



Уральский  
федеральный  
университет

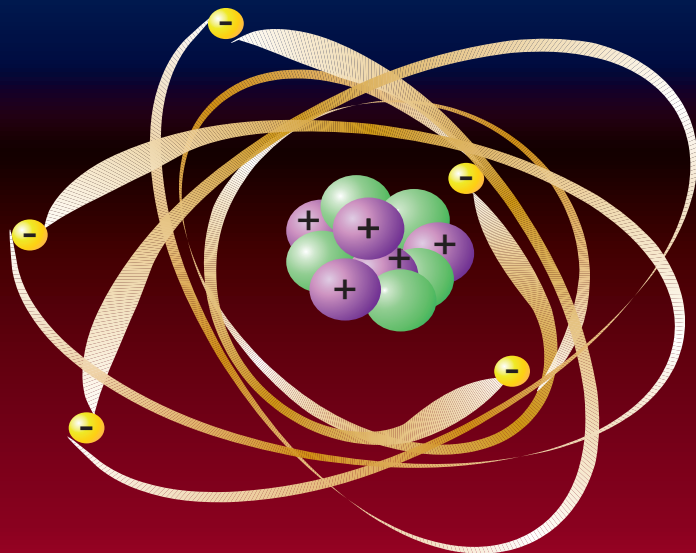
имени первого Президента  
России Б.Н.Ельцина

Физико-  
технологический  
институт

А. Н. КИСЛОВ

# АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

Учебное пособие





Министерство образования и науки Российской Федерации  
Уральский федеральный университет  
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

А. Н. Кислов

# Атомная и ядерная физика

Рекомендовано методическим советом  
Уральского федерального университета  
в качестве **учебного пособия** для студентов вуза,  
обучающихся по направлению подготовки  
18.03.01 «Химическая технология»

Екатеринбург  
Издательство Уральского университета  
2017

УДК 539.1(075.8)

ББК 22.38я73

К44

Рецензенты: кафедра физики факультета геологии и геофизики ФГБОУ ВО «Уральский государственный горный университет» (завкафедрой д-р физ.-мат. наук, проф. *И. Г. Коршунов*); ст. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук *С. Л. Скорняков* (Институт физики металлов УрО РАН)

Научный редактор — д-р физ.-мат. наук, проф. *И. А. Вайнштейн*

**Кислов, А. Н.**

К44 Атомная и ядерная физика : учеб. пособие / А. Н. Кислов. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2017. — 271, [1] с.  
ISBN 978-5-7996-1992-3

Данное учебное пособие предназначено для студентов, изучающих дисциплину «Атомная и ядерная физика». Оно служит дополнением к существующим учебным пособиям по атомной и ядерной физике. В нем рассматриваются различные вопросы из этой области физики. Изложение учебного материала ведется с учетом тех знаний, которые студенты получили при изучении общей физики и высшей математики.

Библиогр.: 9 назв. Рис. 82.

УДК 539.1(075.8)

ББК 22.38я73

ISBN 978-5-7996-1992-3

© Уральский федеральный университет, 2017

## ПРЕДИСЛОВИЕ

---

**Н**астоящее учебное пособие основано на семестровом курсе лекций под названием «Атомная и ядерная физика», который читался студентам физико-технологического института в ФГАОУ ВПО «УрФУ имени первого Президента России Б. Н. Ельцина». В нем обсуждаются вопросы из разных, но связанных друг с другом областей физики — атомной и ядерной физики. В атомной физике изучаются строение и свойства атомов, а также процессы, в которых они участвуют. Атомная физика оперирует объектами, линейные размеры которых около  $10^{-10}$  м, называемых *микроскопическими объектами* (микрочастицами). В ядерной физике рассматриваются структура и свойства атомных ядер (являются микрочастицами с размерами около  $10^{-15}$  м) и взаимопревращения атомных ядер, которые совершаются как в результате радиоактивных распадов, так и в результате ядерных реакций.

Изложение материала ведется с учетом имеющихся у студентов знаний, полученных при изучении курса общей физики. Данное пособие служит дополнением к существующим учебным пособиям по атомной и ядерной физике, в котором на простом, но достаточно содержательном уровне рассматриваются многие важные эксперименты и гипотезы, приведшие к становлению современной атомной и ядерной физики.

Содержание первой части учебного пособия, посвященного атомной физике, построено с учетом исторического пути развития этой области физики. Вначале рассматривается становление

атомистического представления о веществе и квантового подхода к излучению. Затем освещаются вопросы, связанные с моделями строения атома. В следующих нескольких главах обсуждаются волновые свойства вещества и основы квантовой механики. После этого рассматриваются различные виды спектров: оптические, рентгеновские и молекулярные. Во второй части представлен учебный материал по физике атомного ядра.

Необходимо отметить, что при написании некоторых базовых формул учитывается то, что в атомной физике используется наряду с Международной системой единиц СИ предшествующая ей система единиц СГС. Соотношения единиц системы СИ и соответствующих единиц СГС приведены в таблице.

Важнейшие физические величины и их единицы измерений

Величина	Система единиц	
	СИ	СГС
Время	секунда (с)	с
Масса	килограмм (кг)	грамм (г) = $10^{-3}$ кг
Длина	метр (м)	сантиметр (см) = $10^{-2}$ м
Скорость	м/с	см/с = $10^{-2}$ м/с
Электрический заряд	кулон (Кл)	СГС-ед. заряда = $10/c$ Кл
Сила	ньютон (Н)	дина (дин) = $10^{-5}$ Н
Энергия, работа	джоуль (Дж)	эрг = $10^{-7}$ Дж
Сила тока	ампер (А)	СГС-ед. = $10/c$ А
Напряжение, разность потенциалов	вольт (В) = Дж/Кл	СГС-ед. $\approx 300$ В
Напряженность электрического поля	В/м	СГС-ед. $\approx 2,99 \cdot 10^4$ В/м
Напряженность магнитного поля	А/м	эрстед (Э) = $1000/(4\pi)$ А/м
Магнитная индукция	тесла (Тл)	гаусс (Гс) = $10^{-4}$ Тл

Примечание:  $c$  — скорость света в вакууме, примерно равная  $2,99 \cdot 10^8$  м/с ( $2,99 \cdot 10^{10}$  см/с).

Учебное пособие может использоваться студентами в качестве основного при самостоятельной работе, а также при подготовке к экзаменам.

# 1. АТОМИСТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ О ВЕЩЕСТВЕ

---

## 1.1. Ряд доказательств атомного строения вещества

**И**дея о том, что вещество состоит из очень маленьких, неделимых частиц (атомов), появилась достаточно давно. Атомизм встречался уже в трудах древнегреческих философов Левкиппа и его ученика Демокрита и носил в то время умозрительный характер. Научно обоснованное атомистическое учение стало зарождаться значительно позднее, в XVIII—XIX веках.

К последователям этого учения можно отнести русского ученого М. Ломоносова, который в 1741 г. сформулировал положения созданной им корпускулярной теории строения вещества. По его представлениям любое вещество состоит из мельчайших, физически неделимых частиц. Свойства этих частиц определяют свойства самого вещества. Но в то время не было возможности экспериментальным путем проверить и подтвердить атомно-кинетическую концепцию Ломоносова. Для формирования и развития атомистической теории не хватало определенных знаний, которые были получены лишь в XIX веке.

В 1803 г. Дж. Дальтоном был открыт *закон кратных отношений*, который утверждал, что массы элементов, входящих в состав химических соединений, относятся между собой как небольшие це-

лые числа. Кратность в весовых отношениях реагирующих элементов говорит о дискретном строении вещества.

В 1808 г. Ж. Гей-Люссак, измеряя объемы газов, вступающих в реакцию и образующихся в результате реакции, пришел к обобщению, известному как *закон простых объемных отношений*. Согласно этому закону объемы вступающих в реакцию газов и образующихся газообразных продуктов относятся друг к другу как небольшие целые числа. Таким образом, он распространил кратность с весовых отношений на объемные отношения химически взаимодействующих газов.

В 1811 г. А. Авогадро, объясняя закон простых отношений между объемами газов, установил следующий закон: в равных объемах любых газов, взятых при одинаковой температуре и одинаковом давлении, содержится одно и то же количество молекул.

Перечисленные законы были важнейшими этапами в развитии атомистической теории строения вещества.

Другим значительным шагом в становлении атомистических представлений о веществе было открытие дискретной структуры электрического заряда (количества электричества). Идея о существовании в веществе частиц, которые переносят электрический заряд, стала научной гипотезой в 1833 г., когда М. Фарадей открыл *два закона об электролизе*. Эти законы утверждали, что, во-первых, масса вещества, осажденного на электроде при электролизе, прямо пропорциональна количеству электричества, переданного на этот электрод, во-вторых, для данного количества электричества масса химического элемента, осажденного на электроде, прямо пропорциональна молярной массе элемента.

Из опытов по электролизу был сделан вывод о дискретности электрического заряда и возникло предположение о наличии в веществе отрицательных и положительных элементарных носителей (ионов), названных *анионами* и *катионами* соответственно. Более подробная информация о свойствах этих носителей была получена при изучении процессов переноса электрического заряда в газах.



В 1858 г. Ю. Плюккер, работая с разрядной трубкой (рис. 1.1), заметил, что если в ней создать низкое давление газа ( $\approx 10^{-3}$  мм рт. ст.), а к металлическим электродам (катоде  $K$  и аноду  $A$ ) приложить высокое напряжение ( $\approx 200$  В), то из катода  $K$  начнет выходить излучение.

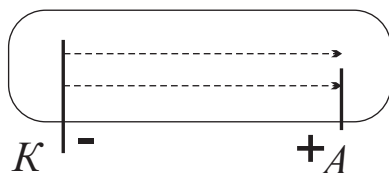


Рис. 1.1. Газоразрядная трубка для катодных лучей

Это излучение обладает следующими свойствами:

- 1) распространяется прямолинейно, в направлении нормали к поверхности катода;
- 2) не меняет направление распространения при изменении формы или положения анода;
- 3) попадая на стекло, вызывает его люминесценцию;
- 4) вызывает свечение газа на своем пути.

В 1869 г. И. Гитторф обнаружил, что указанное излучение отклоняется магнитным полем, а в 1876 г. О. Гольдштейн показал, что оно отклоняется также электрическим полем, и назвал его «*катодными лучами*».

В 1886 г. Гольдштейн, используя разрядную трубку с катодом  $K$ , в котором имелось небольшое отверстие (рис. 1.2), и создавая газовый разряд при низком давлении, наблюдал за отверстием светящуюся область. В дальнейшем было установлено, что это свечение вызывается потоком положительно заряженных частиц, который проходит через разреженный газ. Позднее выяснилось, что частицы представляют собой поток ионов, летящих с различными скоростями. Такое излучение назвали *канальными лучами*.

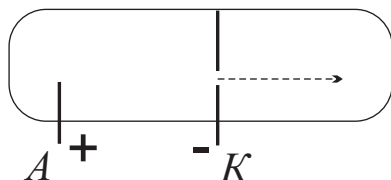


Рис. 1.2. Разрядная трубка для каналовых лучей

В 1895 г. Ж. Перрен, исследуя катодные лучи, показал, что они являются потоком частиц (корпускул) и несут отрицательный электрический заряд. В 1897 г. Дж. Томсон открыл частицу катодных лучей — *электрон*, который является носителем минимальной порции отрицательного электрического заряда. Этот год принято считать годом рождения электрона. Термин «электрон» ввел в обращение в 1891 г. Дж. Стоней для обозначения заряда одновалентного иона.

Томсон смог не только доказать корпускулярную природу катодных лучей, но и измерить отношение электрического заряда к массе (*удельный заряд*) электрона. Это отношение примерно в 1836 раз больше, чем для иона водорода. Отсюда следовало, что электрон может являться составной частью атома, а это привело к пересмотру представления о неделимости атома. Для подтверждения этого предположения требовалось измерить заряд частиц катодных лучей.

Прямые измерения величины электрического заряда электрона удалось выполнить в 1911 г. Р. Милликену. Он проводил опыты по наблюдению за движением маленькой капли масла в электрическом поле и обнаружил, что величина заряда капли всегда кратна некоторому минимальному заряду, который и равен величине заряда электрона. Таким образом, Милликен открыл фундаментальное свойство электрического заряда — его дискретность.

## 1.2. Заряженная нерелятивистская частица в электрическом и магнитном полях

Рассмотрим заряженную частицу, характеризуемую двумя параметрами — зарядом  $q$  и массой  $m$ , которая движется со скоростью  $\vec{v}$ . Допустим в области ее движения присутствуют постоянные во времени и однородные в пространстве электрическое поле с напряженностью  $\vec{E}$  и магнитное поле с индукцией  $\vec{B}$ . Эти поля воздействуют на частицу с силой  $\vec{F}_L$ , которую называют *силой Лоренца*. Данная сила имеет две составляющие — электрическую  $\vec{F}_e$ , обусловленную существованием электрического поля и магнитную  $\vec{F}_m$ , связанную с магнитным полем:

$$\vec{F}_L = \vec{F}_e + \vec{F}_m = q\vec{E} + q[\vec{v} \times \vec{B}] \quad (\text{в системе СИ}). \quad (1.1a)$$

$$\vec{F}_L = \vec{F}_e + \vec{F}_m = q\vec{E} + \frac{q}{c}[\vec{v} \times \vec{B}] \quad (\text{в системе СГС}), \quad (1.1б)$$

где  $c$  — скорость света в вакууме. В векторном произведении векторы  $\vec{v}$ ,  $\vec{B}$  и  $\vec{F}_m$  образуют правую систему.

Если частица движется с нерелятивистской скоростью, которая значительно меньше скорости света ( $v \ll c$ ), то согласно второму закону Ньютона для нее можно записать уравнение движения, имеющего в векторной форме следующий вид:

$$\vec{F}_L = m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = m \ddot{\vec{r}}, \quad (1.2)$$

где  $\ddot{\vec{r}}$  — ускорение частицы.

Для системы единиц СГС это уравнение переписется в виде

$$\ddot{\vec{r}} = \frac{q}{m} \left( \vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v} \times \vec{B}] \right). \quad (1.3)$$

Удельный заряд  $q/m$  частицы, т. е. отношение заряда  $q$  частицы к ее массе  $m$  является одним из параметров данного дифференциального уравнения. Следовательно, исследуя движение частицы в электрическом и магнитном полях, можно определить значение ее удельного заряда  $q/m$ . При условии, что известно значение заряда  $q$  частицы, сведения об удельном заряде позволяют найти ее массу  $m$ .

Магнитная составляющая  $\vec{F}_m$  силы Лоренца  $\vec{F}_L$  всегда перпендикулярна скорости  $\vec{v}$  частицы, поэтому работа  $A$  этой составляющей по любому перемещению частицы равна нулю. Следовательно, в магнитном поле кинетическая энергия  $T_{\text{кин}}$ , а значит, и модуль  $v$  вектора скорости  $\vec{v}$  частицы изменяться не будут. Эти величины изменяются только за счет влияния электрического поля, связанного с составляющей  $\vec{F}_e$  силы Лоренца  $\vec{F}_L$ . При этом электростатическое поле является потенциальным и для него можем записать равенство:

$$\vec{E} = -\text{grad}\varphi(\vec{r}), \quad (1.4)$$

где  $\varphi(\vec{r})$  — потенциал электростатического поля,

$\text{grad} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$  — градиент в декартовой прямоугольной системе координат  $XYZ$ ,  $\vec{i}, \vec{j}$  и  $\vec{k}$  — орты (единичные векторы) по осям  $X$ ,  $Y$  и  $Z$  соответственно.

