),} \\ 1 & \text{при } s=1 \text{ (спины нуклонов параллельны).} \end{cases} \quad (28.15a)$$

¹⁾ Эта формула легко может быть получена, если учесть (28.7), а также соотношение:

$$\nabla_i \nabla_{i'} f = - \frac{3x_i x_{i'} - r^2 \delta_{ii'}}{r^3} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{x_i x_{i'}}{r^2} \nabla^2 f,$$

где $f = \frac{e^{-k_0 r}}{r}$ является функцией r .

²⁾ Дельта-образную часть взаимодействия можно рассматривать как проявление отталкивательной сердцевины Ястрова на малых расстояниях при рассеянии протонов протонами или нейтронов нейтронами с ориентированными спинами, т. е. когда $(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) = -3$ [см. (28.15a)].

Что касается тензорной части ядерного взаимодействия, то она характеризует нецентральную часть взаимодействия и в случае сферической симметрии при интегрировании по углам просто обращается в нуль:

$$\oint S_{12} d\Omega = 0.$$

Таким образом, наряду со взаимодействием, не зависящим от спина (силы Вигнера) и напоминающим собой кулоновские силы, должно существовать взаимодействие, зависящее от взаимной ориентации спинов взаимодействующих частиц, т. е. соответствующее обмену спиновыми состояниями (силы Бартлетта)¹⁾.

Как было указано Гейзенбергом из общих соображений, при взаимодействии протона и нейтрона могут существовать еще обменные силы, связанные с обменом зарядами между ними, что эквивалентно обмену координатами и спинами (силы Гейзенберга).

Наряду с обменом зарядами нуклоны могут обмениваться вместе с тем и спинами, что будет эквивалентно обмену просто координатами (силы Майораны).

Если силы Вигнера и Бартлетта могут переноситься нейтральным мезонным полем, то для объяснения обменных сил Гейзенберга и Майораны необходимо предположить, что взаимодействие переносится полем заряженных мезонов.

Это обменное взаимодействие можно описать, например, следующим образом:

$$p_1, n_2 \text{ (начальное состояние)} \rightarrow n_1, \pi^+, n_2 \text{ (промежуточное состояние)} \rightarrow n_1, p_2 \text{ (конечное состояние)}.$$

Заметим, что заряженные мезоны в данном приближении (пропорциональном $\sim g^2$) могут переносить взаимодействие только между протонами и нейтронами, а не между двумя протонами или двумя нейтронами, взаимодействие между которыми (в указанном приближении) переносится только нейтральными мезонами:

$$(p_1, p_2) \rightarrow (p_1, \pi^0, p_2) \rightarrow (p_1, p_2),$$

или заряженными мезонами в четвертом приближении:

$$(p_1, p_2) \rightarrow (n_1, \pi_1^+, p_2) \rightarrow (n_1, \pi_1^+, n_2, \pi_2^+) \rightarrow (n_1, \pi_2^+, p_2) \rightarrow (p_1, p_2).$$

Для того чтобы все эти возможные типы взаимодействия между нуклонами объединить в единую схему, Гейзенберг предложил протон и нейтрон рассматривать как два зарядовых состояния одной и той же частицы; заряд такой частицы (нуклона) может принимать два значения (зарядовая мультиплетность, см. § 31).

В теории превращений частиц с двумя состояниями может быть использован аппарат, разработанный уже в теории спина. Как известно, спиновые части волновых функций являются матрицами (см. задачу 16.4):

$$\Psi\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

при этом $\Psi\left(\frac{1}{2}\right)$ описывает состояние с проекцией спина на ось z , равной

¹⁾ Оператор обмена имеет вид:

$$P_{\sigma} = \frac{1}{2} (1 + S_{\sigma}) = \begin{cases} 1, & \text{когда спины параллельны,} \\ -1, & \text{когда спины антипараллельны.} \end{cases}$$

$s_z = \frac{1}{2}$ (спин направлен по оси z), а $\Psi\left(-\frac{1}{2}\right)$ — состояние с $s_z = -\frac{1}{2}$ (спин направлен против оси z).

Точно так же зарядовую часть волновой функции нуклона Гейзенберг предложил описывать двухрядной матрицей:

$$\chi = \begin{cases} \chi\left(\frac{1}{2}\right) & (\text{протон}) \\ \chi\left(-\frac{1}{2}\right) & (\text{нейтрон}) \end{cases}, \quad \chi\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

где $\chi\left(\frac{1}{2}\right)$ описывает протонное зарядовое состояние нуклона [этому состоянию приписывается проекция так называемого изотопического спина на некоторое выбранное направление в зарядовом (изотопическом) пространстве $I_3 = \frac{1}{2}$], а $\chi\left(-\frac{1}{2}\right)$ — нейтронное состояние нуклона ($I_3 = -\frac{1}{2}$) (см. задачу 31.1). Формально матрицы изотопического спина τ (τ_1, τ_2, τ_3) совпадают с матрицами Паули для обычного спина, а I_3 является собственным значением матрицы τ_3 .

Однако матрицы τ действуют не на волновую функцию Ψ , характеризующую различные направления спина, а на зарядовую часть волновой функции χ , характеризующую частицы с различными значениями заряда. Величина τ не является обычным вектором, но просто объединяет три матрицы изотопического спина. Произведение матриц τ_1 и τ_2 двух нуклонов, т. е. величина:

$$S_\tau = (\tau_1 \tau_2),$$

представляет собой оператор, характеризующий обменное взаимодействие Гейзенберга — Майорана.

В полной аналогии с оператором S_σ обмена спинами [см. (28.15а)] оператор S_τ может принимать два значения¹⁾:

$$S_\tau = \begin{cases} -3 & \text{при взаимодействиях с } I = 0 \\ & \text{протона и нейтрона } (I_3 = 0), \\ 1 & \text{при взаимодействиях с } I = 1 \\ & \text{двух протонов } (I_3 = 1), \\ & \text{двух нейтронов } (I_3 = -1), \\ & \text{протона и нейтрона } (I_3 = 0). \end{cases} \quad (28.16)$$

Взаимодействие между двумя нуклонами в общем случае может быть записано в виде:

$$V = F_1(r) + S_\sigma F_2(r) + S_{12} F_3(r) + S_\tau [F_4(r) + S_\sigma F_5(r) + S_{12} F_6(r)], \quad (28.17)$$

где $F_i(r)$ представляют собой функции только r и должны характеризовать короткодействующий характер ядерных сил. Мезонная теория в ее различных вариантах, давая для $F_i(r)$ выражения, соответствующие короткодей-

¹⁾ По аналогии с (28.15) величины I и I_3 для системы двух нуклонов могут быть найдены из операторных равенств:

$$\frac{1}{4} (\tau_1 + \tau_2)^2 = I(I+1),$$

$$\frac{1}{2} (\tau_1 + \tau_2)_3 = I_3.$$

ствующему характеру ядерных сил, а также указывая вид операторов, зависящих как от обычного, так и изотопического спина, пока еще не в состоянии дать такие выражения для $F_i(r)$, которые бы количественно согласовывались со всей совокупностью экспериментальных фактов. Поэтому указанные функции приходится подбирать полуэмпирическим путем: в виде потенциала Юкавы, или в виде гауссовской функции, или в виде прямоугольной ямы и т. д. Также полуэмпирически пока что приходится выбирать соответствующие параметры ядерного потенциала (константы связи и радиусы действия).

Следует заметить, что во многих задачах теории ядра, где мы имеем дело с основными и низшими возбужденными состояниями ядер (теория дейтрона, рассеяние нуклонов с энергиями порядка энергии связи нуклонов в ядре), конкретная зависимость потенциальной энергии от r не является существенной; важно лишь хорошо подобрать значения параметров. Поэтому $F_i(r)$ в подобных задачах выбираются в виде потенциальной ямы, которая характеризуется двумя параметрами: глубиной, т. е. величиной потенциальной энергии при $r < a$, и шириной, т. е. эффективным радиусом действия соответствующих сил.

г. Элементарная теория дейтрона

Простейшей ядерной системой является дейтрон (D). Дейтрон состоит из двух нуклонов: протона и нейтрона. Эта система двух нуклонов с зарядом $Z=1$ и массовым числом $A=2$ представляет особый интерес для ядерной физики: в ней существенным образом проявляются ядерные силы и в то же время эта система проста для анализа.

Нетрудно убедиться в том, что никакие другие до сих пор известные нам силовые поля непригодны для объяснения требуемой величины энергии связи дейтрона. В самом деле, предположение об электрическом взаимодействии отпадает в силу нейтральности нейтрона. Силы магнитного взаимодействия между нейтроном и протоном оказываются примерно в 100 раз меньше, чем экспериментальное значение энергии взаимодействия этих частиц в дейтроне. Наконец, гравитационное взаимодействие протона и нейтрона оказывается совершенно недостаточным вследствие чрезвычайно малого значения гравитационной постоянной.

Поэтому для объяснения наблюдаемой энергии связи дейтрона необходимо предположить существование сил нового типа — ядерных сил, только что рассмотренных нами.

Главной особенностью ядерных сил, как мы уже отмечали, является их малый радиус действия ($a \sim 10^{-13}$ см), причем на малых расстояниях ($r < a$) ядерное взаимодействие оказывается очень большим, а затем быстро убывает, так что за пределами их радиуса действия ядерные силы практически не сказываются.

Рассмотрим задачу дейтрона на основе квантовой механики. Для упрощения задачи предположим, что ядерные силы взаимодействия протона и нейтрона являются центральными, т. е. по-

тенциал взаимодействия этих частиц является функцией только расстояния r между ними:

$$V = V(r).$$

Тогда уравнение Шредингера для относительного движения протона и нейтрона в стационарном случае удобно записать в сферических координатах:

$$\left\{ \nabla^2 + \frac{2M_{\text{пр.}}}{\hbar^2} [E - V(r)] \right\} \psi(r, \vartheta, \varphi) = 0. \quad (28.18)$$

Здесь $M_{\text{пр.}}$ — приведенная масса:

$$M_{\text{пр.}} = \frac{M_n M_p}{M_n + M_p} \cong \frac{1}{2} M, \quad (28.19)$$

а M — некоторое среднее значение массы протона (M_p) и нейтрона (M_n).

Уравнение Шредингера в данном случае [$V = V(r)$] допускает разделение переменных (см. § 11):

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi), \quad (28.20)$$

причем для радиальной функции R , согласно § 11, получаем уравнение:

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \frac{M}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{Mr^2} \right] R = 0. \quad (28.21)$$

В дальнейшем мы рассмотрим основное состояние дейтрона, т. е. состояние с наименьшей энергией (и, следовательно, максимальной энергией связи). В этом случае обе частицы находятся на минимальном расстоянии друг от друга; очевидно, при этом $l = 0$ (s -состояние). Напомним, что член $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{Mr^2}$, соответствующий центробежной энергии, в рассматриваемом случае относительного движения двух частиц имеет характер дополнительных сил отталкивания.

Полагая $l = 0$ и вводя новую функцию:

$$rR = u, \quad (28.22)$$

получаем уравнение Шредингера:

$$u'' + \frac{M}{\hbar^2} [E - V(r)] u = 0. \quad (28.23)$$

Для дальнейшего рассмотрения задачи необходимо конкретизировать зависимость потенциальной энергии от расстояния между частицами. В силу малости эффективного радиуса действия ядерных сил и малой энергии связи по сравнению с потенциальной энергией взаимодействия основное состояние дейтрона

мало зависит от конкретного вида $V(r)$. Важно лишь, чтобы этот потенциал был короткодействующим. В частности, в простейшем случае $V(r)$ можно выбрать в виде сферически симметричной прямоугольной ямы (см. фиг. 28.2):

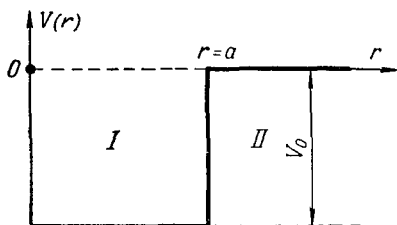
$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{при } r < a, \\ 0 & \text{при } r > a. \end{cases} \quad (28.24)$$

Поскольку потенциальная энергия отрицательна [знак минус в формуле (28.24) указывает на взаимное притяжение обеих частиц], связанные состояния возможны только при отрицательных значениях E . Поэтому для удобства введем энергию связи $W = -E$, которая будет уже величиной положительной.

Учитывая выражение для потенциала (28.24), а также вводя обозначения:

$$\begin{aligned} k^2 &= \frac{M}{\hbar^2} (V_0 - W), \\ \chi^2 &= \frac{M}{\hbar^2} W, \end{aligned} \quad (28.25)$$

$$k_0^2 = k^2 + \chi^2 = \frac{M}{\hbar^2} V_0,$$



Фиг. 28.2. Зависимость потенциальной энергии дейтрона от расстояния между нуклонами.

получаем из (28.23) следующие уравнения для функций u_1 и u_2 , относящихся соответственно к областям I и II (см. фиг. 28.2):

$$\begin{aligned} u_1'' + k^2 u_1 &= 0, \\ u_2'' - \chi^2 u_2 &= 0. \end{aligned} \quad (28.26)$$

Решения уравнений (28.26) имеют вид:

$$\begin{aligned} u_1 &= A \sin kr, \\ u_2 &= B e^{-\chi r}. \end{aligned} \quad (28.27)$$

Они выбраны таким образом, чтобы радиальная функция $R = \frac{u}{r}$ оставалась конечной при $r=0$ и обращалась бы в нуль при $r \rightarrow \infty$. В соответствии с требованием непрерывности волновой функции оба эти решения должны быть «сшиты», т. е. при $r=a$ должны быть приравнены как сами функции, так и их производные:

$$\begin{aligned} u_1|_{r=a} &= u_2|_{r=a}, \\ u_1'|_{r=a} &= u_2'|_{r=a} \end{aligned}$$

Можно исключить из рассмотрения нормировочные коэффициенты A и B , если взять отношение последних двух равенств:

$$\frac{u_1'}{u_1} \Big|_{r=a} = \frac{u_2'}{u_2} \Big|_{r=a}. \quad (28.28)$$

Отсюда для определения собственных значений энергии находим соотношение:

$$\operatorname{ctg} ka = -\alpha/k, \quad (28.29)$$

связывающее между собой глубину ямы V_0 , ее ширину a , а также величину энергии связи частиц W .

Поскольку котангенс в соотношении (28.29) является отрицательной величиной, то минимальное значение его аргумента ka должно лежать во второй четверти и может быть найдено из уравнения:

$$\sin ka = \frac{1}{\sqrt{1 + \operatorname{ctg}^2 ka}} = \frac{ka}{k_0 a}.$$

Полагая $ka = \frac{\pi}{2}(1 + \alpha)$, для угла $\frac{\pi}{2}\alpha$, лежащего уже в первой четверти ($1 > \alpha > 0$), получаем уравнение:

$$\cos \frac{\pi}{2}\alpha = \frac{\pi}{2k_0 a}(1 + \alpha). \quad (28.30)$$

Решение последнего уравнения, которое легко может быть найдено графически, дает наименьший энергетический уровень дейтрона.

Прежде всего заметим, что если величина $k_0 a = \frac{a\sqrt{MV_0}}{\hbar} < \frac{\pi}{2}$, то последнее трансцендентное уравнение не будет иметь вещественных решений, так как правая часть уравнения (28.30) при $\alpha > 0$ остается больше единицы и поэтому не может равняться $\cos \frac{\pi}{2}\alpha$.

Первый корень этого трансцендентного уравнения появляется в предельном случае:

$$k_0 a = \frac{\pi}{2}. \quad (28.31)$$

При этом энергия связи W должна равняться нулю ($W = 0$). Подставляя сюда вместо k_0 его значение, мы находим связь между $V_0^{\text{мин}}$ и a :

$$V_0^{\text{мин}} a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4M}. \quad (28.32)$$

Если подставить сюда в соответствии с экспериментальными данными $a \approx 2 \cdot 10^{-13}$ см, то найдем, что

$$V_0^{\text{мин}} = 25 \text{ Мэв.}$$

Последнее значение дает наименьшую глубину потенциальной ямы (при выбранном выше значении a), при котором становятся возможными появления устойчивых состояний в дейтроне, соответствующих энергии связи $W = 0$. Если при решении трансцен-

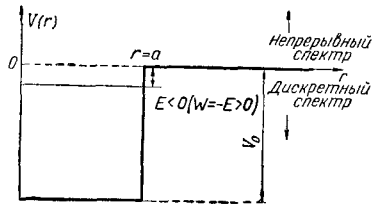
дентного уравнения учесть, что энергия связи дейтрона отлична от нуля и согласно экспериментальным данным по фоторасщеплению дейтрона $W = 2,23 \text{ Мэв}$, то величина $k_0 a$ будет немного больше $\frac{\pi}{2}$ и для V_0 найдем значение, несколько превышающее $V_0^{\text{мин.}}$:

$$V_0 \approx 33 \text{ Мэв.}$$

Это решение соответствует наимизшему энергетическому состоянию. В этом случае волновая функция внутри ядра не будет иметь радиальных узлов:

$$R_{l=0} = A \frac{\sin \frac{\pi}{2} \frac{r}{a}}{r}. \quad (28.33)$$

Следует заметить, что во многие расчеты, связанные с исследованием системы двух нуклонов, входит непосредственно величина $V_0 a^2$, которая в первом приближении может быть вычислена по формуле (28.32), соответствующей $W = 0$, поскольку вообще $W \ll V_0$. Благодаря тому, что основной энергетический уровень дейтрона расположен вблизи края потенциальной ямы ($W < V_0$), дейтрон является сравнительно слабосвязанным ядром (см. фиг. 28.3)¹⁾.



Фиг. 28.3. Энергетический уровень дейтрона.

Существенно, что результаты, полученные здесь для случая прямоугольной ямы, практически не изменяются при использовании других короткодействующих потенциалов с соответствующими параметрами, например потенциала Юкава.

Другим важным результатом, не зависящим от формы потенциала короткодействующих сил, является экспоненциальное убывание функции $u(r)$ на расстояниях, превышающих радиус действия ядерных сил (т. е. при $r > a$).

В ряде случаев, когда несущественно знать точное поведение волновой функции вблизи нуля, вместо шитых волновых функций (28.27) используют во всей области одну экспоненциальную функцию:

$$u = B e^{-\chi r}, \quad (28.34)$$

которая зависит только от энергии связи W и не зависит от параметров V_0 и a [см. значение для χ , определяемое формулой (28.25)].

¹⁾ Аналогом энергии связи дейтрона в теории атома может служить потенциал ионизации атома водорода, который, как известно, равен всего 13,6 эв.

Коэффициент B может быть найден в этом случае из условия нормировки:

$$\int \psi^2 d^3x = 4\pi \int_0^\infty u^2 dr = 4\pi B^2 \int_0^\infty e^{-2xr} dr = \frac{2\pi B^2}{x} = 1. \quad (28.35)$$

Таким образом,

$$u = \sqrt{\frac{x}{2\pi}} e^{-xr}. \quad (28.36)$$

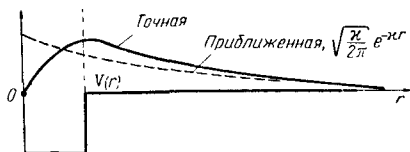
Из сравнения этой приближенной волновой функции с точной¹⁾ (см. фиг. 28.4) следует, что эти функции мало отличаются друг от друга.

Аппроксимация волновой функции (28.27) функцией (28.36) оказалась возможной благодаря малой энергии связи дейтрона ($W \ll V_0$). Вследствие этой же причины эффективные размеры дейтрона $R_{\text{эфф.}} = \frac{1}{x} = 4,31 \cdot 10^{-13}$ см значительно превышают радиус действия ядерных сил $a \approx 2 \cdot 10^{-13}$ см.

Поскольку u^*u характеризует плотность вероятности того, что нейтрон и протон находятся друг от друга на расстоянии от r до $r + dr$, мы можем сделать вывод о том, что дейтрон является сравнительно «рыхлой» системой, так как вероятность того, что составляющие дейтрон частицы будут находиться друг от друга на расстоянии, большем радиуса действия ядерных сил, заметно отличается от нуля.

Заканчивая упрощенное рассмотрение задачи дейтрона, скажем несколько слов о его спине. Экспериментально он равен единице. Это означает, что спины протона и нейтрона в дейтроне направлены параллельно, а следовательно энергия притяжения между протоном и нейтроном с параллельными спинами будет больше, чем в случае антипараллельных спинов. Этим, в частности, можно объяснить также и факт отсутствия связанных состояний систем из двух нейтронов ($2n$) или двух протонов ($2p = {}_2\text{He}^2$) (при наличии равенства сил между двумя любыми нуклонами).

В самом деле, если в низшем состоянии система pn может существовать в связанном состоянии лишь с параллельными спинами, то, учитывая зарядовую независимость ядерных сил, то же самое можно сказать относительно возможности образования связанных состояний систем $2p$ или $2n$. Однако системы, состоящие



Фиг. 28.4. Точная и приближенная волновые функции основного состояния дейтрона.

¹⁾ Заметим, что точная волновая функция (для потенциальной ямы) зависит еще от параметров потенциальной ямы: V_0 и a , и поэтому менее удобна для исследования.

из двух одинаковых нуклонов с параллельными спинами, в низшем энергетическом состоянии исключены в силу принципа Паули. Если же спины нуклонов антипараллельны, то существование таких систем, состоящих из пары любых нуклонов, хотя и допустимо с точки зрения принципа Паули, будет зависеть от величины энергии связи, которая оказывается недостаточной для систем $2p$, $2n$ или pn . Наиболее веским доводом в пользу параллельности спинов протона и нейтрона в дейтроне является триплетный характер основного состояния дейтрона. Однако вывод об ориентации спинов нуклонов в дейтроне может быть весьма просто проверен, в частности, по анализу его магнитного момента. Поскольку спины протона и нейтрона параллельны, то их собственные магнитные моменты должны быть антипараллельными, так как нейтрон обладает отрицательным магнитным моментом. Поэтому магнитный момент μ_D дейтрона должен равняться (в ядерных магнетонах):

$$\mu_D^{\text{теор.}} = \mu_p + \mu_n = 2,793 - 1,913 = 0,880.$$

Эксперимент же дает весьма близкое значение:

$$\mu_D^{\text{экспер.}} = 0,857 = \mu_D^{\text{теор.}} - 0,023.$$

Весьма небольшое расхождение между этими теоретическими и экспериментальными значениями магнитного момента дейтрона следует искать в том, что в элементарной теории не учтены нецентральные силы, которые зависят не только от расстояния между частицами, но и от угла ϑ между радиус-вектором, соединяющим две частицы, и направлением спинов обеих частиц.

Наличие небольшой компоненты нецентральных сил приводит также к наличию электрического квадрупольного момента дейтрона, соответствующего распределению электрического заряда (протона) по сфероиду, вытянутому вдоль спиновой оси, направленной по оси z , для которого следует принять:

$$\frac{z^2}{r^2} = \frac{1,14}{3}.$$

При сферическом распределении заряда это отношение равнялось бы точно $1/3$. Сфероидальное же распределение заряда приводит к наличию квадрупольного момента дейтрона, величина которого в соответствии с предыдущей формулой равна:

$$Q = \int \psi^* (3z^2 - r^2) \psi d^3x = 2,74 \cdot 10^{-27} \text{ см}^2.$$

Для описания такого несимметричного распределения заряда приходится предположить, что волновая функция имеет вид:

$$\psi = f(r) + f_1(r) P_2(\cos \vartheta).$$

Отсюда следует, что волновая функция представляет собой суперпозицию S -состояния (сферически симметричного, не зависящего от угла ϑ) и D -состояния (зависящего от $\cos^2 \vartheta$). Примесь P -состояния (зависящего от $\cos \vartheta$) появиться не может, так как оно имеет отрицательную четность и не может смешиваться с состоянием, имеющим положительную четность (см. § 24).

По известному значению квадрупольного момента можно вычислить относительное время, в течение которого дейтрон находится в D -состоянии. Оно должно составлять примерно $1/25$ часть времени пребывания дейтрона в S -состоянии.

Поскольку орбитальный магнитный момент D -состояния отличен от нуля, общий магнитный момент дейтрона складывается из собственных магнитных моментов протона и нейтрона, а также из орбитального магнитного момента D -состояния. Используя же закон сложения магнитных моментов внутри ядра, можно с учетом D -состояния дать количественное объяснение экспериментально наблюдаемого магнитного момента дейтрона.

Большую роль в исследовании ядерных сил играет анализ рассеяния нуклонов на нуклонах различных энергий. Например, на основе анализа рассеяния протонов нейтронами был экспериментально доказан обменный характер взаимодействия между ними. В самом деле, при рассеянии протонов с энергией 400 Мэв почти неподвижными нейтронами были обнаружены нейтроны, летящие вперед с энергией примерно в 400 Мэв. Эти нейтроны могли появиться только в результате обмена зарядом и, следовательно, превращения падающего протона в нейтрон. Некоторые общие вопросы теории рассеяния мы рассмотрим в параграфе 29. Однако более глубокий анализ всех этих вопросов дается в специальных монографиях, посвященных теории ядра.

д. Стабильность ядер

В настоящее время известно 104 химических элемента. Ядра химических элементов с одинаковым Z могут отличаться друг от друга числом нейтронов, поэтому общее число ядер, равное примерно 1300, гораздо больше числа элементов. Большинство из этих ядер являются нестабильными и самопроизвольно превращаются в другие ядра. Начиная с водорода ($Z=1$) и кончая висмутом ($Z=83$)¹⁾, для каждого элемента (кроме $Z=43$ и 61)

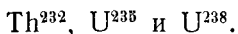
¹⁾ Устойчивым изотопом висмута является Bi^{209} . Все остальные изотопы Bi радиоактивны. Bi^{209} представляет собой конец цепочки радиоактивного распада ряда нептуния Np^{237} (тип $4n+1$; см. ниже). Три остальных цепочки радиоактивных семейств U^{238} (тип $4n+2$), U^{235} (тип $4n+3$) и Th^{232} (тип $4n$) кончаются соответственно на следующих стабильных изотопах свинца ($Z=82$):

Pb^{206} , Pb^{207} и Pb^{208} .

можно указать такое значение A , при котором ядро может быть практически стабильным.

Начиная же с полония ($Z=84$), все изотопы ядер являются радиоактивными, и можно говорить лишь о наиболее устойчивом изотопе, каковым для полония является ${}_{84}\text{Po}^{209}$ с периодом полураспада, равным примерно 100 годам. С этим и связано то обстоятельство, что в естественных земных условиях существует ограниченное число элементов, а именно элементы до $Z=92$ включительно. В самом деле, допустим, что тяжелые радиоактивные элементы появились в момент образования Земли. Эти элементы могли сохраниться до наших дней только в том случае, если сам элемент или его более тяжелый предок распадается столь медленно, что его продолжительность жизни соизмерима с возрастом Земли.

В настоящее время известно три изотопа тяжелых радиоактивных элементов, продолжительность жизни которых исчисляется миллиардами лет:



Эти элементы и определяют конец естественной периодической системы. Все остальные более тяжелые радиоактивные изотопы, если они даже когда-либо существовали в земных условиях, к нашему времени должны были бы распасться. Однако в связи с развитием ядерной техники искусственно получены двенадцать элементов, начиная с $Z=93$ (нептуний) и кончая $Z=104$.

Первые трансурановые элементы были получены сравнительно недавно, а именно в 1940 г. При этом использовались в основном два метода: бомбардировка урана нейтронами или бомбардировка урана альфа-частицами. Нейтрон, попадая в ядро ${}_{92}\text{U}^{238}$, превращает его в изотоп ${}_{92}\text{U}^{239}$. Последний является неустойчивым и, испуская бета-частицу (электрон), превращается в первый трансурановый элемент нептуний ${}_{93}\text{Np}^{239}$, который при последующем бета-распаде превращается в плутоний ${}_{94}\text{Pu}^{239}$.

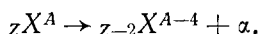
Наиболее устойчивым изотопом Np является Np²³⁷ с периодом полураспада $T_{1/2} = 2,2 \cdot 10^6$ лет. Плутоний может быть получен также непосредственно при бомбардировке альфа-частицами ядер урана; при этом заряд ядра урана повышается на две единицы.

Следует заметить, что Pu^{239} нашел исключительно большое применение в ядерной технике, так как, обладая сравнительно большим периодом полураспада ($T_{1/2} \sim 24000$ лет), наряду с U^{235} делится под действием нейтронов любых энергий, причем деление сопровождается освобождением 2—3 нейтронов на один акт деления, что приводит к цепной реакции.

В свою очередь, бомбардируя плутоний альфа-частицами, были получены кюрий ($Z=96$) и т. д.

При распаде естественно радиоактивных элементов продукты распада сами оказываются радиоактивными, так что атомные ядра, каждое из которых возникает из предыдущего в результате альфа- или бета-распада, вместе с исходным ядром образуют цепочки, называемые радиоактивными семействами. Цепочка распадов продолжается до тех пор, пока не образуется стабильное ядро.

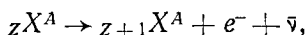
Как известно, при альфа-распаде массовое число уменьшается на четыре (ядро теряет альфа-частицу, представляющую собой ядро атома гелия, состоящего из двух протонов и двух нейтронов), а заряд ядра уменьшается на два, благодаря чему разность между числом нейтронов и протонов остается неизменной:



В результате же бета-распада, когда один из нейтронов n ядра превращается в протон (p), электрон (e^-) и антинейтрино ($\bar{\nu}$) (более подробно см. § 30):



распад ядра протекает следующим образом:



т. е. при этом распаде массовое число остается неизменным ($A = \text{const}$), а разность между числом нейтронов и протонов уменьшается на два (так как один нейтрон переходит в протон).

Поскольку при альфа-распаде A меняется на четыре ($\Delta A = 4$), а при бета-распаде остается неизменной ($\Delta A = 0$), тип массового числа $A = 4n + n_1$ (n и n_1 — целые числа, причем $n_1 = 0, 1, 2, 3$) для элементов, входящих в одно и то же радиоактивное семейство, сохраняется.

В связи с тем, что n_1 может принимать четыре значения, будем иметь четыре радиоактивных семейства.

Для радиоактивного семейства урана типа $A = 4n + 2$ ($n_1 = 2$) родоначальником является ${}_{92}\text{U}^{238}$. Для семейства тория типа $A = 4n$ ($n_1 = 0$) родоначальником является ${}_{90}\text{Th}^{232}$. Для семейства актиния типа $A = 4n + 3$ ($n_1 = 3$) родоначальником является ${}_{92}\text{U}^{235}$. На фиг. 28.5 изображена цепочка радиоактивных превращений семейства урана ($A = 2n + 2$), где по оси ординат отложена разность между числом нейтронов и протонов $N - Z$, а по оси абсцисс — массовое число A . На этой схеме при альфа-распаде элемент смещается вправо на четыре единицы ($A \rightarrow A - 4$, $N - Z \rightarrow N - Z$), а при бета-распаде — вниз на две единицы ($N - Z \rightarrow N - Z - 2$, $A \rightarrow A$).

е. Альфа-распад

Как было отмечено, альфа-распад — один из важнейших типов спонтанного превращения радиоактивных ядер. Экспериментальное исследование возможного влияния внешних условий на скорость распада показало, что альфа-распад обусловлен исключительно структурой и внутренними свойствами ядер. Поэтому естественно предположить, что число ядер dN , распадающихся в течение времени dt , пропорционально промежутку времени и числу ядер N в момент t , т. е.

$$dN = -\lambda N dt. \quad (28.37)$$

Интегрируя это уравнение, получаем закон радиоактивного распада Кюри:

$$N = N_0 e^{-\lambda t}. \quad (28.38)$$

Здесь постоянная радиоактивного распада λ имеет смысл вероятности распада. Нетрудно получить связь этой постоянной с периодом полураспада $T_{1/2}$, т. е. со временем, в течение которого распадается половина исходного количества вещества. Действительно, обозначим первоначальное количество атомов через N_0 , тогда для периода полураспада $T_{1/2}$ получим очевидное соотношение:

$$N_0 e^{-\lambda T_{1/2}} = \frac{1}{2} N_0 = N_0 e^{-\ln 2}, \quad (28.39)$$

из которого следует, что

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0,693}{\lambda}. \quad (28.40)$$

Закон Кюри был впервые установлен чисто эмпирически путем анализа кривых, характеризующих убывание вещества в результате радиоактивного распада.

Другим эмпирическим соотношением для альфа-распада является так называемый закон Гейгера — Неттола (1912), который устанавливает связь между постоянной распада λ и длиной пробега l испускаемых альфа-частиц. Это соотношение:

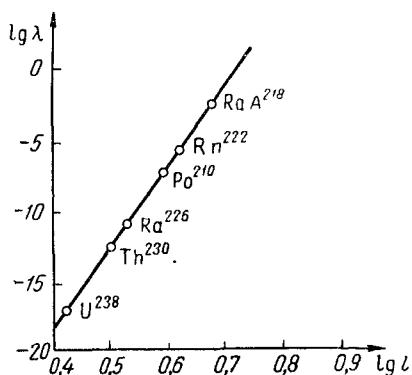
$$\lg \lambda = B + A \lg l$$

имеет место по отдельности для каждого из трех естественных радиоактивных семейств, причем на фиг. 28.6 изображен график этой зависимости применительно к семейству урана.

Так как пробег альфа-частиц является степенной функцией энергии ($l = \text{const} \cdot E^{\gamma}$), то закон Гейгера — Неттола может быть записан в следующем виде:

$$\lg \lambda = B' + A' \lg E. \quad (28.41)$$

Последнее соотношение связывает постоянную распада с энергией E испускаемых альфа-частиц. Следует все же заметить, что на кривую Гейгера—Неттола сравнительно хорошо укладывается лишь небольшое число ядер — изотопов радиоактивных семейств. Большое же количество новых изотопов, полученных в результате искусственных ядерных превращений и в особенности изотопов, обладающих малыми периодами полураспада, плохо укладывается на кривую Гейгера — Неттола. Только на основе квантовой теории удалось более точно дать объяснение всей совокупности опытных данных, причем не только качественное, но даже



Фиг. 28.6. Кривые Гейгера — Неттола для семейства урана.

и количественное, несмотря на то, что ряд важных деталей структуры ядра, и в особенности ядерных взаимодействий, все еще остается до конца невыясненным. Выведенная теоретически формула радиоактивного распада в общем сравнительно хорошо согласуется с экспериментом, если отвлечься от некоторых второстепенных факторов.

Оставляя в стороне механизм образования самой альфа-частицы в процессе распада ядра (на этом вопросе мы остановимся несколько подробнее при анализе квантовомеханической теории альфа-распада), рассмотрим систему, состоящую из вторичного (так называемого дочернего) ядра и альфа-частицы.

Потенциальная энергия взаимодействия альфа-частицы (заряд $2e_0$) и дочернего ядра (заряд $(Z - 2)e_0$) должна, помимо кулоновских сил отталкивания, приводящих к потенциальной энергии:

$$V = \frac{2(Z-2)e_0^2}{r}, \quad (28.42)$$

содержать также потенциальную энергию ядерных сил притяжения, действующих лишь на малых расстояниях.

Для приближенных оценок аппроксимируем потенциальную энергию следующим выражением (см. фиг. 28.7):

$$V = \begin{cases} \frac{2(Z-2)e_0^2}{r} & r > R \\ V_0 & r < R, \end{cases} \quad (28.43)$$

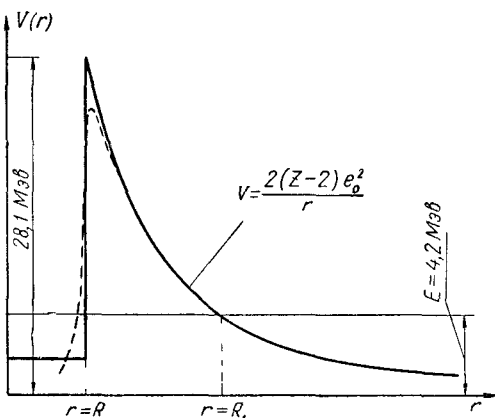
причем параметры R и V_0 следует подобрать таким образом, чтобы низший уровень альфа-частицы в ядре соответствовал той энергии,

с которой она вылетает из ядра¹⁾ (хотя величина V_0 непосредственно не оказывает влияние на постоянную распада, важно лишь, чтобы было $E > V_0$).