Посмотрим, как движется заряженная частица отдельно в электрическом и магнитном полях. Начнем с изучения закономерностей движения в электрическом поле, когда магнитная индукция  $\vec{B} = 0$ , а уравнение движения имеет вид

$$\ddot{\vec{r}} = \frac{q}{m} \vec{E}. \quad (1.5)$$

Дважды интегрируя уравнение (1.5) по времени  $t$ , получим закон движения частицы в виде изменения радиус-вектора  $\vec{r}$  во времени:

$$\vec{r}(t) = \frac{q}{2m} \vec{E}t^2 + \vec{v}_0 t + \vec{r}_0, \quad (1.6)$$

где  $\vec{v}_0$  и  $\vec{r}_0$  — скорость и радиус-вектор в момент времени  $t = 0$  (начальные условия) соответственно.

Обсудим два частных случая: продольное и поперечное электрическое поле относительно начальной скорости  $\vec{v}_0$  частицы.

Пусть частица с зарядом  $q$  движется в электростатическом поле, создаваемом, например, пластинами конденсатора, а вектор напряженности поля  $\vec{E}$  сонаправлен с вектором начальной скорости частицы  $\vec{v}_0$ . Ось  $X$  декартовой системы координат ориентируем в пространстве, как и вектор  $\vec{v}_0$ , а за начало координат возьмем точку влета частицы в поле. Переходя в декартову прямоугольную систему координат, можно написать

$$\vec{E} = (E, 0, 0),$$

$$\vec{v}_0 = (v_0, 0, 0),$$

$$\vec{r}_0 = (0, 0, 0).$$

Векторное уравнение движения (1.5) частицы запишем через три скалярных уравнения движения в проекциях на декартовы оси координат

$$\begin{cases} \ddot{x} = \frac{q}{m} E, \\ \ddot{y} = 0, \\ \ddot{z} = 0. \end{cases} \quad (1.7)$$

Из этой системы уравнений получаем закон движения частицы в виде зависимостей декартовых координат частицы от времени  $t$  (с учетом заданных начальных условий):

$$\begin{cases} x(t) = \frac{q}{2m} Et^2 + v_0 t, \\ y(t) = 0, \\ z(t) = 0. \end{cases} \quad (1.8)$$

Итак, в заданном электростатическом поле движение частицы прямолинейно и равноускоренно.

Обратимся к первому уравнению системы (1.7), которое умножим на  $mv_0$ . Принимая во внимание, что

$$v \frac{dv}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{v^2}{2},$$

рассматриваемое уравнение для момента времени  $t = 0$  преобразуем к виду

$$mv_0 \dot{v}_0 = \frac{d}{dt} \frac{mv_0^2}{2} = qEv_0 = -q \left. \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} \right|_{t=0} = -q \frac{d\varphi_0}{dt}.$$

Отсюда следует равенство  $\frac{d}{dt} \left( \frac{mv_0^2}{2} + q\varphi_0 \right) = 0$ . Оно означает, что

$$\left( \frac{mv_0^2}{2} + q\varphi_0 \right) = \text{const}.$$

Здесь первое слагаемое — это *кинетическая энергия*, а второе слагаемое — это *потенциальная энергия* частицы в начальный момент времени  $t = 0$ . Таким образом, пришли к закону сохранения *полной механической энергии*.

Допустим, в электрическом поле частица переместилась из точки с потенциалом  $\varphi_0$  в точку с потенциалом  $\varphi_1$ , тогда, введя *разность потенциалов*  $V = \varphi_0 - \varphi_1$ , получим выражение для изменения ее кинетической энергии:

$$\frac{mv_1^2}{2} - \frac{mv_0^2}{2} = qV \quad (\text{в системе СГС и СИ}). \quad (1.9a)$$

Если разность потенциалов  $V$  записывается в вольтах — единицах системы СИ, а масса  $m$ , скорость  $v$  и заряд  $q$  в единицах системы СГС, то применяется следующая формула:

$$\frac{mv_1^2}{2} - \frac{mv_0^2}{2} = \frac{qV}{300}. \quad (1.96)$$

Предположим, что частица с зарядом  $q$  движется в электростатическом поле  $\vec{E}$ , силовые линии которого перпендикулярны вектору начальной скорости частицы  $\vec{v}_0$ , как показано на рис. 1.3.

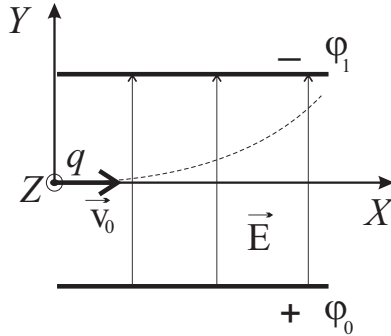


Рис. 1.3. Движение частицы в поперечном электрическом поле

Пусть направление координатной оси  $X$  совпадает с направлением вектора  $\vec{v}_0$ , а начало координат с точкой влета частицы в поле. Рассматривая движение в декартовой системе координат, напишем

$$\vec{E} = (0, E, 0),$$

$$\vec{v}_0 = (v_0, 0, 0),$$

$$\vec{r}_0 = (0, 0, 0).$$

Для этого случая векторное уравнение движения (1.5) частицы можно записать через три скалярных уравнения движения:

$$\begin{cases} \ddot{x} = 0, \\ \ddot{y} = \frac{q}{m} E, \\ \ddot{z} = 0. \end{cases}$$

Если эти уравнения дважды проинтегрировать по времени  $t$  с учетом начальных условий, то получим закон движения:

$$\begin{cases} x(t) = v_0 t, \\ y(t) = \frac{q}{2m} E t^2, \\ z(t) = 0. \end{cases}$$

Из первых двух уравнений данной системы несложно найти уравнение траектории частицы в плоскости  $XU$ :

$$y(x) = \frac{q}{2m} \frac{E}{v_0^2} x^2. \quad (1.10)$$

Очевидно, что движение происходит по кривой, имеющей вид параболы.

Исследуем движение заряженной частицы в магнитном поле, когда напряженность  $\vec{E} = 0$ , а уравнение движения имеет вид

$$\ddot{\vec{r}} = \frac{q}{mc} [\vec{v} \times \vec{B}] = \frac{q}{mc} \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ v_x & v_y & v_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix}. \quad (1.11)$$

Данное векторное уравнение эквивалентно системе трех скалярных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{v}_x = \frac{q}{mc} (v_y B_z - v_z B_y), \\ \dot{v}_y = \frac{q}{mc} (v_z B_x - v_x B_z), \\ \dot{v}_z = \frac{q}{mc} (v_x B_y - v_y B_x). \end{cases} \quad (1.12)$$

Интегрирование этой системы уравнений в общем случае представляет сложную математическую задачу.



Рассмотрим простой случай, когда движение частицы происходит в поперечном магнитном поле относительно начальной скорости  $\vec{v}_0$  частицы. Считаем, что вектор индукции  $\vec{B}$  магнитного поля направлен вдоль координатной оси  $Z$ , а вектор начальной скорости частицы  $\vec{v}_0$  перпендикулярен вектору магнитной индукции  $\vec{B}$  и направлен вдоль оси  $X$  декартовой системы координат (рис. 1.4).

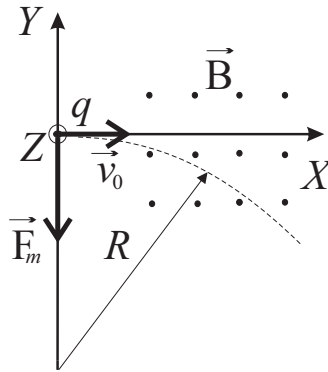


Рис. 1.4. Движение частицы в поперечном магнитном поле

Допустим, что частица начинает двигаться из начала координат. Тогда можно написать

$$\begin{aligned}\vec{B} &= (0, 0, B), \\ \vec{v}_0 &= (v_0, 0, 0), \\ \vec{r}_0 &= (0, 0, 0).\end{aligned}$$

Напомним, что направление магнитной составляющей  $\vec{F}_m$  силы Лоренца  $\vec{F}_L$  определяется по правилу левой руки.

При заданных условиях для заряженной частицы запишем систему уравнений:

$$\begin{cases} \dot{v}_x = \frac{q}{mc} v_y B = \omega_c v_y, \\ \dot{v}_y = -\frac{q}{mc} v_x B = -\omega_c v_x, \\ \dot{v}_z = 0, \end{cases} \quad (1.13)$$

где введено  $\omega_c = \frac{qB}{mc}$ , которое используется для обозначения *циклотронной частоты*.

Из последнего уравнения системы (1.13) с учетом начальных условий выходит, что  $z$ -я компонента скорости  $v_z$  равна нулю. Дифференцируя по  $t$  два первых уравнения этой же системы, приходим к системе однородных дифференциальных уравнений второго порядка с постоянными коэффициентами:

$$\begin{cases} \ddot{v}_x = -\omega_c^2 v_x, \\ \ddot{v}_y = -\omega_c^2 v_y. \end{cases}$$

Решения полученных уравнений ищем в виде  $v_x = e^{kt}$  и  $v_y = e^{kt}$  соответственно. Их подстановка дает:  $k_{1,2} = \pm i\omega_c$ , а значит, имеем два таких решения:

$$\begin{cases} v_x = C_1 \cos \omega_c t + C_2 \sin \omega_c t, \\ v_y = C_3 \cos \omega_c t + C_4 \sin \omega_c t. \end{cases}$$

Из первых двух уравнений системы (1.13) находим  $C_2 = C_3 = 0$ ,  $C_1 = -C_4$ . Из начальных условий следует, что  $C_1 = v_0$ . Таким образом, получаем

$$\begin{cases} v_x = v_0 \cos \omega_c t, \\ v_y = -v_0 \sin \omega_c t. \end{cases}$$

Интегрирование по времени  $t$  найденных выше трех уравнений для компонент скорости позволяет прийти к системе параметриче-

ских уравнений, определяющих положение частицы в пространстве в зависимости от времени  $t$  (с учетом начальных условий):

$$\begin{cases} x(t) = \frac{v_0}{\omega_c} \sin \omega_c t, \\ y(t) = \frac{v_0}{\omega_c} \cos \omega_c t - \frac{v_0}{\omega_c}, \\ z(t) = 0. \end{cases}$$

Данные уравнения задают окружность радиуса  $R = \frac{v_0}{\omega_c}$  на плоскости  $XU$ .

Найдем уравнение траектории частицы на плоскости  $XU$  в случае ее малого отклонения от первоначального направления движения, т. е.  $R \gg (y(t), x(t))$ . Для этого запишем уравнение окружности в виде:

$$y(x) = -R \mp R \sqrt{1 - \frac{x^2}{R^2}},$$

где первое слагаемое возникает из-за того, что  $\vec{r}_0 = (0, 0, 0)$ .

Разложим квадратный корень в ряд Маклорена по степеням  $x^2$ , ограничившись двумя членами:

$$y(x) \approx -R \mp R \left(1 - \frac{x^2}{2R^2}\right) = \begin{cases} -2R + \frac{x^2}{2R} \\ -\frac{x^2}{2R} \end{cases}.$$

Из анализа рис. 1.4 можно сделать заключение, что верным является нижнее равенство. Значит, траекторией частицы будет парабола, которая описывается уравнением:

$$y(x) = -\frac{q}{2m} \frac{B}{c v_0} x^2. \quad (1.14)$$

Закономерности движения заряженной частицы в электрическом и магнитном полях учитываются при создании многочисленных приборов и устройств, например, электронно-лучевых трубок, ускорителей частиц (циклотрон, синхротрон, синхрофазотрон и т. д.), масс-спектрографов.

### 1.3. Определение электрического заряда электрона

Исторически первым было определено значение удельного заряда  $q_e/m$  электрона и только затем установлено значение его электрического заряда  $q_e$ . Поэтому вначале рассмотрим экспериментальный метод, позволяющий найти отношение заряда к массе  $q_e/m$  электрона, который применялся в *опыте Томсона*. Указанный опыт опирался на закономерности движения заряженной частицы в электрическом и магнитном полях.

Томсон использовал вакуумную трубку с двумя электродами: катодом  $K$  и анодом  $A$  (рис. 1.5). Он измерял отклонение узкого пучка электронов, вылетающих из катода  $K$ , коллимированных отверстием анода  $A$  и проходящих через скрещенные поперечные электрическое  $\vec{E}$  и магнитное  $\vec{B}$  поля. Электроны, попадая на стекло трубки, вызывали люминесценцию, видимую глазом. Отклонение пучка, вызванное таким расположением электрического и магнитного полей (постоянных и однородных), происходит вдоль одного направления.

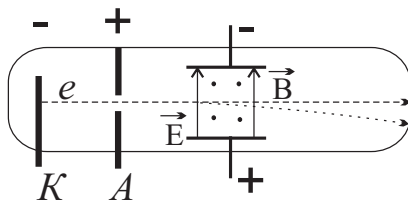


Рис. 1.5. Вакуумная трубка в опыте Томсона

Напомним, что отклонение электрона в поперечном электрическом поле зависит не только от его удельного заряда  $q_e/m$ , но и от квадрата его скорости  $v^2$  — (см. выражение (1.10)), а в поперечном магнитном поле — от величины скорости  $v$ , (см. выражение (1.14)). В связи с этим измерение отклонения в каком-либо одном поле не позволило бы определить отношение заряда  $q_e$  к массе  $m$  электрона.

В начале Томсон, подавая напряжение на пластины конденсатора, подбирал такую напряженность  $\vec{E}$  электрического поля, чтобы отклонение пучка электронов, обусловленное этим полем, компенсировало отклонение, связанное с магнитным полем. Вследствие этого пучок не отклонялся от первоначальной траектории. В этом случае из выражений (1.10) и (1.14) следует, что

$$\frac{E}{v_0} = \frac{B}{c}.$$

Это равенство позволяет найти величину начальной скорости  $v_0$  электронов.

Затем, после выключения магнитного поля и измерения отклонения пучка только в одном электрическом поле, вычислялся удельный заряд электрона по формуле (1.10). Результаты эксперимента показали, что  $q_e/m \approx -1,8 \cdot 10^{11}$  Кл/кг ( $\approx -5,3 \cdot 10^{17}$  СГС-ед. заряда/г).

Сейчас рассмотрим *опыт Милликена* по нахождению значения электрического заряда электрона. В данном опыте проводилось измерение заряда медленно испаряющейся маленькой капли масла с диаметром около 1 микрона, которая двигалась в пространстве между пластинами конденсатора, находящимися на расстоянии  $d$  друг от друга (см. рис. 1.6).

Суть опыта заключалась в следующем. Использовался конденсатор, внутри которого создавалось электрическое поле напряженности  $\vec{E}$ . В верхней пластине конденсатора имелось отверстие, через которое впрыскивались капли масла. Выбиралась одна из капель

и с помощью микроскопа проводилось наблюдение за ее движением в электрическом поле.

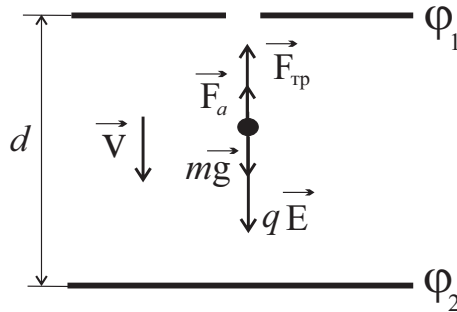


Рис. 1.6. Движение капли в опыте Милликена

При pulverизации капля масла приобретает электрический заряд величиной  $q$ . В конденсаторе она испытывает сложное воздействие, к ней приложены четыре силы:

1) сила тяжести  $m\vec{g} = \frac{4\pi}{3} R^3 \rho_m \vec{g}$ , где  $R$  — радиус капли,  $\rho_m$  —

плотность масла,  $\vec{g}$  — ускорение свободного падения;

2) электрическая составляющая силы Лоренца  $q\vec{E}$ ;

3) подъемная сила Архимеда  $\vec{F}_a = -\frac{4\pi}{3} R^3 \rho_v \vec{g}$ , где  $\rho_v$  — плотность воздуха;

4) сила трения (сопротивления воздуха)  $\vec{F}_{тр} = -6\pi\eta R\vec{v}$ , где  $\eta$  — коэффициент вязкости воздуха,  $\vec{v}$  — скорость капли.

Приложенные к капле масла силы образуют уравновешенную систему сил:

$$\frac{4\pi}{3} R^3 (\rho_m - \rho_v) \vec{g} - 6\pi\eta R\vec{v} + q\vec{E} = 0,$$

поэтому через некоторое время капля начинает двигаться равномерно, достигнув определенной скорости.

Во время опыта изменяли полярность на пластинах конденсатора, не меняя величины  $E = (\varphi_1 - \varphi_2) / d$  напряженности  $\vec{E}$  поля, и измеряли величину скорости падения  $v_1$  и скорости подъема  $v_2$  капли. Для этих скоростей можно записать уравнения с неизвестными  $R$  и  $q$ . Например, для величины скорости  $v_1$  падающей капли имеем уравнение

$$v_1 = \frac{2R^2(\rho_m - \rho_v)g}{9\eta} + \frac{qE}{6\pi\eta R}.$$

Если из уравнения для скорости  $v_1$  вычесть уравнение для  $v_2$ , то получим формулу для расчета радиуса капли:

$$R = \frac{3}{2} \sqrt{\frac{(v_1 - v_2)\eta}{(\rho_m - \rho_v)g}},$$

а если уравнения сложить, тогда приходим к формуле для определения величины заряда капли:

$$q = \frac{3\pi\eta R(v_1 + v_2)}{E}.$$

Анализ экспериментальных данных о заряде  $q$  капли показал, что его величина кратна одной и той же постоянной  $e$ , равной величине элементарного электрического заряда (заряда электрона). Итак, было установлено, что заряд электрона  $q_e = -e$  имеет численное значение  $-1,602 \cdot 10^{19}$  Кл ( $-4,8 \cdot 10^{-10}$  СГС-ед. заряда).

## 1.4. Основы релятивистской динамики частицы

### а. Зависимость массы от скорости

Зная удельный заряд частицы и величину самого заряда, можно вычислить массу частицы. В 1901 г. В. Кауфман, выполняя экс-

перименты по исследованию зависимости удельного заряда  $q_e/m$  электрона от величины его скорости  $v$ , обнаружил, что при скоростях, близких к скорости света  $c$ , масса  $m$  электрона зависит от его скорости  $v$ . Таким образом, экспериментальное доказательство такой зависимости было получено за четыре года до появления теории относительности, которая ее объясняет.

В опыте Кауфмана, как и в опыте Томсона, учитывались закономерности движения электрона в однородных и постоянных электрическом и магнитном полях. Источником быстрых электронов был кусок бромистого радия (радиоактивное вещество). Электроны, обладающие скоростью  $\vec{v}$ , пролетали через расположенные антипараллельно друг другу поперечные электрическое  $\vec{E}$  и магнитное  $\vec{B}$  поля и оседали на экране, расположенном в плоскости  $XU$  (рис. 1.7). Оба поля образовывали прямой угол с первоначальным направлением пучка электронов.

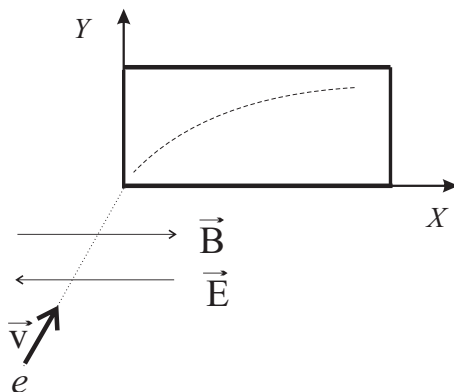


Рис. 1.7. Схема опыта Кауфмана

Отклонения электронов при таком расположении полей происходят во взаимно-перпендикулярных направлениях. Электроны в электрическом поле отклонялись в положительном направлении оси  $X$ , а в магнитном поле — в положительном направлении



оси  $Y$ . Отклонения электронов по осям  $X$  и  $Y$  на экране определяются равенствами:

$$x_{\text{э}} = \frac{\text{const } q_e}{v^2} \frac{q_e}{m},$$

$$y_{\text{м}} = \frac{\text{const } q_e}{v} \frac{q_e}{m}.$$

Так как разные электроны имеют различные скорости, то места их попадания на экран образуют определенную кривую линию. Этой кривой была бы парабола, если бы масса электронов не зависела от величины скорости:

$$\frac{y_{\text{м}}^2}{x_{\text{э}}} = \text{const } \frac{q_e}{m}.$$

В опыте Кауфмана экспериментальная кривая отличалась от параболы, особенно на участке, который соответствовал большим скоростям. Этот результат указывал на то, что масса электронов зависит от скорости их движения.

В 1904 г. Х. Лоренцом была впервые получена формула для вычисления массы тела в зависимости от его скорости:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (1.15)$$

где  $m$  — это релятивистская масса, а  $m_0$  — это масса покоя, т. е. масса тела при его скорости  $v$ , стремящейся к нулю.

Объяснение зависимости  $m(v)$  было дано теорией относительности, разработанной в 1905 г. А. Эйнштейном. По его теории зависимость массы от скорости является универсальным законом, не зависящим от свойств тел.

Физическую природу увеличения массы тела при росте скорости несложно понять, рассматривая случай малых скоростей  $v \ll c$ .

Раскладывая дробь перед массой покоя  $m_0$  в формуле (1.15) в ряд Маклорена по степеням  $v/c$  и ограничиваясь вторым слагаемым в разложении, запишем

$$m \approx m_0 \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} \right) = m_0 + \frac{mv^2}{2c^2}.$$

Здесь второе слагаемое — это добавка к массе покоя, оно равно отношению кинетической энергии тела к квадрату скорости света. Значит, при возрастании скорости увеличение массы тела обусловлено увеличением его кинетической энергии.

*б.* Сила и импульс.

В механике Ньютона (классической механике), в которой движение тел считается нерелятивистским,  $v \ll c$ , если на тело оказывается воздействие, то силу  $\vec{F}$ , являющуюся мерой этого воздействия, определяют либо как первую производную импульса  $\vec{p}$  (количества движения  $m_0 \vec{v}$ ) тела по времени  $t$ , либо как произведение массы покоя  $m_0$  тела на ускорение, вызванное этой силой:

$$\vec{F} = \frac{d}{dt} \vec{p} = m_0 \frac{d\vec{v}}{dt}.$$

Можно показать, что это уравнение, выражающее второй закон Ньютона, инвариантно относительно преобразований Галилея.

В релятивистской механике ( $v \approx c$ ) силу  $\vec{F}$  определяют только как производную импульса  $\vec{p}$  по времени  $t$ :

$$\vec{F} = \frac{d}{dt} \vec{p} = \frac{d}{dt} (m\vec{v}).$$

Это уравнение инвариантно относительно преобразований Лоренца (преобразований, которым подвергаются пространственно-временные координаты при переходе от одной инерциальной системы отсчета к другой), переходящих в преобразования Галилея при малых скоростях  $v \ll c$ .

Если продифференцировать импульс по времени и учитывать, что масса  $m$  не является постоянной величиной, то получим

$$\vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt} + \vec{v} \frac{dm}{dt}.$$

Отсюда видно, что силу  $\vec{F}$  можно записать в виде суммы двух векторов, один из которых параллелен ускорению, другой — скорости. Из данного выражения следует, что в релятивистской механике сила и ускорение в общем случае не направлены одинаково. Сила  $\vec{F}$  будет иметь то же направление, что и ускорение (как в классической механике), в двух случаях:

1) когда сила  $\vec{F}$  направлена перпендикулярно скорости  $\vec{v}$  движения тела;

2) когда сила  $\vec{F}$  направлена параллельно скорости  $\vec{v}$ .

*в.* Взаимосвязь между массой и энергией, импульсом и энергией.

В релятивистской механике элементарная работа  $dA$  по перемещению  $d\vec{r}$  тела, совершенная под воздействием силы  $\vec{F}$ , определяется, как и в механике Ньютона, т. е. как скалярное произведение силы и перемещения:

$$dA = \vec{F} d\vec{r}.$$

Если на свободное тело (не взаимодействует ни с какими телами и полями) воздействуют с силой  $\vec{F}$ , то, согласно закону сохранения энергии, затраченная при этом работа  $dA$  равна изменению кинетической энергии тела  $dT_{\text{кин}}$ :

$$dA = dT_{\text{кин}}.$$

Принимая во внимание, что  $\vec{F} = \frac{d}{dt}(m\vec{v})$ , напишем

$$dT_{\text{кин}} = \frac{d}{dt}(m\vec{v})d\vec{r} = d(m\vec{v})\vec{v} = (dm\vec{v} + md\vec{v})\vec{v} = v^2 dm + mvdv. \quad (1.16)$$

С другой стороны, из зависимости массы от скорости (1.15) следует, что

$$m^2 c^2 = m_0^2 c^2 + m^2 v^2 .$$

Дифференцируя это выражение по абсолютной величине скорости  $v$ , приходим к равенству

$$c^2 2m \frac{dm}{dv} = 0 + v^2 2m \frac{dm}{dv} + m^2 2v .$$

Умножив это равенство на  $dv$ , получим

$$c^2 dm = v^2 dm + mv dv .$$

Сравнивая правые части этого выражения и выражения (1.16), находим

$$dT_{\text{кин}} = c^2 dm .$$

Проинтегрировав это равенство

$$\int_0^T dT_{\text{кин}} = c^2 \int_{m_0}^m dm ,$$

получим окончательный результат

$$T_{\text{кин}} = (m - m_0)c^2 = mc^2 - m_0c^2 , \quad (1.17)$$

являющийся релятивистским выражением для кинетической энергии тела.

Первый член в выражении (1.17) представляет собой релятивистскую полную энергию  $E$  тела, которая может быть вычислена по формуле Эйнштейна:

$$E = mc^2 = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (1.18)$$

Второй член в выражении (1.17) — это энергия покоя тела:

$$E_0 = m_0 c^2. \quad (1.19)$$

Итак, кинетическая энергия  $T_{\text{кин}}$  тела равна разности между полной энергией  $E$  и энергией покоя  $E_0$ .

Используя выражение для релятивистской полной энергии (1.18) и релятивистского импульса

$$\vec{p} = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (1.20)$$

можно установить связь между полной энергией и импульсом. Так как

$$\left(\frac{E}{c}\right)^2 = \frac{m_0^2 c^2}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad \text{и} \quad p^2 = \frac{m_0^2 v^2}{1 - \frac{v^2}{c^2}},$$

то, вычитая второе выражение из первого, получим

$$\left(\frac{E}{c}\right)^2 - p^2 = \frac{m_0^2 c^2 - m_0^2 v^2}{1 - \frac{v^2}{c^2}} = m_0^2 c^2.$$

Окончательно приходим к соотношению

$$E = c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}. \quad (1.21)$$

Выполним разложение  $E$  в ряд Маклорена по степеням  $p/(m_0 c)$ , ограничившись тремя членами разложения:

$$E = m_0 c^2 + \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2} + \dots$$

Кроме энергии покоя  $E_0 = m_0 c^2$  и нерелятивистской кинетической энергии  $T_{\text{кин}} = \frac{p^2}{2m_0}$  в разложении имеется член  $-p^4 / 8m_0^3 c^2$ , связанный с зависимостью массы от скорости.

Следует сказать, что электрон считается нерелятивистским, если его кинетическая энергия  $T_{\text{кин}}$  удовлетворяет неравенству:

$$T_{\text{кин}} \ll m_0 c^2 \approx 0,511 \text{ МэВ},$$

(1 эВ  $\approx 1,602 \cdot 10^{-19}$  Дж или  $\approx 1,602 \cdot 10^{-12}$  эрг).

## 2. КВАНТОВАЯ ПРИРОДА ИЗЛУЧЕНИЯ

---

### 2.1. Виды излучения. Энергетические величины излучения

**И**злучением называется процесс испускания и распространения энергии в виде волн или частиц. Наиболее известное излучение электромагнитных волн (*электромагнитное излучение*) возникает при изменении энергетического состояния образующих вещество частиц, таких как молекулы, атомы, атомные ядра или электроны, а излучение частиц — при изменении состава или внутреннего строения атомного ядра. Существуют разные способы классификации излучения, например, по длине волны (частоте, энергии), по результатам воздействия на вещество, по видам компенсации убывающей энергии и т. д.

Если в качестве признака классификации взять длину волны, то электромагнитное излучение распределится по следующим видам:

- 1) радиоволны (длина волны более 1 мм);
- 2) инфракрасное (ИК) излучение (1 мм — 750 нм);
- 3) видимый свет (750 нм — 380 нм);
- 4) ультрафиолетовое (УФ) излучение (380 нм — 10 нм);
- 5) рентгеновское излучение (10 нм — 0,002 нм);
- 6) гамма-излучение (менее 0,002 нм).

По способности ионизировать вещество выделяют ионизирующее и неионизирующее излучение. К ионизирующему излучению относят

- 1) рентгеновское излучение;
- 2) нейтронное (протонное, мюонное) излучение;
- 3) радиоактивное излучение, которым является:
  - а) альфа-излучение (поток ядер атома гелия, т. е. частиц, образованных двумя протонами и двумя нейтронами);
  - б) бета-излучение (поток электронов и позитронов);
  - в) гамма-излучение.

Испускание веществом электромагнитных волн сопровождается потерей энергии. Для обеспечения дальнейшего излучения необходимо восполнять убывающую энергию. Это восполнение осуществляется различными путями. Способ компенсации убывающей энергии можно положить в основу следующей классификации излучения:

1) *тепловое* или *температурное излучение* — это излучение, которое происходит за счет внутренней (тепловой) энергии вещества при его нагревании;

2) *люминесценция* — избыточное излучение тела над температурным излучением, когда этот избыток обладает конечной длительностью примерно  $10^{-10}$  с и больше. Для примера назовем несколько видов люминесценции:

а) *фотолюминесценция* — излучение вызывается за счет поглощения электромагнитной энергии;

б) *хемилюминесценция* — излучение, которое поддерживается благодаря энергии, выделяемой при химической реакции;

в) *электролюминесценция* — излучение, которое возбуждается в газах или телах под действием электрического поля (разряда).

Любой вид излучения характеризуется энергетическими величинами, основные из которых сейчас отметим. *Поток излучения* (или *мощность излучения*)  $\Phi$  — это количество энергии излучения  $W$ , которое испускается телом за единицу времени  $t$  по всем направлениям (в пределах телесного угла  $2\pi$ ) во всем спектральном диапазоне (рис. 2.1). Он определяется как отношение количества энергии излучения  $dW$ , испускаемого телом за промежуток времени  $dt$ , к этому промежутку:



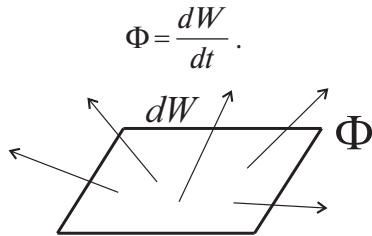


Рис. 2.1. Поток излучения

Поток излучения имеет размерность мощности, за единицу измерения которого в системе СИ принимают ватт, он связан с джоулем и секундой — единицами измерения энергии и времени — соотношением  $\text{Вт} = \text{Дж/с}$ .

Еще одной значимой величиной является *энергетическая светимость*  $E_c$  (рис. 2.2). Она равна потоку излучения  $\Phi$ , испускаемому единицей поверхности тела  $S$  в одну сторону:

$$E_c = \frac{d\Phi}{dS}.$$

Единица измерения этой величины в системе СИ — ватт на метр в квадрате ( $\text{Вт/м}^2$ ). Если поток излучения  $\Phi$  поглощается единицей поверхности тела  $S$ , то он называется *освещенностью*  $E_{\text{осв}}$ .