Эмпирически установлено, что радиус ядра (с учетом радиуса действия ядерных сил) пропорционален $A^{1/3}$, т. е. $R \approx 1,4 \cdot 10^{-13} A^{1/3} \text{ см}^2$. Учитывая это значение R в формуле (28.43), находим, что высота потенциального барьера (V_B), удерживающего альфа-частицу в ядре U^{238} , примерно равна:

$$V_B = \frac{2(Z-2)e_0^2}{1,4 \cdot 10^{-13} A^{1/3}} \approx 28,1 \text{ Мэв},$$

в то время как альфа-частицы вылетают из этого ядра с энергией всего 4,2 Мэв. Таким образом, альфа-распад представляет собой



Фиг. 28.7. Схема потенциальной энергии альфа-частицы в поле ядра U^{238} .

типичное явление прохождения частицы сквозь потенциальный барьер. Поэтому теория альфа-распада была построена лишь в 1928 г. (Гамов, Кондон, Гэрни) после появления квантовой механики. Рассматривая альфа-распад как прохождение частиц сквозь потенциальный барьер, следует прежде всего установить связь между постоянной радиоактивного распада λ и коэффи-

¹⁾ Напомним, что энергия E для первого энергетического уровня связана с основными характеристиками потенциальной ямы V_0 и R соотношением:

$$E - V_0 = \pi^2 \frac{\hbar^2}{2MR^2}.$$

Отсюда, зная E и R , мы можем подобрать соответствующие значения для V_0 .

²⁾ Радиус распределения электрического заряда изменяется по закону $R_0 = 1,2 \cdot 10^{-13} A^{1/3} \text{ см}$. Однако в данном случае следует брать область действия ядерных сил, которая простирается несколько дальше за пределы распределения нуклонов в ядре (см. стр. 513).

циентом прозрачности потенциального барьера, определенного формулой (6.24)¹⁾:

$$D = e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2M} \int_R^{R_1} \sqrt{V-E} dr}, \quad (28.44)$$

где M — масса альфа-частицы, а R и R_1 — начало и конец потенциального барьера (см. фиг. 28.7). Вспоминая, что коэффициент прозрачности представляет собой вероятность прохождения частицы сквозь барьер при одном ее ударе о стенку барьера, закон распада можно записать в виде:

$$dN = -\lambda N dt = -n N D dt, \quad (28.45)$$

где n — число ударов в 1 сек. Величину n можно легко оценить из следующих простых соображений. Предположим, что альфа-частица движется внутри потенциальной ямы с радиусом R . Тогда, очевидно, что $n \sim v_0/R$, где v_0 — скорость альфа-частиц внутри ядра ($r < R$). Нетрудно связать эти последние величины друг с другом. Действительно, согласно соотношению неопределенности, импульс Mv_0 частицы и область ее локализации R связаны друг с другом соотношением $Mv_0 R \approx \hbar$. Поэтому

$$n \cong \frac{\hbar}{MR^2}. \quad (28.46)$$

С учетом этих замечаний связь постоянной радиоактивного распада λ с коэффициентом прозрачности D имеет вид:

$$\lambda = \frac{\hbar}{MR^2} e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2M} \int_R^{R_1} \sqrt{V-E} dr}. \quad (28.47)$$

Логарифмируя обе части равенства, получаем:

$$\ln \lambda = \ln \frac{\hbar}{MR^2} - \frac{2}{\hbar} \sqrt{2MJ}, \quad (28.48)$$

где интеграл

$$J = \int_R^{R_1} \sqrt{V-E} dr \quad (28.49)$$

должен быть взят между так называемыми точками поворота R (радиус ядра) и R_1 . Последний радиус может быть найден из

¹⁾ Вообще говоря, в формуле (28.44):

$$V = \frac{2(Z-2)e_0^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{Mr^2}.$$

Однако в дальнейшем мы ограничимся случаем, когда альфа-частица покидает ядро в низшем орбитальном состоянии, т. е. с $l=0$. Теорию альфа-распада возбужденных ядер мы рассматривать не будем.

условия, что полная энергия равняется потенциальной, т. е. в данном случае кулоновской:

$$\frac{2(Z-2)e_0^2}{R_1} = E. \quad (28.50)$$

Подставляя выражение для $V \doteq \frac{ER_1}{r}$ в интеграл (28.49), находим:

$$J = \sqrt{E} \int_R^{R_1} \sqrt{\frac{R_1}{r} - 1} dr, \quad (28.51)$$

или после замены переменных $r = R_1 x^2$ имеем:

$$J = 2R_1 \sqrt{E} \int_{\sqrt{\frac{R}{R_1}}}^1 \sqrt{1-x^2} dx. \quad (28.52)$$

Производя новую замену переменных $x = \sin \varphi$ и полагая $\sin \varphi_0 = \sqrt{\frac{R}{R_1}}$, получаем интеграл:

$$J = 2R_1 \sqrt{E} \int_{\varphi_0}^{\pi/2} \cos^2 \varphi d\varphi, \quad (28.53)$$

который легко может быть вычислен; тогда

$$J = \frac{R_1 \sqrt{E}}{2} (\pi - 2\varphi_0 - \sin 2\varphi_0). \quad (28.54)$$

Учитывая далее, что обычно $\frac{R}{R_1} \ll 1$, можно в последнем выражении положить $\varphi_0 \sim \sin \varphi_0 = \sqrt{\frac{R}{R_1}}$:

$$J = R_1 \sqrt{E} \left\{ \frac{\pi}{2} - 2 \sqrt{\frac{R}{R_1}} \right\}. \quad (28.55)$$

Исключая теперь R_1 с помощью соотношения (28.50) и вводя обозначения:

$$B = \ln \frac{\hbar}{MR^2} + \frac{8e_0}{\hbar} \sqrt{MR(Z-2)}, \quad (28.56)$$

$$A = \frac{2\pi(Z-2)e_0^2}{\hbar} \sqrt{2M}, \quad (28.57)$$

находим окончательно для постоянной альфа-распада:

$$\ln \lambda = B - \frac{A}{\sqrt{E}}. \quad (28.58)$$

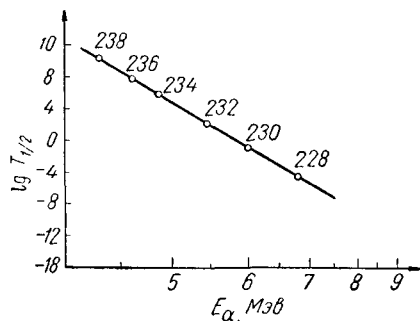
Вводя вместо постоянной λ период полураспада $T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$, последнее выражение можно привести к виду:

$$\lg T_{1/2} = \frac{a}{\sqrt{E}} - b, \quad (28.59)$$

$$\text{где } b = B \lg e - \lg 0,693, \quad a = A \lg e. \quad (28.60)$$

Последняя формула устанавливает более точное соотношение между $T_{1/2}$ и энергией вылетевших альфа-частиц по сравнению с соотношением Гейгера — Неттола [см. (28.41)], являющимся чисто эмпирическим.

Характерной особенностью формулы (28.59) является то, что в ней коэффициент a пропорционален Z . Коэффициент же b зависит не только от Z , но и от $R \sim A^{1/3}$. Однако с увеличением Z он изменяется незначительно и его в первом приближении можно считать вообще постоянным. Поскольку коэффициент a зависит от порядкового номера Z , то кривые, связывающие период полураспада $T_{1/2}$ с энергией E (обобщение кривых Гейгера — Неттола), следует относить к изотопам одного и того же элемента.



Фиг. 28.8. Зависимость логарифма периода полураспада $T_{1/2}$ (в годах) от энергии альфа-частиц E_{α} (в МэВ) для четно-четных изотопов урана.

Шкала по оси абсцисс выбрана таким образом, чтобы величины, пропорциональные $E^{-1/2}$, представляли собой прямую линию.

мерно пропорционально Z . Коэффициент же b остается, как мы уже указывали, почти постоянным.

Для изотопов каждого из этих элементов можно построить кривую зависимости $\lg T_{1/2}$ от E . Кривая для четно-четных

Значения a и b , полученные полуэмпирическим способом для ядер с четным числом протонов и с четным числом нейтронов (четно-четные ядра), приведены в табл. 28.1.

Из табл. 28.1 видно, что коэффициент a в согласии с формулой (28.57) изменяется при-

Таблица 28.1

Значения коэффициентов a и $b^1)$
 $T_{1/2}$ измеряется в секундах, а E — в МэВ

Элемент	a	b	Элемент	a	b
^{100}Fm	156,38	53,37	^{90}Th	144,19	53,26
^{98}Cf	152,86	52,95	^{88}Ra	139,17	52,15
^{96}Cm	152,44	53,68	^{86}Rn	137,46	52,46
^{94}Pu	146,23	52,09	^{84}Po	129,35	49,92
^{92}U	147,49	53,66			

¹⁾ См. И. Перлман, Дж. Расмуссен, Альфа-радиоактивность, М., 1958, стр. 73.

изотопов урана изображена на фиг. 28.8, откуда видно, что она хорошо согласуется с квантовой формулой (28.59) (аналогичные кривые можно построить и для других семейств).

Поскольку квантовая теория трактует альфа-распад как просачивание частицы сквозь потенциальный барьер, становится ясным, что даже небольшие вариации энергии от 4 до 9 Мэв (хотя и сравнительно немного уменьшают площадь потенциального барьера, но благодаря тому, что эта площадь входит в показатель степени) приводят к сильному уменьшению среднего времени жизни от нескольких миллиардов лет до нескольких десятиллионных долей секунды.

Более детальное исследование альфа-распада показывает, что существуют запрещенные переходы, которые дают для вероятности распада λ значительно меньшее значение. Запрещенные переходы, которые свойственны четно-нечетным или нечетно-четным и в особенности нечетно-нечетным ядрам, говорят о том, что альфа-частица, по-видимому, образуется в процессе распада. В самом деле, в указанных случаях один неспаренный нуклон при образовании альфа-частицы должен встретить другой неспаренный нуклон с противоположным спином. Поэтому образование альфа-частицы значительно менее вероятно по сравнению со случаем четно-четных ядер, для которых нуклоны с противоположным спином являются спаренными.

Поэтому для сравнения с экспериментом теоретических соотношений, полученных для разрешенных переходов, мы выбрали четно-четные ядра.

В ряде случаев альфа-излучатели испускают альфа-частицы с различными энергиями (тонкая структура энергетического спектра альфа-частиц). При этом, как правило, наибольшей интенсивностью обладают альфа-частицы с максимальной энергией. Это говорит о наличии в ядрах (в данном случае в ядрах, испытывающих распад) нескольких энергетических уровней (изомерных состояний). Если в результате альфа-распада ядро оказывается в возбужденном состоянии, то, как правило, это возбужденное ядро испускает затем гамма-лучи¹⁾.

ж. Капельная модель ядра

Поскольку закон ядерных сил до настоящего времени окончательно не установлен и поскольку он по всей вероятности будет носить весьма сложный характер, большое значение для исследования ядра приобретают модели ядра. По тем же причинам создание модели ядер является значительно более сложным

¹⁾ Некоторые вопросы гамма-излучения будут рассмотрены в § 30.

делом, чем создание модели атомов (см. § 25 и 27). Выдвигаемые модели сложных ядер пока что носят предварительный характер.

Прежде всего необходимо остановиться на так называемой *капельной модели*, согласно которой ядерное вещество должно напоминать каплю жидкости. С помощью такой модели была найдена формула для энергии связи ядер.

Не вдаваясь в анализ конкретного вида ядерных сил, а учитывая только то, что они являются короткодействующими с радиусом действия, значительно меньшим размеров ядра, для полной энергии нуклонов в ядре (потенциальная плюс кинетическая) получаем следующую формулу:

$$E = -C_1V + C_2S + E_{\text{кин.}} + E_{\text{кул.}} \quad (28.61)$$

Здесь первый член ($-C_1V$) учитывает основную часть взаимодействия, а именно короткодействующие силы притяжения, которые приводят, как и в случае жидкой капли, к общей для ядра энергии, пропорциональной объему ядра V . Второй член (C_2S) учитывает уменьшение объемной энергии ядра, вследствие того, что частицы, находящиеся на поверхности ядра-капли, не испытывают притяжения со стороны внешнего пространства, и поэтому внешние нуклоны дают несколько меньший вклад в объемную энергию ядра. Эта часть энергии имеет положительный знак и должна быть пропорциональна поверхности ядра S . В теории жидкой капли поверхностные силы приводят к силам поверхностного натяжения.

Значение для кинетической энергии $E_{\text{кин.}}$ непосредственно из капельной модели получено быть не может. В то же самое время хорошо известно, что ферми-частицы [в данном случае нуклоны, так же как и электроны в металле (см. § 6) или в атоме (см. § 25)] обязательно должны обладать нулевой кинетической энергией. Поэтому для определения кинетической энергии используем статистическую (или газовую) модель ядра.

Согласно статистической модели значение кинетической энергии протонов и нейтронов может быть получено из формулы (25.6), если в последней положить:

$$\rho_0 = \frac{Z}{V} = \text{const}$$

для протонов и

$$\rho_0 = \frac{N}{V} = \frac{A-Z}{V} = \text{const}$$

для нейтронов. Тогда будем иметь:

$$E_{\text{кин.}} = \frac{3}{10} \hbar^2 (3\pi^2)^{2/3} \frac{1}{MV^{2/3}} (Z^{5/3} + N^{5/3}). \quad (28.62)$$

Учитывая, что Z и N для большинства известных в настоящее время ядер (легких и средних) весьма близки к $\frac{A}{2}$, можно в последней формуле положить:

$$Z = \frac{A}{2} \left(1 - \frac{A-2Z}{A} \right),$$

$$N = \frac{A}{2} \left(1 + \frac{A-2Z}{A} \right).$$

и ограничиться в разложении в ряд лишь членами, пропорциональными $\left(\frac{A-2Z}{A}\right)^2$, поскольку линейные члены $\frac{A-2Z}{A}$ сокращаются друг с другом. В этом случае выражение (28.62) принимает вид:

$$T = C_3 \frac{A^{5/3}}{V^{2/3}} + C_3' \frac{(A-2Z)^2}{V^{2/3} A^{1/3}}, \quad (28.63)$$

где C_3 и C_3' — некоторые постоянные коэффициенты, которые при переходе к капельной модели лучше всего найти эмпирически.

Наконец, кулоновская энергия отталкивания протонов, распределенных с постоянной плотностью внутри сферы капельной модели радиуса R ($V = \frac{4\pi}{3} R^3$), может быть вычислена по обычной формуле электростатики:

$$E_{\text{кул.}} = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e_0^2}{R}.$$

Отсюда, учитывая, что радиус ядра (точнее, радиус распределения заряда в ядре) изменяется с увеличением A по закону:

$$R \approx 1,2 \cdot 10^{-13} A^{1/3},$$

находим для энергии связи $W = -E$, выраженной в $M\text{эв}$, следующую формулу:

$$W = 15A - \frac{20}{A} (A-2Z)^2 - 17A^{2/3} - 0,7 \frac{Z^2}{A^{1/3}} + \delta, \quad (28.64)$$

где введена еще поправка на четность:

$$\delta = \begin{cases} -\frac{34}{A^{3/4}}, & Z \text{ — нечетн., } A \text{ — четн.,} \\ +\frac{34}{A^{3/4}}, & Z \text{ — четн., } A \text{ — четн.,} \\ 0, & A \text{ — нечетн.} \end{cases}$$

Здесь численные коэффициенты определены полуэмпирическим способом из условия наилучшего совпадения с экспериментальными данными.

Пользуясь этой формулой, можно объяснить общий характер экспериментальной зависимости удельной энергии связи W/A от массового числа A (см. фиг. 28.1).

Формула (28.64) для фиксированного A дает различные значения Z при изменении порядкового номера Z .

Если же требуется найти максимальное значение энергии связи W при заданном A , то следует потребовать, чтобы

$$\left(\frac{\partial W}{\partial Z}\right)_{A=\text{const}} = 0.$$

Отсюда находим соответствующее значение $Z = Z^*$, определяемое формулой ¹⁾:

$$Z^* = \frac{A}{1,98 + 0,017 \cdot A^{2/3}}. \quad (28.65)$$

Из этой формулы видно, что для легких элементов сравнительно точно соблюдается соотношение $Z^* \approx \frac{1}{2} A$. Для более тяжелых элементов коэффициент $\frac{1}{2}$ несколько уменьшается, приближаясь для самых тяжелых элементов к значению $\frac{2}{5}$.

При построении теории деления ядер в первом приближении мы можем считать, что первоначальное ядро делится точно на две равные части, для каждой из которых можно положить:

$$A' = \frac{A}{2}, \quad Z' = \frac{Z}{2}. \quad (28.66)$$

В этом случае объемная энергия ядра ($E_1 = -15A$), а также энергия, связанная с различием числа протонов и нейтронов $\left[E_2 = \frac{20}{A}(A - 2Z)^2\right]$, остаются без изменения. При делении ядра объемную энергию в первом приближении можно считать неизменной. Изменение же будет претерпевать лишь поверхностная энергия:

$$E_{\text{пов.}} = C_2 4\pi R^2 = 17 A^{2/3} \text{ Мэв} \quad (28.67a)$$

и кулоновская энергия:

$$E_{\text{кул.}} = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e_0^2}{R} = 0,7 \frac{Z^2}{A^{1/3}} \text{ Мэв}. \quad (28.67b)$$

¹⁾ Очевидно, что Z^* в общем случае не будет целым. Поэтому для Z наиболее стабильного изобара следует брать ближайшее целое число. Кривая зависимости Z^* от A называется кривой устойчивости.

При делении поверхностная энергия ядер-осколков несколько возрастает:

$$E'_{\text{пов.}} = 2 \cdot 17 \left(\frac{A}{2} \right)^{2/3} \text{ Мэв} = 2^{1/3} E_{\text{пов.}}$$

Кулоновская энергия всей системы несколько уменьшается и, когда оба осколка удалятся друг от друга на достаточно большое расстояние, становится равной:

$$E'_{\text{кул.}} = 2 \cdot 0,7 \frac{2^{1/3}}{2^2} \frac{Z^2}{A^{1/3}} = \frac{E_{\text{кул.}}}{2^{2/3}}$$

Поэтому, если

$$E'_{\text{пов.}} + E'_{\text{кул.}} < E_{\text{пов.}} + E_{\text{кул.}}, \quad (28.68)$$

т. е.

$$\frac{0,7 Z^2}{17 A} > \frac{2^{1/3} - 1}{\frac{1}{2^{2/3}} - 1} \approx 0,7,$$

или

$$\frac{Z^2}{A} \approx 17, \quad (28.69)$$

деление становится энергетически выгодным, причем энергия реакции деления, т. е. выигрыш потенциальной энергии, который естественно должен превращаться в кинетическую энергию поступательного движения образовавшихся частиц, будет определяться выражением:

$$E_{\text{дел.}} = E_{\text{пов.}} + E_{\text{кул.}} - E'_{\text{пов.}} - E'_{\text{кул.}}$$

Положив в грубом приближении для тяжелых элементов $Z \approx \frac{2}{5} A$, из (28.69) найдем значение $A \sim 100$, при котором деление становится энергетически возможным. Следует заметить, что условие (28.69) вовсе не означает, что ядра с массовым числом $A > 100$ должны немедленно делиться. Это будет происходить не всегда, так как при делении ядра на две части промежуточные состояния могут быть менее энергетически выгодными, чем начальное, т. е. этот процесс, так же как и альфа-распад, будет связан с прохождением частиц сквозь потенциальный барьер.

Только в том случае, когда энергия активации (т. е. высота потенциального барьера по сравнению с начальной энергией) обращается в нуль, ядро должно немедленно распасться. Это будет происходить в том случае, когда начальное состояние ядра соответствует неустойчивому равновесию по отношению к деформациям. Математически это означает, что малейшая деформация ядра должна приводить к увеличению энергии связи.

Найдем изменение поверхностной и кулоновской энергии при деформации ядра, когда оно принимает форму вытянутого по направлению оси z сфероида, т. е. когда поверхность, ограничивающая ядро, описывается уравнением:

$$R'^3 = R^3 [1 + \alpha P_2(\cos \vartheta)]. \quad (28.70)$$

Чтобы центр ядра, помещенный в начало координат, оставался центром симметрии, в последнем выражении должен отсутствовать полином Лежандра первого порядка $P_1(\cos \vartheta)$. В этом случае деформация будет симметричной относительно замены ϑ на $\pi - \vartheta$, т. е. $R'(\vartheta) = R'(\pi - \vartheta)$. Кроме того, мы выбрали зависимость R' от угла ϑ таким образом, чтобы деформацию можно было бы описать с помощью одного параметра, поскольку объем ядра остается неизменным при любом значении параметра α в формуле (28.70).

При малой деформации такого типа поверхность ядра увеличивается, а вместе с тем увеличивается и поверхностная энергия, которая принимает вид (см. задачу 31.2):

$$E'_{\text{пов.}} = C_2 A \pi R^2 \left(1 + \frac{2}{45} \alpha^2\right) = 17 A^{2/3} \left(1 + \frac{2}{45} \alpha^2\right). \quad (28.71)$$

В то же время кулоновская энергия несколько уменьшается и становится равной (см. задачу 31.2):

$$E'_{\text{кул.}} = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e_0^2}{R} \left(1 - \frac{1}{45} \alpha^2\right) = 0,7 \frac{Z^2}{A^{1/3}} \left(1 - \frac{1}{45} \alpha^2\right). \quad (28.72)$$

Очевидно, что равновесие ядра будет устойчивым (т. е. энергия активации будет больше нуля), когда

$$E'_{\text{пов.}} + E'_{\text{кул.}} > E_{\text{пов.}} + E_{\text{кул.}}. \quad (28.73)$$

Поскольку

$$E'_{\text{пов.}} + E'_{\text{кул.}} = E_{\text{пов.}} + E_{\text{кул.}} + \frac{\alpha^2}{45} (2E_{\text{пов.}} - E_{\text{кул.}}),$$

то условие (28.73) будет иметь место при наличии соотношения:

$$E_{\text{кул.}} < 2E_{\text{пов.}}.$$

Отсюда следует, что

$$\frac{0,7 Z^2}{17 A} \leq 2, \quad (28.74)$$

т. е.

$$\frac{Z^2}{A} \leq 49. \quad (28.75)$$

Последнее условие для устойчивости ядер было получено почти одновременно советским физиком Я. И. Френкелем, а также зарубежными физиками Бором и Уилером в 1939 г. сразу же после того, как немецкие физики Ган и Штрассман экспериментально

открыли деление урана в результате бомбардировки его нейтронами.

Таким образом, если $Z^2/A < 17$, то энергия деления будет отрицательной величиной и такой процесс не должен иметь места. При $17 < Z^2/A < 49$ энергии деления и активации будут положительными величинами и спонтанное деление становится возможным как результат прохождения частиц сквозь потенциальный барьер. Наконец, при $Z^2/A > 49$ энергия активации становится отрицательной величиной и ядро становится неустойчивым по отношению к делению.

В более точных теориях следует также учитывать возможность отклонения формы устойчивых ядер от сферической, а также деление на неравные части.

У элементов конца периодической системы Менделеева отношение Z^2/A сравнительно быстро возрастает.

Так, например, у U^{238} это отношение равно 35,5 (энергия активации 5,8 Мэв), а для Cf^{246} оно увеличивается уже до 39. Поэтому если период полураспада по отношению к спонтанному делению для U^{238} достигает порядка 10^{16} лет, то для Cf^{246} он понижается до 10^3 лет.

Предел же существования тяжелых ядер, а вместе с тем и всей периодической системы элементов будет обусловлен их чрезвычайно малым временем жизни по отношению к спонтанному делению. Подставляя $A \sim \frac{5}{2}Z$ в формулу (28.75), находим предельные значения Z и A :

$$Z_{\text{пр.}} \sim 120 \text{ и } A_{\text{пр.}} \sim 300.$$

Конечно, эти формулы не претендуют на большую точность, так как в капельной модели не учитываются многие детали строения ядра. Более точный анализ показывает, что периодическая система, по-видимому, должна быть ограничена Z порядка 110.

Следует также заметить, что вероятность распада ядра сильно увеличивается при бомбардировке его тепловыми нейтронами, гамма-квантами и т. д. В самом деле, под влиянием внешнего воздействия ядро (т. е. заряженная капля) приходит в колебание, то вытягиваясь, то сплющиваясь. В том же случае, когда деформация достигает критической величины, соответствующей энергии активации, эти колебания в конце концов приведут к делению. Если в каждом акте деления тяжелого ядра испускается еще 2—3 нейтрона, то эти нейтроны при соответствующих благоприятных условиях (если они не будут поглощены примесями, а их энергия соответствует энергии деления) могут, в свою очередь, вызвать новые акты деления ядер. Это и приводит к возможности осуществления цепной реакции деления, в которой

выделяется огромная энергия (в ядерном реакторе или при взрыве атомной бомбы).

Особенно больших значений эта вероятность деления под действием тепловых нейтронов достигает у U^{235} , U^{233} и Pu^{239} . Поэтому указанные изотопы и представляют особый интерес для современной ядерной энергетики.

3. Оболочечная модель ядра

Вследствие сильного взаимодействия между нуклонами, казалось, что можно было бы говорить лишь о строении всего ядра в целом, не обращая внимания на поведение отдельных нуклонов. В этом отношении капельная модель, явившаяся удачным приближением для описания свойств ядра в целом, сумела объяснить зависимость удельной энергии связи от массового числа A и порядкового номера Z , а также деление ядер, наличие вращательно-колебательных энергетических уровней и т. д.

Однако обширный эмпирический материал, собранный в последующие годы, говорил также и о том, что нуклоны в ядре не теряют полностью своих индивидуальных свойств и заполняют оболочки типа электронных оболочек, которые, в частности, приводят к периодическим изменениям свойств ядер в зависимости от числа протонов и нейтронов.

Как известно, атомы с целиком заполненной внешней электронной оболочкой оказываются наиболее стабильными (см. § 25). Такими атомами являются атомы инертных газов, имеющие следующее число электронов: 2 (гелий), 10 (неон), 18 (аргон), 36 (криптон), 54 (ксенон) и 86 (радон). Точно так же оказалось, что имеются такие ядра, которые обладают наибольшей стабильностью по сравнению с соседними. Однако такие ядра имеют несколько иные (по сравнению с числом электронов в атоме) значения для чисел протонов и нейтронов, а именно для них число протонов Z (или нейтронов N) равно 2, 8, 20, 50, 82 и $N = 126$. Эти числа получили название *магических* (М. Гепперт-Майер, 1948), а ядра с такими числами протонов или нейтронов (являющимися ядерными аналогами инертных газов) называют магическими ядрами.

В пользу оболочечной модели прежде всего говорят повышенные удельные энергии связи ядер с числами протонов и нейтронов, равными магическим числам, например, ${}^2_2\text{He}^4$, ${}^8_8\text{O}^{16}$, ${}^{20}_{20}\text{Ca}^{40}$ и ${}^{82}_{82}\text{Pb}^{208}$.

В указанных ядрах как число протонов, так и число нейтронов равняется магическим числам, и поэтому они называются *дважды магическими*. Благодаря тому, что эти ядра являются наиболее устойчивыми, они являются и более распространенными,

чем соседние элементы. Если же сравнить распространенность изотопов одного и того же элемента (т. е. ядер с фиксированным Z), то максимумы распространенности будут приходиться на магические числа нейтронов¹⁾.

Далее, эффективное сечение захвата быстрых нейтронов имеет наименьшее значение для ядер с $N=20, 82, 126$ ($\text{Ca}^{40}, \text{Zr}^{90}, \text{Ba}^{138}, \text{Bi}^{209}, \text{Pb}^{208}$, в то время как у соседних элементов эффективное сечение захвата оказывается примерно в сто раз большим.

Из графиков зависимости удельных энергий связи атомных ядер от массового числа для всей системы изотопов следует, что эти энергии испытывают характерные скачки в области заполнения ядерных оболочек. Квадрупольные моменты, характеризующие отклонение от сферической симметрии, распределения электрического заряда ядра при значениях числа протонов или нейтронов, равных магическим числам, обращаются в нуль, переходя от положительных значений к отрицательным. Поэтому мы имеем все основания считать, что ядра с магическим числом протонов или нейтронов, подобно атомам инертных газов, соответствуют заполненным протонным или нейтронным оболочкам. При этом, как уже отмечалось выше, магические числа как для протонов, так и для нейтронов совпадают. Это еще раз говорит о том, что схема уровней в ядрах обусловлена в основном ядерными, а не кулоновскими силами, действующими лишь между протонами.

При исследовании заполнения нуклонных оболочек в ядрах, так же как и в теории атома, обычно пользуются одночастичной моделью. В отличие от электронной оболочки атома в случае ядра точный закон взаимодействия между нуклонами неизвестен, что на первый взгляд делает как будто невозможным теоретический расчет схемы заполнения уровней ядра. Однако ввиду короткодействующего характера ядерных сил и быстрого спада плотности нуклонов на границе ядер, при исследовании движения одного нуклона в поле всех остальных нуклонов, этот потенциал можно аппроксимировать параболическим потенциалом трехмерного осциллятора или сферической прямоугольной ямой.

¹⁾ Из следующей таблицы распространенности устойчивых изотопов свинца:

Изотоп	Распространенность, %
Pb^{204}	1,37
Pb^{206}	25,14
Pb^{207}	21,11
Pb^{208}	52,38

видно, что она достигает максимума у дважды магического изотопа Pb^{208} .

Предполагая, что среднее поле обладает сферической симметрией, получаем в качестве решения уравнения для угловой части волновой функции шаровые функции $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$, иначе говоря, состояние отдельного нуклона в ядре будет характеризоваться значениями орбитального квантового числа:

$$\begin{aligned} l=0 \text{ (s-термы)}, \quad l=1 \text{ (p-термы)}, \\ l=2 \text{ (d-термы)}, \quad l=3 \text{ (f-термы)}, \\ l=4 \text{ (g-термы)}, \quad l=5 \text{ (h-термы)} \text{ и т. д.} \end{aligned}$$

Для определения энергетических уровней нуклонов в ядре воспользуемся моделью сферически-симметричного гармонического осциллятора (см. фиг. 28.9), энергетический спектр которого был исследован нами в § 21.

Согласно формуле (21.18), энергетический спектр трехмерного гармонического осциллятора определяется выражением:

$$E = -V_0 + \hbar\omega \left(2k + l + \frac{3}{2} \right), \quad (28.76)$$

где V_0 — глубина потенциальной ямы, представляющей все нуклоны данного ядра, кроме рассматриваемого, ω — частота колебаний, определяемая ядерными силами, l — орбитальное квантовое число, характеризующее порядок шаровой функции, которая входит в волновую функцию Ψ , а

радиальное квантовое число k принимает значения 0, 1, 2, 3 и т. д.

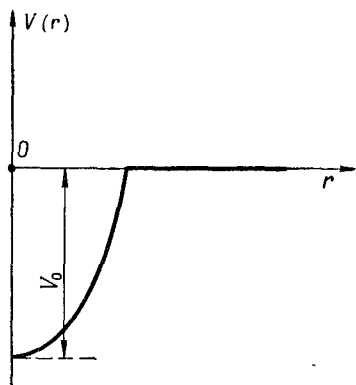
Положим главное квантовое число n равным:

$$n = 2k + l. \quad (28.77)$$

В этом случае энергия осциллятора в нерелятивистском приближении будет зависеть только от главного квантового числа n :

$$E_n = -V_0 + \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right). \quad (28.78)$$

В теории ядра, где действуют короткодействующие силы, орбитальное квантовое число l изменяется в пределах от 0 до n , причем в случае нечетных l квантовое число n может принимать лишь нечетные значения и, наоборот, для четных l значения n будут также четными.



Фиг. 28.9. Потенциальная яма ядра нуклона в одночастичной модели ядра.

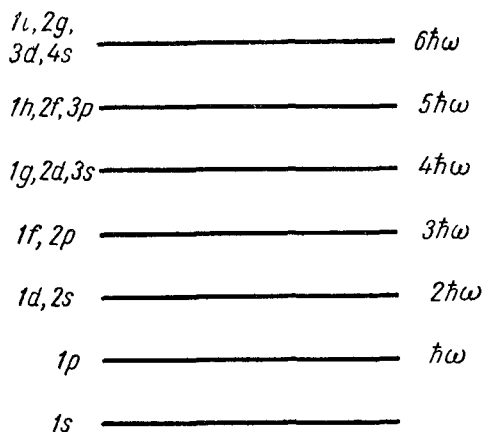
Схема уровней частицы в трехмерной потенциальной яме представлена на фиг. 28.10. Эти уровни являются вырожденными по квантовому числу l , поскольку энергия зависит только от n . Главное квантовое число n в теории ядра не используется для обозначения термов, так что обычно номер подоболочки означает, в какой раз число l появляется.

При учете же отклонения от этого осцилляторного потенциала, так же как и при отклонении от кулоновского закона в теории атома, вырождение по l снимается. При этом в теории ядра в соответствии с экспериментальными фактами следует предположить, что уровни поднимаются тем выше, чем меньше l .

Кроме того, в ядрах благодаря сильному взаимодействию между спином и орбитальным движением осуществляется непосредственная связь между орбитальным l и спиновым s моментами одной и той же частицы, которые, складываясь, дают полный момент j частицы. Результирующий же момент ядра получается путем векторного сложения полных моментов всех нуклонов.

Таким образом, в ядре имеет место jj -связь, в отличие от обычного атома, где осуществляется LS -связь Рессела — Саундерса, когда вначале складываются все l ($\sum l_i = L$) и s ($\sum s_i = S$), а затем уже находится $J = L + S$.

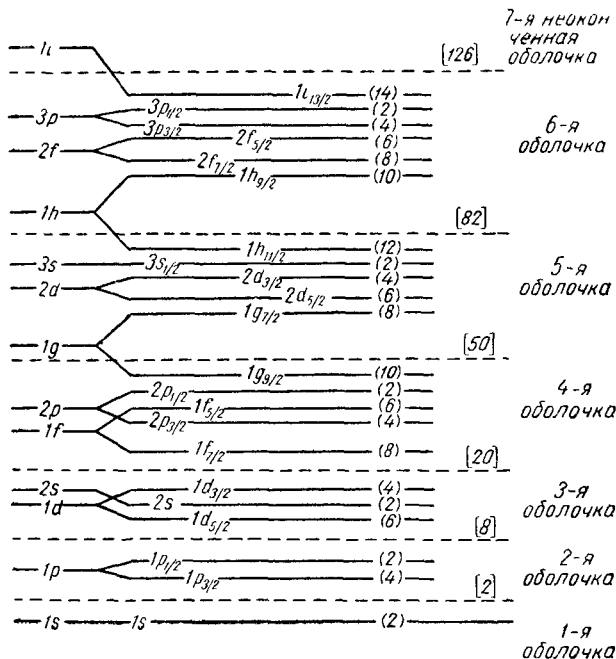
Как известно, в случае атома спин-орбитальное взаимодействие непосредственно в уравнение Дирака не входит. Оно может быть вычислено совершенно автоматически, исходя из кулоновских сил при переходе к приближенному уравнению, в котором учитываются члены порядка $(v/c)^2$ (см. § 19). Поскольку теория ядерных сил разработана совершенно недостаточно, спин-орбитальное взаимодействие нуклонов не может быть сколько-нибудь надежно вычислено. Более того, если в атоме водорода при заданном l уровни с более высоким значением j лежат выше, чем уровни с меньшим j , то в случае ядра уровни с более высокими j лежат ниже, а следовательно, они и должны заполняться в первую очередь.



Фиг. 28.10. Схема ядерных уровней в осцилляторной яме без учета спин-орбитальной связи.

Энергии $n\hbar\omega = E_n - E_0$, указанные справа, отсчитываются от уровня $1s$.

Учет jj -связи приводит к тому, что в ядрах уровни с данным l расщепляются на два: с $j=l+\frac{1}{2}$ и с $j=l-\frac{1}{2}$, т. е. что одна подоболочка может отличаться от другой только значением полного момента j .



Фиг. 28.11. Схема ядерных оболочек и подоболочек с учетом спин-орбитальной связи.

Пунктирными линиями отделены друг от друга различные оболочки. Слева приведена последовательность уровней в осцилляторной яме, когда вырождение по l снято, но без учета спин-орбитальной связи.

Схема ядерных энергетических уровней с учетом спин-орбитальной связи изображена на фиг. 28.11. В круглых скобках стоит максимальное число протонов (или нейтронов), вычисленное по формуле $N_j = 2j + 1$, которые могут находиться в заданной подоболочке.

Ядерная же оболочка должна объединять группу подоболочек, отделенных от других оболочек достаточно широким энергетическим интервалом. На фиг. 28.11 эти оболочки отделены друг от друга пунктирными линиями и в квадратных скобках указано максимальное число нуклонов в соответствующей оболочке.

Из приведенной схемы легко видеть, что на группировку первых трех низших оболочек ($1s$), ($1p$), ($1d$, $2s$), соответствующих магическим числам 2, 8 и 20, спин-орбитальное взаимодействие фактически не влияет. При получении следующего магического числа 50 необходимо предположить, что в четвертую оболочку входят не только подоболочки ($1f$, $2p$), которые заканчиваются на 40 нуклоне, но и подоболочка $1g_{9/2}$, содержащая 10 нуклонов, которая примыкает к четвертой оболочке. Таким образом, в четвертую оболочку, которая кончается на магическом числе 50, входят подоболочки $1f$, $2p$ и $1g_{9/2}$. В пределах следующей оболочки, заканчивающейся на магическом числе 82, заполняются подоболочки $1g_{7/2}$, $2d$, $3s$ и $1h_{11/2}$. Наконец, магическое число 126 можно получить, если в шестую оболочку поместить подоболочки $1h_{9/2}$, $2f$, $3p$ и $1i_{13/2}$.

Рассмотрим теперь истолкование наблюдаемых спинов ядер на основе модели ядерных оболочек. У ядер с магическим числом протонов и нейтронов спин, магнитный и квадрупольный моменты равны нулю. При наличии одного нуклона вне заполненной оболочки или недостатка одного нуклона спин ядра будет определяться моментом этого нуклона или его «дырки» (четно-нечетные или нечетно-четные ядра). При наличии двух одинаковых нуклонов вне заполненной оболочки спин ядра будет определяться взаимной ориентацией моментов этих двух нуклонов, причем для четно-четных ядер общий спин равен нулю. Это значит, что связь благоприятствует антипараллельной ориентации моментов двух протонов или двух нейтронов.

Наоборот, для нечетно-нечетных ядер, когда остаются незаполненными один протон и один нейтрон, так же как и в случае дейтрона, связь между протоном и нейтроном будет наибольшей при параллельной ориентации их спинов. Все нечетно-нечетные ядра, как правило, имеют отличный от нуля целочисленный спин.

Наряду с капельной моделью ядра, где не учитываются эффекты, связанные с движением отдельных нуклонов, а также оболочечной (одночастичной) моделью ядра, где хотя и учитывается движение отдельных нуклонов, но потенциальная яма, в которой они движутся, считается заданной, начинают развиваться и другие модели атомных ядер, и в первую очередь обобщенная, или коллективная, модель атомного ядра, разработанная О. Бором (сыном Нильса Бора). Эта модель представляет собой, грубо говоря, объединение капельной и оболочечной моделей. В обобщенной модели принимается, что ядро состоит из деформируемой части так называемого ядерного остова, который определяет вращательные и колебательные свойства ядра как целого, и взаимодействующих с ним внешних нуклонов.

С помощью обобщенной модели удалось объяснить свойства низших возбужденных состояний, а также электрические квадрупольные моменты ядер.

Широкое применение для многих расчетов нашла так называемая оптическая модель ядра, носящая феноменологический характер.

Как известно, многие задачи прохождения электронов или нейтронов через кристаллическое вещество, когда энергия частиц достаточно велика, могут решаться приближенно путем замены кристалла непрерывной средой с комплексным показателем преломления.

Точно так же при прохождении сравнительно быстрых нуклонов (с энергией порядка от 1 до нескольких десятков $Mэв$) сквозь ядро, воздействие последнего можно заменить комплексным потенциалом. При таком описании вещественная часть потенциала будет характеризовать упругое рассеяние нуклона ядром, мнимая же часть потенциала — неупругие процессы¹⁾.

Однако все эти модели носят предварительный характер. Последовательное же обоснование и уточнение модели ядра станет возможным лишь после того, как будет установлен точный закон ядерных сил. Более детально с современным состоянием теории ядра можно познакомиться по специальным курсам.

§ 29. УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЦ

а. Нестационарная теория возмущений

В том случае, когда гамильтониан явно зависит от времени, получить точные решения уравнения Шредингера, как правило, не представляется возможным. Если зависящая от времени часть

¹⁾ В этом случае задача рассеяния рассматривается не как проблема многих тел, а как задача о движении нуклона в некотором не зависящем от времени поле, создаваемом ядром.

Таким простейшим потенциалом может служить в простейшем случае прямоугольная яма:

$$V(r) = -U(r)(1 + i\xi)$$

$$U(r) = \begin{cases} V_0; & r < R \\ 0; & r > R, \end{cases}$$

где V_0 , ξ и R — константы для данного ядра.

Подобная полуэмпирическая модель носит название оптической. Оптическая модель позволяет рассчитать упругое рассеяние (вещественная часть потенциала) и сечение захвата, зависящее от мнимой части потенциала. Параметры, определяющие потенциал, подгоняются из эмпирических данных. Например, часто для расчетов принимают $V_0 = 42 Mэв$, $\xi = 0,03$ и $R = 1,45 \cdot 10^{-18} A^{1/3} \text{ см}$.

гамильтониана $V'(t)$ мала по сравнению с основным, независимым от времени гамильтонианом H^0 , то при решении этой задачи может быть использована нестационарная теория возмущений.

Очевидно, что результаты нестационарной теории возмущений могут быть применены также и к случаю, когда энергия возмущения не зависит от времени. При этом мы должны получить результаты стационарной теории возмущений, рассмотренные нами в § 14.

Включая в рассмотрение возмущение $V'(t)$, запишем уравнение Шредингера в виде:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = [H^0 + V'(t)] \psi(t). \quad (29.1)$$

Решение этого уравнения в нулевом приближении ($V'(t) = 0$) имеет форму:

$$\psi(t) = \sum_n C_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n, \quad (29.2)$$

где волновая функция ψ_n является решением стационарного волнового уравнения:

$$E_n \psi_n = H^0 \psi_n, \quad (29.3)$$

причем функции ψ_n должны удовлетворять также условию ортонормированности:

$$\int \psi_n^* \psi_{n'} d^3x = \delta_{n'n}. \quad (29.4)$$

Решение уравнения (29.1) с учетом энергии возмущения $V'(t)$ будем искать в виде (29.2), предполагая, что коэффициенты C_n зависят от времени: $C_n \rightarrow C_n(t)$. Этот приближенный метод решения был предложен Дираком и представляет собой развитие метода решения дифференциальных уравнений, известного под названием метода вариации постоянных.

Подставляя (29.2) в (29.1) и учитывая равенство (29.3), находим следующее уравнение для определения искомого коэффициента C_n :

$$-\sum_{n'} \frac{\hbar}{i} \dot{C}_{n'} \psi_{n'} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n'} t} = \sum_{n'} V'(t) C_{n'} \psi_{n'} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n'} t}. \quad (29.5)$$

Умножая последнее равенство на $\psi_n^* e^{\frac{i}{\hbar} E_n t}$, интегрируя полученное выражение по всему пространству, и учитывая условия ортонормированности (29.4), приходим к следующей системе уравнений для определения неизвестных коэффициентов C_n :

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{C}_n = \sum_{n'} C_{n'} e^{i\omega_{n'n} t} V'_{n'n'}(t), \quad (29.6)$$

где

$$\omega_{n'n'} = \frac{E_{n'} - E_n}{\hbar}, \quad (29.7)$$

а матричный элемент:

$$V'_{n'n''}(t) = \int \psi_{n''}^* V'(t) \psi_{n'} d^3x.$$

Полученная впервые Дираком система (29.6), взятая для всех значений n' , полностью эквивалентна исходному волновому уравнению.

Аппроксимация теории возмущений состоит в том, что решение ищется в виде разложения:

$$C_{n'} = C_{n'}^0 + C_{n'}^1 + C_{n'}^2 + \dots, \quad (29.8)$$

где коэффициенты нулевого приближения $C_{n'}^0$ не должны зависеть от V' . Коэффициенты же первого приближения $C_{n'}^1$ и всех остальных должны быть пропорциональны соответственно V' , V'^2 и т. д.

Подставляя (29.8) в (29.6) и учитывая лишь члены первого приближения, находим следующую систему уравнений для определения коэффициентов $C_{n'}$:

$$\dot{C}_{n'}^0 = 0 \quad (\text{нулевое приближение}), \quad (29.9)$$

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{C}_{n'}^1 = \sum_{n''} C_{n''}^0 e^{i\omega_{n'n''} t} V'_{n'n''}(t) \quad (\text{первое приближение})$$

и т. д.

Первое из уравнений (29.9) показывает, что искомые коэффициенты в нулевом приближении не должны зависеть от времени, т. е.

$$C_{n'}^0 = \text{const}. \quad (29.10)$$

Их значения задаются начальными условиями и характеризуют состояние электрона до того, как на него начало действовать возмущение.

Допустим, что в начальный момент времени, т. е. при $t=t_0$, электрон находится в состоянии n . Тогда можно положить:

$$C_{n''}^0 = \delta_{nn''}. \quad (29.11)$$

Последнее выражение определяет начальные условия нашей задачи. Подставляя (29.11) в (29.9), находим:

$$C_{n'}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt e^{i\omega_{n'n} t} V_{n'n}(t). \quad (29.12)$$

Как правило, в квантовой механике вычисляется вероятность перехода ω за единицу времени. Учитывая, что вероятность нахождения частицы в состоянии n' характеризуется выражением $|C_{n'}|^2$, для вероятности перехода получаем выражение:

$$\omega = \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n'} |C_{n'}|^2. \quad (29.13)$$

Формулы (29.12) и (29.13) лежат в основе исследований многих квантовомеханических задач в первом приближении нестационарной теории возмущений.

б. Эффективное сечение упругого рассеяния

Применим полученные формулы прежде всего для исследования упругого рассеяния электрона.

Допустим, что в начальный момент $t_0 = 0$ частица была свободной, т. е. двигалась равномерно с импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и энергией $E = \frac{p^2}{2m_0} = c\hbar K$ ($K = \frac{k^2}{2k_0}$, $k_0 = \frac{m_0 c}{\hbar}$). После же включения

в момент времени $t_0 = 0$ возмущения, т. е. взаимодействия, характеризуемого потенциальной энергией $V(\mathbf{r})$, частица обладает определенной вероятностью перейти в другое состояние с импульсом $\mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k}'$ и энергией $E' = c\hbar K'$ ($K' = \frac{k'^2}{2k_0}$), т. е. в результате включения взаимодействия должно произойти рассеяние частицы (см. фиг. 29.1).

Волновые функции начального и конечного состояний, описывающие свободное движение (нулевое приближение), будут в этом случае иметь вид [см. (4.62)]:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{k}) &= L^{-3/2} e^{-icKt + i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \\ \psi(\mathbf{k}') &= L^{-3/2} e^{-icK't + i\mathbf{k}'\mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (29.14)$$

где L^3 — объем основного куба периодичности, а составляющие импульса k_i и k'_i ($i = 1, 2, 3$) связаны с целыми числами n_i и n'_i с помощью соотношения:

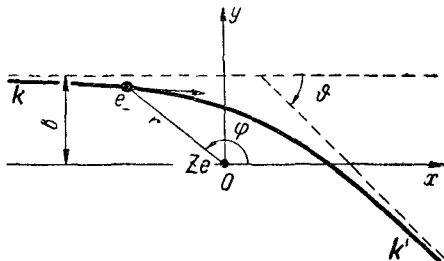
$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L}, \quad k'_i = \frac{2\pi n'_i}{L}. \quad (29.15)$$

Подставляя волновые функции (29.14) в выражение (29.12) для коэффициента $C_{n'}$, находим:

$$C_{n'}(t) = \frac{1}{L^3} V_x \frac{1 - e^{ict(K' - K)}}{c\hbar(K' - K)}, \quad (29.16)$$

где матричный элемент энергии взаимодействия равен ($V' = V(\mathbf{r})$):

$$V_x = \int e^{i\mathbf{x}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3x, \quad \mathbf{x} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'.$$



Фиг. 29.1. Рассеяние частицы силовым центром:

$\hbar\mathbf{k}$ — импульс падающей частицы; $\hbar\mathbf{k}'$ — импульс рассеянной частицы; φ — угол рассеяния; O — рассеивающий центр.

Отсюда для вероятности перехода имеем:

$$\omega = \frac{\partial}{\partial t} \sum_{k'} |C_{k'}|^2 = \frac{1}{L^3} \sum_{k'} |V_x|^2 \frac{2 \sin ct (K' - K)}{c\hbar^2 (K' - K)}. \quad (29.17)$$

Заметим, что функция:

$$f = \frac{\sin ct (K' - K)}{\pi (K' - K)} \quad (29.18)$$

при достаточно больших значениях t имеет острый максимум при $K' - K \rightarrow 0$. Это приводит к тому, что практически можно ограничиться лишь такими изменениями K' , для которых выполняется условие:

$$ct |K' - K| \sim 2\pi.$$

Принимая во внимание, что величина $t = t - t_0 = \Delta t$ есть промежуток времени от начального момента, а величина $c\hbar (K' - K) = \Delta E$ представляет собой разброс энергии в результате рассеяния, находим связь между этими величинами:

$$\Delta t |\Delta E| \sim \hbar. \quad (29.19)$$

Последнее соотношение, если угодно, можно рассматривать как четвертое соотношение неопределенности, которое обычно получают из теории переходных процессов.

Так же как и пространственные соотношения неопределенности, соотношение (29.19) не носит какого-то субъективного характера, связанного с неконтролируемостью влияния наблюдателя на микромир (см. § 3 и 7). Неопределенность же энергии является характерной для любого волнового процесса и имеет своим аналогом известное из классической оптики выражение для уширения спектральных линий, связанное с конечным значением длительности излучения.

При достаточно же больших значениях времени $t (t \rightarrow \infty)$ неопределенность энергии стремится к нулю и выражение (29.18) будет выражать собой закон сохранения энергии:

$$K' = K,$$

благодаря чему это рассеяние получило название упругого¹⁾.

Математическое это следует из того обстоятельства, что функция (29.18) при $t = \infty$ будет представлять собой δ -функцию, которая при интегрировании приведет к замене K' на K . Чтобы это показать, рассмотрим интеграл:

$$I = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sin ct (K' - K)}{K' - K} F(K') dK'. \quad (29.20)$$

¹⁾ В качестве примера неупругого рассеяния можно привести тормозное излучение, когда при рассеянии электрон испускает фотон, благодаря чему будем иметь: $K' < K$.

Произведем замену переменных:

$$ct(K' - K) = \xi.$$

Тогда будем иметь:

$$I = \frac{1}{\pi} \int_{-ctK}^{\infty} \frac{\sin \xi}{\xi} F\left(K + \frac{\xi}{ct}\right) d\xi.$$

Последнее выражение (если функция F не имеет каких-либо особенностей) при $t \rightarrow \infty$ дает:

$$I = F(K) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin \xi}{\xi} d\xi = F(K).$$

С другой стороны, из определения δ -функции следует:

$$\int_0^{\infty} \delta(K' - K) F(K') dK' = F(K). \quad (29.21)$$

Отсюда видно, что выражение (29.18) при $t \rightarrow \infty$ переходит в δ -функцию, и выражение (29.17) для вероятности перехода можно записать в виде:

$$\omega = \frac{2\pi}{L^3 c \hbar^2} \sum_{k'} |V_x|^2 \delta(K' - K). \quad (29.22)$$

При переходе в равенстве (29.22) от суммы к интегралу мы должны, согласно (29.15) использовать соотношение:

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = k^2 dk' d\Omega = k_0 k' dk' d\Omega. \quad (29.23)$$

Обычно рассеяние характеризуют *эффективным сечением*, равным отношению вероятности ω к числу частиц N , падающих в единицу времени на единицу поверхности $S = 1 \text{ см}^2$, перпендикулярной падающему пучку частиц. На эту поверхность в единицу времени, очевидно, попадут те частицы, которые расположены от нее на расстоянии, не превышающем скорости частицы v , т. е. находящиеся в объеме $vS = v$. Это число N равно произведению плотности числа частиц $\rho_0 = L^{-3}$ на объем, численно равный скорости частицы:

$$N = \frac{v}{L^3} = \frac{c}{L^3} \cdot \frac{k}{k_0}. \quad (29.24)$$

С помощью соотношений (29.22) — (29.24) для эффективного сечения рассеяния находим следующее выражение:

$$\sigma = \frac{\omega}{N} = \int \sigma(\vartheta, \varphi) d\Omega, \quad (29.25)$$

где подынтегральное выражение, характеризующее число рассеянных частиц, попадающих в телесный угол $d\Omega$ ($d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$, ϑ и φ — сферические углы рассеяния), называемое *дифференциальным эффективным сечением*, равно:

$$\sigma(\vartheta, \varphi) = \left(\frac{m_0}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |V_x|^2. \quad (29.26)$$

В частности, когда рассеивающий центр обладает сферической симметрией, будем иметь:

$$V_x = \int_0^\infty V(r) r^2 dr \oint e^{i\mathbf{x}\mathbf{r}} d\Omega',$$

где $d\Omega'$ — телесный угол в пространстве вектора \mathbf{r} , в то время как в формуле (29.25) $d\Omega$ — телесный угол в пространстве вектора \mathbf{k}' .

Интегрируя последнее выражение по телесному углу $d\Omega'$, найдем:

$$V_x = \frac{4\pi}{x} \int_0^\infty r \sin xr V(r) dr.$$

Отсюда видно, что дифференциальное эффективное сечение упругого рассеяния равно:

$$\sigma(\vartheta) = |f(\vartheta)|^2, \quad (29.27)$$

где

$$x = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}, \quad (29.27a)$$

а величина:

$$f(\vartheta) = -\frac{2m_0}{\hbar^2 x} \int_0^\infty r \sin xr \cdot V(r) dr \quad (29.28)$$

называется *амплитудой рассеяния*.

Формула (29.27), описывающая упругое рассеяние частицы силовым центром $V(r)$ в первом приближении теории возмущений, впервые была найдена Борном; поэтому подобное приближение носит название *борновского приближения*.

Заметим, что эта же задача может быть решена и по стационарной теории возмущений, так как потенциальная энергия взаимодействия не зависит от времени.

Однако для получения эффективного сечения рассеяния мы использовали нестационарную теорию возмущений, математический аппарат которой является также сравнительно простым, но обладает большей общностью. Он, в частности, позволяет решать многие задачи современной квантовой электродинамики с учетом

взаимодействия электронов с вторично квантованным электромагнитным полем (см. § 30).

Выражение для $\sigma(\vartheta)$, найденное по методу возмущений, имеет определенные границы применимости. В случае короткодействующих сил (ядерные силы, нейтральный атом, непроницаемая сфера и т. д.), когда ими на расстояниях r от центра, превышающих некоторый эффективный радиус R , можно пренебречь, величина эффективного сечения (даже когда эти силы создают барьер, абсолютно непроницаемый для частиц) не может превышать порядок их геометрического сечения πR^2 . Поэтому для короткодействующих сил находим следующую область применимости метода возмущений:

$$\sigma < \pi R^2. \quad (29.29)$$

В случае же дальнедействующих сил (например, кулоновские силы) формула (29.27) несправедлива, вообще говоря, при малых углах рассеяния. Этот вопрос обычно требует более детального анализа (см. ниже).

в. Рассеяние на юкавском силовом центре

Как известно, потенциальная энергия юкавского взаимодействия имеет следующий вид:

$$V = -A \frac{e^{-k_0 r}}{r}, \quad (29.30)$$

где A — некоторая постоянная, а $R = \frac{1}{k_0}$ — эффективный радиус действия этих сил. Взаимодействие (29.30) может найти самое широкое применение. Как было отмечено в § 28, этому закону удовлетворяет простейший потенциал ядерных сил (потенциал Юкавы).

В этом случае величина $A = g^2$, где g — ядерный заряд, превышающий электрический более чем в 10 раз, а радиус действия ядерных сил равен комptonовской длине волны пи-мезонного поля:

$$R = \frac{\hbar}{m_\pi c} \sim 10^{-13} \text{ см}. \quad (29.31)$$

Точно так же при рассеянии быстрых электронов (или альфа-частиц) нейтральным атомом потенциал, следующий из модели Томаса — Ферми, можно аппроксимировать выражением (29.30)¹⁾.

¹⁾ Более точной оказывается аппроксимация потенциала Томаса — Ферми выражением (25.22), как было отмечено в § 25 и 27. Однако результаты обеих аппроксимаций не очень сильно отличаются друг от друга (вследствие короткодействующего характера сил), а в задаче рассеяния аппроксимация (29.30) является более удобной для расчета.

В последнем случае величина $A = Ze_0^2$, где Z — порядковый номер атома, а эффективный радиус R атома в модели Томаса — Ферми равен:

$$R = \frac{\gamma a_0}{Z^{1/3}}, \quad (29.32)$$

где γ — коэффициент порядка единицы.

Наконец, полагая $R \rightarrow \infty$, получаем потенциал кулоновского поля ядра, который также можно рассматривать как частный случай выражения (29.30).

Подставляя (29.30) в формулу (29.27) и учитывая, что

$$\int_0^{\infty} r \sin \kappa r V(r) dr = -A \int_0^{\infty} \sin \kappa r e^{-k_0 r} dr = -A \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_0^2},$$

приходим к следующему выражению для дифференциального эффективного сечения упругого рассеяния:

$$\sigma(\vartheta) = \frac{4m_0^2 A^2 R^4}{\hbar^4 (\kappa^2 R^2 + 1)^2}. \quad (29.33)$$

Здесь согласно (29.27а):

$$\kappa^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = 4 \frac{p^2}{\hbar^2} \sin^2 \frac{\vartheta}{2},$$

где p — импульс частицы.

При исследовании формулы (29.33) следует различать два случая.

1. Случай рассеяния сравнительно медленных частиц, когда для любых углов рассеяния $\kappa R \ll 1$. Как видно из формулы (29.33), в этом случае $\sigma(\vartheta)$ не будет зависеть от угла ϑ и становится равным:

$$\sigma(\vartheta) = \frac{4m_0^2 A^2 R^4}{\hbar^4}. \quad (29.34)$$

Независимость сечения рассеяния от угла ϑ (изотропность) является характерной чертой рассеяния частиц сравнительно низких энергий центром короткодействующих сил.

2. При рассеянии сравнительно быстрых частиц для углов, удовлетворяющих условию $\kappa R \gg 1$, дифференциальное эффективное сечение не будет зависеть от величины радиуса действия сил R и становится равным:

$$\sigma(\vartheta) = \frac{4m_0^2 A^2}{\hbar^4 \kappa^4}. \quad (29.35)$$

Отсюда видно, что для таких углов рассеяние на потенциале Юкавы будет таким же, как и при рассеянии на кулоновском центре. Поэтому при рассеянии быстрых электронов или α -частиц нейтральным атомом на сравнительно большие углы атомные

электроны особой роли не играют, и рассеяние определяется лишь потенциалом ядра.

Полагая в (29.33) $A = Ze_0^2$ и $\kappa = \frac{2p}{\hbar} \sin \frac{\vartheta}{2}$, приходим к формуле Резерфорда:

$$\sigma(\vartheta) = \frac{Z^2 e_0^4 m_0^2}{4p^4 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}}, \quad (29.36)$$

полученной нами методами классической физики в § 2. Из формулы (29.36) видно, что для сил с большим радиусом действия имеет место сильная зависимость сечения от угла рассеяния ϑ .

Однако для любых больших значений волнового вектора $k = \frac{p}{\hbar}$ найдутся такие малые углы ϑ , при которых будет выполняться неравенство:

$$\frac{2pR}{\hbar} \sin \frac{\vartheta}{2} \ll 1. \quad (29.37)$$

В частности, при $\vartheta \rightarrow 0$ формула Резерфорда дает для $\sigma(\vartheta)$ расходящееся значение; в этом случае должен сказаться короткодействующий характер сил, что обусловлено экранирующим действием электронной оболочки. Условие (29.37) в этом случае определяет область, где формула Резерфорда не применима.

Из равенств (29.32) и (29.33) при $\vartheta = 0$, т. е. для рассеяния вперед ($\kappa = 0$), находим следующее выражение для дифференциального эффективного сечения:

$$\sigma_{\vartheta \rightarrow 0}(\vartheta) = 4\gamma^4 \alpha_0^2 Z^{2/3} \sim \alpha_0^2 Z^{2/3}. \quad (29.38)$$

Для полного эффективного сечения из (29.33) получим выражение:

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{8\pi m_0^2 A^2 R^4}{\hbar^4} \int_0^\pi \frac{\sin \vartheta d\vartheta}{[1 + 2k^2 R^2 (1 - \cos \vartheta)]^2} = \\ &= \frac{16\pi m_0^2 A^2 R^4}{\hbar^4} \frac{1}{4k^2 R^2 + 1}. \end{aligned} \quad (29.39)$$

Отсюда с помощью формулы (29.29) можно найти следующие пределы применимости метода теории возмущений для нашей задачи в двух только что рассмотренных крайних случаях:

$$\begin{aligned} A &< \frac{\hbar^2}{m_0 R} \text{ при } kR \ll 1, \\ A &< \frac{\hbar^2 k}{m_0} \text{ при } kR \gg 1. \end{aligned} \quad (29.40)$$

Таким образом, при исследовании упругого рассеяния частиц на потенциале Юкавы были выявлены основные особенности рас-

сеяния короткодействующими и дальнодействующими силами, а также условия применимости метода теории возмущений.

Задача 29.1. Представить эффективное сечение рассеяния частиц сферически симметричным потенциалом в виде суммы парциальных эффективных сечений, т. е. суммы эффективных сечений для волн, обладающих определенным значением орбитального квантового числа l . Получить сечение рассеяния в общем случае, а также в случае борновского приближения.

Решение. Пусть падающая частица обладает импульсом $p = \hbar k$ (и соответственно скоростью $v = \hbar k/m_0$), направленным вдоль оси z .

Тогда волновая функция падающей частицы будет плоской волной:

$$\psi_{\text{пад.}} = e^{ikz}.$$

Плоскую волну можно разложить по сферическим гармоникам (см. задачу 12.5). Тогда, учитывая еще асимптотическое выражение (при $r \rightarrow \infty$) для функции Бесселя:

$$J_{l+\frac{1}{2}}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{\sqrt{kr}},$$

падающую волну можно представить в виде:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr} P_l(\cos \vartheta). \quad (29.41)$$

При наличии потенциальной энергии $V(r)$ асимптотическое выражение для волновой функции частицы в центрально-симметричном поле согласно (13.75) и (13.78) следует брать в виде:

$$\psi_{\text{ас.}} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(\cos \vartheta) \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)}{kr},$$

причем фазу δ_l можно определить из асимптотического решения уравнения Шредингера для радиальной функции при наличии потенциала:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} V(r) \right] R = 0. \quad (29.42)$$

Рассеянная волна, очевидно, будет равна:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{расс.}} = \psi_{\text{ас.}} - \psi_{\text{пад.}} = \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2ik} P_l(\cos \vartheta) \left\{ e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} \times \right. \\ \left. \times [C_l e^{i\delta_l} - i^l (2l+1)] - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} [C_l e^{-i\delta_l} - i^l (2l+1)] \right\}. \end{aligned}$$

Неизвестный коэффициент C_l может быть найден из условия, что функция $\psi_{\text{расс.}}$ должна представлять собой расходящуюся сферическую волну. Для

этого коэффициент при сходящейся сферической волне $e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}$ необходимо положить равным нулю. Тогда

$$\psi_{\text{расс.}} = \frac{f(\vartheta)}{r} e^{ikr}.$$

Функция $f(\vartheta)$ является амплитудой рассеяния [см. (29.28)], которая по точной теории будет равна:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \vartheta). \quad (29.43)$$

Как известно, дифференциальное эффективное сечение, характеризующее рассеяние частиц на угол ϑ , равно отношению вероятности рассеянной частице пройти в единицу времени через элемент сферической поверхности $dS = r^2 d\Omega$:

$$dW_{\text{расс.}} = v \psi_{\text{расс.}}^* \psi_{\text{расс.}} r^2 d\Omega = v |f(\vartheta)|^2 d\Omega$$

к числу частиц, падающих в единицу времени на единицу поверхности, перпендикулярной их скорости, т. е. оси z :

$$W_{\text{пад.}} = v \psi_{\text{пад.}}^* \psi_{\text{пад.}} = v.$$

Отсюда для дифференциального эффективного сечения находим выражение:

$$d\sigma = \frac{dW_{\text{расс.}}}{W_{\text{пад.}}} = |f(\vartheta)|^2 2\pi \sin \vartheta d\vartheta. \quad (29.44)$$

Здесь, предполагая аксиальную симметрию рассеивающего поля, мы положили телесный угол равным:

$$d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta.$$

Подставляя сюда полученное значение для амплитуды рассеяния и учитывая при интегрировании по углам условие ортогональности для полиномов Лежандра:

$$\int_0^\pi P_l(\cos \vartheta) P_{l'}(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'},$$

находим следующее выражение для полного эффективного сечения:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (29.45)$$

Последнее выражение для σ представляет собой искомую сумму парциальных эффективных сечений.

Сопоставим выражение для амплитуды рассеяния, найденное в борновском приближении [см. (29.28)], с точным выражением (29.43). Сравнение показывает, что точное выражение дает тот же результат, что и борновское приближение в случае малых значений фаз рассеяния δ_l . В самом деле, при $\delta_l \ll 1$ выражение (29.43) дает:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \delta_l P_l(\cos \vartheta). \quad (29.45a)$$

Решая же уравнение (29.42) при заданном l (для парциальной волны) методом теории возмущений, можно показать, что

$$\delta_l = -\frac{\pi m_0}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) r J_{l+\frac{1}{2}}^2(kr) dr. \quad (29.46)$$

Учитывая далее разложение:

$$\frac{\sin \chi r}{\chi r} = \frac{\pi}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) J_{l+\frac{1}{2}}^2(kr) P_l(\cos \vartheta),$$

где

$$\chi = 2k \sin \frac{\vartheta}{2},$$

амплитуду рассеяния (29.45а) можно привести к виду (29.28), найденному в борновском приближении.

Задача 29.2. Определить эффективное сечение рассеяния частиц сферически-симметричным прямоугольным потенциальным барьером высоты $V_0 > 0$ и радиуса a :

$$V = \begin{cases} V_0 & \text{при } r < a, \\ 0 & \text{при } r > a, \end{cases}$$

когда радиус a много меньше де-бройлевской длины волны рассеиваемых частиц, т. е. когда $ka \ll 1$.

Показать, что в этом случае основной вклад в рассеяние дает s -волна (т. е. волна с $l=0$).

Сравнить точные решения с решениями, найденными методом теории возмущений.

Решение. Как видно из формулы (29.46), основной вклад при $ka \ll 1$ дает лишь s -волна ($l=0$).

Решая задачу методом возмущений (борновское приближение), т. е. пользуясь формулой (29.28), для амплитуды рассеяния находим выражение:

$$f(\vartheta) = -\frac{2m_0 V_0}{\hbar^2} \int_0^a r^2 dr = -\frac{2m_0 V_0 a^3}{3\hbar^2}.$$

Следовательно, эффективное сечение в борновском приближении будет равно:

$$\sigma_B = 2\pi \int_0^\pi \sin \vartheta |f(\vartheta)|^2 d\vartheta = \frac{16\pi}{9} \cdot \frac{m_0^2 V_0^2 a^6}{\hbar^4}. \quad (29.47)$$

Определим фазу рассеяния δ_l в этой простейшей задаче. Ограничимся нахождением фазы при $l=0$ и малых энергиях E , когда можно положить $ka \ll 1$.

При $l=0$ волновые уравнения будут иметь вид:

$$\begin{aligned} \chi_0^2 + k^2 \gamma_0 &= 0 & \text{при } r > a, \\ \chi_0^2 - \chi'^2 \gamma_0 &= 0 & \text{при } r < a, \end{aligned} \quad (29.48)$$

где

$$\chi_0 = R_0 r, \quad k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E, \quad \chi'^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} (V_0 - E) = \chi^2 - k^2.$$

Учитывая граничное условие $\chi_0(0) = 0$, решение уравнения (29.48) можно представить в виде:

$$\chi_0 = \begin{cases} A \operatorname{sh} \chi' r & \text{при } r < a, \\ \sin(kr + \delta_0) & \text{при } r > a. \end{cases}$$

Приравнивая на границе области $r = a$ волновые функции и их производные, в нашем случае малых E ($E \ll V_0$), находим:

$$\delta_0 = \operatorname{arc} \operatorname{tg} \left[\frac{k}{\chi'} \operatorname{th} \chi' a \right] - ka \approx ka \left(\frac{\operatorname{th} \chi a}{\chi a} - 1 \right), \quad (29.49)$$

где

$$\chi a = \sqrt{\frac{2m_0 V_0}{\hbar^2}} a.$$

Отсюда согласно (29.45) имеем:

$$\sigma = 4\pi a^2 \left(\frac{\operatorname{th} \chi a}{\chi a} - 1 \right)^2. \quad (29.49a)$$

В случае ¹⁾

$$\chi a \ll 1 \quad (29.50)$$

можно положить:

$$\frac{\operatorname{th} \chi a}{\chi a} \cong 1 - \frac{1}{3} (\chi a)^2.$$

Тогда формула (29.49) дает выражение для σ , соответствующее борновскому приближению [см. (29.47)].

При $\chi a \gg 1$ (т. е. при $V_0 \rightarrow \infty$) эффективное сечение достигает своего максимального значения и становится равным:

$$\sigma = 4\pi a^2. \quad (29.51)$$

Последнее выражение будет в 4 раза больше, чем соответствующее эффективное сечение упругого рассеяния на непроницаемой сфере, вычисленное по классической механике, когда σ определяется просто геометрическим поперечным сечением сферы πa^2 . Это расхождение связано с проявлением волновых свойств (дифракции) рассеиваемых частиц.

Задача 29.3. Определить эффективное сечение рассеяния медленных частиц ($ka \ll 1$) сферически-симметричной прямоугольной потенциальной ямой:

$$V = \begin{cases} -V_0 & \text{при } r < a, \\ 0 & \text{при } r > a. \end{cases} \quad (29.52)$$

Указать, чем отличается выражение для сечения рассеяния частиц потенциальной ямой от сечения рассеяния потенциальным барьером.

Решение.

При точном решении задачи вместо уравнения (29.48) следует написать:

$$\begin{aligned} \chi_0'' + k^2 \chi_0 &= 0 & \text{при } r > a, \\ \chi_0'' + k'^2 \chi_0 &= 0 & \text{при } r < a, \end{aligned} \quad (29.53)$$

¹⁾ Заметим, что условие (29.50), которое для данной задачи может быть также представлено в виде:

$$\sigma_B \ll \pi a^2,$$

эквивалентно условию (29.29) применимости метода возмущений.

где

$$k'^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} (E + V_0) = k^2 + \chi^2.$$

Поэтому для фазы δ_0 вместо (29.49) получаем выражение:

$$\delta_0 = \arctg \left(\frac{k}{k'} \operatorname{tg} k'a \right) - ka. \quad (29.54)$$

При $k'a \ll 1$ и $E < V_0$ мы вновь приходим к формуле (29.47), полученной в первом приближении теории возмущений. В этом случае эффективные сечения рассеяния потенциальной ямой и потенциальным барьером будут совершенно одинаковыми.

Различие наступает, когда величина χa ($\chi^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} V_0$) будет сравнима или больше единицы. При этом в случае потенциального барьера величина $\frac{\hbar \chi'a}{\chi'a}$ при возрастании V_0 будет монотонно стремиться к нулю, в то время как в случае потенциальной ямы соответствующая величина $\left| \frac{\operatorname{tg} k'a}{k'a} \right|$ будет с увеличением V_0 изменяться периодически в пределах от 0 до ∞ .

В частности, если величина $k'a$ приближается к $\frac{\pi}{2}$, то для области $\frac{k'a}{\operatorname{tg} k'a} \ll ka$ найдем следующее выражение для эффективного сечения:

$$\sigma_{\text{рез.}} = \frac{4\pi a^2}{k^2 a^2}. \quad (29.55)$$

Ввиду малости величины $k^2 a^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2} a^2$ выражение для σ будет много больше максимального значения для эффективного сечения при рассеянии потенциальным барьером ($\sigma_{\text{макс.}} = 4\pi a^2$, когда $V_0 \rightarrow \infty$ [см. (29.51)]). Поскольку соотношение $k'a = \sqrt{\chi^2 a^2 + k^2 a^2} = \frac{\pi}{2}$ при $ka \ll 1$ эквивалентно фактически условию появления первого уровня в сферически-симметричной потенциальной яме, $\chi a \cong \frac{\pi}{2}$ [см. (28.31)], то эффективное сечение (29.55) соответствует случаю так называемого «резонансного» рассеяния. Последующие «резонансные» максимумы эффективного сечения имеют место при $\chi a = \frac{3}{2}\pi, \frac{5}{2}\pi$ и т. д.