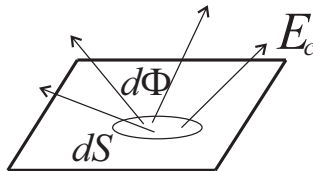


Рис. 2.2. Энергетическая светимость

*Сила излучения*  $I_c$  — это величина, которая определяет мощность излучения  $\Phi$  точечного источника, приходящуюся на единицу телесного угла  $\Omega$  (см. рис. 2.3). Она вычисляется по формуле

$$I_c = \frac{d\Phi}{d\Omega}.$$

За единицу измерения силы излучения берется ватт на стерадиан (Вт/ср).

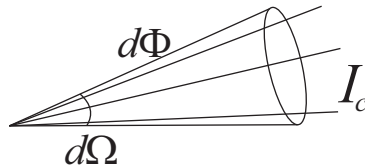


Рис. 2.3. Сила излучения

*Интенсивность излучения (поверхностная яркость)  $J$*  — это поток излучения  $\Phi$ , испускаемый единицей поверхности тела  $S$  и распространяющийся внутри единичного телесного угла  $\Omega$ , ось которого составляет с нормалью к излучающей площадке  $dS$  угол  $\theta$ :

$$J = \frac{d^2\Phi}{d\Omega dS \cos\theta}.$$

Ее в СИ измеряют в ваттах на стерадиан и на метр в квадрате (Вт/(ср·м<sup>2</sup>)).

Найдем выражение, которое связывает энергетическую светимость  $E_c$  (поток излучения  $\Phi$ , проходящий через площадку  $dS$ ) с интенсивностью  $J$  изотропного излучения ( $J$  не зависит от направления распространения). Для этого, принимая во внимание, что элемент телесного угла равен  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ , проинтегрируем записанное выше выражение по азимутальному углу  $\varphi$  и по полярному углу  $\theta$ . В результате получим:

$$d\Phi = JdS \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \sin\theta \cos\theta d\theta = \pi JdS,$$

поскольку

$$\int_0^{\pi/2} \sin\theta \cos\theta d\theta = 1/2.$$

Если продифференцируем  $\Phi$  по  $S$ , то найдем соотношение между энергетической светимостью  $E_c$  и интенсивностью излучения  $J$ :

$$E_c = \pi J.$$

Наконец, введем понятие *объемной плотности* излучения  $u$ . Она равна количеству энергии излучения  $W$  в единице объема  $V$ :

$$u = \frac{dW}{dV}.$$

Единица измерения объемной плотности излучения в СИ — джоуль на метр в кубе (Дж/м<sup>3</sup>).

Объемную плотность излучения  $u$  можно записать через интенсивность излучения  $J$  и энергетическую светимость  $E_c$  следующим образом:

$$u = \frac{4\pi}{c} J, \quad u = \frac{4}{c} E_c \quad (\text{для изотропного излучения}).$$

Из опытных данных следует, что энергия излучения зависит от его спектрального состава. Когда спектр излучения сплошной (непрерывный), удобно использовать спектральные энергетические величины. Например, спектральную мощность излучения  $\Phi(x)$  (рис. 2.4), которая представляет собой поток излучения, проходящий на единичный интервал спектра (спектральная координата  $x$  может задаваться длинами волн  $\lambda$ , линейными частотами  $\nu$ , волновыми числами  $\bar{\nu}$ , энергиями квантов излучения и т. д.).

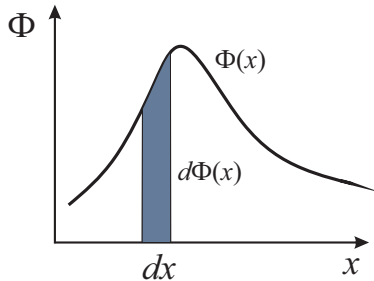


Рис. 2.4. Спектральная мощность излучения

*Спектральная мощность излучения*  $\Phi(x)$  показывает распределение энергии по спектру излучения и определяется как отношение мощности излучения  $d\Phi(x)$ , приходящейся на малый спектральный интервал  $dx$ , содержащий  $x$ , к ширине этого интервала

$$\Phi(x) = \frac{d\Phi(x)}{dx}.$$

Следует иметь в виду, что значения спектральной мощности излучения в одной и той же точке спектра, получаемые при использовании различных спектральных координат, не совпадают друг с другом. Например,  $\Phi(\nu) \neq \Phi(\lambda)$ .

Правильное соотношение можно найти, учитывая равенство  $\Phi(\nu)d\nu = \Phi(\lambda)d\lambda$  (энергии излучения, заключенные в интервале частот  $d\nu$  и длин волн  $d\lambda$ , равны) и  $\lambda = c/\nu$ ,

$$\Phi(\nu) = \frac{\lambda^2}{c} \Phi(\lambda).$$

Переход от *спектральных энергетических величин*  $\Phi(x)$ ,  $E_c(x)$ ,  $J(x)$  и  $u(x)$ , характеризующих только малую долю излучения, к *интегральным энергетическим величинам*  $\Phi$ ,  $E_c$ ,  $J$  и  $u$ , которые характеризуют излучение во всем спектральном диапазоне, осуществляется путем вычисления интеграла:

$$\Phi = \int_0^{\infty} \Phi(x) dx.$$

## 2.2. Тепловое равновесное излучение

В дальнейшем будем обсуждать только тепловое излучение. Это излучение испускается телами при любых температурах  $T$ , отличных от абсолютного нуля ( $-273,15^\circ\text{C}$ ). При этом каждое тело одновременно испускает тепловое излучение и поглощает излучение от окружающих тел. Эти происходящие совместно процессы приводят к обмену энергией через излучение и установлению тер-

модинамического равновесия в системе «тело — излучение», т. е. состояния, в котором тело при заданной температуре  $T$  излучает в единицу времени столько энергии сколько поглощает. Тепловое излучение является единственным видом излучения, которое может находиться в термодинамическом равновесии с испускающим его телом. Равновесное тепловое излучение устойчиво, поскольку при его нарушении оно через некоторое время вновь будет восстановлено. Температура  $T$  является той величиной, которая характеризует состояния теплового излучения и излучающего его тела.

Анализ условий теплового равновесного излучения позволил установить ряд его свойств:

- 1) объемная плотность излучения  $u$  зависит от температуры  $T$  излучающих тел;
- 2) излучение однородно, поэтому объемная плотность  $u$  одинакова в разных точках пространства, она не зависит от координат;
- 3) оно изотропно, а интенсивность излучения  $J$  не зависит от направления;
- 4) излучение неполяризовано.

Тепловое излучение имеет сплошной спектр, интенсивность и спектральный состав которого зависят от природы и температуры излучающего тела. Вещество, находящееся при комнатной температуре, значительную часть энергии испускает в ИК части спектра, а нагретое до высокой температуры (более  $5000\text{ }^\circ\text{C}$ ) — в видимом диапазоне. Если температура тела превышает  $500\text{ }^\circ\text{C}$ , то спектр излучаемой энергии содержит лучи, видимые невооруженным глазом.

Изучение законов теплового излучения предполагает введение таких понятий, как испускательная и поглощательная способность тела. *Испускательной способностью*  $e$  тела (аналогична энергетической светимости  $E_c$ ) называют поток излучения  $\Phi$ , испускаемый единицей поверхности  $S$  тела:

$$e = \frac{d\Phi}{dS}.$$

Испускательная способность  $e$  тела зависит от его температуры  $T$ , а также частоты  $\nu$  (длины волны  $\lambda$ ) излучения. Отдельный спектральный участок излучения характеризуется величиной, которая называется спектральной испускательной способностью тела. Она может быть записана как функция  $e(\nu, T)$  или  $e(\lambda, T)$ . Весь спектр излучения характеризуется интегральной испускательной способностью, записываемой как функция  $e(T)$ ,

Интегральная и спектральная испускательные способности связаны соотношением

$$e(T) = \int_0^{\infty} e(\nu, T) d\nu = \int_0^{\infty} e(\lambda, T) d\lambda .$$

В системе СИ единицей измерения интегральной испускательной способности является ватт на метр в квадрате ( $\text{Вт}/\text{м}^2$ ), спектральной испускательной способности  $e(\nu, T)$  — джоуль на метр в квадрате ( $\text{Дж}/\text{м}^2$ ), а  $e(\lambda, T)$  — ватт на метр в кубе ( $\text{Вт}/\text{м}^3$ ).

*Поглощательной способностью* тела (обозначим ее буквой  $a$ ) называют долю падающей энергии теплового излучения, которая остается внутри тела и превращается в тепло. Ее определяют как отношение потока излучения  $\Phi'$ , поглощенного телом, к потоку излучения  $\Phi$ , падающего на тело:

$$a = \frac{\Phi'}{\Phi} .$$

Из определения поглощательной способности следует, что она является безразмерной величиной. Кроме того, она не может быть больше единицы.

Согласно экспериментальным данным поглощательная способность тела зависит как от его температуры  $T$ , так и от частоты  $\nu$  (длины волны  $\lambda$ ), на которой происходит поглощение излучения. В связи с этим вводят величины  $a(\nu, T)$  (или  $a(\lambda, T)$ ) и  $a(T)$ , называемые спектральной поглощательной способностью и интегральной поглощательной способностью соответственно.

Отметим, что между испускательной и поглощательной способностями тела существует следующая связь: чем больше испускательная способность тела, тем больше его поглощательная способность.

Среди всего многообразия тел можно условно представить такое тело, поглощательная способность которого равна единице для всех значений температур и частот (длин волн). Это тело поглощает все падающее на него излучение и называется абсолютно черным телом (АЧТ). Тело называется серым, если его поглощательная способность меньше единицы.

В действительности ни одно тело нельзя считать АЧТ. Смоделировать тепловое излучение АЧТ можно следующим образом. Возьмем замкнутый сосуд с теплонепроницаемыми стенками, которые равномерно нагреем. Через некоторое время внутри сосуда установится тепловое равновесное излучение, которое будет тождественно излучению АЧТ. Это происходит из-за того, что излучение испытывает многократные отражения от стенок сосуда, а при каждом отражении часть энергии излучения поглощается. Вследствие этого практически все излучение на любой частоте (длине волны) будет поглощаться стенками сосуда. Если в стенке сделать небольшое отверстие, то из него начнет выходить излучение, похожее на излучение АЧТ.

## 2.3. Законы теплового излучения

Далее при изложении учебного материала о спектральных величинах в качестве спектральной координаты будем использовать линейную частоту  $\nu$  излучения. Иногда в некоторых формулах в качестве примера будем применять длину волны  $\lambda$ , как принято в практической спектроскопии.

В 1859 г. Г. Кирхгоф, опираясь на второй закон термодинамики, установил первый фундаментальный закон теплового излучения, который связывает спектральную испускательную и поглощательную способности тела. *Закон Кирхгофа* утверждает, что отношение

спектральной испускательной способности  $e(\nu, T)$  тела к его спектральной поглотительной способности  $a(\nu, T)$  не зависит от природы тела, является для всех тел одной и той же универсальной функцией  $f(\nu, T)$  частоты  $\nu$  и температуры  $T$ :

$$\frac{e(\nu, T)}{a(\nu, T)} = f(\nu, T). \quad (2.1)$$

При заданных частоте и температуре данное отношение одинаково для любых тел, поэтому тело, сильнее поглощающее излучение, будет сильнее его излучать.

По определению спектральная поглотительная способность для АЧТ равна единице:  $a(\nu, T) = 1$ . Значит, функция  $f(\nu, T)$  представляет собой спектральную испускательную способность  $\varepsilon(\nu, T)$  АЧТ:

$$f(\nu, T) = \varepsilon(\nu, T).$$

Закон Кирхгофа (2.1) можно записать посредством равенства

$$e(\nu, T) = \varepsilon(\nu, T) \cdot a(\nu, T).$$

Но для серых тел  $a(\nu, T) < 1$ , поэтому всегда выполняется неравенство

$$e(\nu, T) < \varepsilon(\nu, T).$$

Оно означает, что при одинаковой температуре  $T$  кривая, соответствующая спектральной испускательной способности  $\varepsilon(\nu, T)$  АЧТ, всегда лежит выше кривой  $e(\nu, T)$  серого тела (рис. 2.5).

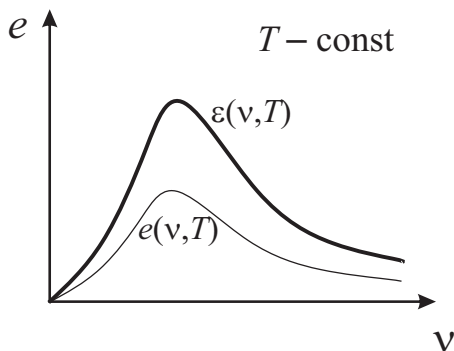


Рис. 2.5. Спектральные испускательные способности серого тела и АЧТ



Долгое время предпринимались многочисленные попытки найти вид функции  $\varepsilon(\nu, T)$ . Отметим, что в общем виде  $\varepsilon(\nu, T)$  была записана в 1900 г. М. Планком. До этого времени при исследовании теплового излучения были открыты еще несколько законов.

В 1878 г. Й. Стефан, анализируя экспериментальные данные для серых тел, пришел к выводу, что интегральная испускательная способность  $e(T)$  пропорциональна четвертой степени абсолютной температуры  $T$  излучающего тела:  $e(T) \sim T^4$ . Но последующие более точные результаты измерений показали ошибочность его заключения.

В 1884 г. Л. Больцман, применив к тепловому излучению принципы термодинамики, теоретически получил точно такую же зависимость, но для интегральной испускательной способности  $\varepsilon(T)$  АЧТ:  $\varepsilon(T) \sim T^4$ . В дальнейшем соотношение между интегральной испускательной способностью  $\varepsilon(T)$  АЧТ и четвертой степенью его абсолютной температуры  $T$  назвали *законом Стефана — Больцмана*:

$$\varepsilon(T) = \sigma T^4, \quad (2.2)$$

где  $\sigma$  — константа пропорциональности, называемая *постоянной Стефана — Больцмана*, значение которой равно  $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$  Вт/(м<sup>2</sup> · К<sup>4</sup>).

В 1893 г. В. Вин в своих теоретических рассуждениях помимо классической термодинамики воспользовался еще и электромагнитной теорией света.

Это позволило получить следующую формулу для спектральной испускательной способности  $\varepsilon(\nu, T)$  АЧТ:

$$\varepsilon(\nu, T) = \nu^3 F\left(\frac{\nu}{T}\right), \quad (2.3)$$

где  $F$  — функция отношения частоты  $\nu$  к температуре  $T$ . Установить явный вид функции  $F$  при помощи классического подхода к излучению, т. е. без гипотезы о квантованности излучения, оказалось невозможно. Формула (2.3) получила название *термодинамического закона Вина* и сыграла важную роль при объяснении свойств теплового излучения.

Перечислим несколько важных результатов, которые вытекают из формулы Вина (2.3).

Во-первых, с помощью данной формулы можно вычислить частотную зависимость  $\varepsilon(\nu, T)$  для любой температуры  $T$ , зная частотную зависимость  $\varepsilon(\nu, T_1)$  для температуры  $T_1$ . Покажем это.

Допустим, задана функция  $\varepsilon(\nu, T_1)$  для температуры  $T_1$ , а требуется найти испускательную способность  $\varepsilon(\nu, T_2)$  для температуры  $T_2$ . Возьмем частоту  $\nu_2$ , удовлетворяющую условию

$$\frac{\nu_1}{T_1} = \frac{\nu_2}{T_2} \quad \text{или} \quad \nu_2 = \nu_1 \frac{T_2}{T_1},$$

и запишем формулу Вина

$$\varepsilon(\nu_2, T_2) = \nu_2^3 F\left(\frac{\nu_2}{T_2}\right) = \nu_1^3 \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^3 F\left(\frac{\nu_1}{T_1}\right) = \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^3 \varepsilon(\nu_1, T_1).$$

Значит, чтобы получить кривую  $\varepsilon(\nu, T_2)$ , надо изменить масштаб по оси абсцисс в  $T_2/T_1$  раз, а по оси ординат в  $(T_2/T_1)^3$  раз.