Примечание. Фазу рассеяния, а вместе с тем и выражение для эффективного сечения, можно точно определить для весьма ограниченного круга задач (рассеяние сферически-симметричным прямоугольным потенциальным барьером или потенциальной ямой; рассеяние потенциалом, обратно пропорциональным квадрату расстояния и т. д.). В общем же случае необходимо пользоваться приближенными методами. Для не слишком больших значений потенциальной энергии V_0 (например, в случае рассеяния заряженных частиц кулоновским полем постоянная, характеризующая потенциальную энергию, должна удовлетворять соотношению: $\frac{Ze^2}{\hbar v} \ll 1$) хорошие результаты дает метод возмущений (борновское приближение). В тех же случаях, когда борновское приближение уже неприменимо, для определения фазы можно использовать другие приближенные методы, как например метод ВКБ [см.

соотношение (13.78)], вариационный метод; метод затухания и т. д. Ввиду специального характера этих методов не будем останавливаться на них в данном общем курсе¹⁾. Следует заметить, что многие качественные особенности, которые могут проявляться в рассеянии частиц различными силовыми центрами, вскрываются в основном при рассмотрении рассеяния потенциальным барьером и потенциальной ямой.

§ 30. ПОНЯТИЕ О ВТОРИЧНОМ КВАНТОВАНИИ

а. Вторичное квантование уравнения Шредингера

Рассмотрим процесс вторичного квантования на примере нерелятивистского уравнения Шредингера, а затем обобщим полученные результаты на случай релятивистских уравнений Максвелла и Дирака.

Как было показано в § 5, решение нестационарного уравнения Шредингера в общем случае может быть представлено в виде:

$$\psi(t) = \sum_n C_n \psi_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} = \sum_n C_n(t) \psi_n, \quad (30.1)$$

где в коэффициент $C_n(t)$, характеризующий вероятность того, что частица находится в состоянии n , включена также временная часть волновой функции:

$$C_n(t) = C_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}. \quad (30.2)$$

Здесь величины E_n представляют собой собственные значения энергии, а собственные функции ψ_n стационарного уравнения Шредингера удовлетворяют условию ортонормированности:

$$\int \psi_n^* \psi_m d^3x = \delta_{nm}. \quad (30.3)$$

При переходе от классических величин к квантовым координату x , импульс p_x и другие величины необходимо заменить средними значениями:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \psi^*(t) x \psi(t) d^3x, \\ \langle p_x \rangle &= \int \psi^*(t) p_x \psi(t) d^3x. \end{aligned} \quad (30.4)$$

Изменение со временем этих средних значений следует характеризовать не классическими скобками Пуассона, которые в дан-

¹⁾ Более подробно теория рассеяния изложена в книге Н. Мотта и Г. Месси «Теория атомных столкновений», М., 1951, или в книге Л. Шиффа «Квантовая механика», М., 1957.

ном случае совпадают с каноническими уравнениями Гамильтона:

$$\frac{dx_{\text{кл.}}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{\text{кл.}}},$$

а квантовыми:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle (Hx - xH) \rangle, \quad (30.5)$$

Здесь оператор функции Гамильтона равен:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(x). \quad (30.6)$$

Квантовое уравнение движения (30.5) можно рассматривать как уравнение, с помощью которого производится процесс квантования. Это квантование назовем первым. Чтобы связать $\langle p \rangle$ и $\langle x \rangle$ обычным соотношением:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m_0}, \quad (30.7)$$

мы должны в (30.5) считать, что операторы p и x не коммутируют между собой и подчиняются следующему перестановочному соотношению:

$$px - xp = \frac{\hbar}{i}. \quad (30.8)$$

Таким образом, перестановочное соотношение (30.8), являющееся основой теории Шредингера, можно рассматривать как следствие квантового уравнения движения (30.5), а переход от классического уравнения движения к волновому уравнению Шредингера означает переход от корпускулярных представлений к волновым.

Чтобы учесть корпускулярные свойства де-бройлевских волн, необходимо было ввести ряд дополнительных гипотез, например гипотезу о вероятностном характере ψ -волн, а также о том, что коэффициенты $|C_n|^2$ должны характеризовать вероятность пребывания электрона в состоянии n и т. д.

Процесс же вторичного квантования позволяет совершенно автоматически учитывать в волновом уравнении не только волновые, но и корпускулярные свойства частиц.

Происхождение названия «вторичное квантование» связано с тем, что в этом случае подвергается квантованию волновое уравнение, которое было уже получено в результате первого квантования.

Заметим, что в результате вторичного квантования операторами (q -числами) становятся коэффициенты C_n , которые в теории Шредингера оставались фактически обычными постоянными величинами (c -числами).

Чтобы произвести вторичное квантование, прежде всего необходимо найти среднее значение оператора энергии:

$$\langle H \rangle = \int \psi^*(t) H \psi(t) d^3x. \quad (30.9)$$

Подставляя сюда вместо $\psi(t)$ выражение (30.1) и принимая во внимание, что $H\psi_n = E_n\psi_n$, находим:

$$\langle H \rangle = \sum_{n, n'} E_n C_n^*(t) C_n(t) \int \psi_n^* \psi_n d^3x.$$

Отсюда, принимая во внимание условие ортонормированности (30.3), получаем:

$$\langle H \rangle = \sum_n E_n C_n^*(t) C_n(t). \quad (30.10)$$

Следует заметить, что последнее выражение не зависит от t , поскольку из соотношений:

$$C_n(t) = C_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}, \quad C_n^*(t) = C_n^* e^{i\frac{E_n t}{\hbar}} \quad (30.11)$$

видно, что в произведении $C_n^*(t) \cdot C_n(t)$ временной множитель просто обращается в единицу:

$$C_n^*(t) C_n(t) = C_n^* C_n.$$

Выражение (30.10) в теории Шредингера не представляет собой оператора, так как коэффициенты C_n являются обычными числами, или, как говорят, c -числами.

В теории же вторичного квантования эти величины, а вместе с тем и гамильтониан (30.10), следует рассматривать как операторы, т. е. как q -числа.

Чтобы найти перестановочные соотношения для коэффициентов C_n , в квантовое уравнение движения (30.5) вместо x и p следует подставить $C_n(t)$ и $C_n^*(t)$, а вместо оператора H — его среднее значение $\langle H \rangle$, т. е.

$$\frac{\partial C_n(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} (\langle H \rangle C_n(t) - C_n(t) \langle H \rangle). \quad (30.12)$$

Тогда, принимая во внимание, что согласно (30.11):

$$\dot{C}_n(t) = -\frac{iE_n}{\hbar} C_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t},$$

из (30.12) находим следующее соотношение, которое является основой (точнее постулатом) вторичного квантования:

$$-E_n C_n = \langle H \rangle C_n - C_n \langle H \rangle. \quad (30.13)$$

Подставляя сюда значение для $\langle H \rangle$ из (30.10), получаем:

$$-E_{n'}C_{n'} = \sum_n E_n (C_n^* C_n C_{n'} - C_{n'} C_n^* C_n). \quad (30.14)$$

Последнее уравнение имеет два решения, которые соответствуют двум возможным статистикам: статистике Бозе и статистике Ферми. Первое решение имеет вид¹⁾:

$$\begin{aligned} C_{n'} C_n - C_n C_{n'} &= 0, \\ C_{n'} C_n^* - C_n^* C_{n'} &= \delta_{nn'}. \end{aligned} \quad (30.15)$$

В этом нетрудно убедиться, так как, подставляя выражения:

$$\begin{aligned} C_n C_{n'} &= C_{n'} C_n, \\ C_{n'} C_n^* &= C_n^* C_{n'} + \delta_{nn'} \end{aligned} \quad (30.16)$$

соответственно в первый и второй члены, стоящие в скобках правой части равенства (30.14), получаем тождество:

$$-E_{n'} C_{n'} = - \sum_n E_n C_n \delta_{nn'}.$$

Из соотношения (30.15) следует, что коэффициенты C_n и C_n^* являются операторами. Если положить:

$$C_n^* C_n = N, \quad (30.17)$$

где N — число частиц в состоянии n , то из соотношений (30.15) находим:

$$C_n C_n^* = 1 + N \quad (30.18)$$

Отсюда, в частности, следует, что эти операторы в нуль не обращаются даже в том случае, когда частицы отсутствуют. В самом деле, хотя $C_n^* C_n = 0$ при $N = 0$, но зато $C_n C_n^* = 1$. Это отличное от нуля значение для комбинаций коэффициентов C и обуславливает связь вакуума (поля нерожденных частиц) с реальными частицами.

Из последних соотношений видно, что оператор C_n^* следует рассматривать как оператор появления частиц, а C_n — как оператор поглощения. В самом деле, если в начальный момент частиц нет, то условие $C_n C_n^* = 1$ означает, что частица может вначале появиться (благодаря действию оператора C_n^*), а затем уже поглотиться (благодаря действию оператора C_n). Условие же $C_n^* C_n = 0$ означает, что при отсутствии частиц не может быть

¹⁾ Из (30.15) следует, что волновые функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ и $\psi(\mathbf{r}', t)$ коммутируют друг с другом, а ψ и ψ^* — не коммутируют:

$$\psi(\mathbf{r}, t) \psi^*(\mathbf{r}', t) - \psi^*(\mathbf{r}', t) \psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}') \psi_n(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}).$$

обратного процесса, когда частица вначале поглощается, а затем уже испускается.

В решениях (30.17) и (30.18) величина N должна быть целой и положительной. Она не ограничена каким-либо максимальным значением. Поэтому такие перестановочные соотношения соответствуют статистике Бозе, когда в любом состоянии может находиться произвольное число частиц.

Второе решение уравнения (30.14) может быть представлено в виде:

$$\begin{aligned} C_{n'}C_n + C_nC_{n'} &= 0, \\ C_{n'}^*C_n + C_nC_{n'}^* &= \delta_{nn'}. \end{aligned} \quad (30.19)$$

В этом нетрудно убедиться непосредственной подстановкой (30.19) в (30.14).

Если при этом положить:

$$C_n^*C_n = N, \quad (30.20)$$

то тогда:

$$C_nC_n^* = 1 - N. \quad (30.21)$$

Принимая во внимание, что $C_n^*C_n$ и $C_nC_n^*$ не могут быть отрицательными величинами, находим, что число частиц в состоянии n может принимать лишь два значения: $N=0$ и $N=1$. Следовательно, в этом решении учтен принцип Паули, т. е. оно соответствует статистике Ферми. В частности, если в начальный момент частицы отсутствуют ($N=0$), то так же, как и в случае статистики Бозе, квадратичные комбинации амплитуд будут равны:

$$C_n^*C_n = 0, \quad C_nC_n^* = 1. \quad (30.22)$$

Таким образом, вторично квантованное уравнение описывает состояния с переменным (целым) числом частиц. Следовательно, электроны должны быть сходны с фотонами не только потому, что их движение описывается волновым уравнением, но еще и потому, что электроны, так же как и фотоны, могут и рождаться, и поглощаться.

Поскольку процесс рождения и поглощения электронов происходит при энергии, превышающей собственную энергию электрона более чем в два раза (так как электрон всегда рождается вместе с позитроном), вторичное квантование нерелятивистского волнового уравнения Шредингера имеет чисто методическое значение. Чтобы рассматривать реальные волновые процессы с возможным рождением или аннигиляцией частиц, следует обобщить эти правила вторичного квантования на релятивистские уравнения и в первую очередь на волновое уравнение для фотонов (уравнения Максвелла) и на релятивистское волновое уравнение для электронов и позитронов (уравнение Дирака).

б. Квантование уравнений Максвелла

Как известно, поле фотонов можно описывать вектор-потенциалом, удовлетворяющим уравнению Даламбера:

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0, \quad (30.23)$$

подчинив его условию поперечности:

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0. \quad (30.24)$$

Решение уравнения (30.23) с учетом того, что вектор-потенциал \mathbf{A} является вещественным, представим в виде:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{x}} \sqrt{\frac{2\pi c \hbar}{\kappa}} (\mathbf{a} e^{-i\kappa t + i\mathbf{x}r} + \mathbf{a}^* e^{i\kappa t - i\mathbf{x}r}), \quad (30.25)$$

где

$$\kappa = |\mathbf{x}|, \quad \text{а } \kappa_i = \frac{2\pi}{L} n_i \quad (n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots).$$

Условие поперечности соответствует тому, что вектор \mathbf{a} будет перпендикулярен вектору \mathbf{x} , т. е.

$$(\mathbf{x}\mathbf{a}) = 0. \quad (30.26)$$

Нормировочный же коэффициент $\frac{1}{L^{3/2}} \sqrt{\frac{2\pi c \hbar}{\kappa}}$ определен из условия, чтобы энергия поля:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{1}{8\pi} \int [(E)^2 + (H)^2] d^3x = \frac{1}{8\pi} \int \left\{ \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 + \right. \\ &\quad \left. + (\operatorname{rot} \mathbf{A})^2 \right\} d^3x = \sum_{\mathbf{x}} \frac{c \hbar \kappa}{2} [(\mathbf{a}^* \mathbf{a}) + (\mathbf{a} \mathbf{a}^*)] \end{aligned} \quad (30.27)$$

равнялась сумме произведений энергии $ch\kappa$ отдельных частиц на соответствующий квадрат амплитуды.

Поскольку гамильтониан пропорционален комбинациям коэффициентов вида $C^*C + CC^*$ (роль коэффициентов C в данном случае играют амплитуды \mathbf{a}), квантовое уравнение движения (30.13) допускает для поля фотонов только решение, соответствующее статистике Бозе¹⁾. Кроме того, учитывая еще попереч-

¹⁾ Если бы в гамильтониан входили эти амплитуды в комбинации $C^*C - CC^*$ (это имеет место, например, для дираковских частиц), то тогда, наоборот, для соответствующих амплитуд имела бы место только статистика Ферми. В этом нетрудно убедиться, подставляя в гамильтониан соответственно решения для бозевской [см. (30.15)] и для фермиевской [см. (30.19)] статистик.

ность фотонного поля, находим следующие перестановочные соотношения:

$$a_i a_{i'}^* - a_{i'}^* a_i = A_{ii'} = \delta_{ii'} - \frac{x_i x_{i'}}{x^2}, \quad (30.28)$$

где $i, i' = 1, 2, 3$, а амплитуды a_i и $a_{i'}^*$ относятся к одному и тому же вектору x , играющему роль квантового числа n [см. (30.15)]. Коэффициент же $A_{ii'}$ выражает поперечность поля фотонов:

$$x_i A_{ii'} = x_{i'} A_{ii'} = 0. \quad (30.29)$$

В частности, если в начальный момент фотоны отсутствуют, то отличной от нуля будет только следующая билинейная комбинация, составленная из амплитуд:

$$a_i a_{i'}^* = \delta_{ii'} - \frac{x_i x_{i'}}{x^2}. \quad (30.30)$$

в. Спонтанное излучение

В § 9 мы нашли коэффициенты Эйнштейна A для спонтанного излучения, используя при этом принцип соответствия. При подобном рассмотрении причины, заставляющие электрон переходить с более высокого уровня на более низкий, остались невыясненными (см. § 9). Квантовая электродинамика (такое название получила вторичноквантованная теория электромагнитного поля) дает объяснение этому явлению как переходам, вызываемым взаимодействием электрона с полем вакуумных (нерожденных) фотонов.

В самом деле, как видно из (30.30), существуют такие квадратичные комбинации квантованных амплитуд электромагнитного поля, которые будут отличными от нуля даже при отсутствии реальных фотонов.

Полное уравнение Шредингера с учетом вторично квантованного поля фотонов может быть представлено в виде:

$$\left[-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - V - \frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \right] \psi = 0. \quad (30.31)$$

Отбрасывая величины второго порядка малости, пропорциональные A^2 , и учитывая условие поперечности электромагнитных волн:

$$(\mathbf{pA}) \psi = (\mathbf{Ap}) \psi, \quad (30.32)$$

поскольку:

$$(\nabla \mathbf{A}) = \text{div } \mathbf{A} = 0,$$

уравнение (30.31) можно привести к виду:

$$\left[-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H}^0 - V'(t) \right] \psi = 0. \quad (30.33)$$

Здесь невозмущенный гамильтониан $H^0 = V + \frac{1}{2m_0} p^2$ не зависит от времени, а оператор энергии возмущения имеет вид:

$$V'(t) = -\frac{e}{cm_0} (\mathbf{A}(t) \mathbf{p}).$$

Допустим, что в начальный момент времени электрон находится в состоянии n . Тогда под влиянием вакуумных фотонов¹⁾:

$$V'(t) = -\frac{e}{cm_0} (\mathbf{A} \mathbf{p}) = -\frac{e}{L^{3/2} cm_0} \sum_{\mathbf{x}} \sqrt{\frac{2\pi c \hbar}{\kappa}} e^{i\omega t - i\mathbf{x} \cdot \mathbf{r}} (\mathbf{a}^* \mathbf{p}) \quad (30.34)$$

электрон может перейти в состояние n' .

Для коэффициента $C_{n'}(t)$, характеризующего этот переход, находим согласно (29.12) следующее выражение:

$$C_{n'}(t) = \frac{ie}{L^{3/2} m_0} \sum_{\mathbf{x}} \sqrt{\frac{2\pi}{c \hbar \kappa}} \frac{1 - e^{it(\omega_{nn'} - \omega)}}{i(\omega_{nn'} - \omega)} (\mathbf{a}^* \mathbf{p}_{n'n}), \quad (30.35)$$

где матричный элемент:

$$\mathbf{p}_{n'n} = \int \psi_n^* e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{p} \psi_n d^3x, \quad (30.36)$$

а $\omega = c\kappa$ — частота излучаемых фотонов.

Величина $\mathbf{x} \cdot \mathbf{r} \sim \frac{r}{\lambda}$ является малой, поскольку длина волны излучаемого света $\lambda \sim 10^{-8}$ см, а размер атома $r \sim 10^{-8}$ см. Поэтому в первом приближении в формуле (30.36) экспоненциальный множитель:

$$e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{r}} = 1 - i\mathbf{x} \cdot \mathbf{r} + \dots$$

следует положить равным единице. Такие переходы называются *дипольными*²⁾.

Вероятность спонтанного перехода с уровня n на уровень n' в данном случае будет равна:

$$\begin{aligned} A_{nn'} &= \frac{\partial}{\partial t} C_{n'}^*(t) C_{n'}(t) = \\ &= \frac{e^2}{L^3 m_0^2} \sum_{\mathbf{x}} \frac{2\pi}{\hbar \omega} 2 \frac{\sin t(\omega_{nn'} - \omega)}{\omega_{nn'} - \omega} (\mathbf{a} \mathbf{p}_{n'n}^*) (\mathbf{a}^* \mathbf{p}_{n'n}). \end{aligned} \quad (30.37)$$

¹⁾ Принимая во внимание перестановочные соотношения (30.30) в выражении для вектор-потенциала \mathbf{A} в случае отсутствия фотонов следует оставить только амплитуды, пропорциональные \mathbf{a}^* , т. е. операторы появления частиц.

²⁾ Учет следующего члена разложения дает нам квадрупольное излучение. Квадрупольное излучение в $(r/\lambda)^2$ раз слабее дипольного и играет роль лишь в тех случаях, когда дипольные переходы оказываются запрещенными.

Здесь вместо двух сумм по волновым числам амплитуд a оставлена только одна, поскольку отличными от нуля являются лишь такие комбинации амплитуд a и a^* :

$$a_i a_i^* = \delta_{ii} - \frac{x_i^2}{x^2},$$

которые относятся к одному и тому же импульсу κ .

Учитывая последние перестановочные соотношения, находим:

$$(a p_{n'n}^*) (a^* p_{n'n}) = |[\kappa^0 p_{n'n}]|^2.$$

Перейдем далее в равенстве (30.37) от суммы по κ к интегралу [см. (29.23)]:

$$\frac{1}{L^3} \sum_{\kappa} \rightarrow \frac{1}{8\pi^3} \int d^3\kappa = \frac{1}{8\pi^3 c^3} \int \omega^2 d\omega d\Omega \quad (30.38)$$

и примем во внимание, что при достаточно больших значениях времени t согласно (29.20):

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin t(\omega - \omega_{nn'})}{\omega - \omega_{nn'}} = \delta(\omega - \omega_{nn'}). \quad (30.39)$$

Последнее соотношение приводит к постулату частот Бора [см. (2.48)] или к закону сохранения энергии:

$$\omega = \omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}, \quad (30.40)$$

поскольку из (30.40) следует, что энергия излучаемого фотона $\hbar\omega$ равна энергии, которую теряет атом ($E_n - E_{n'}$). Тогда для вероятности спонтанного излучения находим выражение:

$$A_{nn'} = \frac{e^2 \omega_{nn'}^4 |p_{n'n}|^2}{2\pi \hbar c^3 m_0^2} \oint \sin^2 \vartheta d\Omega.$$

Вычисляя последний интеграл и принимая во внимание, что $p_{n'n} = -im_0 \omega_{nn'} r_{n'n}$, для вероятности спонтанного излучения находим выражение:

$$A_{nn'} = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega_{nn'}^3}{\hbar c^3} |r_{n'n}|^2, \quad (30.41)$$

которое было получено нами с помощью полуклассического принципа соответствия в § 9 [см. формулу (9.20)].

г. Бета-распад

В качестве другого примера на применение вторичного квантования рассмотрим теорию бета-распада. Как известно, это явление состоит в том, что ядро испускает электрон (позитрон), увеличивая (уменьшая) свой заряд на единицу.

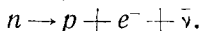
Теория этого явления, которое в некотором отношении должно напоминать собой испускание фотонов атомами, была создана на основе вторичного квантования.

В самом деле, фотонов в атоме нет. Они рождаются из вакуума при переходе атома из одного энергетического состояния в другое. Точно так же известно, что электронов в ядре тоже нет. Они рождаются лишь в процессе бета-распада ядер по аналогии с рождением фотонов при переходах в атомах.

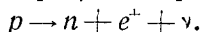
В результате экспериментального исследования явления бета-распада установлено, что, во-первых, электроны распада имеют непрерывный спектр, ограниченный некоторой максимальной энергией, равной разности энергий между исходным и конечным ядрами. Во-вторых, при бета-распаде момент количества движения ядра меняется на величину, кратную \hbar , в то время как момент количества движения, который уносится электроном, равен $(1/2)\hbar$.

Кажущееся нарушение законов сохранения энергии и момента количества движения при бета-распаде было устранено гипотезой Паули, согласно которой вместе с электроном испускается другая частица — нейтрино, обладающая полуцелым спином и массой покоя, близкой или почти равной нулю.

Согласно теории Ферми, построенной на основе этой гипотезы, бета-распад следует рассматривать как превращение одного из нейтронов ядра (n) в протон (p), электрон (e^-) и антинейтрино ($\bar{\nu}$):



Точно так же позитронный бета-распад следует рассматривать как превращение протона ядра¹⁾ в нейтрон, позитрон и нейтрино²⁾:



Кроме того, возможен захват связанного электрона, при котором протон переходит в нейтрон с испусканием нейтрино ($p + e^- \rightarrow n + \nu$). Как правило, в этом случае поглощается электрон с K -оболочки, и поэтому подобное явление получило название K -захвата. K -захват по характеру превращения ядра очень близок к позитронному бета-распаду, так как в том и другом случаях заряд ядра уменьшается на единицу.

Мы не будем здесь рассматривать детали бета-распада, а опишем в общих чертах процесс рождения электрона и антинейтрино, следуя теории Ферми.

¹⁾ Заметим, что поскольку масса покоя нейтрона больше суммы масс покоя протона, электрона и антинейтрино, также должен наблюдаться распад и свободного нейтрона. Распад же свободного протона, очевидно, энергетически невозможен, и поэтому позитронный распад может наблюдаться лишь у связанного протона, когда необходимая энергия может быть взята у ядра.

²⁾ На различии между нейтрино и антинейтрино мы остановимся в конце настоящего параграфа при рассмотрении вопроса о несохранении четности.

Энергию взаимодействия нейтрона с электронно-антинейтринным полем запишем в виде:

$$V_{e\bar{\nu}} = f\psi_e^*\psi_{\bar{\nu}}^*, \quad (30.42)$$

где f — некоторая константа связи, введенная Ферми. Величина f очень мала ($f \approx 1,4 \cdot 10^{-49} \text{ эрг} \cdot \text{см}^3$), так что это взаимодействие получило название слабого.

В следующем параграфе мы узнаем, что процессы спонтанного распада частиц обусловлены главным образом слабыми взаимодействиями; поэтому времена жизни элементарных частиц или ядер сравнительно велики и колеблются в пределах от долей секунды до миллиардов лет.

Наоборот, ядерные процессы обусловлены так называемыми сильными взаимодействиями, порой в тысячу раз превышающими электромагнитные. Время протекания процессов, обусловленных такими взаимодействиями, очень мало (порядка 10^{-23} сек).

Пренебрегая спиновыми эффектами, волновые функции ψ_e^* и $\psi_{\bar{\nu}}^*$ можно представить в виде:

$$\begin{aligned} \psi_e^* &= L^{-3/2} a^* e^{icKt - ikr}, \\ \psi_{\bar{\nu}}^* &= L^{-3/2} b^* e^{ic\bar{\nu}t - i\bar{\nu}r}, \end{aligned} \quad (30.43)$$

причем в случае отсутствия частиц в начальный момент для амплитуд a^* и b^* имеют место соотношения: $a^*a = b^*b = 0$, $aa^* = bb^* = 1$.

Тогда согласно формуле (29.12) для коэффициента $C(t)$ имеем выражение:

$$C(t) = -\frac{if}{\hbar L^3} V_{pn} a^* b^* \int_0^t dt e^{-ict(K_n - K_p - K - \kappa)}. \quad (30.44)$$

Здесь $E_n = c\hbar K_n$ — энергия нейтрона, $E_p = c\hbar K_p$ — энергия протона. Матричный элемент взаимодействия V_{pn} имеет вид:

$$V_{pn} = \int \chi_p^+ \gamma \chi_n e^{-i(k+\kappa)r} d^3x, \quad (30.45)$$

где χ_n — волновая функция нейтрона, χ_p^+ — волновая функция протона, γ — матрица Дирака, определяющая характер взаимодействия. Поскольку энергия взаимодействия должна представлять собой скаляр, аналогичная матрица должна была бы также стоять между спинорными амплитудами волновых функций электрона и нейтрино в равенстве (30.42). Однако конкретный выбор матриц Дирака может сказаться лишь на спиновых эффектах, которые мы здесь не рассматриваем.

Так же как и при исследовании дипольного излучения, величина, стоящая в экспоненте в матричном элементе (30.45), много меньше единицы, т. е. в пределах ядра:

$$(k + \kappa)r \sim |(k + \kappa)R| \ll 1,$$

где R — радиус ядра. Следовательно, можно разложить экспоненту в ряд:

$$e^{-i(k+x)r} = 1 - i(k+x)r + \dots$$

Если матричный элемент (30.45) при замене экспоненты единицей окажется отличным от нуля, то такие переходы называются разрешенными бета-переходами.

Заметим, что разрешенные переходы, соответствующие в теории фотонов дипольным, обладают определенными правилами отбора¹⁾.

В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением только разрешенных переходов, когда в матричном элементе (30.45) экспоненту достаточно положить равной единице. Тогда для коэффициента C' найдем следующее выражение:

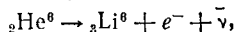
$$C' = \frac{f}{\hbar L^3} V_{pn} \alpha^+ b^+ \frac{1 - e^{ict(K+x-K_{np})}}{c(K+x-K_{np})}, \quad (30.46)$$

¹⁾ В случае векторного взаимодействия матричный элемент:

$$V_{pn} = \int \chi_p^+ \chi_n d^3x$$

(четвертая составляющая четырехмерной скорости, первые три составляющие для покоящегося нуклона обратятся в нуль) будет отличным от нуля (разрешенные переходы), если спин ядра (т. е. полный момент) при бета-распаде не изменяется ($\Delta J = 0$, фермиевские переходы). Это правило отбора Ферми выполняется для большинства ядер.

Однако существуют такие случаи разрешенного бета-распада, например,



при которых спин ядра изменяется на единицу ($\Delta J = 1$). В самом деле, спин ядра ${}_2\text{He}^6$ равен нулю (альфа-частица плюс два нейтрона, которые всегда имеют попарно антипараллельные спины), а спин ядра ${}_3\text{Li}^6$ равен единице (альфа-частица плюс протон и нейтрон, спины которых, так же как и в дейтроне, параллельны).

Чтобы объяснить эти правила отбора, Гамов и Теллер впервые указали, что при составлении оператора энергии взаимодействия, которая является скаляром ($V = V_{pn} V_{ev}$), из четырех волновых функций можно брать произведение не только вектора на вектор, но и другие релятивистски инвариантные комбинации. Например, можно взять произведение псевдовектора на псевдовектор и т. д., которые также являются инвариантами. В частности, к правилу отбора $\Delta J = 0, \pm 1$ приводит псевдовекторное взаимодействие:

$$V_{pn} = \int \chi_p^+ \boldsymbol{\sigma} \chi_n d^3x.$$

При этом следует подчеркнуть, что для покоящегося нуклона отличными от нуля будут первые три составляющие.

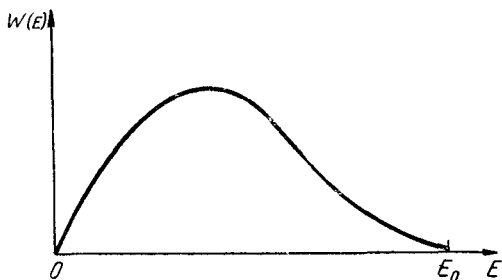
Ввиду того что псевдовекторное взаимодействие запрещает наблюдающиеся экспериментальные переходы $0 \rightarrow 0$, а также в силу других причин в настоящее время в теории бета-распада принята комбинация векторного и псевдовекторного взаимодействия (вариант Фейнмана — Гелл-Манна). Этот вариант теории позволяет объяснить основные установленные экспериментальные данные по бета-распаду.

где $E_0 = c\hbar K_{np} = c\hbar(K_n - K_p)$ — энергия, которую уносят легкие частицы при бета-распаде.

Отсюда, учитывая равенство (30.39), а также переходя от суммирования по импульсам электрона и нейтрино к интегрированию [см. (30.38)], находим для вероятности бета-распада следующее выражение:

$$\omega = \frac{\partial}{\partial t} \sum_{k, \kappa} C^* C = \frac{f^2 |V_{pn}|^2}{32c\hbar^2 \pi^5} \int d^3x d^3k \delta(K + \kappa - K_{np}). \quad (30.47)$$

Интегрируя последнее выражение по углам вылета электрона и антинейтрино, а также по энергии антинейтрино, получаем



Ф и г. 30.1. Распределение электронов по энергиям при бета-распаде (согласно теории Ферми).

E_0 — граничная энергия бета-спектра. Начало координат соответствует энергии $m_0 c^2$.

формулу, характеризующую распределение электронов по энергиям $E = c\hbar K$ (бета-спектр):

$$\omega = \int_{m_0 c^2}^{E_0} \omega(E) dE, \quad (30.48)$$

где

$$\omega(E) = \frac{f^2 |V_{pn}|^2}{2\pi^3 c^6 \hbar^7} E \sqrt{E^2 - m_0^2 c^4} (E_0 - E)^2 \quad (30.49)$$

Кривая распределения бета-электронов по энергиям, полученная в теории Ферми, представлена на фигуре 30.1¹⁾. Из этой кривой

¹⁾ Следует заметить, что максимум этой кривой несколько сдвинут от средней точки в стороны малых энергий. Эта несимметрия связана с тем обстоятельством, что масса антинейтрино равна нулю, а электрона — отлична от нуля. Если бы масса антинейтрино равнялась массе электрона, то эта кривая (при пренебрежении кулоновским притяжением электрона и ядра) была бы симметричной, т. е. максимум лежал бы в точке $E/2$.

видно, что энергия вылетевших электронов лежит в пределах от $E_{\text{мин.}} = m_0c^2$ до $E_{\text{макс.}} = E_0 = E_n - E_p$.

Согласно теории Паули—Ферми, никакого нарушения закона сохранения энергии при этом не должно происходить, так как сумма энергий, которую уносят с собою испускаемые антинейтрино и электрон, всегда равна общей энергии, теряемой ядром при бета-распаде¹).

д. Несохранение четности при распаде частиц

Одним из фундаментальных открытий в теории слабых взаимодействий, обуславливающих спонтанный распад частиц, является открытие Ли и Янгом (1956) несохранения четности. Несохранение четности проявляется в пространственной асимметрии, при спонтанном распаде элементарных частиц и, в частности, при бета-распаде ядер.

Несохранение четности может быть обнаружено экспериментально в следующих двух явлениях.

1. В асимметрии углового распределения бета-электронов при распаде ядер с ориентированным спином (число бета-электронов, вылетающих по направлению спина ядра, не равно числу электронов, вылетающих в противоположном направлении).

2. В существовании круговой поляризации (или спиральности) частиц, образующихся при распаде (например, электроны при бета-распаде или мю-мезоны при распаде пи-мезона), даже в том случае, когда распадающаяся система является бесспиновой.

Явление несохранения четности при бета-распаде или при распаде пи-мезона нашло свое объяснение в рамках теории нейтрино, обладающего определенной круговой поляризацией (спиральностью). Одно время казалось, что нейтрино (образующееся при позитронном бета-распаде) и антинейтрино (образующееся при электронном бета-распаде) ничем не отличаются друг от друга (гипотеза Майораны). Было предложено проверить эту гипотезу на примере двойного бета-распада.

Если нейтрино и антинейтрино тождественны, то следовало бы ожидать сравнительно большого значения для вероятности двойного бета-распада без испускания нейтрино (один нейтрон ядра испускает электрон и нейтрино, другой же нейтрон испускает электрон и поглощает это нейтрино), т. е. с испусканием лишь двух электронов. Если же двойной бета-распад представляет собой просто два последовательных одинаковых бета-распада с испусканием двух электронов и двух антинейтрино, то вероятность распада должна быть много меньше. Эксперимент подтвердил правильность второй точки зрения, и тем самым было доказано, что нейтрино должно чем-то отличаться от антинейтрино.

Кстати заметим, что обе частицы являются нейтральными и обладают спином, равным $1/2$. Тем не менее это различие удалось установить на основе анализа явлений, связанных с несохранением четности. Экспериментально было доказано, что асимметрия, наблюдающаяся при позитронном бета-распаде ядра с ориентированным спином, когда вместе с позитроном вылетает нейтрино, будет обратна той, которая наблюдается при электронном бета-распаде, когда вместе с электроном вылетает антинейтрино.

Поэтому была высказана гипотеза, что нейтрино должно отличаться от антинейтрино круговой поляризацией. Чтобы объяснить экспериментальные

¹ Более подробно см. А. С. Давыдов, Теория атомного ядра, М., 1958; см. также Г. Бете и Ф. Моррисон, Элементарная теория ядра, М., 1958.

данные, необходимо было предположить, что нейтрино должно напоминать собой фотон с левой круговой поляризацией, а антинейтрино — фотон с правой поляризацией. Различие заключается лишь в том, что спин фотона равен единице (в единицах \hbar), в то время как спин нейтрино равен половине.

Подобную круговую (продольную) поляризацию нейтрино принято называть спиральностью.

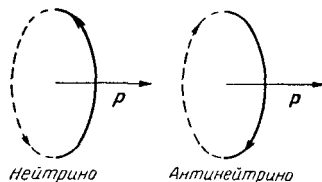
Нейтрино обладает левой спиральностью. Это означает, что если винт с левой нарезкой вращать по направлению поляризации, то он будет перемещаться в направлении импульса. Антинейтрино же обладает правой спиральностью (см. фиг. 30.2). Чтобы при переходе от одной лоренцевой системы отсчета к другой спиральность сохранялась и поэтому могла бы быть принятой за характеристику нейтрино, необходимо, чтобы масса покоя нейтрино точно равнялась нулю¹⁾.