Во-вторых, формула Вина позволяет определить интегральную испускательную способность  $\varepsilon(T)$  АЧТ:

$$\varepsilon(T) = \int_0^{\infty} \varepsilon(\nu, T) d\nu = \int_0^{\infty} \nu^3 F\left(\frac{\nu}{T}\right) d\nu = \left. \begin{array}{l} \text{введем переменную } x = \frac{\nu}{T} \\ \text{тогда } \nu^3 = T^3 x^3, \quad d\nu = T dx \end{array} \right| = T^4 \underbrace{\int_0^{\infty} x^3 F(x) dx}_{=\sigma}.$$

Если обозначить число, полученное при вычислении интеграла, через  $\sigma$ , то приходим к закону Стефана — Больцмана (2.2).

В-третьих, термодинамический закон Вина приводит к закону, называемому законом смещения Вина. Чтобы показать это, воспользуемся условием, которое позволяет найти частоту  $\nu_m$ , соответствующую максимуму спектральной испускательной способности  $\varepsilon(\nu, T)$  при температуре  $T$ :

$$\left. \frac{d\varepsilon(\nu, T)}{d\nu} \right|_{\nu=\nu_m} = 0.$$

Записывая  $\varepsilon(\nu, T)$  по формуле Вина (2.3), получим

$$3\nu^2 F\left(\frac{\nu}{T}\right) + \nu^3 \frac{\partial F\left(\frac{\nu}{T}\right)}{\partial\left(\frac{\nu}{T}\right)} \frac{1}{T} = \nu^2 \left[ 3F\left(\frac{\nu}{T}\right) + \frac{\nu}{T} F'\left(\frac{\nu}{T}\right) \right] = \left. \begin{array}{l} \text{введем} \\ x = \frac{\nu}{T} \end{array} \right| =$$

$$= x^2 T^2 [3F(x) + xF'(x)] = 0.$$

Решив это дифференциальное уравнение, найдем значение  $x = x_m = \text{const}$ . Следовательно,

$$x_m = \frac{\nu_m}{T} = b, \quad (2.4a)$$

где  $b$  — *постоянная Вина*, равная  $0,588 \cdot 10^{11}$  Гц/К.

Равенство (2.4a) является математической записью *закона смещения Вина*. Согласно этому закону отношение частоты  $\nu_m$ , при которой спектральная испускательная способность  $\varepsilon(\nu, T)$  АЧТ достигает максимального значения, к абсолютной температуре  $T$  этого тела является постоянным. Из закона смещения Вина следует, что при уменьшении температуры  $T$  АЧТ максимум испускательной способности  $\varepsilon(\nu, T)$  смещается в сторону низких частот (см. рис. 2.6).

Если в качестве одного из аргументов спектральной функции  $\varepsilon$  использовать не частоту  $\nu$  излучения, а его длину волны  $\lambda$ , то закон смещения Вина примет вид:

$$\lambda_m T = b', \quad (2.4б)$$

где коэффициент  $b' = 2,9 \cdot 10^{-3}$  м·К.

В 1896 г. Вином была написана эмпирическая формула для своего термодинамического закона (2.3):

$$\varepsilon(\nu, T) = A\nu^3 e^{-\frac{B\nu}{T}}, \quad (2.5)$$

где  $A$  и  $B$  — постоянные коэффициенты. При получении этой формулы Вином было сделано предположение, что распределение

энергии по частотам в спектре излучения АЧТ аналогично максвелловскому распределению молекул идеального газа по скоростям.

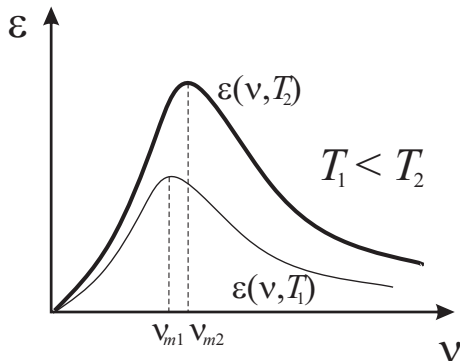


Рис. 2.6. Зависимость испускательной способности АЧТ от частоты для разных температур

В 1897 г. О. Люммер и Э. Прингсгейм экспериментально проверили формулу (2.5) и установили, что она достаточно хорошо описывает распределение энергии теплового излучения лишь в области высоких частот.

## 2.4. Формула Рэля – Джинса

В середине 1900 г. Дж. Рэлеем была сделана более строгая попытка теоретического вывода формулы для спектральной объемной плотности  $u(\nu, T)$  излучения АЧТ, которая связана со спектральной испускательной способностью  $\varepsilon(\nu, T)$  простым соотношением:

$$u(\nu, T) = \frac{4}{c} \varepsilon(\nu, T).$$

При поиске выражения для спектральной объемной плотности  $u(\nu, T)$  он воспользовался теоремой классической статистики о рав-

номерном распределении энергии по степеням свободы в состоянии термодинамического равновесия.

Рэлей представлял равновесное тепловое излучение в замкнутой полости в виде электромагнитного поля, образованного совокупностью стоячих волн различных частот и направлений. Для объемной плотности энергии электромагнитного поля в интервале частот  $d\nu$  справедливо равенство

$$u(\nu, T)d\nu = dn(\nu) \cdot \langle E \rangle,$$

где  $dn(\nu)$  — число независимых стоячих волн в интервале частот  $d\nu$  в единице объема,  $\langle E \rangle$  — среднее значение энергии стоячей волны.

К стоячим волнам была применена теорема о равномерном распределении энергии, согласно которой на каждую электромагнитную волну приходится средняя энергия

$$\langle E \rangle = k_b T,$$

где  $k_b$  — *постоянная Больцмана*, равная  $1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К. Эта энергия складывается из электрической и магнитной энергии волны, по отдельности равной  $0,5k_b T$ .

В качестве примера вычислим среднее значение энергии стоячей волны при классическом предположении о том, что излучение испускается (поглощается) и распространяется непрерывно, а энергия волны может принимать любое положительное значение (подход электромагнитной теории света). Если исходить из классического статистического подхода, то среднее значение энергии определяют через интеграл

$$\langle E \rangle = \int_0^{\infty} E dW(E).$$

Здесь  $dW(E)$  — это вероятность того, что значение энергии  $E$  стоячей волны находится внутри интервала  $[E; E + dE]$ . Она вычисляется по формуле

$$dW(E) = Ce^{-\frac{E}{k_b T}} dE,$$

где нормировочный множитель  $C$  находится из условия

$$\int_0^{\infty} dW(E) = 1.$$

С учетом этого имеем

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^{\infty} E e^{-\frac{E}{k_b T}} dE}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{k_b T}} dE} = \left| \begin{array}{l} \text{введем переменную } x = \frac{E}{k_b T} \\ \text{тогда } dE = k_b T dx \end{array} \right| = \frac{(k_b T)^2 \int_0^{\infty} x e^{-x} dx}{k_b T \underbrace{\int_0^{\infty} e^{-x} dx}_{= -(e^{-x})_0^{\infty} = 1}} = k_b T.$$

Стоящий в числителе дроби интеграл вычисляется путем интегрирования по частям

$$\int_0^{\infty} \underbrace{x}_{u} \underbrace{e^{-x}}_{dv} dx = - \underbrace{(x e^{-x})}_{=0} \Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} e^{-x} dx = 1.$$

В 1905 г. Дж. Джинс повторил вывод формулы для  $u(\nu, T)$  по методу, предложенному Рэлеем. При этом было найдено выражение для  $dn(\nu)$  с учетом обоих направлений поляризации стоячей волны:

$$dn(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu.$$

Если принять это во внимание, то для спектральной объемной плотности энергии электромагнитного поля получаем выражение

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_b T.$$

Учитывая связь  $u(\nu, T)$  с  $\varepsilon(\nu, T)$ , для последней находим формулу

$$\varepsilon(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} k_b T, \quad (2.6)$$

которая называется *формулой Рэля — Джинса*.

Анализируя эту формулу, можно прийти к следующим выводам:

- 1) она удовлетворяет термодинамическому закону Вина (см. выражение (2.3));
- 2) хорошо описывает только низкочастотную область спектра теплового излучения;
- 3) не позволяет получить максимум в спектре излучения;
- 4) приводит к абсурдному результату, называемому «ультрафиолетовая катастрофа». Вычисление интегральной испускательной способности дает бесконечность:  $\varepsilon(T) = \infty$ , что находится в противоречии с опытом, поскольку равновесие между тепловым излучением и излучающим телом устанавливается при конечных значениях  $\varepsilon(T)$ .

Расхождение формулы Рэля — Джинса с результатами экспериментов указывало на то, что при описании высокочастотного (коротковолнового) теплового излучения нельзя использовать классическую электромагнитную теорию света. При теоретическом рассмотрении теплового излучения надо учитывать принципы, не совместимые с представлениями классической физики.

## 2.5. Формула Планка

С точки зрения классической физики вывод формулы Рэля — Джинса (2.6) является безупречным. Вместе с тем она не давала максимума в спектре теплового излучения, а результаты расчетов согласовывались с экспериментальными данными только в области низких частот. Эмпирическая формула Вина (2.5), полученная также на базе классических принципов, воспроизводила максимум в спектре излучения, но результаты расчетов совпадали с данными из эксперимен-

тов лишь в области высоких частот. Таким образом, на рубеже XIX и XX вв. существовали две формулы для вычисления спектральной испускательной способности  $\varepsilon(\nu, T)$  АЧТ, которые удовлетворяли экспериментальным данным на ограниченных спектральных участках.

В конце 1900 г. М. Планку удалось вначале эмпирически получить формулу для  $\varepsilon(\nu, T)$ , которая хорошо описывала тепловое излучение во всем частотном интервале от 0 до  $\infty$ , а затем в 1901 г. вывести ее теоретически. Однако для этого он сделал предположение, коренным образом противоречащее классическим волновым представлениям об излучении. В отличие от Рэля и Джинса, Планк считал, что тепловое излучение испускается (поглощается) и распространяется дискретно, в виде отдельных порций с энергией  $\Delta E$ , кратной некоторой величине  $E$ . Последняя, в свою очередь, прямо пропорциональна частоте  $\nu$  излучения (поглощения)  $E = h\nu$ , где коэффициент пропорциональности  $h$  — это фундаментальная физическая постоянная, называемая *постоянной Планка*. Ее значение равно  $h \approx 6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж·с ( $\approx 6,626 \cdot 10^{-27}$  эрг·с).

При выводе своей формулы Планк рассматривал излучающие центры АЧТ как линейные гармонические осцилляторы, обладающие электрическим зарядом. Эти центры могли обмениваться энергией с окружающим их электромагнитным полем. Сформулируем гипотезу, которую использовал Планк: осцилляторы могут находиться только в определенных состояниях  $n$ , в которых их энергия  $E_n$  кратна энергии  $E = h\nu$

$$E_n = nh\nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

Во время испускания (поглощения) излучения осцилляторы переходят скачком из состояния  $n$  в другое состояние  $n'$ , при этом их энергия изменяется на величину

$$\Delta E = (n - n')h\nu.$$

Важно отметить, что по Планку излучение испускается (поглощается) дискретно, порциями, имеющими энергию  $\Delta E$ , но внутри этих порций излучение непрерывно.



На основании этой гипотезы Планк нашел среднее значение энергии  $\langle E \rangle$  осциллятора. Согласно классической статистике при указанных условиях применяется формула

$$\langle E \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n W_n,$$

где  $W_n$  — это вероятность того, что осциллятор находится в  $n$ -м состоянии с энергией  $E_n$ , определяется по Больцману как

$$W_n = C e^{-\frac{E_n}{k_b T}}.$$

Нормировочный множитель  $C$  находится из равенства

$$\sum_{n=0}^{\infty} W_n = 1.$$

Значит, среднее значение энергии  $\langle E \rangle$  излучения на частоте  $\nu$  равно

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n h \nu e^{-\frac{n h \nu}{k_b T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n h \nu}{k_b T}}} = \left. \begin{array}{l} \text{введем переменную} \\ x = \frac{h \nu}{k_b T} \text{ и учтем,} \\ \text{что она непрерывна} \\ \text{при изменении } n \end{array} \right| = h \nu \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n x}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n x}} = -h \nu \frac{d}{dx} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n x}.$$

Под знаком логарифма находится сумма членов бесконечной убывающей геометрической прогрессии с первым членом, равным единице, и знаменателем, равным  $e^{-x}$ , который меньше единицы. По известной из алгебры формуле эта сумма равна  $\frac{1}{1 - e^{-x}}$ . Следовательно,

$$\langle E \rangle = -h \nu \frac{d}{dx} \ln \frac{1}{1 - e^{-x}} = h \nu \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{h \nu}{e^x - 1} = \frac{h \nu}{e^{\frac{h \nu}{k_b T}} - 1}.$$

Заметим, что при стремлении постоянной Планка  $h$  к нулю (когда излучение считается непрерывным) среднее значение энергии  $\langle E \rangle$  равно  $k_b T$ . Это же предполагалось при выводе формулы Рэля — Джинса.

Если заменить в формуле Рэля — Джинса среднее значение энергии  $\langle E \rangle$  на выражение, записанное выше, то получим формулу Планка для спектральной испускательной способности  $\varepsilon(\nu, T)$  АЧТ:

$$\varepsilon(\nu, T) = \frac{2\pi h \nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_b T}} - 1}. \quad (2.7a)$$

Перечислим следствия, вытекающие из формулы Планка.

1. Для фиксированной частоты  $\nu$  с ростом температуры  $T$  знаменатель дроби в формуле Планка убывает, а сама дробь возрастает, следовательно, возрастает и спектральная испускательная способность  $\varepsilon(\nu, T)$  АЧТ (см. рис. 2.6).

2. С помощью формулы Планка могут быть получены все рассмотренные выше выражения, которые являются математически ми записями законов теплового излучения.

Например, вычислив интегральную испускательную способность  $\varepsilon(T)$  АЧТ путем интегрирования формулы Планка в диапазоне частот от 0 до  $\infty$ , приходим к закону Стефана — Больцмана (2.2):

$$\varepsilon(T) = \frac{2\pi h}{c^2} \int_0^{\infty} \frac{\nu^3 d\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_b T}} - 1} = \left\{ \begin{array}{l} \text{введем переменную } x = \frac{h\nu}{k_b T} \\ \text{тогда } d\nu = \frac{k_b T}{h} dx \end{array} \right. = \frac{2\pi k_b^4 T^4}{c^2 h^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Определенный интеграл в правой части этого выражения является табличным

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}.$$

Следовательно,

$$\varepsilon(T) = \frac{2\pi^5 k_b^4}{15c^2 h^3} T^4 = \sigma T^4.$$

Отметим, что постоянная Стефана — Больцмана  $\sigma$  выражается через универсальные постоянные  $\pi$ ,  $k_b$ ,  $c$  и  $h$ .

Сравнив формулу Планка с термодинамическим законом Вина (2.3), видим, что она удовлетворяет ему.