Некоторые авторы описывают поляризацию с помощью аксиального вектора, который перпендикулярен плоскости вращения и имеет различное направление в правой и левой системах координат (см. фиг. 30.3).

Следует, однако, заметить, что, хотя при переходе от правой системы координат к левой аксиальный вектор s и полярный вектор p изменяют свою взаимную ориентацию, спиральность при этом переходе все-таки сохраняется (т. е. левовинтовое нейтрино остается левовинтовым) и изменяется только способ ее описания (см. также задачу 18.8)²⁾.

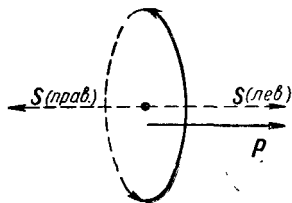
Попытаемся, исходя из поляризационных свойств нейтрино, качественно объяснить явления несохранения четности при спонтанном распаде частиц.

Рассмотрим для примера бета-распад ядер с ориентированным спином. Прежде всего заметим, что спин ядра (т. е. его продольную поляризацию) более естественно описывать вращением, так как направление аксиального вектора спина носит условный характер. Пространственная асимметрия, которая должна наблюдаться в явлениях несохранения четности, связана с тем обстоятельством, что при электронном бета-распаде вверх и вниз вылетают правовинтовые антинейтрино со спином (точнее, вращением, характеризующим поляризацию), соответственно



Фиг. 30.2. Спиральность нейтрино и антинейтрино.

Нейтрино имеет левую круговую поляризацию; антинейтрино — правую.

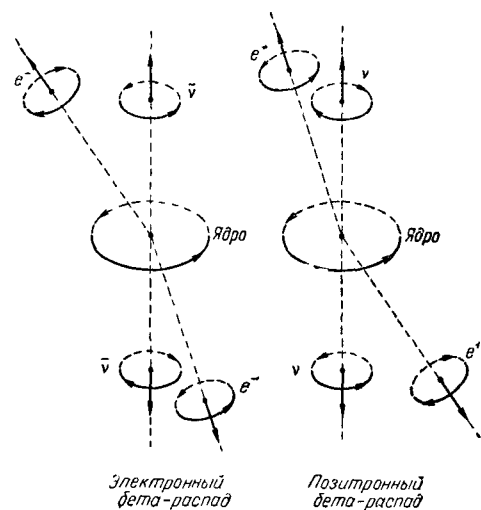


Фиг. 30.3. Описание спиральности левовинтового нейтрино в правой и левой системах координат.

¹⁾ Если масса покоя частицы отлична от нуля, то при переходе от одной лоренцевой системы отсчета к другой параллельные вектора спина и импульса могут стать направленными под углом.

²⁾ Более подробно см. А. А. Соколов, Вопросы философии, № 10, 1959. Исходя из того факта, что при переходе от правой системы координат к левой изменяется направление (аксиального) вектора спина с относительно полярного вектора импульса p , Ли и Янг, Л. Д. Ландау [ЖЭТФ, 32, 405 (1957)], А. И. Алиханов (см. его книгу «Слабые взаимодействия и новейшие исследования β -распада», М., 1960) и др., наоборот, считают, что в этом случае левовинтовое нейтрино должно переходить в правовинтовое, т. е. что способ геометрического описания частицы якобы может изменить ее внутренние свойства (спиральность).

параллельным и антипараллельным спину ядра. При этом электроны будут образовываться преимущественно со спиральностью, противоположной спиральности антинейтрино (т. е. с левой спиральностью). Этим создается пространственная асимметрия, благодаря чему число электронов, испускаемых



Фиг. 30.4. Схема бета-распада ориентированных ядер.

Направление вращения характеризует направление спина частицы; p — импульс частицы.

обладающее другой (левой) спиральностью, картина асимметрии будет противоположной. В частности, зависимость числа вылетевших позитронов от угла ϑ будет определяться формулой:

$$\omega_{e+}(\vartheta) = \omega_{0+}(1 + a \cos \vartheta), \quad (30.51)$$

т. е. образовавшиеся позитроны будут обладать главным образом правой спиральностью и вылетать преимущественно вверх. Асимметрия, противоположная асимметрии электронного распада, наблюдалась экспериментально при позитронном бета-распаде ядер Co^{58} с ориентированным спином.

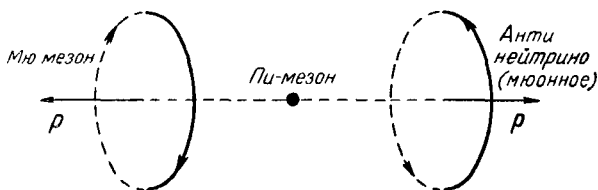
Особенно ярко продольная поляризация обнаруживается при спонтанном распаде пи-мезонов на мю-мезоны и нейтрино¹⁾.

Выберем систему координат, относительно которой пи-мезон покоится, и для определенности возьмем отрицательный пи-мезон, распадающийся на отрицательный мю-мезон и антинейтрино. Поскольку антинейтрино обладает правой спиральностью и импульсы мю-мезона и антинейтрино должны быть равными и направленными в противоположные стороны, мы найдем, что мю-мезон также должен обладать правой спиральностью. В самом деле, только в этом случае общий спин системы мю-мезона и антинейтрино будет равняться первоначальному, т. е. нулю. При распаде же положительных пи-

¹⁾ В дальнейшем будет показано отличие спиральности нейтрино, образующегося с мю-мезоном, и нейтрино бета-распада (см. § 31).

мезонов на нейтрино и положительные мю-мезоны последние будут обладать, очевидно, левой спиральностью (см. фиг. 30.5).

Полная продольная поляризация образовавшихся мю-мезонов была также подтверждена экспериментально.



Фиг. 30.5. Распад покоящегося пи-мезона на мю-мезон и мюонное антинейтрино.

Однако более подробное обсуждение вопросов, связанных с несохранением четности, выходит за рамки настоящего курса, и для детального ознакомления с этими вопросами мы отсылаем читателя к специальным статьям¹⁾.

е. Гамма-излучение. Эффект Мёссбауэра

Как известно, радиоактивные ядра испускают не только заряженные частицы, но также и гамма-лучи (кванты электромагнитного поля).

Прежде всего следует отметить, что вероятность квадрупольного гамма-излучения (с изменением ядерного спина на ± 2) становится сравнимой с вероятностью дипольного излучения (изменение ядерного спина равняется 0, ± 1) в противоположность атомным спектрам, где квадрупольное излучение особой роли не играет, так как его интенсивность во много раз меньше дипольного.

Это связано с тем обстоятельством, что атом состоит из положительных и отрицательных зарядов и поэтому при атомных переходах его дипольный момент изменяется по сравнению с квадрупольным значительно сильнее, чем у атомного ядра, состоящего только из положительных и нейтральных частиц. Заметим, кстати, что если бы система состояла только из одинаково заряженных частиц, то тогда при квантовых переходах ее дипольный момент вообще не должен был бы изменяться и поэтому интенсивность дипольного излучения строго равнялась бы нулю²⁾. Если будет осуществлено излучение гравитационных волн, дипольное излучение по этим причинам, очевидно, должно отсутствовать, поскольку все тела обладают только положительным гравитационным зарядом.

Гамма-излучение возможно при наличии лишь возбужденного состояния ядра при его переходе в состояние с меньшей энергией, например, в основное состояние.

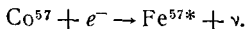
¹⁾ Работы по теории несохранения четности подробно изложены в сборнике «Новые свойства симметрии элементарных частиц», М., 1957; и в статьях: Т. Д. Ли и Ч. Н. Янг, Нобелевские лекции, УФН, **66**, № 1 (1958); Р. Фейнман и М. Гелл-Манн, Проблемы современной физики, № 4 (1958); А. А. Соколов, Введение в квантовую электродинамику, М., 1958, стр. 98; А. А. Соколов, Ю. М. Лоскутов, Изв. ВУЗ'ов, Физика, № 3 (1959).

²⁾ Дипольный момент частиц, состоящих из одних положительных зарядов ($e_i = e_0$), равен $\mathbf{d} = e_0 \sum \mathbf{r}_i \sim r_{ц.т.}$, а координата центра тяжести $r_{ц.т.}$ под влиянием внутренних сил не меняется, и ее можно положить равной нулю.

Ядро переходит в возбужденное состояние, как правило, в результате или альфа- или бета-распадов, K -захвата или других ядерных реакций.

Для примера рассмотрим гамма-излучение Fe^{57*} (здесь звездочка указывает на то, что ядро железа находится в возбужденном состоянии). Этим примером мы также воспользуемся для дальнейшего анализа гамма-излучения.

В частности, Fe^{57*} образуется в результате K -захвата ядра Co^{57} (период полураспада 270 дней):



Ядро Fe^{57*} (период полураспада 10^{-7} сек), теряя сравнительно небольшую по сравнению с другими гамма-излучателями энергию $E_0 = 14,4$ кэв, переходит в основное состояние (Fe^{57}). При этом испускается гамма-квант с энергией $\epsilon_\gamma = E_0 - \Delta E$, поскольку часть энергии $\Delta E = \frac{E_0^2}{2M_0c^2}$ (где M_0 — масса ядра) берет на себя ядро вследствие отдачи. Следовательно, этот же гамма-квант не способен перевести невозбужденное ядро Fe^{57} обратно в возбужденное состояние, так как при поглощении гамма-кванта требуется энергия не только на возбуждение ядра Fe^{57} (14,4 кэв), но и на отдачу, которую получает поглощаемое ядро. Это резонансное поглощение могло бы быть осуществлено для гамма-квантов с энергией:

$$\epsilon'_\gamma = E_0 + \Delta E = \epsilon_\gamma + 2\Delta E.$$

Поскольку гамма-квант обладает весьма узкой шириной испускания и поглощения, которая много меньше потерь энергии на отдачу ($\Delta\epsilon \ll \Delta E$), вопрос о резонансном испускании и поглощении гамма-лучей долгое время оставался фактически не разрешенным.

Чтобы практически устранить эффект отдачи, немецкий физик Мёссбауэр в 1958 г. предложил использовать распад радиоактивных ядер, введенных в кристаллы. В этом случае при сравнительно низких температурах (ниже дебаевской) отдачу будет испытывать весь кристалл, а так как кристалл в целом имеет чрезвычайно большую массу по сравнению с массой отдельного ядра, то процессы испускания и поглощения будут происходить практически без потерь энергии на отдачу.

Первоначальные опыты Мёссбауэра были выполнены с Ir^{191} . Однако эти опыты давали сравнительно большое отношение ширины спектральной линии Γ и энергии перехода $E_0 \left(\frac{\Gamma}{E_0} \approx 4 \cdot 10^{-11} \right)$.

Значительно лучшие результаты удалось получить при использовании для этих целей Fe^{57*} $\left(\frac{\Gamma}{E_0} \sim 10^{-13} \right)$. При этом необходимо также подчеркнуть, что эффект Мёссбауэра для Ir^{191*} наблюдается при очень низких температурах, в то время как для Fe^{57*} он имеет место при комнатной температуре. Следует учесть также возможность повысить эту точность до 10^{-13} , если использовать Zn^{64*} . Это значительно превосходит точность измерения частот (а вместе с тем и времени) даже с таким рекордным по точности прибором, как молекулярный генератор (см. § 27).

ж. Приложения эффекта Мёссбауэра

Высокая точность, достигнутая в эффекте Мёссбауэра, при измерении частоты привела к тому, что этот метод нашел самые широкие применения во многих областях современной физики.

С помощью этого метода исследована сверхтонкая структура гамма-излучения ряда ядер, измерены величины внутренних магнитных полей в кристаллах, значения для квадрупольной связи, магнитные моменты возбужденных состояний ядер и т. д. Особый интерес вызвало применение эффекта

Мёссбауэра для проверки смещения спектральных линий в гравитационном поле в соответствии с общей теорией относительности.

Строго говоря, выражение для смещения спектральных линий в гравитационном поле следует определять по общей теории относительности. Однако вполне достаточное для данного исследования приближение можно получить исходя из следующих простых соображений: учитывая соотношение между массой и энергией $M = E/c^2$, напишем выражение для изменения энергии частицы, движущейся в гравитационном поле:

$$E(\mathbf{r}) = E(\mathbf{r}_0) - \frac{E(\mathbf{r}_0)}{c^2} \Delta\varphi, \quad (30.53)$$

где

$$\Delta\varphi = \varphi(\mathbf{r}) - \varphi(\mathbf{r}_0)$$

приращение гравитационного потенциала.

Принимая во внимание далее, что энергия в данной точке связана с частотой при помощи соотношения $E = \hbar\omega$, получаем связь между частотами колебаний:

$$\omega = \omega_0 \left(1 - \frac{\Delta\varphi}{c^2} \right), \quad (30.54)$$

где $\omega = \omega(\mathbf{r})$, а $\omega_0 = \omega(\mathbf{r}_0)$ представляют собой частоты в точках \mathbf{r} и \mathbf{r}_0 , а разность потенциалов $\Delta\varphi$ не зависит от массы покоя. Формула (30.54) приводит, в частности, к так называемому красному смещению спектральных линий Солнца относительно земного наблюдателя, поскольку потенциал на Земле (с учетом знака минус, стоящего перед потенциалом) больше, чем на Солнце ($\Delta\varphi > 0$). Этот эффект представляет собой один из трех основных эффектов¹⁾ общей теории относительности — красное смещение спектральных линий. Он неоднократно проверялся экспериментально и было установлено, что красное смещение спектральных линий Солнца бесспорно имеет место. Однако ряд посторонних искажающих факторов не давал возможности количественно подтвердить это смещение. Значительно более надежные данные были получены при исследовании красного смещения в спектрах спутников Сириуса.

Следует также указать, что предполагалось проверить этот эффект с установкой атомных часов на одном из искусственных спутников Земли. В этом случае ожидаемые результаты должны были находиться на пределе достижимой точности эксперимента.

Наконец, Паунд и Ребка (1959) на основе эффекта Мёссбауэра поставили классический эксперимент, позволяющий в земных условиях проверить формулу (30.54) для смещения частоты, следующую из общей теории относительности.

Свой опыт Паунд и Ребка осуществили в башне Джефферсоновской физической лаборатории Гарвардского университета (США) высотой $h = 21$ м, построенной около 80 лет тому назад. В этой башне удалось обеспечить изоляцию от вибраций и однородность температуры.

Чтобы избежать ослабления пучка при прохождении в воздухе, была использована цилиндрическая труба из пластмассы диаметром 40 см, наполненная гелием до атмосферного давления. Схема опыта изображена на фиг. 30.6. Источником гамма-лучей служили возбужденные ядра Fe^{57*} , связанные с кристаллом железа. Последний приготавливался гальваническим способом с помощью введения Co^{57} в Fe^{56} (а не в Fe^{57} , чтобы избежать само-

¹⁾ Одним из важнейших следствий общей теории относительности является предсказание следующих основных эффектов: движение перигелия Меркурия, отклонение света в гравитационном поле, что неоднократно проверялось во время полных солнечных затмений, и красное смещение спектральных линий.

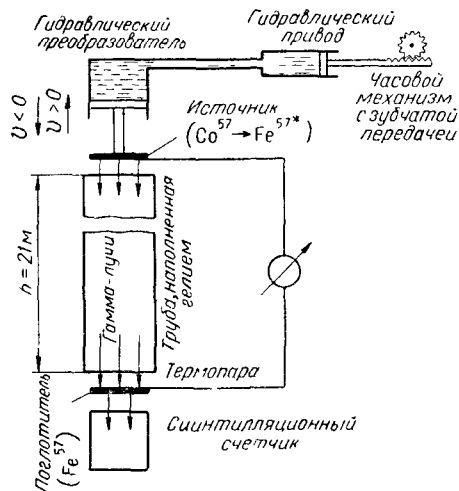
поглощения гамма-лучей источником). Как было уже указано, ядра Co^{57} путем K -захватов превращались в возбужденные ядра Fe^{57*} , которые вместе с нерадиоактивным Fe^{56} образовывали кристаллическую решетку. Испущенные ядром Fe^{57*} гамма-лучи, пройдя через трубу высотой $h = 21$ м, попадали в поглотитель, представляющий собой также кристалл железа, содержащий уже невозбужденные ядра Fe^{57} . Относительное количество поглощенных

гамма-квантов регистрировалось сцинтиляционным счетчиком, состоящим из кристалла NaJ и фотоумножителей.

Подставляя в формулу (30.54) значения для $\Delta\varphi = -gh$, найдем, что эффект смещения в сторону коротких волн при $h = 21$ м должен быть равен:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} = \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} \approx \frac{gh}{c^2} \approx 2,5 \cdot 10^{-15}. \quad (30.55)$$

Как было указано в предыдущем разделе, ядра Fe^{57*} , скрепленные с кристаллом, испускают монохроматические гамма-лучи (эффект Мёссбауэра) с энергией 14,4 кэв. В этих опытах не обязательно было доводить величину $\frac{\Delta\omega}{\omega_0}$ [см. (30.55)] до относительной ширины гамма-линии, которая для



Фиг. 30.6. Схема опыта Паунда — Ребка.

Fe^{57*} равнялась $\frac{\Gamma}{\omega_0} \approx 3 \cdot 10^{-13}$. Заметим, что, как видно из формулы (30.55), эти величины имели бы один и тот же порядок только при $h \sim 3$ км. В действительности же важным фактором является экспериментальное определение лишь изменения относительного сдвига частот, соответствующих максимумам интенсивности испускания и поглощения, лежащим в пределах ширины испускания. Для того чтобы несколько «расстроить» частоту испускания, необходимо было привести источник в движение с очень малой скоростью v (в данном опыте она равнялась $6 \cdot 10^{-4}$ см/сек) от поглотителя ($v > 0$) или к поглотителю ($v < 0$), что было осуществлено с помощью особого гидравлического устройства (привода и преобразователя) и часового механизма (см. фиг. 30,6). Тогда благодаря продольному эффекту Допплера частота изменялась и становилась равной¹⁾:

$$\omega'_0 = \omega_0 \left(1 - \frac{v}{c}\right).$$

¹⁾ Чувствительность прибора к доплеровскому смещению в эффекте Мёссбауэра настолько велика, что скорость $\sim 0,1$ см/сек могла расстроить резонанс. Поэтому в подобных опытах необходимо было устранить уширение линии от тепловых колебаний молекул [релятивистский или поперечный эффект Допплера, пропорциональный $\left(\frac{v}{c}\right)^2$]. Для этого у источника и поглотителя поддерживалась одинаковая температура, поскольку изменение температуры в 1°C давало уширение порядка самого эффекта. Постоянство температуры контролировалось с помощью термометры, включенной между источником и поглотителем.

Если бы не было гравитационного сдвига, то максимум поглощения соответствовал случаю $\nu = 0$, и кривая поглощения была бы симметрична относительно замены ν на $-\nu$. Благодаря же влиянию гравитационного поля кривая поглощения становится асимметричной относительно замены ν на $-\nu$. По этой асимметрии оказалось возможным определить скорость ν , а вместе с тем и частоту соответствующего максимуму поглощения. В согласии с теорией гравитации эксперимент показал смещение в фиолетовую сторону¹⁾, причем если теоретический сдвиг ($2,5 \cdot 10^{-15}$) принять за единицу, то экспериментальные данные в пределах небольшой ошибки (4%) его полностью подтвердили:

$$\left(\frac{\Delta\omega}{\omega_0}\right)_{\text{эксп.}} = \left(\frac{\Delta\omega}{\omega_0}\right)_{\text{теор.}} \cdot (0,98 \pm 0,04).$$

Наунд считает, что достигнутая в его эксперименте точность не является пределом; используя Zn^{67*} , он надеется довести ошибку до десятых или даже до сотых долей процента.

§ 31. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЧАСТИЦЫ

а. Общая характеристика элементарных частиц

Как известно, наименьшая частица химического элемента — атом (в переводе с греческого — неделимый) оказался сложной частицей. Он состоит из новых «атомов», т. е. еще более мелких частиц, получивших название элементарных. Первоначально в термин «элементарность» так же, как в свое время и в термин «атом», вкладывалось также понятие неделимости. Однако в настоящее время ученые вплотную подошли к изучению структуры элементарных частиц и поэтому неделимость стала пониматься в известной мере условно.

В настоящее время известно свыше 30 элементарных частиц; современные теоретические представления предсказывают возможные существования еще нескольких частиц. Кроме того, открыты свыше 150 квазичастиц, получивших название *резонансов* (см. ниже).

К 1932 г., когда Иваненко и Гейзенбергом была предложена нуклонная модель атомного ядра, были известны всего четыре элементарные частицы, которые определяют структуру и свойства атома, а также все явления, связанные с атомом. Протоны и нейтроны образуют атомные ядра; из электронов построена внешняя оболочка атома. Электромагнитное поле, с одной стороны, удерживает электроны в атоме, а с другой — является своеобразным резервуаром, откуда извлекаются реальные фотоны при их излучении и куда они переходят при их поглощении. Затем были обнаружены теоретически предсказанные еще три частицы,

¹⁾ При замене местами источника и наблюдателя гравитационное смещение происходило в противоположную, т. е. красную, сторону.

о которых уже упоминалось в нашем курсе. Здесь мы еще раз осветим основные моменты, связанные с открытием этих частиц.

1) Дирак, исходя из анализа предложенного им релятивистского квантового уравнения для электрона, предсказал существование позитрона — частицы, обладающей всеми свойствами электрона (масса, спин и т. д.), за исключением знака заряда, который должен быть положительным. Более того, Дирак предсказал даже такие фундаментальные свойства позитрона, казавшиеся в то время парадоксальными, как возможность превращения гамма-кванта в пару электрон-позитрон в поле ядра и, наоборот, превращение (аннигиляция) пары электрон-позитрон в два или три гамма-кванта. Вскоре был не только открыт позитрон, но и получили экспериментальное подтверждение эти теоретически предсказанные свойства.

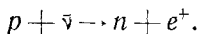
2) Второй частицей, существование которой было предсказано теоретически, является нейтрино (Паули, 1933).

Как известно, внутри стабильных ядер нейтрон может существовать неопределенно долго. В бета-радиоактивных же ядрах, и в особенности в свободном состоянии, нейтрон является нестабильной частицей. Период полураспада свободного нейтрона равен 11,7 мин, что соответствует времени жизни $11,7/\ln 2 = 17$ мин. При своем распаде он должен испускать электрон (бета-частицу) и превращаться в протон. Масса протона и электрона, вместе взятых, примерно на $1,5 m_0$ (m_0 — масса электрона) меньше массы нейтрона, а при распаде нейтрона масса покоя уменьшается на $2,5 m_0$. Таким образом, разность масс ($\sim m_0$) должна проявляться в виде кинетической энергии продуктов распада. Однако в действительности протон и электрон очень редко (при распаде, например, свободного нейтрона) обладают максимально возможной энергией. Иными словами, спектр энергий бета-электронов является непрерывным (электроны, образующиеся при бета-распаде, имеют энергии от энергии покоя до некоторой максимальной). Поскольку при этом разность между энергией исходной частицы (или ядра) и энергией продуктов бета-распада является вполне определенной, на первый взгляд как будто бы имело место нарушение закона сохранения энергии.

На основании кажущегося несохранения энергии некоторые физики, в том числе Нильс Бор, стали считать, что закон сохранения энергии в микромире вообще не имеет места.

Примером такого же подхода может служить высказывание Маха и Оствальда против атомизма и даже против существования электрона на том основании, что в то время его никто непосредственно не наблюдал. Как известно, подобные поспешные заключения сторонников чисто эмпирического подхода были опровергнуты последующим развитием науки.

Для объяснения кажущейся потери энергии Паули выдвинул гипотезу, согласно которой при бета-распаде образуется еще одна частица, получившая название нейтрино. Последняя и уносит всю остальную часть энергии. Чтобы при бета-распаде соблюдался не только закон сохранения энергии, но и закон сохранения спина, пришлось предположить, что спин нейтрино, так же как и электрона, равен $1/2$ (в единицах \hbar), т. е. нейтрино является фермионом (более подробно см. § 30). Вследствие малого эффективного сечения захвата нуклонами ($\sigma \sim 10^{-43} \text{ см}^2$)¹⁾ эта частица долгое время оставалась за пределами возможности прямого наблюдения. Только в 1956 г. Райнес и Коуэн с сотрудниками обнаружили антинейтрино, образующиеся в ядерном реакторе, который является их мощным источником. Оно было «поймано» водородосодержащим веществом при исследовании реакции захвата антинейтрино протонами:



3) Исходя из аналогии с электромагнитными взаимодействиями, которые, согласно квантовой электродинамике, переносятся фотонами, японский физик Юкава предсказал существование квантов ядерного поля — мезонов, переносящих взаимодействие между нуклонами.

Как было указано в § 28, взаимодействие, переносимое пи-мезонами, приводит к появлению притяжения между нуклонами, носящего короткодействующий характер. Потенциальная энергия взаимодействия двух нуклонов определяется формулой:

$$V = -\frac{g^2}{r} e^{-k_0 r},$$

где k_0 — обратная величина эффективного радиуса действия ядерных сил, связанная с массой покоя m_π пи-мезона соотношением:

$$k_0 = \frac{m_\pi \cdot c}{\hbar}.$$

Чтобы подобное взаимодействие имело конечный радиус действия, сравнимый с радиусом ядра ($\sim 10^{-13} - 10^{-12} \text{ см}$), Юкава ввел кванты мезонного поля, которые должны иметь отличную от нуля массу покоя, равную примерно $200 m_0$ ²⁾. Кроме того, чтобы мезонное поле (так же, как и поле фотонов) могло одно переносить вза-

1) Последние измерения сечения этого процесса Коуэном (1959) привели к значению $\sigma = (11 \pm 2,6) \cdot 10^{-44} \text{ см}^2$, которое в пределах экспериментальных ошибок согласуется с сечением $\sigma = 12 \cdot 10^{-44} \text{ см}^2$, следующим из теории нейтрино с ориентированным спином (см. § 30). Если бы антинейтрино обладало двумя ориентациями спина, то эффективное сечение указанного процесса было бы в два раза меньше (Более подробное изложение этих экспериментов см. в монографии: Дж. Алле, Нейтрино, М., 1960.)

2) Экспериментальные значения массы мезонов приведены в табл. 31,1.

имодействие между частицами, необходимо было предположить, что спин этих мезонов — целочисленный.

Сначала, вслед за предсказанием Юкавы, были открыты мезоны (1937) (положительный и отрицательный), масса которых примерно соответствовала массе предсказанного Юкавой кванта ядерного поля.

Однако спин этих мезонов, впоследствии получивших название мю-мезонов, оказался равным половине, благодаря чему одиночные мю-мезоны без участия каких-то третьих частиц не могли взаимодействовать с нуклонами. Эта частица действительно оказалась слабо взаимодействующей с ядрами и, естественно, не могла дать столь большую величину для ядерных сил даже на сравнительно малых расстояниях порядка 10^{-13} см. Мю-мезоны (не считая почти стабильного нейтрона) являются наиболее долгоживущими из нестабильных элементарных частиц (время жизни $\sim 2 \cdot 10^{-6}$ сек).

Только через 10 лет после открытия мю-мезона английский физик Пауэлл (1947) обнаружил заряженные пи-мезоны. Этот мезон по существу и является тем квантом ядерного поля, который был предсказан Юкава. Пи-мезоны имеют нулевой спин, массу $\sim 273m_0$ и время жизни $\sim 2 \cdot 10^{-8}$ сек. Они сильно взаимодействуют с ядрами и ответственны за основную часть ядерных сил.

Одной из указанных особенностей взаимного превращения элементарных частиц является обратимость процессов. Например, благодаря электромагнитному взаимодействию электрон при известных условиях может излучить фотон. Обратно, этот же фотон может быть поглощен электроном. Время испускания и поглощения фотона, т. е. электромагнитных процессов, оказывается порядка 10^{-21} сек.

Точно так же вследствие взаимодействия с мезонным полем нуклон может испускать пи-мезон, а также обратно его поглотить.

Соответствующее время испускания и поглощения пи-мезона, т. е. время протекания ядерных процессов, равно $\sim 10^{-23}$ сек.

Такое различие времен протекания указанных процессов может быть объяснено следующим образом. Как известно, время жизни обратно пропорционально соответствующей вероятности перехода. Эта вероятность перехода в свою очередь пропорциональна константе связи (заряду частицы) с соответствующим полем, из которой можно образовать безразмерную величину — постоянную тонкой структуры. Для электромагнитных взаимодействий постоянная тонкой структуры $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$. Для ядерных же взаимодействий величина $\frac{g^2}{\hbar c}$ достигает значения ~ 10 . Поэтому при-

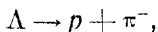
мерно в тысячу раз быстрее протекают ядерные процессы по сравнению с электромагнитными.

Важным свойством элементарных частиц является их спонтанный распад, который может происходить, когда масса покоя распадающейся частицы больше суммы масс покоя образовавшихся.

Время протекания этих процессов спонтанного распада (в среднем $10^{-8} - 10^{-10}$ сек), соответствующее времени жизни элементарных частиц по отношению к подобным распадам, как правило, гораздо больше даже времени протекания электромагнитных процессов и поэтому соответствующее значение постоянной тонкой структуры должно быть примерно в 10^{12} раз меньше постоянной тонкой структуры для электромагнитных процессов. Эти взаимодействия, как мы уже указывали в предыдущем параграфе, получили название слабых взаимодействий.

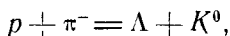
Наконец, следует еще упомянуть об особых свойствах K -мезонов с массой $\sim 960m_0$, а также гиперонов с массой, превышающей массу нуклонов. Эта группа частиц ведет себя несколько необычно, почему они и получили название странных частиц.

Странность их поведения проявляется в том, что процесс их спонтанного распада в известном смысле необратим процессу образования. Так, например, лямбда-гиперон (Λ) (см. табл. 31.1) распадается на протон (p) и пи-мезон (π^-):



причем время жизни гиперона по отношению к этому распаду составляет $\sim 10^{-10}$ сек, т. е. этот распад обусловлен слабым взаимодействием.

Обратно, при столкновении протона с отрицательным пи-мезоном один нейтральный гиперон (Λ) образоваться не может. При этом столкновении (если, конечно, энергия будет достаточная) он образуется вместе с K^0 -мезоном:



причем процесс образования характеризуется временем $\sim 10^{-23}$ сек, т. е. обусловлен сильным взаимодействием. Таким образом, странные частицы всегда рождаются совместно парами (сильное взаимодействие), а распадаются поодиночке (слабое взаимодействие).

Следует заметить, что многие новые частицы были открыты в космических лучах: позитрон (Андерсон, 1932), мю-мезоны (Андерсон и Неддермайер, 1937), пи-мезоны (Пауэлл, 1947), некоторые K -мезоны (Лепренс-Ренге и др., 1942—1947), некоторые гипероны (Рочестер и Батлер, 1947).

Мощные ускорители протонов [«Космотрон» в Брукхейвене на 3,5 Бэв ($1 \text{ Бэв} = 10^9 \text{ эв}$), «Беватрон» в Беркли на 6,5 Бэв (США)

и синхрофазотрон в Дубне на 10 Бэв (СССР)] позволили получить потоки пи-мезонов, К-мезонов, различных гиперонов, а также открыть новые частицы: антипротоны, антинейтроны (Сегрэ, Чемберлен и др., 1955), семейство гиперонов, анти-лямбда-гиперон, семейство анти-сигма-гиперонов.

Недавно запущенные ускорители протонов в Женеве (Европейский центр ядерных исследований) на 29,5 Бэв и в Брукхейвене более чем на 30 Бэв позволили получить весьма интенсивный пучок антипротонов, в сотни раз больший, чем поток от «Беватрона», на котором эти частицы были открыты. Кроме того, в Брукхейвене были обнаружены анти-кси-минус гипероны, недавно были получены сообщения об открытии на этом ускорителе мюонного нейтрино, а также Ω -частицы, являющейся самой тяжелой на сегодняшний день (с массой $3280m_0$). В настоящее время в СССР строится еще более мощный ускоритель протонов с энергией около 70 Бэв. В СССР, Женеве и США ученые приступили к проектированию ускорителей с энергией 300—1000 Бэв.

Несмотря на то что современные ускорители уже превосходят среднюю энергию космических лучей (10^{10} эв = 10 Бэв), только в космических лучах встречаются, хотя очень редко, частицы с энергией до 10^{19} эв, совершенно недоступной для ускорителей, которые предполагается построить в ближайшее время.

б. Основные характеристики и систематика элементарных частиц

Характеристики известных в настоящее время элементарных частиц приведены в таблице 31.1. В таблице 31.2 указаны новые характеристики этих частиц согласно схеме Гелл-Манна-Нишиджимы, включая частицы, предсказываемые этой схемой и современными теоретическими представлениями.

Основными характеристиками элементарных частиц, помимо массы покоя, являются их заряд и спин. Этими характеристиками можно было вполне ограничиться там, где имеют дело с электромагнитными взаимодействиями (например, в атоме). Как известно, основное состояние электрона в атоме определяется его взаимодействием с электромагнитным полем ядра и остальных электронов. Спин определяет число электронов, которое может находиться в данном квантовом состоянии (статистику), и приводит к расщеплению энергетических уровней. При заданном спине состояние частицы в квантовой механике принято характеризовать проекцией спина на ось z .

Например, если спин системы двух электронов в атоме гелия равен нулю, $s=0$ (парагелий), то возможны лишь синглетные

состояния ($s_z = 0$). Если спин равен половине: $s = \frac{1}{2}$ (атом водорода или атомы щелочных металлов), то возможны два состояния с $s_z = +\frac{1}{2}$ и с $s_z = -\frac{1}{2}$, что приводит к дублетному расщеплению спектральных линий. При $s = 1$ (ортогелий) мы будем иметь $s_z = -1, 0, +1$ и т. д.

Электроны с различным направлением спина можно особенно хорошо отличать друг от друга, если атом поместить в магнитное поле, направленное по оси z . Тогда к основному кулоновскому взаимодействию между частицами, не зависящему от направления спина, добавится небольшое магнитное взаимодействие, величина которого будет определяться направлением спина, причем для электрона будем иметь:

$$\Delta E = -\frac{e\hbar\mathcal{K}}{m_0c} s_z.$$

При исследовании же поведения нуклонов в ядре основную роль играют ядерные силы (сильное взаимодействие). Ядерные силы, действующие между двумя протонами, или двумя нейтронами, или между протоном и нейтроном, оказываются в одинаковых условиях равными. Это свойство ядерных сил, получившее название зарядовой независимости, показывает, что протон и нейтрон при сильных взаимодействиях ведут себя как одинаковые частицы. Только при учете электромагнитного поля, дающего по сравнению с ядерным лишь небольшие поправки (в легких ядрах), будет проявляться различие в их поведении. Заметим, что электромагнитные взаимодействия обуславливают небольшую разницу масс протона и нейтрона.

Поэтому Гейзенберг предложил характеризовать нуклон «особым дублетом», введя некоторую новую переменную, которая может принимать два значения, одно из которых соответствует протону, другое — нейтрону (более подробно см. § 28). Математический аппарат Гейзенберга для описания этой величины оказался очень похожим на аппарат, который был использован Паули для описания спина электрона. Поэтому Гейзенберг назвал подобную переменную изотопическим спином. Это означает, что протон и нейтрон образуют изотопическое семейство, т. е. имеют почти одинаковую массу, одинаковый ядерный заряд и отличаются друг от друга только электрическим зарядом, не играющим при взаимодействии нуклонов первостепенной роли. Слово «спин» просто отражает тождественность математического описания изотопического и обычного пространственного спина.

По аналогии с пространственным спином $\frac{1}{2}$, когда возможны два спиновых состояния, изотопический спин нуклона выбирается

Элементарные частицы (1964 г.)

Класс и спин (s)	Символ	Знак заряда	Название	Масса (Мэв)	Время жизни в сек	Схема распада	Реакция образования
Бозон, $s = 1$	γ	0	Фотон	0	∞	Стабилен	
	$\nu, \bar{\nu}$ $\nu, \bar{\nu}$	0 0	Нейтрино Антинейтрино	0	∞	Стабильны	
Лептоны, $s = \frac{1}{2}$	e^- e^+	- +	Электрон Позитрон	0,51	∞	Стабильны	$\gamma + \gamma \rightarrow e^+ + e^-$
	μ^- μ^+	- +	Мю-минус Мю-плюс*	106	$2,2 \cdot 10^{-6}$	$\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu} + \nu$	
Мезоны	π^0	0	Пи-нуль	135	$1,8 \cdot 10^{-16}$	$\pi^0 \rightarrow \begin{cases} \gamma + \gamma \\ e^+ + e^- + \gamma \end{cases}$	$p + p \rightarrow \begin{cases} p + p + \pi^0 \\ p + n + \pi^+$
	π^- π^+	- +	Пи-минус Пи-плюс	140	$2,6 \cdot 10^{-8}$	$\pi^- \rightarrow \mu^- + \nu$	$p + \bar{p} \rightarrow 5\pi$
	K^+ K^-	+ -	Ка-плюс Ка-минус	494	$1,2 \cdot 10^{-8}$	$K^+ \rightarrow \begin{cases} \pi^+ + \pi^+ + \pi^- \\ \pi^0 + \pi^0 \end{cases}$	$\pi^- + p \rightarrow \bar{K}^+ + K^0 + p$
	K^0 K^0	0 0	Ка-нуль Анти-ка-нуль	498	$1,0 \cdot 10^{-10}$ (K_S^0) $0,6 \cdot 10^{-7}$ (K_L^0)	$K_S^0 \rightarrow \begin{cases} \pi^+ + \pi^- \\ \pi^0 + \pi^0 \end{cases}$ $K_L^0 \rightarrow \begin{cases} \pi^+ + \pi^- + \pi^0 \\ 2\pi^0 \end{cases}$	

Барьоны, $s = \frac{1}{2}$	Нуклоны	p \bar{p} n \bar{n}	+	0	-	Протон Антипротон Нейтрон Антинейтрон	938,3 939,5	∞ $1,0 \cdot 10^8$	Стабильны $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}$	
Лямбда, $s = \frac{1}{2}$	Лямбда	Λ	0	0	0	Лямбда Анти-лямбда Сигма-плюс Анти-сигма-плюс Сигма-нуль Анти-сигма-нуль Сигма-минус Анти-сигма-минус	1115	$2,6 \cdot 10^{-10}$	$\Lambda \rightarrow p + \pi^-$	$\pi^+ + n \rightarrow \Lambda + K^+$
		Λ	0	0	0		1189	$0,8 \cdot 10^{-10}$	$\Sigma^+ \rightarrow p + \pi^0$	$\pi^+ + p \rightarrow \Sigma^+ + K^+$
		Σ^+	+	-	0		1192	$1,0 \cdot 10^{-14}$	$\Sigma^0 \rightarrow \Lambda + \gamma$	$\pi^- + p \rightarrow \Sigma^- + K^+$
		Σ^0	0	0	0		1197	$1,6 \cdot 10^{-10}$	$\Sigma^- \rightarrow n + \pi^-$	
		Σ^-	+	-	0					
		Σ^-	+	-	0					
Каскадные перон	Каскадные перон	Ξ^0	0	0	0	Кси-нуль Анти-кси-нуль** Кси-минус Анти-кси-минус*	1314	$3,0 \cdot 10^{-10}$	$\Xi^0 \rightarrow \Lambda + \pi^0$	$\bar{K}^- + p \rightarrow \begin{cases} \Xi^0 + K^0 \\ \Xi^- + K^+ \end{cases}$
		Ξ^0	0	0	0		1321	$1,8 \cdot 10^{-10}$	$\Xi^- \rightarrow \Lambda + \pi^-$	
		Ξ^-	+	-	0					
		Ξ^-	+	-	0					
$s = \frac{3}{2}$ ∞	Омега-перон	Ω^-	-	+	0	Омега-минус Анти-омега-минус**	1675	$\sim 10^{-10}$	$\Omega^- \rightarrow \Xi^0 + \pi^-$	$\bar{K}^- + p \rightarrow \Omega^- + K^+ + K^0$
		Ω^-	-	+	0					

* Мы не приводим здесь схемы распада античастицы. Для того чтобы от реакции распада частиц перейти к схеме распада античастицы, мы должны все частицы заменить на соответствующие античастицы. При распаде бозонов ($s=0$) наряду с p, π могут появляться также e^+ , а наряду с парой заряженных пи-мезонов — два нейтральных. Следует обратить внимание на то, что при распаде частиц точно соблюдаются законы сохранения электрического и легитонного зарядов, а также барьонного числа (слабое взаимодействие), а при реакции образования (и при распаде π^0 -мезона или Ξ^0 -гиперона) наряду с указанными законами имеет место еще сохранение странности и компоненты изоспина I_3 (сильное или электромагнитное взаимодействие).

** Эти частицы еще не обнаружены экспериментально.

равным половине ($I = \frac{1}{2}$), а его проекция на положительное направление оси z в зарядовом (изотопическом) пространстве (введенная также по аналогии со спином) может принимать лишь два различных значения, соответствующих двум зарядовым состояниям нуклона: протон и нейтрон. Для протона $I_3 = \frac{1}{2}$, а для нейтрона $I_3 = -\frac{1}{2}$.

Впоследствии изотопический спин с таким же успехом был использован для описания зарядовых мультиплетов пи-мезонов.

Как видно из таблиц 31.1 и 31.2, спин пи-мезонов равен нулю. Поведение их должно описываться псевдоскалярным уравнением, которое в отсутствие источников поля (нуклонов) совпадает с уравнением Клейна — Гордона. Что касается заряда пи-мезонов, то существуют мезоны трех типов: положительные (π^+), отрицательные (π^-) и нейтральные π^0 . Таким образом, они образуют зарядовый триплет, т. е. должны характеризоваться изотопическим спином, равным единице ($I = 1$). Проекция изотопического спина на некоторую выбранную ось («ось положительного заряда») в изотопическом пространстве может принимать три значения: $I_3 = -1$ (для π^-), $I_3 = 0$ (для π^0) и $I_3 = 1$ (для π^+).

Заметим, что если за единицу заряда частицы Q принять элементарный заряд e_0 , то величина Q для пи-мезонов будет совпадать с I_3 , а для нуклонов она будет сдвинута наполовину. Поэтому, если ввести так называемый барионный, или ядерный, заряд B , равный нулю для пи-мезонов и единице для нуклонов, то величины Q , I_3 и B будут связаны соотношением:

$$Q = I_3 + \frac{1}{2} B. \quad (31.1)$$

Интересно отметить, что последняя формула оказывается пригодной также для описания антинуклонов (антипротона и антинейтрона), если для последних барионный заряд положить равным минус единице ($B = -1$). Тогда для антипротона, заряженного отрицательно ($Q = -1$), проекция изотопического спина $I_3 = -\frac{1}{2}$, а для антинейтрона $I_3 = \frac{1}{2}$.

В любых реакциях с элементарными частицами строго должны сохраняться три величины: обычный заряд ($\sum_i Q_i = \text{const}$), барионный заряд ($\sum_i B_i = \text{const}$) и лептонный заряд.

Поэтому нейтрон не может спонтанно перейти в антинейтрон, а антинуклоны ($B = -1$) должны всегда рождаться вместе с нуклонами или гиперонами, для которых $B = 1$.

**Схема сильно взаимодействующих частиц по Гелл-Манну
и Нишиджиме**

Странность (S)		Зарядовая мультиплетность	Q=1	Q=0	Q=-1	Q=0	Q=1	Q=0	Q=-1
Части- цы	Анти- части- цы		Бозоны B=0						
0	0	Синглет I=0 I_3				** π_0^0 0			
0	0	Триплет I=1 I_3			π^- -1	π^0 0	π^+ +1		
1	-1	Дублеты I=1/2 I_3	K^+ 1/2	K^0 -1/2			\bar{K}^0 1/2	\bar{K}^- -1/2	
			Барионы B=1			Антибарионы B=-1			
0	0	Дублеты I=1/2 I_3	p 1/2	n -1/2			\bar{n} 1/2	\bar{p} -1/2	
-1	1	Синглеты I=0 I_3		Δ 0			$\bar{\Lambda}$ 0		
-1	1	Триплеты I=1 I_3	Σ^+ 1	Σ^0 0	Σ^- -1		$\bar{\Sigma}^+$ 1	$\bar{\Sigma}^0$ 0	$\bar{\Sigma}^-$ -1
-2	2	Дублеты I=1/2 I_3		Ξ^0 1/2	Ξ^- -1/2		$\bar{\Xi}^+$ 1/2	$\bar{\Xi}^0$ -1/2	
-3	3	Синглет I=0 I_3				\bar{Q}^- 0	\bar{Q}^+ 0		

В основе классификации лежит формула:

$$Q = I_3 + \frac{B+S}{2},$$

где Q — электрический заряд (в единицах e_0), I — изоспин, I_3 — компонента изоспина, B — барионное число, S — странность. Обычно проекция изотопического спина выбирается таким образом, чтобы большее ее значение соответствовало бы большему заряду.

Со звездочками указаны элементарные частицы, существование которых предсказывалось теорией, и в настоящее время они уже обнаружены экспериментально. С двумя звездочками обозначена частица, существование которой вызывает сомнения. Только что полученные сообщения об открытии Брукгейвской лабораторией Ξ^- -частицы с массой 3360 m_0 , со странностью -3, которая укладывается в эту схему, если написать еще одну клетку со странностью -3.

Примечание.

Для того чтобы обосновать известные реакции с участием нейтрино, мы должны ввести лептонный заряд и приписать электрону и нейтрино один знак лептонного заряда (например, отрицательный), а позитрону и антинейтрино — противоположный (т. е. положительный).

Тогда можно объяснить, почему при бета-распаде вместе с электроном вылетает антинейтрино ($\bar{\nu}$), а при позитронном бета-распаде — нейтрино (ν), и наоборот, почему протон может поглощать только антинейтрино, а не нейтрино (опыты Райнеса — Коузена, которые исследовали поглощение протонами образующихся в ядерных котлах антинейтрино).

С другой стороны, нейтрино может порождаться вместе с мю-мезонами. Например, при распаде π^- -мезона вместе с правовинтовым μ^- -мезоном образуется и правовинтовое мюонное нейтрино.

Спрашивается, является ли электронное антинейтрино тождественным мюонному или нет. Для выяснения этого вопроса были поставлены весьма прецизионные эксперименты (Ледерман, Стейнбергер и др.) по поглощению мезонных антинейтрино обычным веществом. Эта реакция происходила при больших энергиях (мюонные антинейтрино получались при распаде пи-мезонов, образующихся в тридцатимиллиардном Брукхейвенском ускорителе), когда вероятности реакции, обусловленные слабым взаимодействием, сильно возрастают. Ими было показано, что при поглощении нуклонами мюонных нейтрино возникли только мю-мезоны, а не электроны, т. е. мюонное правовинтовое нейтрино не тождественно правовинтовому электронному антинейтрино.

Открытие второго нейтрино говорит в пользу четырехкомпонентной (а не двухкомпонентной) теории нейтрино с исчезающей массой покоя (см. задачу 18.8).

В четырехкомпонентной теории можно предположить, что электронные нейтрино должны соответствовать первой паре решений (нейтрино ν — левовинтовое, а антинейтрино $\bar{\nu}$ — правовинтовое), в то время как мюонное нейтрино должно образовывать вторую пару решений (нейтрино ν' — правовинтовое, а антинейтрино $\bar{\nu}'$ — левовинтовое). Для того чтобы удовлетворить экспериментальным фактам, необходимо отрицательный лептонный заряд приписать e^-, μ^+, ν, ν' , а положительный — $e^+, \mu^-, \bar{\nu}, \bar{\nu}'$.

Тогда по четырехкомпонентной теории допустимы следующие реакции (с сохранением электрического и лептонного зарядов):

$$\begin{aligned}\pi^- &\rightarrow \mu^- + \nu', \\ \pi^+ &\rightarrow \mu^+ + \bar{\nu}', \\ \mu^- &\rightarrow e^- + \bar{\nu} + \bar{\nu}', \\ K^+ &\rightarrow \mu^+ + e^+ + \pi^-, \\ \mu^+ + \pi^- &\rightarrow e^- + \pi^+, \end{aligned}$$

а некоторые реакции, допустимые по двухкомпонентной теории:

$$\begin{aligned}\mu^- &\rightarrow e^- + \gamma, \\ K^+ &\rightarrow \mu^- + e^+ + \pi^+, \\ K^+ &\rightarrow \mu^+ + e^- + \pi^+, \\ \mu^+ + \pi^- &\rightarrow e^+ + \pi^-, \end{aligned}$$

должны быть запрещены.

Особый интерес представляет исследование распадов без участия нейтрино, так как их анализ позволит непосредственно сопоставить лептонные заряды мю-мезонов и электронов. Пока на этот счет нет никаких экспериментальных данных.

Если проводить дальнейшую математическую аналогию между обычным спином и изотопическим спином, то можно попытаться установить связь между изотопическим спином и соответствующей статистикой. Как известно, бозевской статистике подчиняются частицы с целочисленным спином, а фермиевской — частицы с полуцелым спином.

В связи с этим следует отметить, что пи-мезоны, подчиняющиеся бозевской статистике, обладают целочисленным не только обычным, но также и изотопическим спином, а нуклоны, являющиеся фермионами, имеют полуцелый и обычный и изотопический спин. Оказывается, что для странных частиц, т. е. ка-мезонов и гиперонов, такой аналогии между статистикой и изотопическим спином, какая существует между статистикой и обычным спином, установить нельзя. Для странных частиц, независимо от того, являются они бозонами или фермионами, встречаются зарядовые синглеты ($I=0$), дублеты ($I=\frac{1}{2}$) и триплеты ($I=1$).

Существующая классификация элементарных частиц была установлена независимо Гелл-Манном и Нишиджимой в 1955 г., которые впервые ввели новую характеристику сильно взаимодействующих частиц (включая странные), получившую название странности; при этом квантовое число странности принимает значения: $S=0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Тогда вместо (31.1) соотношения между зарядом Q и изотопическим спином I_3 может быть записано в виде:

$$Q = I_3 + \frac{B+S}{2}. \quad (31.2)$$

Это соотношение и определяет всю систему как открытых, так и предсказанных ими сильно взаимодействующих частиц.

Задавая для группы бозонов и тяжелых фермионов (т. е. барионов, поскольку схема Гелл-Манна — Нишиджимы не включает легкие фермионы или лептоны) изотопический спин I равным нулю, половине и единице, и подбирая странность S таким образом, чтобы электрический заряд Q мог принимать только значения $+1, 0$ и -1 , согласно (31.2) находим все возможные элементарные частицы, которые следуют из этой схемы (см. табл. 31.2).

Из таблицы 31.2 видно, что тяжелые фермионы отличаются друг от друга знаком барионного заряда B , значение которого разделяет их на частицы ($B=1$) и античастицы ($B=-1$). Следует заметить, что силы взаимодействия между нуклонами и гиперонами оказались примерно такого же порядка, что и силы между нуклонами. Это еще раз подчеркивает общность нуклонов и гиперонов и оправдывает включение их в единую группу

барионов. Поэтому наряду с обычными ядрами могут существовать так называемые гиперядра, у которых один из нейтронов заменен гипероном (например, лямбда-гипероном).

Система $p + \Lambda$, т. е. лямбда-дейтрон (${}_{\Lambda}\text{H}^2$), не существует. Это говорит о том, что силы взаимодействия между p и Λ несколько слабее, чем между p и n . Следовательно, поскольку обычный дейтрон является сравнительно рыхлой системой, лямбда-дейтрон образоваться не может. В то же самое время могут образовываться следующие гиперядра:

$${}_{\Lambda}\text{H}^3(p + n + \Lambda), \quad {}_{\Lambda}\text{H}^4(p + 2n + \Lambda), \quad {}_{\Lambda}\text{He}^4, \quad {}_{\Lambda}\text{He}^5$$

вплоть до ${}_{\Lambda}\text{C}^{13}$ и ${}_{\Lambda}\text{N}^{14}$. Время жизни гиперядер примерно совпадает со временем жизни лямбда-гиперона, т. е. составляет $\sim 10^{-10}$ сек.

Изучение гиперядер может дать сведения о гиперонах (например, спины и четности, характер их взаимодействий между собой). Кроме того, исследование гиперядер может способствовать развитию теории обычных ядер и, в частности, теории ядерных сил.

Для группы же бозонов имеется одно значение барионного заряда ($B=0$) и поэтому разделение их на частицы и античастицы не носит такого резко выраженного характера; для K -мезонов частицы и античастицы различаются значением странности.

Необходимо заметить, что введение странности не оказалось чисто формальным. Странность не только позволяет более полно охарактеризовать образование и распад элементарных частиц, но является новым квантовым числом. Эта величина сохраняется во всех сильных и электромагнитных взаимодействиях. Поэтому, например, сигма-гипероны образуются всегда вместе с K^+ -мезонами:

$$\pi^- + p \rightarrow \Sigma^- + K^+.$$

В самом деле, сумма странностей в левой и правой частях последнего равенства равна нулю, поскольку пи-мезоны и протоны имеют нулевую странность (нестранные частицы). Странность же Σ^- и K^+ соответственно равна -1 и $+1$.

Закон сохранения странности объясняет, почему не может идти, например, реакция:

$$\pi^- + p \rightarrow \Sigma^+ + K^-.$$

В самом деле, в этой реакции соблюдаются законы сохранения электрического и ядерного зарядов, но нарушается закон

сохранения странности, поскольку странность как Σ^+ , так и K^- равна -1 .

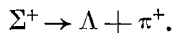
Определив на основе равенства для той или иной реакции странность S сильно взаимодействующих частиц, сразу можно определить изотопический спин I , а вместе с тем и изотопическую мультиплетность (равную числу возможных значений I_3 при заданном I) рассматриваемого семейства элементарных частиц¹⁾.

Схема Гелл-Манна — Нишиджима позволила предсказать существование новых частиц и указать их основные свойства. Таким образом был предсказан, а затем обнаружен ряд нейтральных страннных частиц:

$$\bar{K}^0, \Sigma^0, \bar{\Sigma}^0, \Xi^0 \text{ и др.}$$

в. Спонтанный распад частиц

Если бы спонтанные распады частиц были обусловлены сильными взаимодействиями, при которых должен строго соблюдаться закон сохранения странности, время жизни частиц было бы чрезвычайно малой величиной. Правда, можно указать одну из таких возможных реакций, а именно распад Σ^+ на лямбда-гиперон (Λ) и π^+ :



При этом распаде странность (а также I_3 и вместе с тем изотопический спин I) сохраняется; однако этот распад энергетически невозможен, поскольку сумма масс покоя лямбда-гиперона и положительного пи-мезона больше, чем масса покоя положительного сигма-гиперона. Можно указать две реакции распада элементарных частиц под влиянием электромагнитных взаимодействий, когда также должен соблюдаться закон сохранения странности (а также I_3).

К числу подобных распадов можно отнести распад нейтрального пи-мезона на два гамма-кванта (частицы вообще не обладают странностью) и распад нейтрального сигма-гиперона на лямбда-гиперон и гамма-квант. При этом выполняется закон сохранения странности, так как оба гиперона имеют странность, равную -1 . Однако в противоположность процессам, обусловленным сильными взаимодействиями, в процессах, обусловленных электромагнитными взаимодействиями, полный изотопический спин уже не сохраняется. Время жизни частиц по отношению к электро-

¹⁾ Например, $I=0$ и $I=1$ соответствуют семейству, состоящему из одной и трех частиц (изобозоны), а $I=\frac{1}{2}$ образует семейство из двух частиц (изофермионы).

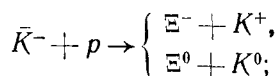
магнитным распадам является особенно малым. Так, время жизни π^0 равно 10^{-16} сек, а время жизни Σ^0 теоретически должно быть порядка 10^{-19} сек. Экспериментально же пока установлено, что верхняя граница времени жизни Σ^0 меньше 10^{-14} сек.

Распад остальных частиц обусловлен слабыми взаимодействиями и поэтому их время жизни в среднем порядка $10^{-8} - 10^{-10}$ сек, т. е. значительно больше, чем времена жизни относительно электромагнитных распадов. При распадах странных частиц, обусловленных слабыми взаимодействиями, странность (а также проекция изотопического спина) изменяется на единицу. Таким образом, в этом случае правила отбора имеют вид:

$$\Delta S = \pm 1, \quad \Delta I_3 = \pm 1.$$

Так, например, кси-гиперон (Ξ), обладающий странностью -2 , распадается на лямбда-гиперон и пи-мезон. Поскольку странность лямбда-гиперона равна -1 , а пи-мезона $-$ нулю, то при этом распаде, происходящем под влиянием слабого взаимодействия, странность меняется на единицу.

Далее лямбда-гиперон распадается на протон и отрицательный пи-мезон. Поскольку в последнем процессе образуются частицы, не обладающие странностью, странность также уменьшается на единицу. Таким образом, каскадные кси-гипероны распадаются на протоны или нейтроны через промежуточный каскад. Образовываться же каскадный гиперон, обладающий странностью -2 , может лишь при столкновении протона с отрицательным K -мезоном, странность которого равна -1 . Тогда реакция образования будет происходить по схеме:



в этой реакции наряду с сохранением барионного заряда должен иметь место также закон сохранения странности (сильное взаимодействие).

Согласно классификации элементарных частиц Гелл-Манна — Нишиджимы должно существовать два нейтральных K -мезона: K^0 -мезон и анти- K^0 -мезон (\bar{K}^0), которые отличаются друг от друга значением странности. Суперпозиции этих нейтральных мезонов образуют в свою очередь K_1^0 -мезон и K_2^0 -мезон:

$$\left. \begin{matrix} K^0 \\ \bar{K}^0 \end{matrix} \right\} \rightarrow 50\% K_1^0, 50\% K_2^0,$$

причем существование K_2^0 -мезона было предсказано на основе схемы странных частиц.

Можно произвести некоторую внешнюю аналогию между двумя нейтральными K -мезонами и позитронием (см. § 21). K_1^0 -мезон до некоторой степени должен напоминать собой парапозитроний. Как известно, парапозитроний, распадаясь на два фотона, обладает сравнительно малым временем жизни. Точно так же K_1^0 -мезон распадется на два пи-мезона и обладает временем жизни 10^{-10} сек.

Другой нейтральный K_2^0 -мезон можно сопоставить с ортопозитронием. Ортопозитроний, распадаясь на три фотона, является сравнительно долгоживущей частицей. В полной аналогии с ортопозитронием K_2^0 -мезон, распадаясь на три пи-мезона, обладает значительно большим временем жизни порядка 10^{-7} сек.

Энергия взаимодействия парапозитрония с двумя фотонами пропорциональна e^2 ; следовательно, это взаимодействие является зарядово-четным. Для ортопозитрония взаимодействие пропорционально e^3 и поэтому является зарядово-нечетным. Точно так же K_1^0 -мезон отличается от K_2^0 -мезона зарядовой четностью, так как первый взаимодействует с полем двух, а второй — с полем трех пи-мезонов¹⁾. Полной аналогии между K^0 -мезонами и позитронием проводить нельзя хотя бы потому, что в первом случае распад определяется слабым, а во втором — электромагнитным взаимодействием. Кроме того, парапозитроний отличается от ортопозитрония спином, в то время как нейтральные K -мезоны отличаются друг от друга значением странности.

Примечание.

Недавно было опубликовано сообщение об открытии распада K_2^0 -мезона не только на три пи-мезона, но (правда с очень малой вероятностью) также и на два (см. доклад Кронин, Фитч и др. на Международной конференции по физике высоких энергий в г. Дубне 1964 г.). Если этот результат подтвердится, то он будет противоречить сохранению зарядовой, а вместе с тем и комбинированной четности (CP-cons), т. е. гипотезе Ли—Янга и Ландау, полученной ими на основе анализа двухкомпонентного уравнения нейтрино (см. задачу 18.8). Поэтому вновь придется пересмотреть вопрос о несохранении четности в слабых взаимодействиях.

Независимо от этих экспериментов нами были высказаны критические замечания об инвариантности уравнений нейтрино относительно комбинированной инверсии. Если для описания нейтрино взять четырехкомпонентную теорию и предположить, что масса покоя равна нулю (см. задачи 18.7 и 18.8), то можно сформулировать теорию таким образом, что вместо комбинированной инверсии, которая может и не сохраняться, волновые уравнения будут инвариантны относительно СТ-преобразования, а также Р-преобразования, что не будет противоречить (см. задачу 18.6) теореме Людерса—Паули (более подробно см. А. А. Соколов, *Элементарные частицы*, изд. МГУ, 1963).

В этой связи следует обратить внимание на гипотезу Д. Д. Иваненко и Д. Ф. Курдгелайдзе («Труды галилеевской юбилейной конференции», Флорен-

¹⁾ Следует заметить, что K^+ -мезоны также могут распадаться на два и на три пи-мезона. Взаимодействия, определяющие тот и другой процесс распада, имеют различную четность. Одно время считали, что мы имеем дело с двумя различными K^+ -мезонами. Один K^+ -мезон, распадающийся на три частицы, получил название тау-мезона (τ), а K^+ -мезон, распадающийся на две частицы, — тета-мезона (θ). Однако, как видно из таблицы 31.2, тау- и тета-мезоны оказались одной и той же частицей, обладающей двумя типами взаимодействия с различной четностью. Анализ этой проблемы и послужил исходным пунктом открытия несохранения четности при слабых взаимодействиях, хотя до настоящего времени распад одной и той же K^+ -частицы на два и на три пи-мезона не получил окончательного объяснения.

ция, 1964), указавших, что расширение Вселенной выделяет определенное направление времени и тем самым возможно приводит к несохранению временной и вместе с тем комбинированной четности. Влияние этих очень слабых, наглядно говоря, «космологических сил» может проявиться в аномальных распадах K_S^0 -мезонов. С другой стороны, Каббико и др. (Physics Letters, 12, 146, 1964) предположили наличие некоторого нового поля, действующего со стороны нашей Галактики по-разному на K^0 - и \bar{K}^0 -мезоны. Галактика обладает огромным барионным числом $\sim 10^{68}$ и тем самым большим гиперзарядом; с другой стороны, K^0 - и \bar{K}^0 -мезоны имеют значения странности или гиперзаряда разного знака. Поскольку, однако, следует учесть также влияние других, притом разбегающихся галактик, то эта идея оказывается близкой к только что указанной космологической точке зрения.

Таким образом, нейтральные K -мезоны различаются по одному принципу при их рождении и по другому — при их распаде.

Введение странности и барионного заряда делает возможной классификацию сильно взаимодействующих частиц. Правила отбора, установленные для изменения странности, позволяют найти возможные превращения странных частиц под влиянием сильного, электромагнитного и слабого взаимодействий.

Ряд предсказанных схемой Гелл-Манна — Нишиджимы элементарных частиц уже открыт экспериментально. Можно с уверенностью сказать, что каскадные анти-кси-гипероны также будут в ближайшее время открыты. Вопрос же о существовании синглетного бозона ($I=0$), так называемого π_0^0 -мезона, является далеко еще не ясным и возможно, что он вообще не существует. Кроме того, в таблицу элементарных частиц нужно ввести еще 6 лептонов: электрон-позитрон, положительный и отрицательные мю-мезоны, а также нейтрино и антинейтрино (см. табл. 31.1), а также один бозон, а именно фотон, спин которого равняется единице, а масса покоя равняется нулю. По-видимому, существует и другой бозон, а именно гравитон, спин которого равняется двум. Возможно, что в связи с постройкой сверхмощных ускорителей будут открыты новые элементарные частицы, более тяжелые, чем гипероны; однако современные теоретические представления не могут предсказать существование таких частиц и их свойства. Для недавно открытого Ω^- -гиперона со странностью —3 также нашлось место в схеме Гелл-Манна — Нишиджимы.

Анализируя приведенную таблицу элементарных частиц, можно сделать для той или иной частицы заключение о существовании соответствующей античастицы. Это условие наряду с введением изотопической мультиплетности также сыграло исключительно большую роль в предсказании новых частиц. Например, наряду с электроном с $Q=-1$ существует позитрон с $Q=1$. Наряду с протоном ($B=1, Q=1$) и нейтроном ($B=1, Q=0$) существуют антипротон ($B=-1, Q=-1$) и антинейтрон ($B=-1, Q=0$). Наряду с гипероном, обладающим одними зна-

чениями $B=1$, Q и странностью S , должны существовать антигипероны, у которых все эти величины должны иметь противоположные знаки. Как известно, существование этих античастиц было предсказано теоретически, а затем большая часть из них обнаружена экспериментально.

Однако следует подчеркнуть, что окружающий нас мир несимметричен относительно числа частиц и античастиц. В частности, наши атомы состоят из частиц: электронов, протонов и нейтронов. Их античастицы: позитроны, антипротоны и антинейтроны — встречаются крайне редко — они образуются в космических лучах или на мощных ускорительных установках. Возможно, что наряду с нашим миром в каких-то частях Вселенной существует также устойчивый антимир, атомы которого должны состоять из позитронов, антипротонов и антинейтронов. Кстати заметим, что при соприкосновении мира и антимира должна произойти их взаимная аннигиляция, и поэтому их совместное существование в одной и той же части Вселенной невозможно.

Долгое время считалось, что все физические явления должны быть одинаковыми в мире и антимире. Однако после открытия несохранения четности при слабых взаимодействиях выяснилось, что такие явления, как бета-распад, распады мю-мезонов, заряженных пи-мезонов и других частиц, которые в нашем мире обладают одной симметрией (угловое распределение продуктов распада), а в антимире — другой. В самом деле, асимметрия распределяется спиральностью нейтрино и антинейтрино, которые, как было показано в § 30, имеют противоположные значения. Возможно, что в явлениях несохранения четности будет играть известную роль также и странность, которая для частиц и античастиц имеет разные значения.

В связи с открытием нейтрино и явлений несохранения четности при слабых взаимодействиях особое значение приобретает нейтринный анализ Солнца и звезд. Дело в том, что долгое время о Вселенной нам рассказывал лишь свет, а также недавно открытое радиоизлучение космических тел и поток космических частиц.

Однако исследование электромагнитного излучения позволяет получить сведения лишь об оболочках звезд. О том, что же происходит внутри звезд, можно было судить лишь по косвенным фактам. Изучение же нейтринных потоков, для которых «прозрачными» являются не только Земля, но и звездные оболочки, поможет нам непосредственно заглянуть в глубь звезд.

Кроме того, только нейтринная астрономия дает перспективы обнаружения во Вселенной антивещества (антизвезд), которое должно преимущественно излучать антинейтрино, а не нейтрино, как наше Солнце¹⁾. При этом, конечно, следует учесть, что эффективное сечение захвата антинейтрино

¹⁾ Вообще говоря, и в мире, и в антимире могут образовываться как нейтрино, так и антинейтрино. В мире антинейтрино образуется за счет превращения нейтронов в протоны: $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}$, (31.3)

или нейтрино крайне мало ($\sigma \sim 10^{-43} \text{ см}^2$), что в свою очередь затрудняет способ их обнаружения. Однако, как было отмечено, уже сделаны первые шаги в регистрации нейтринных излучений. Недавно получены сообщения о том, что нейтрино (а не антинейтрино) большой энергии (когда эффективное сечение захвата резко возрастает), образующееся в «сверхзвездах», «поймано» веществом, содержащим ядра Cl^{37} .

Кроме того, существуют еще своеобразные квазичастицы, или *резонаны*, которые отличаются от элементарных частиц главным образом своей малоустойчивостью, обладая временем жизни порядка $10^{-22} - 10^{-23} \text{ сек}$. В настоящее время их насчитывается свыше ста пятидесяти.

В таблице 31.3 приведены лишь некоторые основные резонаны. Нуклонные резонаны проявляются, например, в виде пиков при рассеянии пи-мезонов нуклонами. Первый нуклонный резонанс образуется, например, при рассеянии π^- -мезонов протоном. Заряд его равен $2e_0$, а полная энергия в системе центра инерции, включая собственную энергию протона и пи-мезона, равна 1237 Мэв . Это соответствует кинетической энергии пи-мезона, примерно равной 185 Мэв , в системе координат, относительно которой покоится протон (лабораторная система координат). Ширина резонанса равна 125 Мэв . Распадается этот нуклонный резонанс на протон и π^+ -мезон ($N^{++} \rightarrow p + \pi^+$). Спин и изоспин его равен $3/2$. Последнее означает, что могут существовать четыре резонана¹⁾, отличающиеся друг от друга зарядом ($2e_0, e_0, 0, -e_0$). Кроме того, были открыты нуклонные резонаны с еще большей энергией.

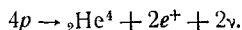
Из пи-резонансов наиболее интересными являются ρ -резонаны, распадающиеся на два пи-мезона (энергия 763 Мэв , спин, изоспин равен единице, т. е. существуют ρ^+, ρ^0 и ρ^- -резонаны), ω -резонанс,

а нейтрино, наоборот, при превращении протона в нейтрон:



Реакция (31.3) может протекать спонтанно (так как масса покоя нейтрона больше суммы масс покоя нейтрона и электрона), в то время как реакция (31.4) происходит лишь при взаимодействии протонов с другими нуклонами в ядре.

В «холодных» земных условиях протекают преимущественно реакции типа (31.3), которые чаще наблюдаются при бета-распаде естественно-радиоактивных ядер, в ядерных реакторах, а также продуктов деления урана. Во всех этих процессах идет превращение более тяжелых атомов в более легкие. В нашем же «горячем» Солнце, а также в других звездах основным источником энергии является либо водородный цикл, либо цикл Бете, когда протекают главным образом реакции типа (31.4), поскольку в последнем в конечном счете имеет место превращение:



¹⁾ Число возможных состояний, образующих то или иное семейство из элементарных частиц, связано с изотопическим спином I простым соотношением $\nu = 2I + 1$.

Таблица 31.3

Некоторые основные резонаны

Наименование	Символ	Изоспин	Спин	Масса (Мэв)	Ширина резонанса	Продукты распада
Пи-резонаны $B=0, S=0$	η	0	0	548	7	$\eta \rightarrow 3\pi, 2\gamma$ $\rho \rightarrow 2\pi$ $\omega \rightarrow 3\pi$ $\varphi \rightarrow K_1^0 K_2^0, \pi\rho + 3\pi$
	ρ	1	1	763	106	
	ω	0	1	783	8	
	φ	0	1	1020	3	
Ка-резонаны $B=0, S=1$	K^*	$\frac{1}{2}$	1	890	50	$K^* \rightarrow K + \pi$
Нуклонные-резонаны ¹⁾ $B=1, S=0$	N^*	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	1237	125	$N^* \rightarrow N + \pi$
	N^{**}	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	1518	125	
	N^{***}	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{2}$	1688	100	
	N^{****}	$\frac{3}{2}$	$\frac{7}{2}$	1924	170	
Гиперонные-резонаны $B=1, S=-1$	Σ^*	1	$\frac{3}{2}$	1382	53	$\Sigma^* \rightarrow \Lambda + \pi, \Sigma + \pi$
	Λ^*	0	$\frac{1}{2}$	1405	50	$\Lambda^* \rightarrow \Sigma + \pi, \Lambda + 2\pi$
	Λ^{**}	0	$\frac{3}{2}$	1518	16	
Каскадный резонанс $B=1, S=-2$	Ξ^*	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	1533	7	$\Xi^* \rightarrow \Xi + \pi$

1) Символом N обозначен нуклон, т. е. протон или нейтрон.

распадающийся на три пи-мезона (энергия 783 Мэв, спин равен единице, а изоспин — нулю). С несколько большей массой, но теми же характеристиками существует φ -резонанс. Далее открыт еще η -резонанс, спин и изоспин которого равен нулю, т. е. последний обладает теми же характеристиками, которые приписываются гипо-

тетическому π_0^0 -резонону. Кроме того, некоторые резонаны, распадающиеся на странные частицы, приведены в таблице 31.3.

Открытие резонансных состояний при рассеянии пи-мезонов нуклонами можно отнести также к первым экспериментальным данным, характеризующим мезонную структуру нуклона.

Недавно были поставлены опыты Хофштадтера, а затем опыты Вильсона и др. по определению электромагнитной структуры нуклона, характеризующей распределение заряда и магнитного момента внутри протона и нейтрона¹⁾. Для этого нуклоны «простреливались» быстрыми электронами (с энергией 500—1000 Мэв), разгоняемыми на электронных ускорителях. Электроны, проходя сквозь нуклон, не вступают практически с ним в ядерную реакцию, поскольку они являются ядернонеактивными частицами в противоположность, например, пи-мезонам и их рассеяние целиком характеризует электромагнитные свойства нуклонов.

В этом отношении опыты Хофштадтера по изучению структуры нуклона можно рассматривать как дальнейшее развитие старых опытов Резерфорда.