Для случая высоких частот или низких температур  $\frac{h\nu}{k_b T} \gg 1$

в формуле Планка можно пренебречь единицей по сравнению с экспонентой, тогда получается формула Вина (2.5):

$$\varepsilon(\nu, T) = \frac{2\pi h}{c^2} \nu^3 e^{-\frac{h\nu}{k_b T}}.$$

Для случая малых частот или высоких температур —  $\frac{h\nu}{k_b T} \ll 1$  — можно использовать разложение

$$e^{\frac{h\nu}{k_b T}} \approx 1 + \frac{h\nu}{k_b T},$$

тогда формула Планка преобразуется в формулу Рэля — Джинса (2.6):

$$\varepsilon(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} k_b T.$$

Иногда в практических расчетах удобно использовать формулу Планка, записанную не через линейные частоты  $\nu$ , а через длину волны  $\lambda$ . Для перехода к другой переменной следует воспользоваться соотношением

$$\varepsilon(\nu, T) d\nu = \varepsilon(\lambda, T) d\lambda.$$

Интегрируем его

$$\int_0^{\infty} \varepsilon(\nu, T) d\nu = \int_0^{\infty} \varepsilon(\lambda, T) d\lambda$$

и выполняем в левой части замену переменной интегрирования  $\nu$  на  $\lambda = c/\nu$ :

$$\int_0^{\infty} \varepsilon(\nu, T) d\nu = - \int_{\infty}^0 \varepsilon(\nu, T) \frac{c}{\lambda^2} d\lambda.$$

После смены пределов интегрирования в правой части этого соотношения получаем равенство

$$\int_0^{\infty} \varepsilon(\nu, T) \frac{c}{\lambda^2} d\lambda = \int_0^{\infty} \varepsilon(\lambda, T) d\lambda,$$

из которого, принимая во внимание формулу (2.7а), получаем

$$\varepsilon(\lambda, T) = 2\pi h \frac{c^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\lambda k_0 T} - 1}. \quad (2.7б)$$

Результаты, достигнутые Планком, явились серьезным указанием на то, что нельзя применять подходы классической физики при описании теплового излучения.

## 2.6. Внешний фотоэффект

Внешним фотоэлектрическим эффектом, или просто *фотоэффектом*, называется процесс испускания электронов веществом при освещении его светом. Фотоэффект относится к числу явлений, в которых проявляются корпускулярные, а не волновые свойства излучения.

Указанное явление было открыто в 1887 г. Г. Герцем, который заметил, что если один из цинковых шариков разрядника освещать

ультрафиолетовым светом, то проскакивание искры между шариками будет происходить при меньшем между ними напряжении. Но Герцу не удалось объяснить этот факт.

В 1888 г. В. Гальвакс установил, что причиной такого влияния освещения является появление свободных зарядов при облучении шариков разрядника. Фотоэффект был детально исследован в течение двух лет с 1888 по 1889 гг. А. Столетовым, который обнаружил ряд закономерностей:

- 1) наиболее эффективное влияние на фотоэффект производят УФ лучи;
- 1) величина испущенного веществом заряда пропорциональна поглощенной им энергии;
- 2) вылетающие с поверхности вещества частицы имеют отрицательный знак;
- 3) фотоэффект принадлежит к безынерционным явлениям, поскольку не обнаруживается запаздывание в появлении испускаемых частиц в промежутке  $10^{-10}$  с после начала освещения.

В 1898 г. Ф. Ленард и Дж. Томсон, изучая отклонение частиц, появляющихся при фотоэффекте, в электрических и магнитных полях, измерили их удельный заряд. Полученные данные позволили прийти к выводу, что этими частицами являются электроны.

Основные законы фотоэффекта проверяются на простой установке, схема которой изображена на рис. 2.7. В стеклянной колбе, из которой выкачен воздух, имеется кварцевое окошко, через которое может проникать УФ излучение. Светом с интенсивностью  $J$  и частотой  $\nu$  через это окошко освещают катод  $K$ , изготовленный из исследуемого материала. Под действием электрического поля выбитые из катода фотоэлектроны перемещаются к аноду  $A$ . В электрической цепи возникает фототок  $I_{\phi}$ , его значение определяется по гальванометру. Напряжение  $U$  между анодом и катодом, которое может изменяться потенциометром  $R$ , измеряется вольтметром.

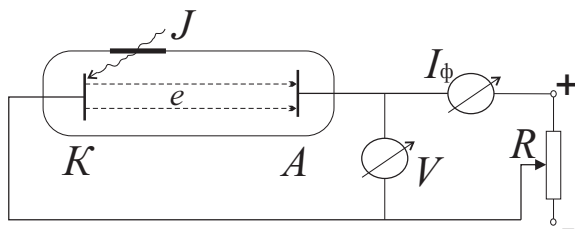


Рис. 2.7. Схема установки для изучения фотоэффекта

Измеряемая в опытах сила фототока  $I_\phi$  зависит от количества фотоэлектронов, которые вылетают из катода и оседают на аноде. Установлено, что фототок также зависит от материала катода и состояния его поверхности. В опытах можно независимо изменять  $J$ ,  $\nu$  и  $V$ .

Обсудим основные особенности экспериментальной проверки четырех законов фотоэффекта.

Первый закон, называемый законом Столетова, утверждает, что сила фототока  $I_\phi$  прямо пропорциональна интенсивности  $J$  падающего на вещество света:

$$I_\phi = \alpha \cdot J.$$

На рис. 2.8 показаны линейные зависимости силы фототока  $I_\phi$  от интенсивности  $J$  при двух значениях напряжения  $V$  между катодом и анодом.

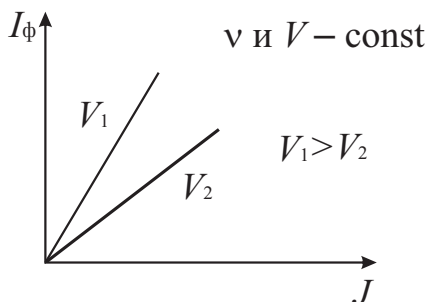


Рис. 2.8. Зависимость фототока от интенсивности света

Чтобы построить изображенные на рис. 2.8 прямые линии, катод освещают монохроматическим светом при постоянных значениях частоты  $\nu$  и напряжения  $V$ . При этих условиях измеряют значение фототока  $I_{\phi}$ , изменяя значения интенсивности  $J$  падающего света.

Второй закон фотоэффекта говорит о том, что для каждого вещества существует такая частота  $\nu_k$  падающего света, ниже которой фотоэффект не обнаруживается. Эту частоту называют *красной границей фотоэффекта*. Она различна для разных материалов.

Этот закон проверяется путем построения спектральной характеристики  $I_{\phi}(\nu)$ , т. е. кривой, показывающей зависимость фототока  $I_{\phi}$  от частоты  $\nu$  падающего света, при постоянных значениях интенсивности  $J$  падающего света и напряжения  $V$  между катодом и анодом. Вид кривой  $I_{\phi}(\nu)$  зависит от материала катода (рис. 2.9). Значение фототока  $I_{\phi}$  при изменении частоты  $\nu$  света может изменяться или монотонно, или иметь максимум на определенной частоте, уменьшаясь по обе стороны от него.

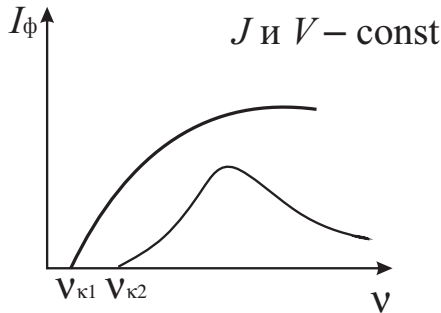


Рис. 2.9. Зависимости фототока от частоты света для разных катодов

Согласно третьему закону максимальная кинетическая энергия  $T_{\text{кин}}^{\text{max}}$  фотоэлектронов (начальная скорость) не зависит от интенсивности  $J$  падающего света.

Подтвердить выполнение этого закона позволяет построение и анализ вольт-амперных характеристик, т. е. зависимо-

стей силы фототока  $I_\phi$  от напряжения  $V$  между катодом и анодом, для нескольких значений интенсивности  $J$  падающего света при неизменном значении его частоты  $\nu$ . Вольт-амперные кривые  $I_\phi(V)$  для двух разных значений интенсивности  $J$  представлены на рис. 2.10.

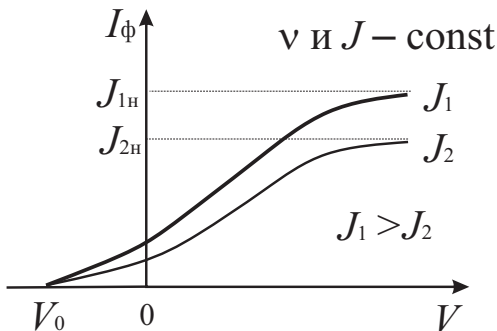


Рис. 2.10. Вольт-амперные кривые для двух интенсивностей света

При положительных значениях напряжения  $V > 0$  фототок  $I_\phi$  вначале возрастает с ростом напряжения  $V$ . Начиная с некоторого значения напряжения, фототок остается неизменным, при этом он достигает максимального значения  $I_{н}$ , которое называется *током насыщения*. При таких значениях напряжения все выбитые из катода фотоэлектроны долетают до анода.

При отрицательном напряжении  $V < 0$  между катодом и анодом создается задерживающее поле. Часть электронов, которые не обладают достаточной для его преодоления кинетической энергией, возвращаются обратно на катод, не достигнув анода. По мере увеличения задерживающего поля возрастает его тормозящее действие. При определенном отрицательном значении напряжения  $V = V_0$  (*запирающее напряжение*) все фотоэлектроны, даже обладающие максимальной кинетической энергией, которую можно определить по формуле



$$T_{\text{кин}}^{\text{max}} = \frac{mv_{\text{max}}^2}{2} = e|V_0|,$$

возвращаются на катод.

Особенностью кривых  $I_{\phi}(V)$ , которые показаны на рис. 2.10 для разных значений интенсивности  $J$  падающего света, является то, что значение  $V_0$  для них одинаково. Следовательно,  $T_{\text{кин}}^{\text{max}}$  не зависит от интенсивности  $J$  падающего света.

Четвертый закон фотоэффекта утверждает, что максимальная кинетическая энергия  $T_{\text{кин}}^{\text{max}}$  фотоэлектронов (начальная скорость) зависит от частоты  $\nu$  падающего света, причем зависимость линейна.

Проверить этот закон можно путем построения вольт-амперных характеристик при фиксированных, но разных значениях частот  $\nu$  падающего света и при его постоянной интенсивности  $J$  (рис. 2.11). Из анализа кривых  $I_{\phi}(V)$  следует, что максимальная кинетическая энергия  $T_{\text{кин}}^{\text{max}}$  фотоэлектронов, связанная со значением  $V_0$ , изменяется при изменении частоты  $\nu$  падающего света. И чем больше частота, тем больше кинетическая энергия.

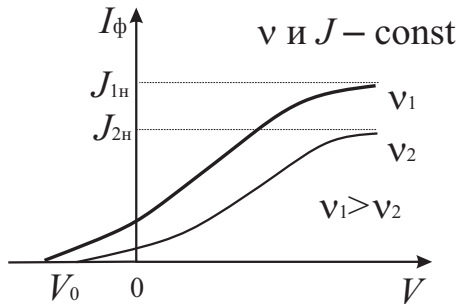


Рис. 2.11. Вольт-амперные кривые для разных частот света

В линейном характере зависимости  $T_{\text{кин}}^{\text{max}}(\nu)$  можно убедиться, построив зависимость модуля запирающего напряжения  $|V_0|$  от ча-

стоты  $\nu$  (рис. 2.12). Угол  $\alpha$  наклона прямой не будет зависеть от материала, из которого изготовлен катод.

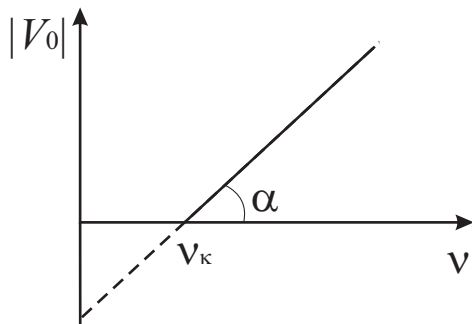


Рис. 2.12. График функции  $|V_0|(\nu)$

## 2.7. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта

Законы фотоэффекта не смогли объяснить в рамках классического волнового подхода к излучению. Согласно электромагнитной теории света электроны в веществе, из которого изготовлен катод, под действием падающей электромагнитной волны совершают вынужденные колебания. Их амплитуды пропорциональны амплитуде этой волны. В случае резонанса между колебанием падающей волны и собственным колебанием электрона амплитуда колебания электрона становится большой. Это может привести к разрыву связи электрона с атомом и выходу электрона из вещества с некоторой скоростью (кинетической энергией  $T_{\text{кин}}$ ). Необходимая для этого энергия заимствуется у падающей волны, а ее величина находится в прямой зависимости от интенсивности  $J$  этой волны. Но это противоречит эксперименту, так как от интенсивности  $J$  падающей волны зависит лишь количество выбиваемых фотоэлектронов (первый закон фотоэффекта), а кинетическая энер-

гия  $T_{\text{кин}}$  электронов зависит от частоты  $\nu$  (четвертый закон) и не зависит от интенсивности  $J$  (третий закон). Кроме того, с позиций волновой теории не объясняется и второй закон фотоэффекта.

В 1905 г. А. Эйнштейн показал, что все закономерности фотоэффекта не сложно понять, если опираться на корпускулярную точку зрения на излучение. Он развил идеи Планка и предположил, что излучение испускается (поглощается) и распространяется только порциями с энергией  $\Delta E = h\nu$ , и ввел термин для этой порции — «квант». В 1926 г. Г. Льюис такой «квант» назвал фотоном.

Согласно гипотезе Эйнштейна в монохроматическом свете частоты  $\nu$  все фотоны имеют одинаковую энергию  $E = h\nu$ . Поглощение света представляется как процесс с поглощением одного фотона одним электроном, при котором фотон передает всю свою энергию электрону. Вероятность поглощения электроном одновременно двух и более фотонов ничтожно мала.

Закон сохранения энергии при поглощении фотона выражает уравнение, которое называют *уравнением Эйнштейна для фотоэффекта*:

$$h\nu = A_1 + A_2 + T_{\text{кин}}, \quad (2.8a)$$

где  $A_1$  — энергия отрыва электрона от атома;  $A_2$  — работа выхода электрона за пределы поверхности тела;  $T_{\text{кин}}$  — кинетическая энергия электрона. В соответствии с этим уравнением энергия фотона, поглощенного электроном, будет потрачена на отрыв электрона от атома, работу по выходу электрона за пределы поверхности тела и сообщение электрону кинетической энергии.

У металлов имеется большое количество свободных электронов, поэтому для них  $A_1 = 0$ . Обозначим  $A_2$  через  $A$ , тогда для металлов запишем уравнение

$$h\nu = A + T_{\text{кин}}. \quad (2.8б)$$

На основе квантового подхода к излучению и уравнения Эйнштейна можно объяснить законы фотоэффекта.

Начнем с первого закона. Количество выбитых за единицу времени фотоэлектронов, определяющих силу фототока  $I_{\text{ф}}$ , должно быть прямо пропорционально количеству падающих за это время фотонов, которые определяют интенсивность излучения  $J$ .

Перейдем ко второму закону. Фотоэффект происходит при условии, что  $h\nu \geq A$  (для металла). Это означает, что имеется такая минимальная частота  $\nu_{\text{к}}$  (красная граница)  $h\nu_{\text{к}} = A$ , для которой еще можно наблюдать фотоэффект.

Наконец, обратимся к третьему и четвертому законам. Из уравнения Эйнштейна следует, что кинетическая энергия  $T_{\text{кин}}$  электрона не зависит от интенсивности  $J$ , а зависит от частоты  $\nu$  падающего света, причем линейно.

Уравнение Эйнштейна можно экспериментально проверить. Наиболее точная проверка выполнена в 1926 г. П. Лукирским. Она состояла в построении зависимости абсолютной величины запирающего напряжения  $|V_0|$  от частоты  $\nu$  падающего света:

$$|V_0| = \frac{h}{e} \nu - \frac{A}{e}.$$

Эта линейная зависимость получается непосредственно из уравнения Эйнштейна (2.86). Отношение  $h/e$  постоянной Планка  $h$  к величине заряда  $e$  электрона определяет тангенс угла  $\alpha$  наклона прямой линии  $|V_0| = f(\nu)$  (см. рис. 2.12).

## 2.8. Эффект Комптона

В 1923 г. А. Комптон, исследуя рассеяние высокоэнергетических рентгеновских лучей (см. гл. 8) с длиной волны  $\lambda$  различными веществами, обнаружил, что в рассеянном излучении содержатся, наряду с лучами первоначальной длины волны  $\lambda$ , еще и лучи с большей длиной волны  $\lambda'$ . Это явление назвали *эффектом Комптона*. В этом

эффекте особенно явно проявляется квантовая природа электромагнитного излучения.