В результате этих экспериментов было установлено, что нуклон состоит из положительно заряженной части, называемой «керном», и двух мезонных оболочек. «Керн» нуклона имеет радиус порядка $0,2 \cdot 10^{-13}$ см, заряд его как для протона, так и для нейтрона равен $+0,35 e_0$. Недавно на Кэмбриджском электронном ускорителе (США) были получены первые экспериментальные данные также и о строении «керна», который был прострелен электронами с энергией порядка 6 Бэв. По-видимому, «керн» по распределению электрического заряда представляет собой не жесткие образования, как предполагалось вначале, а сравнительно плавное продолжение изовекторной оболочки и в этом отношении не совсем оправдывает своего названия «керн».

Первая мезонная оболочка состоит из изовекторных ρ -«резонансов», заряд которой для протона и для нейтрона имеет разные знаки и равен $\pm 0,5 e_0$. Распределение электрической плотности в ней сравнительно хорошо изучено. Она простирается до расстояний $1,25 \cdot 10^{-13}$ см.

Вторая мезонная оболочка должна состоять из изоскалярных ω -«резонансов». Как для протонов, так и для нейтронов она имеет один и тот же заряд, равный $+0,15 e_0$.

Установление спектра «резонансов», а также первые сведения о структуре элементарных частиц представляют собой важнейшие данные для построения теории сильной связи.

¹⁾ Сборник лекций «Международная зимняя школа теоретической физики при ОИЯИ», Дубна, 1964 (см. лекцию В С Барашенкова «Внутренняя структура элементарных частиц»).

Создаваемые за последнее время динамические квантовые теории сильной связи, которые носят еще сугубо предварительный характер, можно в первом приближении разбить на полевые и феноменологические.

Из полевых теорий следует прежде всего отметить нелинейное уравнение Иваненко—Гейзенберга, из которого были получены некоторые качественные результаты, например, была сделана попытка получить спектр масс сильно взаимодействующих частиц.

Известного успеха удалось добиться также с помощью дисперсионных соотношений (Гольдбергер, Боголюбов, Мандельстам, Чу и др.). В последних работах, которые скорее можно отнести к феноменологическим, исходя из ряда общих принципов (причинность, унитарность и т. д.), были установлены некоторые качественные результаты без введения каких-либо конкретных полевых взаимодействий между частицами.

Наконец, в самое последнее время были получены весьма важные результаты в теории сильной связи, исходя из полюсов Рэджа. Теория Рэдже представляет собой дальнейшее развитие теории потенциального рассеяния обычной квантовой механики. В этой теории показано, что в теории потенциального рассеяния полюса могут лежать не только на вещественной оси, но и в комплексной плоскости орбитального момента количества движения.

В частности, была сделана попытка приписать резонансам полюса, соответствующие комплексным решениям. Однако этот метод не привел к количественному согласию с экспериментальными данными при рассеянии быстрых пи-мезонов нуклонами и поэтому одной из центральных задач современной физики элементарных частиц остается проблема создания теории сильных взаимодействий.

Наконец, кратко остановимся на последних работах Гелл-Манна и Неемана¹⁾ по систематике элементарных частиц.

Они начали объединять частицы в определенные группы с одним и тем же значением спина и с одинаковой внутренней четностью²⁾, но отличающихся друг от друга различным значением

¹⁾ См. сборник «Элементарные частицы и компенсирующие поля» под редакцией и со вступительной статьей Д. Д. Иваненко, М., 1964.

²⁾ Частицы, подчиняющиеся скалярному уравнению, обладают положительной четностью, так как их волновая функция при инверсии пространства ($r \rightarrow -r$) не меняет своего знака. В случае псевдоскалярного уравнения (пи-мезоны) четность будет отрицательной. Таким образом, волновые функции бозонов обладают абсолютной четностью.

Для частиц, подчиняющихся уравнению Дирака (фермионы), мы можем ввести лишь относительную четность, поскольку при инверсии пространства волновая функция изменяется по закону $\psi \rightarrow \rho_3 \psi$, т. е. $\psi_{1,2} \rightarrow \psi_{1,2}$; $\psi_{3,4} \rightarrow -\psi_{3,4}$. Приписывая, например, нуклонам (n, p) положительную четность, мы найдем, что антинуклоны (\bar{n}, \bar{p}) должны обладать отрицательной четностью.

гиперзаряда, равного сумме барионного заряда и странности ($Y = B + S$), а также изотопическим спином I_3 . При этом они образовали наряду с возможными синглетными состояниями также три октуплетные (восьмеричные) группы и одну декуплетную (десятеричные) группу (см. ниже).

В две октуплетные группы были объединены мезоны и их резонаны с отрицательной внутренней четностью и со спинами, равными а) нулю ($s = 0$) и б) единице ($s = 1$). В одну октуплетную группу и одну декуплетную группу были объединены барионы и их резонаны с положительной внутренней четностью и со спинами, равными в) половине ($s = 1/2$) — октуплетная группа и г) трем вторым ($s = 3/2$) — декуплетная группа. Все эти группы представлены на таблице 31.4, где по оси абсцисс отложена проекция изотопического спина I_3 , а по оси ординат — гиперзаряд $Y = B + S$.

В первые две группы для мезонов ($B = 0$) входят как частицы, так и их соответствующие античастицы (см. случаи а) и б)). В группу же барионов (см. случаи в) и г)) входят только частицы ($\bar{B} = 1$).

Для антибарионов же ($B = -1$) могут быть написаны аналогичные диаграммы с заменой $Y \rightarrow -Y$, $I_3 \rightarrow -I_3$.

Следует обратить внимание на декуплетную диаграмму. Она была составлена до открытия Ω^- -гиперона. На основе этой диаграммы было предсказано не только само существование Ω^- -гиперона, но также и его основные характеристики: спин, заряд, странность и даже масса, которая была найдена на основе массовой формулы Окубо, принимающей для декуплета вид:

$$M = \text{const} - \text{const } Y.$$

Многие резонаны, которые мы не поместили в нашу таблицу, по-видимому, должны образовывать новые группы. Предложенная Гелл-Манном и Нееманом классификация элементарных частиц и резонансов носит пока что полуэмпирический характер и является далеко не исчерпывающей. В ней не учтено, например, существование шести лептонов, фотона и гравитона.

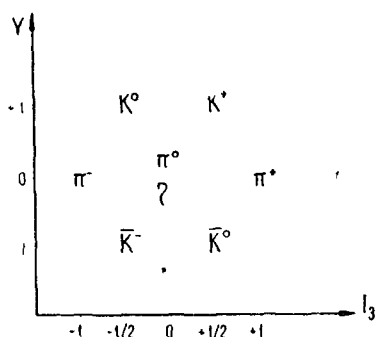
Если проводить аналогию с созданием периодической системы элементов, то современная таблица элементарных частиц соответствует начальному этапу создания периодической системы, когда Менделеев впервые открыл свой периодический закон. Как известно, периодическая система была окончательно понята только после появления квантовой теории и в особенности после установления принципа Паули.

Заметим также, что за последнее время был сделан ряд попыток связать элементарные частицы с другими, так называемыми *субчастицами*.

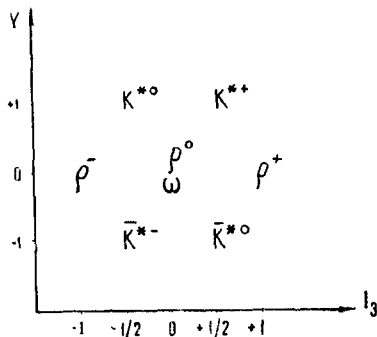
Так, например, в свое время разрабатывалась нейтринная теория света, согласно которой фотон рассматривался как своеобраз-

Таблица 31.4

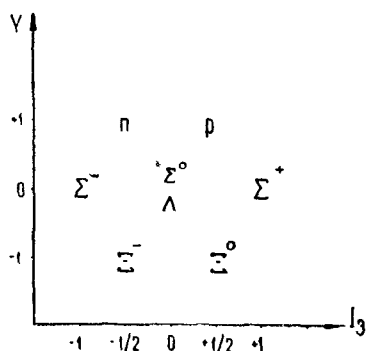
Различные группы элементарных частиц



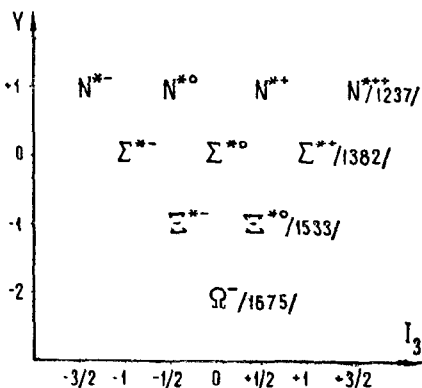
а) Октуплетная группа мезонов и η -резонанса, спин $s=0$, четность отрицательная.



б) Октуплетная группа мезонных резонансов, спин $s=1$, четность отрицательная.



в) Октуплетная группа барионов, спин $s=1/2$, четность положительная.



г) Декуплетная группа барионных резонансов и Ω -бариона, спин $s=3/2$, четность положительная. (В скобках справа указаны массы соответствующих частиц, вычисленных по массовой формуле Окубо для декуплетов.)

ное слияние нейтрино и антинейтрино. Поскольку мы имеем еще мало экспериментальных данных о структуре лептонов, в настоящее время разрабатываются, главным образом, вопросы структуры сильно взаимодействующих частиц.

Первая такая попытка была предпринята японским физиком Саката. Он за субчастицы выбрал p, n, Λ , а также соответствующие им антисубчастицы: $\bar{p}, \bar{n}, \bar{\Lambda}$. С помощью этих субчастиц оказалось возможным составить мезонные октуплеты с необходимой четностью, однако из них нельзя было образовать нуклонный октуплет, а также резонансный декуплет.

Для того чтобы разрешить эту трудность, Гелл-Манн, а также независимо от него Цвейг предложили ввести вместо частиц Саката новые субчастицы (квази-протон p^* , квазинейтрон n^* и квази-гиперон Λ^*) с дробным значением электрического и барионного зарядов. Для отличия от частиц Саката мы будем обозначать последние со звездочкой.

Эти субчастицы с их характеристиками, названные Гелл-Манном *кварками*, мы приводим ниже:

Символ кварк	p^*	n^*	Λ^*
Q	$2/3$	$-1/3$	$-1/3$
B	$1/3$	$1/3$	$1/3$
S	0	0	-1
I_3	$1/2$	$-1/2$	0

Кварки имеют положительную четность. Соответствующие антикварки, которые мы будем обозначать с чертой, должны обладать противоположными значениями этих характеристик и, в частности, должны обладать отрицательной четностью. Спин как кварков, так и антикварков равняется половине.

Кроме того, для них должна иметь место формула Гелл-Манна — Нишиджимы:

$$Q = I_3 + \frac{S + B}{2}. \quad (31.5)$$

Примечание.

Слово «кварк» заимствовано Гелл-Манном из романа Дж. Джойса «Пробуждение Финегана», где этим словом названы бесы. Поиски «кварков» на Брукхейвенском (США) и на Женевском (ЦЕРН) тридцатимиллиардном ускорителях окончились пока что неудачей. Масса «кварков», по-видимому, должна лежать в пределах 2000—20 000 Мэв, что значительно превышает массу нуклона (при их соединении большая часть массы «съедается» энергией связи, имеющей отрицательный знак) и поэтому для их образования энергия даже самых мощных ускорителей пока что недостаточна. Кроме того, трудно сказать, насколько при большой энергии связи у кварков в свободном состоянии сохраняются приписываемые им свойства, которые сохраняются, например, в атомных соединениях у протонов, нейтронов и электронов, поскольку там энергия связи много меньше их свободной энергии.

Поэтому имеются основания предполагать, что «кварков» с их необычным зарядом вообще не существует. Однако на сегодняшний день они представляют собой модель для понимания образования октуплетов и декуплетов

из элементарных частиц (более подробно см.: М. Гелл-Манн, А. Розенфельд и Дж. Чу, УФН, **83**, 695, 1964). Следует отметить, что в настоящее время делаются попытки сохранить у кварков (или аналогичных субчастиц) хотя бы целочисленный электрический заряд. Тогда вместо формулы Гелл-Манна — Нишиджимы (31.5) для них следует ввести формулу:

$$Q = I_3 + \frac{S+B}{2} + \frac{C}{3}, \quad (31.5a)$$

причем для того, чтобы сделать электрический заряд кварков целочисленным, сохраняя при этом остальные параметры без изменения, следует предположить, что новое квантовое число C , получившее название «charm» (в переводе на русский — «очарование»), может принимать значения: $C=1$ или $C=-2$ (более подробно см. доклад А. Салама на Международной конференции по физике высоких энергий, Дубна, 1964 г., опубликованный как дополнение к книге Нишиджима «Фундаментальные частицы», изд. «Мир», 1965).

Если спин двух кварков имеет одно и то же направление (не нарушая общности, мы можем этот спин направить по оси z), то мы будем писать:

$$p^* n^* \rightarrow p_{1/2}^* n_{1/2}^*.$$

Противоположно направленные спины мы будем описывать с помощью квадратных скобок:

$$[p^* n^*] = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_{1/2}^* n_{-1/2}^* - p_{-1/2}^* n_{1/2}^*),$$

предполагая, что в этом случае $[p^* p^*] = 0$ и т. д. Из этих кварков можно следующим способом образовать три группы октетов и одну группу декуплета:

а) Октетная группа мезонов ($s=0$, абсолютная четность отрицательна):

$$\begin{aligned} K^0 &= [n^* \bar{\Lambda}^*], \quad K^+ = [p^* \bar{\Lambda}^*]; \\ \pi^- &= [\bar{p}^* n^*], \quad \pi^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} ([p^* \bar{p}^*] - [n^* \bar{n}^*]), \quad \pi^+ = [p^* \bar{n}^*]; \\ \eta &= \frac{1}{\sqrt{2}} ([p^* \bar{p}^*] + [n^* \bar{n}^*]); \\ \bar{K}^- &= [\bar{p}^* \Lambda^*], \quad \bar{K}^0 = [\bar{n}^* \Lambda^*]. \end{aligned}$$

б) Октетная группа мезонных резонансов ($s=1$, абсолютная четность отрицательна):

$$\begin{aligned} K^{*0} &= n^* \bar{\Lambda}^*, \quad K^{*+} = p^* \bar{\Lambda}^*; \\ \rho^- &= \bar{p}^* n^*, \quad \rho^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (p^* \bar{p}^* - n^* \bar{n}^*), \quad \rho^+ = p^* \bar{n}^*; \\ \omega &= \frac{1}{\sqrt{2}} (p^* \bar{p}^* + n^* \bar{n}^*); \\ \bar{K}^{*-} &= \bar{p}^* \Lambda^*, \quad \bar{K}^{*0} = \bar{n}^* \Lambda^*. \end{aligned}$$

в) Окуплетная группа барионов ($s = \frac{1}{2}$, относительная четность положительна):

$$\begin{aligned} n &= n^* [p^* n^*], \quad p = p^* [p^* n^*]; \\ \Sigma^- &= n^* [n^* \Lambda^*], \quad \Sigma^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(p^* [n^* \Lambda^*] + n^* [p^* \Lambda^*]), \quad \Sigma^+ = p^* [p^* \Lambda^*], \\ \Lambda &= \Lambda^* [p^* n^*]; \\ \Xi^- &= \Lambda^* [n^* \Lambda^*], \quad \Xi^0 = \Lambda^* [p^* \Lambda^*]. \end{aligned}$$

г) Декуплетная группа барионных резонансов ($s = \frac{3}{2}$, относительная четность, положительна):

$$\begin{aligned} N^{*-} &= n^* n^* n^*, \quad N^{*0} = p^* n^* n^*, \quad N^{*+} = p^* p^* n^*, \quad N^{*++} = p^* p^* p^*; \\ \Sigma^{*-} &= n^* n^* \Lambda^*, \quad \Sigma^{*0} = p^* n^* \Lambda^*, \quad \Sigma^{*+} = p^* p^* \Lambda^*; \\ \Xi^{*-} &= n^* \Lambda^* \Lambda^*, \quad \Xi^{*0} = p^* \Lambda^* \Lambda^*; \\ \Omega^- &= \Lambda^* \Lambda^* \Lambda^*. \end{aligned}$$

Гелл-Манн и Нееман попытались прежде всего дать обоснование для числа частиц, входящих в группу (окуплетные, декуплетные) с точки зрения общей теории групп.

Они считают, что сильное взаимодействие, приводящее к окуплетам и декуплетам, должно обладать определенной симметрией по отношению к унитарным преобразованиям в трехмерном (три фундаментальные частицы) комплексном (частицы и античастицы) пространстве¹⁾. Обозначая индексами 1, 2, 3, стоящими внизу, соответственно кварки $p^* n^*$ и Λ^* , а индексами, стоящими вверху, — соответствующие им антикварки, мы можем первые две группы (а, б) мезонов и их резонансов, составленных из одной частицы и одной античастицы, описать восьмью независимыми «квизитензорными» волновыми функциями: A_k^l , где $k, l = 1, 2, 3$. Кроме того, можно образовать еще «квизискалярную» функцию $A = \sum_{k=1}^3 A_k^k = 0^2$.

¹⁾ В частности, Гелл-Манн и Нееман предложили эти унитарные преобразования описывать группой SU_3 (унитарная группа в трехмерном пространстве с детерминантом, равным единице). Если учесть еще спин, то лучше взять группу SU_6 (см. Я. А. Смородинский, УФН, 84, 3, 1964; Дж. де Сварт, УФН, 84, 651, 1964).

²⁾ Вообще из трех частиц и античастиц мы можем попарно образовать девять состояний 3×3 . Тогда, кроме окуплетной группы, возможно еще существование синглетного состояния, описываемого функцией A , если последняя будет отлична от нуля. При этом открывается возможность в окуплетную схему с $s = 1$ наряду с ω -резонансом включить еще φ -резонанс.

Группу барионов, составленную из трех частиц, мы можем описать при помощи волновых функций A_{klm} , которые при условии $A_{klm} = -A_{kml}$ и $A = A_{123} + A_{231} + A_{312} = 0$ дадут также восемь независимых компонент.

Наконец, декуплет барионных резонансов может быть описан с помощью десяти независимых волновых функций A_{klm} , являющихся симметричными относительно индексов klm .

Еще раз подчеркнем, что схему «кварков» Гелл-Манна и Цвейга пока что следует рассматривать как один из возможных способов образования октетных и декуплетных групп из элементарных частиц и резонансов.

Задача 31.1¹⁾. Найти операторы изотопического спина и связать их с операторами увеличения и уменьшения заряда для зарядовых дублетов (нуклоны) и зарядовых триплетов (пи-мезоны).

Решение. Решение следует искать из уравнений:

$$\begin{aligned} (I_1^2 + I_2^2 + I_3^2) \psi &= I(I+1) \psi, \\ I_3 \psi &= I_3 \psi. \end{aligned} \quad (31.6)$$

1) В случае зарядового дублета ($\psi = \chi$, $I = \frac{1}{2}$) для протона ($I_3 = \frac{1}{2}$) и нейтрона ($I_3 = -\frac{1}{2}$) соответственно имеем:

$$\chi_p = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (31.7)$$

Операторы увеличения (Q_+) и уменьшения (Q_-) зарядов при этом оказываются равными:

$$Q_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (31.8)$$

В самом деле, при таком выборе

$$Q_+ \chi_p = 0, \quad Q_- \chi_p = \chi_n \text{ и т. д.}$$

На основании предыдущего получаем следующие матрицы изотопического спина:

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{2} (Q_+ + Q_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \tau_1, \\ I_2 &= -\frac{i}{2} (Q_+ - Q_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \tau_2, \\ I_3 &= \frac{1}{2} (Q_+ Q_- - Q_- Q_+) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \tau_3. \end{aligned} \quad (31.9)$$

Эти матрицы в формальном отношении тождественны матрицам Паули; поэтому по аналогии с теорией спина их можно рассматривать как компоненты вектора τ в некотором трехмерном изотопическом пространстве.

¹⁾ Задачи, приведенные ниже, относятся также и к § 28.

2) В случае зарядового триплета ($\psi = \varphi, I = 1$) для положительного ($I_3 = 1$), нейтрального ($I_3 = 0$) и отрицательного ($I_3 = -1$) мезонов соответственно имеем:

$$\varphi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (31.10)$$

Операторами увеличения (Q_+) и уменьшения (Q_-) зарядов при этом будут

$$Q_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad Q_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (31.11)$$

Отсюда для операторов проекций (в изотопическом пространстве) изотопического спина находим:

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_+ + Q_-) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ I_2 &= -\frac{i}{\sqrt{2}}(Q_+ - Q_-) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \\ I_3 &= Q_+ Q_- - Q_- Q_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (31.12)$$

Последние матрицы формально могут быть использованы также для описания частиц со спином единица.

Задача 31.2. Определить электростатическую энергию, а также поверхность слегка деформированного по закону (28.70) ядра заряда Ze_0 . Показать, что при этой деформации объем ядра остается неизменным.

Решение. Учитывая, что $P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$, легко показать неизменность объема ядра при деформации вида (28.70) для любых значений α , так как

$$V' = \int d^3x = \frac{R^3}{3} \oint d\Omega [1 + \alpha P_2(\cos \vartheta)] = \frac{4\pi R^3}{3} = V.$$

Энергия деформированного ядра будет складываться из трех частей:

1. Из энергии шара радиуса $R_1 = R \left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)^{1/3}$:

$$E_{11} = \frac{3}{5} \frac{e_1^2}{R_1} \approx E \left(1 - \frac{5}{6}\alpha + \frac{5}{36}\alpha^2\right), \quad (31.13)$$

где

$$e_1 = Ze_0 \frac{R_1^3}{R^3} = Ze_0 \left(1 - \frac{\alpha}{2}\right),$$

а $E = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e_0^2}{R}$ — энергия недеформированного ядра; вычисления здесь ограничены величинами порядка α^2 .

2. Из энергии сфероидального слоя, заключенного в интервале

$$R_1 \leq r \leq R' = R [1 + \alpha P_2(\cos \vartheta)]^{1/3};$$

$$E_{22} = \frac{1}{2} \rho^2 \oint d\Omega_1 \int_{R_1}^{R'(\cos \vartheta_1)} r_1^2 dr_1 \oint d\Omega_2 \int_{R_1}^{R'(\cos \vartheta_2)} \frac{r_2^2 dr_2}{|r_1 - r_2|},$$

где плотность заряда $\rho = \frac{3Ze_0}{4\pi R^3}$.

Ограничиваясь при вычислении E_{22} опять-таки величинами порядка α^2 , можно воспользоваться следующей приближенной формулой:

$$\int_{R_1}^{R'(\cos \vartheta_1)} f(r) dr \approx \frac{R}{2} \alpha \cos^2 \vartheta_1 \cdot f(R).$$

Тогда получаем:

$$E_{22} \approx \frac{\alpha^2}{8\sqrt{2}} \rho^2 R^5 \oint d\Omega_1 \cos^2 \vartheta_1 \oint d\Omega_2 \frac{\cos^2 \vartheta_2}{\sqrt{1 - \cos \vartheta}},$$

где ϑ — угол между векторами r_1 и r_2 .

При интегрировании по телесному углу Ω_2 , удобно перейти к вспомогательной системе координат с осью z' , направленной вдоль вектора r_1 , считая после этого, что вектор r_1 будет ориентирован вдоль z . Учитывая, что в этом случае

$$d\Omega_2 = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi, \quad \cos \vartheta_2 = \cos \vartheta_1 \cos \vartheta + \sin \vartheta_1 \sin \vartheta \cos \varphi,$$

для E_{22} находим:

$$E_{22} \approx E \frac{29}{120} \alpha^2. \quad (31.14)$$

3. Из энергии взаимодействия шара радиуса R_1 со сфероидальным слоем

$$E_{12} = \oint d\Omega \int_{R_1}^{R'(\cos \vartheta)} \Phi_1 \rho r^2 dr.$$

Подставляя сюда значение потенциала заряженного шара $\Phi_1 = \frac{e_1}{r}$, получаем:

$$E_{12} = \rho e_1 \frac{R^2}{2} \oint d\Omega \left[(1 + \alpha P_2(\cos \vartheta))^{2/3} - \left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)^{2/3} \right] \approx$$

$$\approx E \left(\frac{5}{6} \alpha - \frac{29}{72} \alpha^2 \right). \quad (31.15)$$

Отсюда следует, что энергия деформированного ядра будет несколько меньше первоначальной [см. (28.72)]:

$$E' = E_{11} + E_{22} + E_{12} = E \left(1 - \frac{\alpha^2}{45} \right). \quad (31.16)$$

Наконец, при определении поверхности деформированного ядра воспользуемся формулой, известной из дифференциальной геометрии:

$$S' = \oint d\Omega [R'(\cos \vartheta)]^2 \sqrt{1 + \left[\frac{d \ln R'(\cos \vartheta)}{d\vartheta} \right]^2}.$$

Подставляя сюда значение для R' и ограничиваясь при вычислениях величинами порядка α^2 , находим:

$$S' \approx R^2 \oint d\Omega \left[1 + \frac{2}{3} \alpha P_z (\cos \vartheta) - \frac{\alpha^2}{9} \left(P_z (\cos \vartheta) \right)^2 + \frac{\alpha^2}{2} (\cos^2 \vartheta \sin^2 \vartheta) \right] = 4\pi R^2 \left(1 + \frac{2}{45} \alpha^2 \right).$$

Задача 31.3. Показать, что если в уравнении движения для классического нерелятивистского электрона (конкретно в случае одномерного гармонического осциллятора) учесть флуктуации со стороны фотонного вакуума, а также силу лучистого трения Планка (т. е. силу самодействия), то классическая координата и импульс электрона становятся операторами, подчиняющимися соотношению неопределенности Гейзенберга.

Решение. Уравнение движения электрона в поле виртуальных фотонов имеет вид:

$$m_0 \ddot{x} = -m_0 \omega_0^2 x + e(E_x + E_x^i), \quad (31.1)$$

где

$$E_x^i = -\frac{1}{c} \frac{\partial A_x^i}{\partial t} = +\frac{2}{3} \frac{e}{c^3} \ddot{\ddot{x}}$$

электрическое поле самодействия, т. е. сила самодействия, а E_x — напряженность внешнего электрического поля.

Если исходить из строгой теории классической электродинамики, то сила самодействия должна содержать еще член, пропорциональный ускорению $\frac{e^2}{c^2 R} \ddot{x}$, который мы можем включить в общую массу электрона. Если радиус электрона стремится к нулю $R \rightarrow 0$, то этот член расходится. Однако современная теория регуляризации [см. (§ 22 п. «г»)] требует, чтобы общая масса оставалась при переходе к пределу $R \rightarrow 0$ постоянной величиной.

В этом случае уравнение движения классического электрона принимает вид:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega_0^2 - \gamma \frac{d^3}{dt^3} \right) x = -\frac{e \partial A_x}{m_0 c \partial t}, \quad (31.18)$$

где $\gamma = \frac{2}{3} \frac{e^2}{m_0 c^3}$, причем если вместо A_x подставить поперечную составляющую вторично квантованного поля фотонов [см. (30.25)], то она, как было указано в § 30, не обратится в нуль даже в том случае, когда реальные фотоны будут отсутствовать.

Подставляя (30.25) в (31.18) и ограничиваясь дипольным приближением:

$$xr \ll 1, \quad (31.19)$$

найдем:

$$x = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_x \frac{e i \omega}{m_0 c} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega}} \left(\frac{a_1 e^{-i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega^3} - \frac{a_1^+ e^{i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega^3} \right),$$

где $\omega = c\kappa$, a_1 — составляющая вторично квантованного поля фотонов, которая дает только следующую, отличную от нуля квадратную комбинацию [см. (30.30)] при $\kappa = \kappa'$:

$$a_1 a_1^+ - a_1^+ a_1 = 1 - \frac{\kappa^2 x}{\kappa^3}. \quad (31.20)$$

Последнее выражение сохраняет свой вклад даже в случае отсутствия реальных фотонов ($a_1^\dagger a_1 = 0$).

Импульс частицы может быть найден из соотношения:

$$p = m_0 \dot{x} + \frac{e}{c} (A_x + A_x^i) = \\ = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_x \frac{e \omega_0^2}{c} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega}} \left(\frac{a_1 e^{-i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega^3} + \frac{a_1^\dagger e^{i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega^3} \right).$$

Отсюда видно, что поскольку амплитуды a_1 и a_1^\dagger являются операторами, подчиняющимися перестановочным соотношениям (31.20), поэтому и классическая координата x и импульс p становятся операторам, некоммутирующими между собой:

$$px - xp = \frac{\hbar}{i} \frac{2}{\pi} \gamma \omega_0 J, \quad \text{где} \quad J = \int_0^\infty \frac{y^2 dy}{(y^2 - 1)^2 + \gamma^2 \omega_0^2 y^6}, \\ y = \frac{\omega}{\omega_0}.$$

Раскрывая последний интеграл:

$$J = \frac{\pi}{2\gamma\omega_0} + O(\gamma\omega_0),$$

найдем в первом приближении ($\omega_0 \gamma \rightarrow 0$) для x и p перестановочные соотношения, совпадающие с соотношением неопределенности:

$$px - xp = \frac{\hbar}{i}.$$

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Абсолютно черное тело 20
Авогадро число 125
Адиабатические инварианты 45
Аксиальная симметрия 494
Аксиальный вектор 521, 583
Актиниды 470, 476
Акцепторная примесь 140
Альфа-распад 533, 535, 539
Альфа-частицы 533, 537, 538
Америций 476
Амплитуда рассеяния 560, 565
Ангармонический осциллятор 291
Аннигиляция 390, 590
Аномальный магнитный момент нуклонов 380, 384, 397
— — — электрона 386, 396
— эффект Зеемана 308, 363
Антигипероны 594, 596
Антимезоны 604
Антимир 607
Антинейтрино 344, 582, 585, 591, 600
Антинуклоны 596, 600
Антисимметричная спиновая функция 431, 493, 496
Антисимметричные волновые функции 112, 421, 422, 486, 489, 492
Астатин 468
Атом гелия, без учета спиновых состояний 400
— — , волновые функции 431
— — , с учетом спиновых состояний 427
— — , энергетические уровни 434
Атомная единица массы 514
Атомные оболочки 469, 470
— подоболочки 469
Атомный остов 449
Бальмера серия — см. *Серия*
Барийонный заряд 598, 601, 614
Барiony 597, 602
Бартлетта силы — см. *Ядерные силы*
Бегущие волны 86
Берклий 476
Бесселева функция 105
— — , асимптотическое выражение 106
— — мнимого аргумента 105
Бета-распад 533, 577
— — варианта Фейнмана — Гелл-Манна 580
Био-Савара закон 7
Благородные газы — см. *Инертные газы*
Блохинцева, Никольского квантовые ансамбли — см. *Квантовый ансамбль*
Боголюбова, Бардина, Купера и Шриффера теория сверхпроводимости 141
Боголюбова — Гольдбергера теория дисперсионных соотношений 611
Бозе — Эйнштейновская статистика 420, 572
Бозоны 595
Больцмана N — теорема 70
Бора магнетон 193, 307
— постулаты 47, 53, 56
Борновское приближение 560
Боровская теория 44
— — водородоподобного атома 49
Бра-векторы Дирака 174
Брэгга — Вульфа условие — см. *Условие*
вие
Вакуум электромагнитный 393
Вакуумные флуктуации 394
Валентность 474
Вариационный метод 408
— — Ритца 408, 472
— — Хиллерааса 408, 410, 489
— принцип 18

- Вексовое уравнение 275
 Векторная модель атома 327, 425
 Вероятность вынужденного перехода 171
 — пребывания частицы в квантовом состоянии 96
 — спонтанного перехода 171, 577
 Вибрационно-ротационный спектр 227, 482
 Вигнера силы — см. *Ядерные силы*
 Вина закон смещения 24, 460
 — термодинамический закон 24
 ВКБ метод 101, 168, 191
 Внутреннее квантовое число 331, 456
 Внутренние оболочки у ферромагнитных металлов 464
 Водородоподобный атом по теории Бора 49
 — — — Дирака 352, 358, 395
 — — — Клейна — Гордона 298
 — — — Шредингера 244, 248, 253, 261, 265
 — — , учет вакуумных поправок 395
 — — , — конечной массы ядра 261
 — — , — магнитного момента ядра 385
 — — , — размеров ядра 374
 Волновой пакет 62, 63, 64, 73
 — — , время расползания 66, 73
 Волны де-Бройля 54
 Волновые свойства пучка электронов 56
 — — частиц 60
 «Время обмена» 417, 418
 Вторая побочная (или резкая) серия — см. *Серия*
 Вторичное квантование — см. *Квантование*
 Вынужденные переходы 170, 503
 Вырождение в случае чисто кулоновского взаимодействия 248, 350
 Вырождения, температура 127
 Вырожденные состояния 79, 217, 483
 Вырывание электронов из металла 57, 129
 Гайтлера — Лондона, теория молекулы водорода 491, 497, 500
 Галилея — Ньютона преобразования 10
 Галогены 474
 Гамильтониан 94
 Гамильтона — Якоби уравнение — см. *Уравнение*
 Гамма-излучение 585, 586
 Гамма-квант 586
 Гармонический осциллятор в импульсном представлении 191
 — — в матричном представлении 196
 — — в трехмерном случае 377, 378, 549, 550
 — — линейный 177, 180, 190, 194
 — — , нулевая энергия вакуума фотонов 392
 Гейгера — Неттола закон 535, 540
 Гейзенберг — Иваненко — см. *Иваненко — Гейзенберг*
 Гейзенберга силы — см. *Ядерные силы*
 — , соотношение неопределенности — см. *Соотношение неопределенности*
 Гелий — см. *Атом гелия*
 Гелл-Манн — Цвейг, кварки — см. *Субчастицы*
 Гелл-Манн — Нишиджима, схема классификации элементарных частиц — см. *Схема*
 Генератор квантовый 508, 509
 — молекулярный 507
 — оптический 508, 509
 Гетерополярные молекулы 477, 499
 Гиперболические орбиты 256
 Гипергеометрическая функция 167
 Гиперзаряд 612
 Гилероны 593
 Гиперядра 602
 Гипотеза размазанного электрона по Шредингеру 66
 Главная серия — см. *Серия*
 Гомеополярная валентность 498
 — связь 490
 Гомеополярные (или атомные) молекулы 482, 490
 Гравитационное излучение 176
 Граничные условия 77, 82
 Групповая скорость 60, 63
 Группы SU_3 , SU_6 616
 — элементарных частиц 613
 Дважды магические числа 548
 Движение электронов в металле 123
 Дебаевская температура 234
 Де-Бройлевские волны 55
 Дейтерий 262, 512
 Дейтрон 524, 530
 Декуплетная группа барионных резонансов 613
 Деление тяжелых ядер 544, 548, 618
 Дефект массы 514
 Диаграмма Форта для полосатых спектров 229

- Диамагнетизм атомов 370
 — «электронного газа» 192
 Диамагнитная восприимчивость парагелия 436
 Динамические закономерности 149
 Дипольное излучение — см. *Излучение*
 Дирака, волновое уравнение — см. *Уравнение*
 — , дельта-функция 83, 89, 519, 558
 — , матрицы — см. *Матрицы*
 — , трансформационные свойства волновой функции 324
 Дираковская теория движения электрона в поле центральных сил 326
 — — «дырок» 387, 389
 Дираковский магнитный момент 347, 380
 Дисперсии теория 282
 Дисперсионные соотношения 611
 Дисперсия отрицательная 288
 Дифракция электронов 57, 58
 Диэлектрик идеальный 138
 Длина периодичности 85
 Дополнительности принцип — см. *Принцип*
 Друде, теория металла 124
 Дуализм волна — частица 55
 Дублет (изотопический) нуклона 595
 Дублетное расщепление уровней 358, 457
 «Дырочная» проводимость 139, 140
 Дюлонга — Пти закон 231, 232

 Единица атомных масс 514
 — — — , физическая кислородная шкала 515
 — — — , углеродная шкала 515
 — — — , химическая шкала 515
 Естественная радиоактивность 515, 535

 Законы сохранения 160
 — — заряда 95, 598
 — — момента количества движения 209, 214, 327
 — — четности 336
 — — энергии 52
 Заполнение электронами энергетических уровней в периодической системе элементов Менделеева 469
 Запрещенные переходы 176, 506
 Заряд ядра 44, 436
 Зарядовая мультиплетность (дублеты) нуклонов 522, 598, 617
 — — странных частиц 601

 Зарядовая мультиплетность (триплеты) пи-мезонов 598, 617
 — независимость нуклонов 517, 595
 Зарядово-сопряженное преобразование — см. *Преобразование*
 Зеемана эффект — см. *Эффект*
 Зона запрещения 138
 — основная 137
 — проводимости 137

 Идеалистическая теория «принципиальной координации субъекта и объекта» 14
 Идеальный диэлектрик 138
 Иваненко — Гейзенберг, модель ядра 511
 — — , нелинейное уравнение 611
 Излучение 169
 — вынужденное 170
 — гравитационное 176
 — дипольное 175
 — индуцированное 504
 — интенсивность 170
 — квадрупольное 176, 177, 194, 372, 576
 — , коэффициенты Эйнштейна 170, 289, 575
 — магнитное 372
 — спонтанное 170, 577
 Изобары 512
 Изотоны 512
 Изотопическая мультиплетность 603
 Изотопический спин 523, 598, 603, 608
 Изотопическое пространство 617, 618
 Изотопы 512
 Импульс фотона 29
 Импульса оператор — см. *Оператор*
 Импульсное представление — см. *Представление*
 Инверсия пространства 335, 341, 520
 Инверсная населенность 504, 506
 — — , мощность 504
 Индуцированное излучение 503, 504
 Инертные газы 474, 479, 548
 — — , химические соединения 499
 Интегралы движения 160
 Интерференция де-Бройлевских волн 97
 Ионизация атома водорода 261
 — — гелия 264
 Ион молекулы водорода 482
 Ионные соединения 478
 Искусственная радиоактивность 534
 — ядерная реакция 515

- Калифорний 476
 Канонические уравнения 158
 Капельная модель ядра — см. *Ядра модели*
 Квадрупольное излучение см. *Излучение*
 Квадрупольные переходы 176
 Квадрупольный конденсатор 507
 — момент дейтрона 530
 Квазиклассическое приближение 100
 Квазичастицы, резонаны — см. *Резонаны*
 Квантование вторичное уравнений Максвелла 574
 — — уравнения Шредингера 569, 572
 — круговых орбит по Бору 49
 — полного момента 327
 — по методу ВКБ 108
 — эллиптических орбит по Бору — Зоммерфельду 51, 53
 Квантовая механика Шредингера 12, 75, 91
 — статистика Бозе — Эйнштейна 420, 572
 — — Ферми — Дирака 124
 — теория Бора 34
 — — дисперсии 284
 — — света 16
 — — теплоемкости двухатомных молекул 234
 — химия 70
 — электродинамика 575
 Квантовое число внутреннее 331, 456
 — — главное 243
 — — магнитное 203
 — — орбитальное 205
 — — полужелое 311, 327, 458
 — — радиальное 243
 — — спиновое 327
 — — эффективное 451
 Квантовый ансамбль 94, 153
 — — смешанный 98
 — — чистый 97
 Квантовый генератор 503
 — усилитель 503
 Кванты ядерного поля 592
 Кварки — см. *Субчастицы*
 Кеплера законы 7
 Кеплера проблема 209, 239, 352
 Кет — векторы Дирака 174
K-захват 578
 Классическая теория дисперсии 282
 — — излучения 17, 169
 — — эффекта Зеемана 302
 Ковалентная связь 497
 Когерентная ψ -волна 97
 Когерентные электромагнитные волны 506
 Комбинационное рассеяние света 289, 290
 Комбинационный принцип Ритца 35
 Комбинированная инверсия 344
 Комптон-эффект 30
 Комптоновская длина волны 31
 Контактная разность потенциалов 132
 Контактное взаимодействие 351, 355
 Координатное представление 144
 Координаты декартовы 85
 — нормальные 502
 — полярные 44
 — сферические 198
 Копенгагенская школа 68, 150
 Корпускулярно-волновой дуализм 156
 Космические лучи 594
 Коэффициенты Клебша — Жордана 330, 422, 424, 425, 426, 431
 — отражения 120
 — поляризации 450
 — прозрачности 120
 — Эйнштейна — см. *Излучение*
 Кривые Гейгера — Нэттола 536, 540
 — Мозли 464
 — устойчивости 544
 Кронига — Пенни модель 133, 141
 Кулоновское взаимодействие электронов в атоме 405, 407, 487
 Кюри закон 535
 Лагерра полиномы 244
 Лагранжа функция 18, 44
 Лагранжиан 44
 Лазер 508
 Ламбда-гиперон 593, 602, 604
 Ландау — Ли — Янг, комбинированная инверсия 344, 605
 Ланде множитель 365, 366, 369
 Лантаниды 470, 476
 Лаплас, о детерминизме 69
 Лапорта правила 337
 Ларморова частота прецессии 193, 307, 365
 Лежандра полиномы 206
 Ленин В. И., анализ «кризиса физики» 69
 — , о механистическом мировоззрении 14
 — , о неисчерпаемости электрона 14, 69
 — , о теории познания 70
 Лептонный заряд 600
 «Линейризация» оператора энергии 318

- Линейчатые спектры 221
 Линии рентгеновского спектра 462
 Ли — Янг, несохранение четности 582
 Лоренца сила 18
 Лоренцево преобразование 10
 Лоуренсий 476
- Магические числа** 548, 553
 — ядра 548
 Магнетон Бора 307
 — ядерный 383, 513
 Магнитная восприимчивость 370
 Магнитное излучение — см. *Излучение*
 Магнитные полюса 7
 Магнитный момент атома 304
 — — дейтрона 530
 — — нуклонов 381
 — — электрона 310, 347
 Мазер 507
 Майорана силы — см. *Ядерные силы*
 Максимальная валентность элементов 475
 Масса ядра 514
 Массовое число 511
 Матричное представление — см. *Представление*
 Матрицы Дирака 320, 321
 — комплексно-сопряженные 341
 — Паули 318, 429, 521, 617
 — эрмитово-сопряженные 173, 341
 Мезоатомы 38, 375
 Мезомолекула водорода 490
 Мезонная теория ядерных сил Юкава — см. *Ядерные силы*
 Мезоны 592, 593, 596, 600, 605
 Мезонный заряд 520
 Менделевий 476
 Менделеева периодическая система — см. *Периодическая система*
 Метастабильный уровень 434, 505, 509
 Механистическое мировоззрение 69, 150
 Механический момент электрона (спин) 311, 314, 327
 Многоэлектронная теория твердого тела 140
 Множитель Ланде 365, 366, 369
 Модель атома водорода по Томсону 36
 — Кронига — Пенни 133, 141
 — потенциальной ямы для металла 126
 — ядра Иваненко — Гейзенберг — см. *Иваненко — Гейзенберг*
 Мозли закон 463, 465
 Молекула водорода 493
 — кислорода 496
 Молекулы гетерополярные 477, 499
 — гомеополярные 482, 490
 Молекулярные уровни (термы) 226
 Молекулярный спектр 221, 230
 Момент инерции двухатомной молекулы 223
 Момент количества движения орбитальный 210, 211, 326
 — — — полный 328
 — — — при квазиклассическом рассмотрении 255, 471
 — — — собственные значения 211
 — — — функции 207
 — — — спиновый 327
 Моменты ядер 512
 Монохроматическая волна 92
 Монохроматическое излучение 504
 Мультиплетная структура рентгеновских спектров 464
 Мультиплетность 498
- Наблюдаемые физические величины** 146, 153
 — нулевые флуктуации вакуума 393
 Нейтральные К-мезоны 605
 Нейтрино 578, 600,
 Нейтрон 512, 516, 610
 Некогерентная волна, смешанный ансамбль 98
 Некоммутирующие операторы, координата и импульс 144
 — — —, проекции момента количества движения 214
 Нелинейная теория поля 153
 Непрерывный спектр движения в кулоновском поле 254
 — — — свободного 84, 87
 — — — теплового излучения 22
 — — —, нормировка волновых функций 84, 87
 «Непроникающие» орбиты 448, 449, 451, 456
 Нептуний 532
 Несохранение четности 344, 582
 Нестационарная теория возмущений 554, 557, 560
 Нобелий 476
 Нулевая энергия гармонического осциллятора 187
 — — вакуума фотонов 392
- Обменная энергия** 405, 417, 485, 488, 492
Обменное взаимодействие 487
 — — электронов ферромагнетика 500

- Обобщенная координата 45
 — модель ядра — см. *Ядра, модели*
 Обобщенный импульс 45
 — спин 342
 Оболочечная модель ядра — см. *Ядра, модели*
 Одночастичная модель оболочек 549
 Октуплетная группа барионов 613
 — — мезонных резонансов 613
 — — мезонов 613
 Оператор Гамильтона для иона водорода 482
 — импульса 93, 143
 — инверсии пространства 335
 — кинетической энергии 94, 482
 — комплексно-сопряженный 341
 — координаты 143
 — Лапласа в сферических координатах 200
 — линейный 142
 — момента количества движения 209, 210, 211
 — перестановки частиц 419
 — функции Гамильтона 94
 — энергии 92
 — эрмитово-сопряженный 148, 323, 341
 Оптическая модель ядра — см. *Ядра, модели*
 Оптический генератор 508, 509
 Опыты Бибермана — Сушкина — Фабриканта по дифракции отдельных электронов 67
 — Блоха — Альвареса для определения магнитного момента нейтрона 382, 384
 — Вавилова с флуктуациями света 32, 67
 — Ву и др. по несохранению четности 584
 — Дебая — Шеррера 58
 — Дэвинсона и Джермера по дифракции пучков электронов 57
 — Комптона 31
 — Куша и Фолли по определению аномального магнитного момента электрона 386
 — Ледермана — Стейнбергера по обнаружению мюонного нейтрино 600
 — Лэмба — Резерфорда 361, 362
 — Майкельсона 10
 — Майкельсона — Морлея 509
 — Мёссбауэра 586
 — Паунда и Ребка о гравитационном смещении 587
 — Раби по измерению магнитного момента протона 384
 — Райнеса и Коузена по обнаружению антинейтрино 591, 600
 — Резерфорда 35, 38, 511
 — Савьяка 509
 — Тартаковского — Томсона 59
 — Франка Герца 48
 — Хофштадтера 513, 610
 — Штерна — Герлаха 309, 311, 384, 458
 — Эйнштейна — де-Гааза 308, 500
 Орбиты гиперболические 254
 — круговые 49, 250
 — непроницающие 448, 449, 451, 456
 — проникающие 451, 452
 — эллиптические 50, 71, 251
 Ортоводород 496
 Ортогелий 432, 434, 595
 Ортонормированность для радиальных функций 245
 Ортопозитроний 391
 Основная зона — см. *Зона*
 Отрицательная валентность 480
 — температура 505
 Параводород 496
 Парагелий 432, 595
 Парамагнетизм атомов 369
 Парамагнитные усилители 506
 Парапозитроний 391
 Паули гипотеза о существовании нейтрино 578
 — матрицы — см. *Матрицы*
 — принцип — см. *Принцип Паули*
 — уравнение — см. *Уравнение*
 Пашена — Бака эффект — см. *Эффект*
 Пашена серия — см. *Серия*
 Первая побочная (или диффузная) серия — см. *Серия*
 Перестановочные соотношения для волновых функций 572
 — — — поля амплитуд Бозе 572
 — — — Ферми 573
 Период полураспада 468, 535, 540
 — — — свободного нейтрона 590
 Периодическая система Менделеева 44, 466, 467, 469
 Периодическое движение 46
 Периодичность свойств элементов 473
 Пи-мезоны 520, 592, 596
 Планетарная модель атома 39, 44
 Планковская константа — см. *Постоянная*
 Плоская волна 55

- Плотность вероятности нахождения частицы 76
 — заряда и тока 94, 95, 295, 322
 — обменного состояния 405
 — тока 94
 — числа частиц 95
 Плутоний 532
 Подоболочки в атомах 438, 469
 Позитрон, 387, 390, 600
 Позитроний 390
 Позитронный распад 534, 578
 Молибом Лагерра 244
 — Лежандра 206
 — Эрмита 184
 Полное внутреннее отражение 120
 — эффективное сечение «захвата» 54
 Полный спин электронов в молекуле 494
 Положительная валентность 480
 Полосатые спектры молекулы 221, 229
 Поляризационные свойства нейтрино 583
 Поляризуемость атома 449
 Полярный вектор 521
 Поправка на релятивистскую скорость частицы 349
 Поправки вакуумные 395
 — на экранирование 463
 — флуктуационные 393
 Порядок заполнения оболочек 439
 Постоянная альфа-распада 539
 — Больцмана 23
 — Вина 28
 — Планка 25, 49, 460
 — радиоактивного распада 537, 538
 — Ридберга 34, 49, 247
 — Стефана — Больцмана 27
 — тонкой структуры 297, 354, 456
 Потенциал Юкава 519
 Потенциальная яма в приближении ВКБ 108
 Потенциальный барьер 80, 108
 Правила отбора для круговых орбит 51, 175, 189
 — — — магнитного квантового числа 220
 — — — орбитального квантового числа 220
 — — — осциллятора 190
 — — — радиального квантового числа 252
 — — — ротатора 220
 — — с учетом спиновых эффектов 354
 — — Ферми (Фермиевские переходы) 580
 Представление импульсное 145, 154, 163, 191
 — координатное 144, 154
 — матричное (энергетическое) 145, 154, 196
 Преобразование Галилея — Ньютона 10
 — зарядового сопряжения 341
 — инверсии пространства 341
 — Лоренца 10
 — обращения времени 341
 Приближенный метод ВКБ — см *ВКБ метод*
 Приведенная масса 223, 525
 Примесная проводимость 139
 Принцип дополнителности 67, 68, 149
 — Паули 124, 172, 388, 420, 421, 438, 441, 468, 530
 — соответствия 50
 Природа обменных сил 210
 Прицельное расстояние 42
 Причинные связи 70
 Проводимость полупроводников 139
 Прометий 468
 «Проникающие» орбиты 449, 451
 Пространственное квантование 212
 Протон 512, 610
 Прохождение альфа-частиц сквозь вещество 38
 Псевдоскаляр 520
 Пуассона скобки квантовые 159
 — — классические 158
 «Работа выхода» 123, 129
 Радиоактивная постоянная распада 535
 Радиоактивность 534
 Радиоактивные семейства 533
 Радиус молекулы водорода 492
 — первой боровской орбиты 49, 435
 Радиус ядра 513
 Равновесное излучение 20
 Разложение плоской волны по сферическим волнам 237
 Разрешающая способность 60
 Распад гиперонов 597, 604
 — мезонов 584
 Рассеяние альфа-частиц (формула Резерфорда) 43, 563
 — на юкавском силовом центре 561
 Регуляризация (понятие о методе) 398

- Резонансное рассеяние 568
 Резононы (квазичастицы) 608, 609, 610, 613
 Релятивистская квантовая механика 293
 — функция Лагранжа 52
 Рентгеновские спектры атомов 459
 Рентгеновское обозначение термов 463
 Ридберга постоянная 34
 Ротатор 215
 Ротационный спектр 223, 482
 Рэдже полюса 611
 Рэлея — Джинса формула 24
- Самосопряженность оператора 148
 Сверхпроводимость 141
 Сверхтонкая структура 384, 386
 Свободное движение частицы 84
 — — — в сферических координатах 236
 Связь jj в атоме 423, 437, 438, 464, 561
 — — в ядре 551
 — Ресселя — Саундерса (LS -связь) в атоме 422, 423, 427, 437, 464, 493
 Сдвиг уровней в атоме водорода 375, 395
 — — в легких мю-мезоатомах 387
 Сердцевина Ястрова 518, 521
 Серия спектральная Бальмера 34, 253
 — вторая побочная 455, 458
 — главная 455, 458
 — Лаймена 34, 253
 — Пашена 35, 254
 — первая побочная 455, 458
 — Пикеринга 264
 — фундаментальная 455, 458
 Сила Лоренца 18
 — лучистого трения Планка 152, 619
 — осциллятора 287
 — поляризации 449
 — электрического изображения 129
 Сильное взаимодействие 579
 — обращение времени 341
 Силы Ван-дер-Ваальса 501, 503
 Символ Кронекера — Вейерштрасса 77
 Симметричная спиновая функция 493, 496
 Симметричные и антисимметричные состояния 419
 — решения 112, 421, 486, 489, 492
 Скалярный вариант мезонной теории 520
- Скобки Пуассона квантовые 159
 — — классические 157
 Скорость групповая 63
 — фазовая 61, 65
 Скрытые параметры 146
 Слабое взаимодействие 579, 593
 — обращение времени 341
 Смешанный ансамбль 98
 Собственная проводимость 139
 Собственные значения 77, 82
 функции 77, 83, 201
 — — в атоме водорода 244
 — — гелия в нулевом приближении 431
 — — в приближении ВКБ 110
 — — осциллятора 185
 — — ротатора 215
 Собственный магнитный момент нуклонов 512
 Соотношения неопределенности 64, 68, 150, 153, 156
 — — в теории флуктуации 621
 — — для времени — см. *Четвертое соотношение неопределенности*
 Состояние с отрицательной энергией 388
 — термодинамического равновесия 171
 Сохранения законы — см. *Законы сохранения*
 Спектр излучения водородоподобных атомов 251
 — — двухатомной молекулы 229
 — — осциллятора 191
 — — ротатора 224
 — — щелочных металлов 455, 436
 Спектр торможения 459
 Спектральная плотность излучения 23
 Спектральные линии серий — см. *Серии*
 — термы — см. *Термы*
 Спин 327
 — изотопический 523, 598, 603
 — и симметрия состояний 493
 Спиновые эффекты 453
 Спин-орбитальное взаимодействие 350, 423, 493, 518
 Спиральность нейтрино и антинейтрино 583
 Спонтанное деление ядер 517, 534, 547
 — излучение 503, 575
 Спонтанный распад элементарных частиц 593, 603
 Среднее значение кинетической энергии 162
 — — оператора 145

- Средняя квадратичная ошибка 155
 — энергия свободных электронов в металле 126, 127
 Стабильность ядер 531
 Статистика Бозе — Эйнштейна 420, 572, 574
 — Максвелла — Больцмана 8
 — Ферми — Дирака 420, 493, 572
 Статистическая интерпретация волновой теории по Борну 66, 149, 542
 Статистические закономерности 145
 Стефана — Больцмана закон 27, 460
 Странность 601
 Странные частицы 593
 Строение ядра 511
 Структура нуклонов 610
 Субчастица 612
 Субчастицы Гелл-Манна — Цвейга (кварки) 614
 — Саката 614
 Суперпозиция состояний 97
 Сферические координаты — см. *Координаты*
 Сферически-симметричный гармонический осциллятор 550
 Схема Гелл-Манна — Нишиджимы классификации элементарных частиц 594, 599
 «Сшивание» решений 81, 106, 118
 Температура вырождения 127
 Теорема Людерса — Паули 342
 — Неймана 146, 149
 — Нернста 232
 — о «перебросе» производной 147
 — Эренфеста 160, 161
 Теория валентности 497
 — возмущений нестационарная 554
 — применительно к вырожденному случаю 273
 — стационарная 268, 401, 483
 — иона водорода 482
 — Косселя 497
 — многоэлектронных атомов 400
 — молекулы водорода 490
 — — с учетом спиновых состояний 493
 — Паули — Ферми бета-распада 582
 — представлений (элементарные сведения) 143
 — ротатора с учетом спиновых эффектов 332
 — сложного атома 437
 — теплоемкости Дебая 231, 232
 — фотонов Эйнштейна 28
 Теплоемкость газов 234
 Термы рентгеновские 463
 — спектральные 35, 217
 Технеций 467
 Томаса — Ферми — см. *Уравнение*
 Тонкая структура по теории Дирака 357, 359
 — — — — Зоммерфельда 53
 — — — — релятивистской теории Клейна — Гордона 359
 — — спектра водородоподобного атома 352
 — — , экспериментальная проверка 360
 Точка поворота 101
 Транзисторы 140
 Трансурановые элементы 476, 532
 Тритиевая вода 263
 Третий 263, 512
 Туннельный эффект 116, 120, 122
 — — в оптике 122
 Тяжелая вода 262
 Тяжелый водород 262
 Уленбека и Гаудсмита гипотеза о спине электрона 311
 Ультрамикроскоп 67
 Ультрафиолетовая катастрофа 24
 Унитарные преобразования 616
 Упругое рассеяние частиц 554
 Уравнение Вейля для нейтрино 344
 — Гамильтона — Якоби полное 98, 99
 — — — стационарное 99
 — Дирака 12, 318, 322, 353
 — — в приближенной форме 345
 — — для свободной частицы 337
 — — и его применимость для движения протона и нейтрона 379
 — — при наличии электромагнитного поля 322
 — Клейна — Гордона 293, 294, 519
 — непрерывности 94
 — Паули 312, 347
 — Пуассона 89
 — типа Штурм — Лиувилля 77
 — Томаса — Ферми 440
 — — и его применение к периодической системе 471
 — — и его решение методом Ритца 443
 — Хартри 415
 — Хартри — Фока 413, 446
 — Шредингера 12, 76, 91, 352
 — — для дейтрона 524
 — — — ионизованной молекулы водорода 482

- — полное 91, 92
 — — полное с учетом вторично квантованного поля фотонов 575
 — —, полученное вариационным методом 412
 — — стационарное 76
 Уравнения Максвелла 7
 — Максвелла — Лоренца 16, 17
 Уровень Ферми 125, 127, 132
 Условие Вульфа — Брэггов 59
 — Лоренца 18
 — ортогональности 78
 — ортонормированности 77, 186
 — — для шаровых функций 208
 Условия нормировки 76
 Условно-периодическое движение 46, 52
 Учение Лапласа о детерминизме 69
 Учет движения ядра 261
 — релятивистских и спиновых эффектов в атоме водорода 353
- Фазовая скорость** 61
Фермий 476
Ферми-уровень 125, 126, 132
Ферромагнетизм 500
Ферромагнитные элементы 468
Флуктуации видимого света — см. *Опыты Вавилова*
 — электромагнитного вакуума 152
Фока — Хартри уравнение — см. *Уравнение*
Формула Бальмера 34, 49
 — Зоммерфельда для тонкой структуры 53, 360
 — Планка 25
 — Рэлея — Джинса 24, 26
Форта диаграмма — см. *Диаграмма*
Фотон, теория Эйнштейна 29
Фотозффект 29
Франций 468
Френкель, теория вращающегося электрона 350
Френкеля — Томаса поправка 350
Фундаментальная серия — см. *Серия*
Функция Бесселя 165
 — Гамильтона 19
 — действия 99
 — Лагранжа 18, 44
 — распределения 145
 — Эйри 165
Фурье-образ функции 144
- Характеристическая температура Дебая** 233
- Характеристические спектры атомов** 461
Химическая валентность 477, 497
Холодная эмиссия 139
- Центр тяжести волнового пакета** 64, 147, 195
Центрально-симметричное поле 198
- Частица в потенциальной яме** 79
Частота ларморовой прецессии 192
 — механического колебания 46
Черенкова эффект — см. *Эффект*
Черное излучение 20
Четвертое соотношение неопределенности 74, 558
Четность состояния 335, 520, 611
Четырехрядные матрицы Дирака — см. *Матрицы*
Численное интегрирование уравнения Томаса — Ферми 445
Число электронов в оболочке 439
 — — в подоболочке 439
Чистый ансамбль 97
- Шаровые спиноры** 330, 353
 — функции 207, 211
Шредингера уравнение — см. *Уравнение Шредингера*
Штарк-эффект — см. *Эффект*
- Щелочные металлы** 447
- Эйнштейний** 476
Эйнштейновская критика копенгагенских взглядов 71
Эйнштейновский закон теплоемкости 231
Эквидистантные дублеты 458
Электромагнитный вакуум 172
Электрон 9, 36, 39, 589, 600
Электронвольт 125, 513
Электронная пушка 56
 — теория Лоренца 9, 16
 — — проводимости кристаллов 136
Электроно-позитронный вакуум 395
Электронные оболочки в атоме 468
Электронный газ металла 124
Электронный микроскоп 60
Электропроводность металлов 123
Элементарные частицы 589
Эллиптическая орбита — см. *Орбита*
Энгельс о сложных формах движения материи 70

- Энергетические уровни атомов щелочных металлов 446
 Энергетический спектр 77
 Энергия активации 545, 547
 — взаимодействия мезонного и нуклонного полей 521
 — диссоциации 225, 493
 — ионизации атома — см. *Ионизация*
 — нулевых колебаний 493
 — ротатора 216
 — связи 481
 — дейтрона 528
 — спин-орбитального взаимодействия 355
 — ядра 513, 514, 516
 Эрнфеста теоремы 160, 161
 Эрмита полиномы 184
 — —, асимптотическое выражение 196
 Эрмитовы матрицы — см. *Матрицы*
 Эффект Зеемана аномальный 363
 — — нормальный 302, 305, 368
 — Комптона 30
 — Мёссбауэра 585, 588
 — Пашена — Бака 367, 369, 371
 — Холла 139
 — Черенкова 399
 — Штарка 275, 280, 507
 Эффективная потенциальная энергия 53
 Эффективное главное квантовое число — см. *Квантовое число*
 — сечение дифференциальное 43, 54, 560, 562
 — — «Захвата» 54
 — — полное 563
 — упругого рассеяния 557, 559, 563, 566
 Ядерные оболочки 541
 — силы 517
 — — Бартлетта 522
 — — Вигнера 522
 — — Гейзенберга 520, 522, 523
 — — Майорана 520, 522, 523
 — —, псевдоскалярное поле 521
 — —, тензорное взаимодействие 522
 — энергетические уровни 551, 552
 Ядерный магнетон — см. *Магнетон*
 Ядра модель капельная 541, 542
 — — обобщенная 553
 — — оболочечная 548
 — — оптическая 554
 Яма потенциальная 80, 82, 526, 567

О Г Л А В Л Е Н И Е

Предисловие	3
Введение	6

Часть I. Нерелятивистская квантовая механика

§ 1. Квантовая теория света	16
а. Основные положения электронной теории	—
б. Классическая теория равновесного излучения	20
в. Формула Планка	25
г. Теория фотонов Эйнштейна	28
§ 2. Квантовая теория Бора	34
а. Основные сведения о свойствах атомов	—
б. Классическая модель атома	35
в. Опыты Резерфорда. Строение атома по Резерфорду	38
г. Теория Бора	44
§ 3. Волновые свойства частиц	54
а. Волны де-Бройля	—
б. Экспериментальное обнаружение волновых свойств частиц	56
в. Волновые пакеты. Групповая и фазовая скорости	60
§ 4. Стационарное уравнение Шредингера	74
а. Получение стационарного уравнения Шредингера	75
б. Условия, налагаемые на волновые функции. Собственные значения и собственные функции	76
в. Частица в потенциальной яме	79
г. Свободное движение частиц. Нормировка волновых функций в случае непрерывного спектра	84
д. Основные свойства δ -функции. Нормировка непрерывного спектра на δ -функцию	87
§ 5. Полное уравнение Шредингера	91
а. Переход к полному уравнению Шредингера	—

б.	Плотность заряда и плотность тока. Квантовые ансамбли	94
в.	Связь между теорией Шредингера и классическим уравнением Гамильтона — Якоби	98
г.	Приближенный метод Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна (метод ВКБ)	101
§ 6.	Основы квантовой теории проводимости	116
а.	Прохождение частиц сквозь потенциальный барьер (туннельный эффект)	—
б.	Туннельный эффект как проявление волновых свойств	120
в.	Движение электронов в металле	123
г.	Вырывание электронов из металла. Холодная эмиссия	129
д.	Контактная разность потенциалов	132
е.	Движение электронов в периодическом электрическом поле (одномерная модель Кронига — Пенни)	133
ж.	Основы электронной теории проводимости кристаллов	136
§ 7.	Статистическое толкование квантовой механики	141
а.	Некоторые сведения из теории линейных операторов	—
б.	Элементы теории представлений	143
в.	Средние значения операторов	145
г.	Статистическая интерпретация волновой функции	149
§ 8.	Средние значения операторов. Изменение физических величин со временем	153
а.	Вывод соотношения неопределенности	—
б.	Классические и квантовые скобки Пуассона	157
в.	Теоремы Эренфеста	160
г.	Переход от квантовых уравнений движения к классическим	161
§ 9.	Элементарная теория излучения	169
а.	Спонтанные и вынужденные переходы	—
б.	Определение вероятностей спонтанных и вынужденных переходов	171
§ 10.	Линейный гармонический осциллятор	177
а.	Осциллятор в теории Бора	178
б.	Собственные функции и собственные значения энергии	180
в.	Нулевая энергия гармонического осциллятора и соотношение неопределенности	187
г.	Правила отбора. Интенсивность излучения	189
§ 11.	Общая теория движения частицы в центрально-симметричном поле	198
а.	Уравнение Шредингера в сферических координатах	—
б.	Разделение переменных. Собственные функции	201
в.	Физический смысл квантовых чисел l и m . Момент количества движения	208
г.	Анализ полученных результатов	212

§ 12. Ротатор	215
а. Собственные функции ротатора	—
б. Правила отбора	219
в. Спектры двухатомных молекул	221
г. Элементарная теория теплоемкости одноатомных и двухатомных веществ	231
§ 13. Теория водородоподобного атома (проблема Кеплера)	239
а. Собственные функции и собственные значения энергии	—
б. Полуклассическая интерпретация основных результатов квантово-механической теории водородоподобного атома	248
в. Правила отбора. Спектр излучения водородоподобных атомов	251
г. Движение частицы в кулоновском поле в случае непрерывного спектра	254
д. Учет движения ядра	261
§ 14. Стационарная теория возмущений	268
а. Основные идеи решения задач по теории возмущений	—
б. Основные уравнения теории возмущений	269
в. Невырожденный случай	271
г. Вырожденный случай	273
д. Эффект Штарка	275
е. Основы классической теории дисперсии	281
ж. Квантовая теория дисперсии	284
з. Комбинационное рассеяние света	289

Часть II. Релятивистская квантовая механика

§ 15. Скалярное релятивистское волновое уравнение Клейна — Гордона	293
а. Классическая релятивистская механика и уравнение Клейна — Гордона. Релятивистская инвариантность	—
б. Плотность заряда и тока	294
в. Релятивистская теория атома водорода (без учета спина электрона)	296
§ 16. Теория движения электрона в магнитном поле. Спин электрона	301
а. Классическая теория эффекта Зеемана	302
б. Эффект Зеемана в нерелятивистской теории Шредингера	305
в. Экспериментальное открытие спина электрона	308
г. Уравнение Паули	312
§ 17. Релятивистское волновое уравнение Дирака	318
а. «Линейризация» оператора энергии. Матрицы Дирака, их связь с матрицами Паули	—
б. Уравнение Дирака. Плотность заряда и тока	322

в.	Трансформационные свойства волновой функции при преобразованиях Лоренца и пространственных вращениях	324
§ 18.	Дираковская теория движения электрона в поле центральных сил	326
а.	Орбитальный, спиновый и полный моменты количества движения. Законы сохранения	—
б.	Свойства оператора полного момента. Квантование полного момента. Векторная модель	327
в.	Движение в поле центральных сил с учетом спиновых эффектов. Теория ротатора	332
г.	Четность состояния	335
д.	Решение уравнения Дирака для свободной частицы	337
§ 19.	Уравнение Дирака в приближенной форме	345
§ 20.	Тонкая структура спектра водородоподобного атома	352
а.	Постановка вопроса	—
б.	Учет релятивистских и спиновых эффектов	353
в.	Исследование тонкой структуры по теории Дирака	357
г.	Экспериментальная проверка теории тонкой структуры	360
д.	Аномальный эффект Зеемана	363
е.	Случай сильных магнитных полей. Эффект Пашена — Бака	367
§ 21.	Влияние структуры ядра на атомные спектры	373
а.	Постановка вопроса	—
б.	Учет конечных размеров ядра	—
в.	Мезоатомы	375
г.	Применимость уравнений Дирака для описания движения нейтрона и протона	379
д.	Экспериментальное определение магнитного момента нейтрона и протона	381
е.	Сверхтонкая структура спектра атома водорода	384
§ 22.	Понятие об электронно-позитронном и электромагнитном вакуумах	387
а.	Дираковская теория «дырок». Открытие позитрона	—
б.	Лэмбовский сдвиг уровней атомных электронов	391
в.	Электронно-позитронный вакуум	395
г.	Понятие о методах регуляризации	398
§ 23.	Теория атома гелия без учета спиновых состояний	400
а.	Основные положения теории многоэлектронных атомов	—
б.	Решение задачи атома гелия методом теории возмущений	401
в.	Кулоновское взаимодействие электронов	407
г.	Вариационный метод	408
д.	Получение уравнения Шредингера вариационным методом	412

е. Метод самосогласованного поля Хартри — Фока	413
ж. Исследование обменной энергии	415
§ 24. Основы теории многоэлектронных атомов с учетом спиновых состояний	419
а. Симметричные и антисимметричные состояния	—
б. Статистики Ферми — Дирака и Бозе — Эйнштейна. Принцип Паули	420
в. Сложение моментов. Связь Рессела — Саундерса. Коэффициенты Клебша — Жордана	422
г. Волновая функция атома гелия с учетом спина	427
д. Пара- и ортогелий	432
е. Энергетический спектр атома гелия	—
§ 25. Оптические спектры щелочных металлов	436
а. Общие сведения о строении сложных атомов	—
б. Статистический метод Томаса — Ферми	440
в. Решение задачи Томаса — Ферми вариационным методом Ритца	443
г. Энергетические уровни атомов щелочных металлов	446
д. Основные серии	453
е. Мультиплетная структура спектральных линий	456
§ 26. Периодическая система элементов Менделеева	459
а. Рентгеновские спектры атомов	—
б. Характеристические спектры атомов и строение их внутренних оболочек	461
в. Мультиплетная структура рентгеновских спектров	464
г. Открытие периодического закона Менделеева	466
д. Заполнение электронных оболочек	468
е. Применение метода Томаса — Ферми к теории периодической системы элементов	471
ж. Периодичность свойств элементов	473
§ 27. Теория простейших молекул	477
а. Основные виды химической связи	—
б. Гетерополярные молекулы	—
в. Ион молекулы водорода	482
г. Гомеополярные атомные молекулы	490
д. Спин и симметрия состояний	493
е. Теория валентности	497
ж. Ферромагнетизм	500
з. Силы Ван-дер-Ваальса	501
и. Понятие о квантовых усилителях и генераторах	503

Часть III. Основы ядерной физики и теории элементарных частиц

§ 28. Некоторые вопросы теории ядра	511
а. Основные сведения об атомном ядре	—
б. Общие свойства ядерных сил	517
в. Понятие о мезонной теории ядерных сил	518
г. Элементарная теория дейтрона	524
д. Стабильность ядер	531
е. Альфа-распад	535
ж. Капельная модель ядра	541
з. Оболочечная модель ядра	548
§ 29. Упругое рассеяние частиц	554
а. Нестационарная теория возмущений	—
б. Эффективное сечение упругого рассеяния	557
в. Рассеяние на юкавском силовом центре	561
§ 30. Понятие о вторичном квантовании	569
а. Вторичное квантование уравнения Шредингера	—
б. Квантование уравнений Максвелла	574
в. Спонтанное излучение	575
г. Бета-распад	577
д. Несохранение четности при распаде частиц	582
е. Гамма-излучение. Эффект Мёссбауэра	585
ж: Приложение эффекта Мёссбауэра	586
§ 31. Элементарные частицы	589
а. Общая характеристика элементарных частиц	—
б. Основные характеристики и систематика элементарных частиц	594
в. Спонтанный распад частиц	603
Предметный указатель	622

*Арсений Александрович Соколов
Юрий Михайлович Лоскутов
Игорь Михайлович Тернов*

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Редактор *Т. В. Михалкевич*
Переплет художника *Б. М. Рябышева*
Художественный редактор *А. В. Сафонов*
Технический редактор *М. И. Смирнова*
Корректор *Г. С. Попкова*

* * *

Сдано в набор 16/XI 1964 г. Подписано к печати 29/III 1965 г. 60×90¹/₁₆. Печ. л. 40+ +вкл. 0,45 л. Уч.-изд. л. 37,26+вкл. 0,23. Тираж 17 тыс. экз. А03765 (Тем. план 1965 г. № 37)

* * *

Издательство «Просвещение» Государственного комитета Совета Министров РСФСР по печати. Москва, 3-й проезд Марьиной рощи, 41

Ленинградская типография № 1 «Печатный Двор» имени А. М. Горького «Главполиграфпрома» Государственного комитета Совета Министров СССР по печати, Гатчинская, 26. Заказ № 1368
Цена без переплета 1 р. 14 к.
переплет 15 к.