Схема установки для наблюдения эффекта Комптона изображена на рис. 2.13. Излучение рентгеновской трубки  $PT$ , которое образуется при торможении электронов на аноде (антикатоде)  $A$ , попадает на диафрагму  $D$  и проходит через нее. Выделяемый диафрагмой узкий пучок монохроматического рентгеновского излучения направляется на рассеивающее вещество  $PB$ . Рассеянные под углом  $\Theta$  рентгеновские лучи проходят через щель  $Щ$ , после чего попадают на рентгеновский спектрограф  $PC$ , с помощью которого регистрируется излучение.

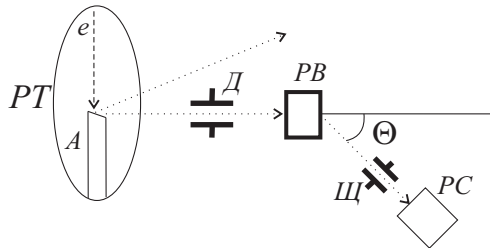


Рис. 2.13. Схема установки в опыте Комптона

Рассмотрим результаты исследований рассеянного рентгеновского излучения в зависимости от угла рассеяния  $\Theta$  и вида рассеивающего вещества.

На рис. 2.14, *a* показано первичное рентгеновское излучение с длиной волны  $\lambda$  как спектральное распределение его интенсивности  $J$ . На рис. 2.14, *б* и рис. 2.14, *с* представлены спектральные составы рассеянного на графите излучения при углах рассеяния  $\Theta$ , которые равны  $50^\circ$  и  $90^\circ$  соответственно.

Наблюдаются следующие зависимости в рассеянном излучении, в котором присутствует и первоначальная линия с длиной волны  $\lambda$ , и спектральная линия с длиной волны  $\lambda'(\lambda')$ , смещенной в сторону длинных волн.

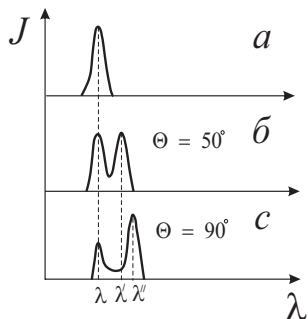


Рис. 2.14. Спектр рассеянного при разных углах излучения

1. Разность  $\Delta\lambda = (\lambda' - \lambda)$ , называемая комptonовским сдвигом, зависит от угла рассеяния  $\Theta$ , а именно, она увеличивается при росте этого угла.

2. При увеличении угла рассеяния  $\Theta$  интенсивность несмещенной линии падает, а интенсивность смещенной линии возрастает.

На рис. 2. 15, *a* дано спектральное распределение интенсивности первичного рентгеновского излучения с длиной волны  $\lambda$ . На рис. 2.15, *б* и рис. 2.15, *с* приведены спектральные составы излучения, рассеянного под одним и тем же углом  $\Theta$ , но разными веществами: натрием Na и медью Cu соответственно.

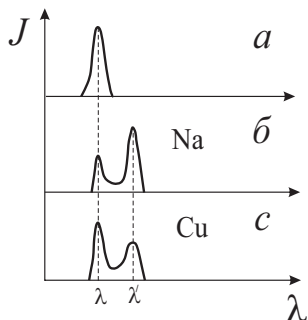


Рис. 2.15. Спектры рассеянного разными веществами излучения

Можно отметить следующие особенности.

1. Величина сдвига  $\Delta\lambda$  не зависит от рассеивающего вещества.
2. При уменьшении атомного номера рассеивающего вещества интенсивность несмещенной линии падает, а интенсивность смещенной линии увеличивается.

Эффект Комптона нельзя объяснить с волновой точки зрения. Согласно этому взгляду механизм рассеяния заключается в том, что раскачивающиеся электромагнитным полем падающей волны электроны испускают во все стороны вторичное излучение с частотой падающей волны. Значит, длины волн рассеянного и падающего излучения должны совпадать.

Все особенности эффекта Комптона можно объяснить, если предполагать, что природа излучения корпускулярная, т. е. излучение представляет собой поток фотонов, двигающихся в вакууме со скоростью  $c$ . Отметим, что масса покоя фотона равна нулю:  $m_{\text{оф}} = 0$ , а корпускулярные характеристики фотона: энергия и импульс, связаны с волновой характеристикой излучения — частотой  $\nu$  (длиной волны  $\lambda$ ):

$$E_{\text{ф}} = h\nu = hc/\lambda, \quad (2.9)$$

$$p_{\text{ф}} = \frac{E_{\text{ф}}}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\underbrace{2\pi}_{=\hbar}} k = \hbar k, \quad (2.10)$$

где  $k = 2\pi/\lambda$  — волновое число, равное числу длин волн  $\lambda$ , укладываемых на длине  $2\pi$ .

Рассеяние рентгеновского излучения будем рассматривать как процесс упругого столкновения фотонов с практически свободными электронами. Такими электронами считаем те, у которых энергия связи с атомом значительно меньше энергии, которую фотон может передать электрону при соударении с ним. Это условие выполняется для высокоэнергетического рентгеновского излучения и легких атомов, так как энергия рентгеновского фотона более 10 кэВ, а энергия связи электронов в атоме около 10 эВ.

Допустим, что с покоящимся свободным электроном с энергией покоя  $E_0 = m_0 c^2$  и импульсом  $\vec{p}_0 = 0$  соударяется фотон с энергией  $E_\phi = hc/\lambda$  и импульсом  $\vec{p}_\phi$ , значение которого равно  $p_\phi = h/\lambda$ . После столкновения энергия и импульс электрона, а также фотона изменятся. Электрон отдачи будет обладать энергией  $E = mc^2$  и импульсом  $\vec{p} = m\vec{v}$ , а фотон — энергией  $E'_\phi = hc/\lambda'$  и импульсом  $\vec{p}'_\phi$ , величиной  $p'_\phi = h/\lambda'$ .

Для упругого соударения запишем законы сохранения импульса и энергии:

$$\vec{p}_\phi = \vec{p} + \vec{p}'_\phi,$$

$$E_0 + E_\phi = E + E'_\phi.$$

Для векторного уравнения нарисуем диаграмму (рис. 2.16).

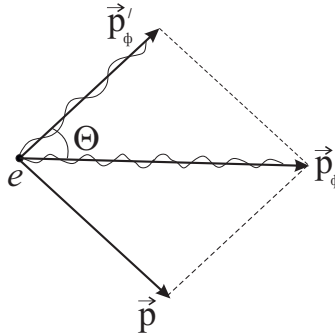


Рис. 2.16. Векторная диаграмма для импульсов

Основываясь на этой диаграмме и используя формулу элементарной тригонометрии («теорема косинусов»), получим выражение для квадрата импульса  $p^2$  электрона отдачи:

$$p^2 = p_\phi^2 + p'^2_\phi - 2p_\phi p'_\phi \cos \Theta,$$

где угол  $\Theta$  между векторами  $\vec{p}_\phi$  и  $\vec{p}'_\phi$  — это угол рассеяния фотона (угол между направлением распространения первичного и рассеянного излучения).



Второе уравнение для энергии запишем в виде

$$E = E_o + (E_\phi - E'_\phi)$$

и возведем его левую и правую части в квадрат:

$$E^2 = E_o^2 + E_\phi^2 + E_\phi'^2 - 2E_\phi E'_\phi + 2E_o(E_\phi - E'_\phi).$$

Разделим это выражение на  $c^2$ , после чего вычтем из него почленно выражение для квадрата импульса  $p^2$  электрона. Затем будем учитывать связь полной энергии  $E$  и импульса  $p$  (см. формулу (1.21)):

$$\begin{aligned} \frac{E^2}{c^2} - p^2 = m_o^2 c^2 &= \frac{E_o^2}{c^2} + \underbrace{\frac{E_\phi^2}{c^2} - p_\phi^2}_{=0} + \underbrace{\frac{E_\phi'^2}{c^2} - p_\phi'^2}_{=0} - \\ &- 2 \frac{E_\phi E'_\phi}{c^2} + 2 \underbrace{p_\phi}_{=E_\phi/c} p'_\phi \cos \Theta + 2 \frac{E_o(E_\phi - E'_\phi)}{c^2}. \end{aligned}$$

Принимая во внимание равенства (1.19) и (2.10), произведем сокращение нескольких членов. В результате получим выражение:

$$\underbrace{\frac{E_o^2}{c^2}}_{=m_o^2} (E_\phi - E'_\phi) = \frac{E_\phi E'_\phi}{c^2} (1 - \cos \Theta).$$

Учитывая равенство (2.10), запишем найденное выражение в виде

$$m_o c h \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = \frac{h}{\lambda} \frac{h}{\lambda'} (1 - \cos \Theta).$$

После умножения этого выражения на  $\frac{\lambda \lambda'}{m_o c}$  получим формулу

для вычисления изменения длины волны  $\Delta \lambda$  при рассеянии:

$$\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_o c} (1 - \cos \Theta) = 2 \Lambda_c \sin^2 \frac{\Theta}{2}, \quad (2.11)$$

где  $\Lambda_c = \frac{h}{m_0 c}$  — это *комптоновская длина волны* электрона,

значение которой равно  $\Lambda_c = 0,0243 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0,0243 \text{ \AA}$ .

Проанализируем найденную формулу (2.11).

1. Из формулы следует, что комптоновское смещение  $\Delta\lambda$  не зависит от длины волны  $\lambda$  падающего рентгеновского излучения.

2. Она показывает, что увеличение длины волны  $\lambda'$  при рассеянии определяется только массой рассеивающих частиц  $m_0$  и углом рассеяния  $\Theta$ .

3. Формула не объясняет увеличение интенсивности  $J$  смещенной линии в рассеянном излучении при возрастании угла рассеяния  $\Theta$ .

4. Уменьшение интенсивности  $J$  смещенной линии и увеличение интенсивности  $J$  несмещенной линии в спектре рассеяния по мере роста атомного номера рассеивающего вещества обусловлено следующим аспектом. С ростом атомного номера увеличивается число электронов, которые сильно связаны с атомом. При рассеянии фотонов на электронах с сильной связью обмен энергией и импульсом происходит уже с самим атомом. Масса атома много больше массы электрона, значит, комптоновское смещение  $\Delta\lambda$  будет мало.

5. При рассеянии видимого света относительное изменение длины волны  $\Delta\lambda/\lambda$  составляет тысячные доли процента от длины волны  $\lambda \approx 5000 \text{ \AA}$  падающего света, а для рентгеновских лучей это изменение равно процентам, поскольку  $\lambda \approx 1 \text{ \AA}$ . Эффект Комптона не наблюдается при выполнении следующего неравенства для длины волны  $\lambda$  первичного излучения:

$$\lambda \gg \Lambda_c .$$

Следовательно, для излучения с большой длиной волны утверждение классической теории о неизменности длины волны при рассеянии является верным.

## 3. МОДЕЛИ СТРОЕНИЯ АТОМА

---

### 3.1. Закономерности в атомных спектрах. Формула Бальмера

До середины XIX века в науке господствовало убеждение, что атомы являются неделимыми частицами материи. Движение материи понималось как механическое перемещение атомов. В конце XIX века начали появляться новые данные, указывающие на сложную структуру атомов. Например, при исследовании электрического разряда в газах были открыты электроны, которые, как выяснилось, имеют массу, во много раз меньшую массы атомов. Было установлено, что атомы являются сложными системами, образованными электрически заряженными частицами. Возник вопрос о строении атома, его структуре.

Ценная информация, используемая при построении моделей атома, была получена экспериментально из атомных спектров излучения и поглощения. Такие спектры наблюдаются для разреженных одноатомных газов, т. е. систем, состоящих из изолированных атомов, которые могут испускать (поглощать) электромагнитные волны. Их спектры излучения (поглощения) называются *линейчатыми спектрами*, так как состоят из отдельных узких спектральных линий.

Исторически первым был получен спектр атомарного водорода Н в видимой и близкой УФ областях (рис. 3.1). В видимой части спектра расположены четыре спектральные линии: красная  $H_\alpha$ , голубая  $H_\beta$ , синяя  $H_\gamma$  и фиолетовая  $H_\delta$ .

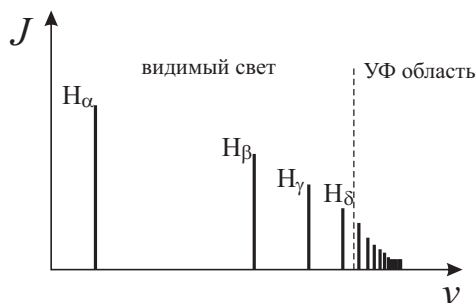


Рис. 3.1. Спектральная серия атомного спектра водорода

Анализ спектра позволил установить следующие закономерности: при увеличении частоты  $\nu$  уменьшается, во-первых, интенсивность  $J$  спектральных линий, во-вторых, расстояние между соседними спектральными линиями. Совокупность спектральных линий, которые обнаруживают в своей последовательности такие закономерности, называется спектральной серией.

Закономерность в расположении указанных спектральных линий в спектре атомарного водорода долго не удавалось выразить в математической форме. В 1885 г. И. Бальмер эмпирически подобрал формулу, по которой находятся длины волн  $\lambda$  всех спектральных линий в данной области спектра водорода:

$$\lambda = 3645,6 \frac{n^2}{n^2 - 4} \text{ \AA},$$

где  $n = 3, 4, 5 \dots$  Группа спектральных линий, которую можно найти по этой формуле, называется *серией Бальмера*.

В 1890 г. Й. Ридберг начал записывать *формулу Бальмера* в виде

$$\bar{\nu} = \underbrace{\frac{4}{3645,6}}_{=R \text{ (Å)}} \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right) = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (3.1)$$

где  $\bar{\nu} = 1/\lambda$  — спектроскопическое *волновое число*, используемое в спектроскопии и равное количеству длин волн  $\lambda$ , уходящих в единице длины (обычно в 1 см);  $R$  — *постоянная Ридберга*. Если запись волнового числа  $\bar{\nu}$  производится через обратные сантиметры ( $\text{см}^{-1}$ ), то значение  $R$  берется равным  $109677,76 \text{ см}^{-1}$  (из экспериментальных спектроскопических измерений).

Формула Бальмера (3.1) показывает, что

- 1) число  $n = 3$  дает низкочастотную границу серии Бальмера (или головную спектральную линию  $H_{\alpha}$ ), для которой  $\bar{\nu}_1 = 5R / 36$ ;
- 2) при увеличении числа  $n$  разность между волновыми числами  $\bar{\nu}$  соседних спектральных линий уменьшается;
- 3) при стремлении  $n$  к бесконечности ( $n \rightarrow \infty$ ) волновые числа  $\bar{\nu}$  спектральных линий приближаются к пределу  $\bar{\nu}_{\infty} = R / 4$ , который является высокочастотной границей серии Бальмера (высокочастотный край сплошной части серии).

Дальнейшие исследования спектра атомарного водорода показали, что имеются и другие серии, находящиеся в невидимых частях спектра. Положение спектральных линий в этих сериях определяется с помощью формул, которые аналогичны формуле Бальмера (3.1).

В УФ части спектра атомарного водорода расположена *серия Лаймана* (открыта Т. Лайманом в 1906 г.):

$$\bar{\nu} = R \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 2, 3, \dots$$

В ИК области наблюдается группа серий (рис. 3.2).

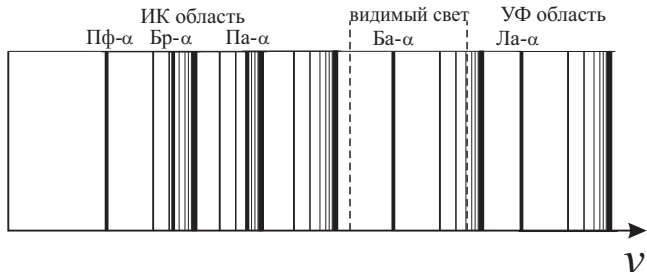


Рис. 3.2. Серии спектра атомарного водорода

*Серия Пашена*, которую впервые обнаружил Ф. Пашен в 1908 г.:

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

*Серия Брэкета*, открытая Ф. Брэккетом в 1922 г.:

$$\bar{\nu} = R \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 5, 6, \dots$$

*Серия Пфунда*, которую впервые наблюдал А. Пфунд в 1924 г.:

$$\bar{\nu} = R \left( \frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 6, 7, \dots$$

Итак, волновые числа  $\bar{\nu}$  всех спектральных линий известных серий атомарного водорода можно рассчитать по формуле, называемой *обобщенной формулой Бальмера*:

$$\bar{\nu} = R \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (3.2)$$

где  $k = 1$  для серии Лаймана,  $k = 2$  для серии Бальмера,  $k = 3$  для серии Пашена,  $k = 4$  для серии Брэкета,  $k = 5$  для серии Пфунда,  $n = k+1, k+2, \dots$

Введем следующее обозначение:  $T(n) = \frac{R}{n^2}$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$

Числа  $T(n)$  называются *спектральными термами*. В 1908 г. В. Ритц на основе эмпирического подхода сформулировал *комбинационный принцип*, являющийся основным законом спектроскопии: волновое число  $\bar{\nu}$  любой спектральной линии спектра атомарного водорода можно представить как разность двух термов  $T(n)$  при разных значениях  $n$ :

$$\bar{\nu} = T(k) - T(n).$$

Следствием комбинационного принципа Ритца является утверждение, что разность волновых чисел  $\bar{\nu}$  двух спектральных линий одной и той же серии равна волновому числу  $\bar{\nu}$  спектральной линии другой серии.

Например, если взять волновые числа двух первых спектральных линий серии Лаймана:

$$\bar{\nu}_1^n = T(1) - T(2) \text{ и } \bar{\nu}_2^n = T(1) - T(3),$$

то их разность дает волновое число головной спектральной линии серии Бальмера:

$$\bar{\nu}_2^n - \bar{\nu}_1^n = \bar{\nu}_2^b = T(2) - T(3).$$

### 3.2. Модель атома Томсона

Первые попытки создания моделей строения атома на основе существующих знаний появляются в самом начале XX века. В 1901 г. Ж. Перрен высказал предположение о ядерно-планетарном устройстве атома. В центре атома находился положительно заряженный шар, представляющий собой основную часть объема атома, а электроны располагались вокруг шара, образуя кольца.

Однако наиболее широкое распространение получила модель атома, предложенная в 1902 г. У. Томсоном (лорд Кельвин). Он высказал предположение о том, что атом представляет собой равномерно заполненный положительным зарядом шар, внутри которого равномерно распределены маленькие по сравнению с шаром отрицательно заряженные электроны,двигающиеся около своих равновесных положений. В 1904 г. эту модель развил Дж. Томсон, считавший, что электроны внутри положительно заряженного шара расположены в одной плоскости и образуют концентрические кольца. Количество электронов в нейтральном атоме должно быть таким, чтобы их отрицательный заряд компенсировал положительный заряд атома.

Рассмотрим в модели атома Томсона простейший атом — атом водорода Н (рис. 3.3). В объеме  $V_c$  шара радиусом  $R_0$ ,

$$V_c = \frac{4\pi R_0^3}{3},$$

распределен положительный заряд величиной  $e$  с объемной плотностью

$$\rho^+ = \frac{e}{V_c} = \frac{3e}{4\pi R_0^3}.$$

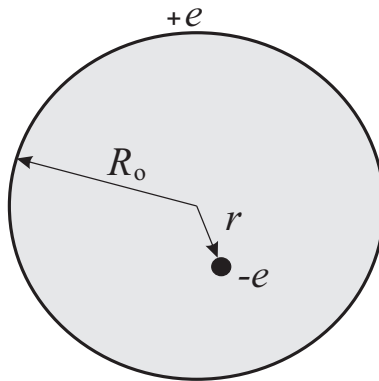


Рис. 3.3. Модель атома водорода по Томсону



В шаре находится один электрон с отрицательным зарядом величиной  $e$  и массой  $m$ , который по какой-либо причине выведен из равновесного положения (центра шара) на расстояние  $r < R_0$ . Поскольку электрон отклонился от положения равновесия, на него со стороны электрического поля начнет действовать сила притяжения  $\vec{F}(r)$ , направленная к центру шара:

$$\vec{F}(r) = -e\vec{E}(r), \quad (3.3)$$

где  $\vec{E}(r)$  — напряженность электрического поля, создаваемого положительным зарядом атома в месте нахождения электрона.

Вычислим напряженность электрического поля  $\vec{E}(r)$  в шаре, используя теорему Остроградского — Гаусса:

$$\oint_S \vec{E}(r) d\vec{S} = \frac{q}{\epsilon_0} \quad (\text{в системе СИ}),$$

$$\oint_S \vec{E}(r) d\vec{S} = 4\pi q \quad (\text{в системе СГС}),$$

где  $q$  — заряд, расположенный внутри сферы радиуса  $r$  и площадью поверхности  $S$ ;  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная, равная примерно  $8,85 \cdot 10^{-12}$  Ф/м.

Распределение положительного заряда сферически симметрично, поэтому электрическое поле  $\vec{E}(r)$ , которое создается этим зарядом, обладает такой же симметрией:

$$\vec{E}(r) = E(r) \frac{\vec{r}}{r},$$

где  $E(r)$  — значение напряженности электрического поля на расстоянии  $r$  от центра шара;  $\frac{\vec{r}}{r}$  — нормаль к поверхности шара радиуса  $r$ . Поскольку

$$d\vec{S} = dS \frac{\vec{r}}{r},$$

для системы единиц СГС получим равенство

$$\oint_S \vec{E}(r) d\vec{S} = E(r) \oint_S dS = 4\pi r^2 E(r) = 4\pi q.$$

Следовательно, в пределах шара

$$E(r) = \frac{q}{r^2}.$$

Отметим, что за пределами шара, когда выполняется неравенство  $r > R_0$  и  $q = e$ , имеем

$$E(r) = \frac{e}{r^2}.$$

Заряд  $q$  шара вычисляется по формуле

$$q = \rho^+ \frac{4\pi r^3}{3} = \frac{er^3}{R_0^3},$$

поэтому величина напряженности электрического поля в шаре равна

$$E(r) = \frac{er}{R_0^3}.$$

График зависимости  $E(r)$  представлен на рис. 3.4. Видно, что внутри шара  $E(r)$  возрастает линейно с увеличением расстояния до центра шара, а за границей шара уменьшается по квадратичному закону.

Таким образом, напряженность электрического поля  $\vec{E}(r)$  в шаре определяется следующим образом:

$$\vec{E}(r) = \frac{e}{R_0^3} \vec{r}. \quad (3.4)$$

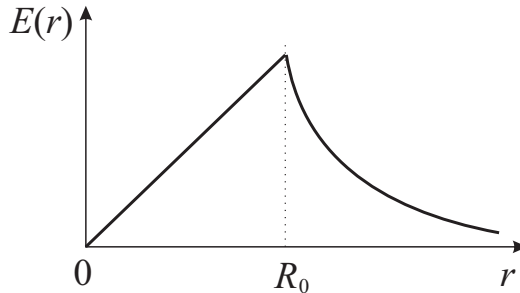


Рис. 3.4. Зависимость напряженности электрического поля от расстояния

С учетом полученного результата перепишем выражение (3.3) для приложенной к электрону силы:

$$\vec{F}(r) = - \underbrace{\frac{e^2}{R_0^3}}_{=\text{const}} \vec{r}.$$

Следовательно, для электрона, подверженного действию этой квазиупругой силы, уравнение движения имеет вид:

$$m \ddot{\vec{r}} = \vec{F}(r) = - \frac{e^2}{R_0^3} \vec{r}.$$

Запишем его в виде однородного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами:

$$\ddot{\vec{r}} + \omega_0^2 \vec{r} = 0,$$

где  $\omega_0 = \sqrt{\frac{e^2}{mR_0^3}}$  является круговой (угловой) частотой. Это уравне-

ние гармонического колебания, его решение имеет вид

$$\vec{r}(t) = \vec{A} \cos \omega_0 t + \vec{B} \sin \omega_0 t,$$

где  $\vec{A}$  и  $\vec{B}$  — постоянные векторы. В момент времени  $t = 0$  имеем

$$\vec{A} = \vec{r}(0), \quad \vec{B} = \frac{\dot{\vec{r}}(0)}{\omega_0} = \frac{\vec{v}(0)}{\omega_0}.$$

Эти равенства определяют физический смысл векторов  $\vec{A}$  и  $\vec{B}$ . Вектор  $\vec{A}$  задает смещение электрона из равновесного положения в начальный момент времени; вектор  $\vec{B}$  связан со скоростью электрона в этот же момент времени.

Итак, положение электрона в атоме, выведенного из положения равновесия, в произвольный момент времени  $t$  определяется уравнением

$$\vec{r}(t) = \vec{r}(0) \cos \omega_0 t + \frac{\vec{v}(0)}{\omega_0} \sin \omega_0 t. \quad (3.5)$$

Электрон совершает незатухающее гармоническое колебание с частотой  $\omega_0$ , и на этой частоте происходит излучение электромагнитных волн.

Модель атома по Томсону не могла объяснить линейчатый характер спектра атома водорода, так как дает только одну спектральную линию на частоте  $\omega_0$ . Эта модель атома является неверной и в настоящее время представляет интерес как один из этапов развития представлений о строении атома.

### 3.3. Опыты по рассеянию альфа-частиц. Планетарная модель атома

При построении модели атома не было информации о распределении положительного и отрицательного заряда внутри атома. Требовались знания о характере распределения в нем таких заря-

дов. Важные сведения были получены в 1909–1910 гг. сотрудниками Э. Резерфорда — Г. Гейгером и Э. Марсденом, во время исследования углового распределения  $\alpha$ -частиц, рассеянных веществом. Отметим, что  $\alpha$ -частицы представляют собой ядра гелия, т. е. частицы с положительным зарядом  $q = +2e$  и массой, примерно в 4 раза большей массы атома водорода и 7300 раз большей массы электрона. Альфа-частицы испускаются многими радиоактивными веществами (см. гл. 10) и при вылете из радиоактивного вещества имеют скорость порядка  $10^7$  м/с.

В *опытах Гейгера и Марсдена* изучалось рассеяние  $\alpha$ -частиц на тончайшей золотой фольге (рис. 3.5).

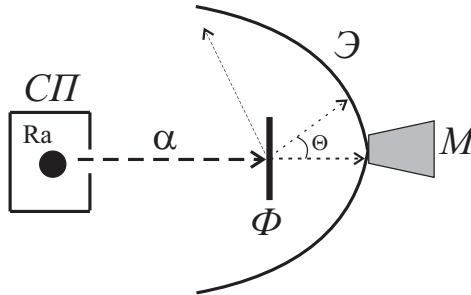


Рис. 3.5. Схема установки по рассеянию  $\alpha$ -частиц

Внутри свинцовой полости *СП* помещался радий Ra, который являлся источником  $\alpha$ -частиц. Через узкое отверстие в полости пучок  $\alpha$ -частиц выходил наружу и направлялся на золотую фольгу  $\Phi$  толщиной около 1 мкм. При прохождении сквозь десятки тысяч ее атомных слоев  $\alpha$ -частицы могли отклоняться от своего первоначального направления движения под различными углами  $\Theta$ . Затем  $\alpha$ -частицы попадали на экран  $\mathcal{E}$ , который был покрыт люминесцирующим веществом (сернистым цинком), чтобы можно было наблюдать сцинтилляции (вспышки света) при попадании  $\alpha$ -частиц. К экрану был приставлен микроскоп *М*, с по-

мощью которого визуально регистрировались сцинтилляционные вспышки.

Опыты показали, что подавляющее большинство  $\alpha$ -частиц проходило через золотую фольгу по прямым или почти прямым траекториям, отклонение в основном происходило на небольшие углы  $\Theta$  в среднем  $1^\circ - 3^\circ$ . Распределение  $\alpha$ -частиц по углам в точности соответствует статистической кривой случайных явлений (рис. 3.6).

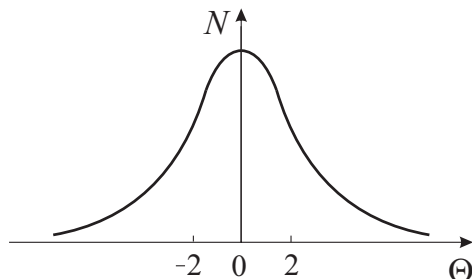


Рис. 3.6. Распределение  $\alpha$ -частиц по углам

В то же время было обнаружено, что некоторое количество  $\alpha$ -частиц, примерно 1 на 8000, отклонялось на большие углы  $\Theta$ , иногда превышающие  $90^\circ$  и доходящие до  $180^\circ$ . Теоретические расчеты, учитывающие модель атома Томсона, показали, что наблюдаемые большие отклонения  $\alpha$ -частиц невозможно объяснить через накопление отклонений на небольшие углы.

Резерфорд, анализируя полученные его сотрудниками результаты, пришел к выводам:

1. Альфа-частицы не могут отклоняться от своего первоначального пути из-за столкновений с электронами, потому что их масса значительно больше массы электронов.

2. Отклонение  $\alpha$ -частиц на большие углы происходит в результате однократного столкновения с положительным зарядом  $+Ze$  атома ( $Z$  — зарядовое число ядра или порядковый (атомный) номер

атомов фольги), который имеет большую массу и заключен в объеме радиуса  $r_0$ , много меньшем, чем объем атома радиуса  $R_0$ . Только в этом случае действующая со стороны положительного заряда атома на  $\alpha$ -частицу сила кулоновского отталкивания величины

$$F_k(r) = \frac{2Ze^2}{r^2} \quad (\text{в системе СГС})$$

достаточна велика ( $r \ll R_0$ ), и это может привести к значительному отклонению  $\alpha$ -частицы от первоначальной траектории. Вероятность попадания  $\alpha$ -частицы в положительный заряд атома мала, поэтому мало количество тех  $\alpha$ -частиц, которые отклоняются на большие углы.

Основываясь на этих заключениях, Резерфорд в 1911 г. предложил *ядерную модель атома*. Согласно его модели в центре атома находится положительно заряженное ядро, в котором сосредоточена почти вся масса атома и которое имеет радиус  $r_0$ , существенно меньший, чем радиус атома  $R_0$ . Отрицательно заряженные электроны расположены вне ядра и образуют электронную конфигурацию, определяющую размер атома. Отметим, что электронная конфигурация может быть статической, т. е. электроны могут создавать механически равновесные системы, располагаясь так, чтобы силы отталкивания электронов друг от друга уравнивались силами притяжения каждого из них к ядру. Однако было доказано (теорема Ирншоу), что такие статические системы являются неустойчивыми.

Это обстоятельство привело Резерфорда к динамической модели атома. Согласно этой модели электроны двигаются вокруг ядра по замкнутым траекториям, подобно планетам, вращающимся вокруг Солнца. Такая модель стала называться *планетарной моделью атома*.

Предложенная Резерфордом модель атома была экспериментально подтверждена немного позднее. Ее подтверждение напрямую связано с экспериментальной проверкой теории рассеяния  $\alpha$ -частиц, которую разработал Резерфорд, исходя из планетарной модели атома.

Рассмотрим сейчас задачу о движении  $\alpha$ -частицы в кулоновском поле положительного заряда, сосредоточенного в малом ядре атома. На  $\alpha$ -частицу с зарядом  $+2e$  и массой  $M$ , приближающуюся со скоростью  $\vec{v}$  и *прицельным расстоянием*  $l$  (расстояние между ядром и первоначальным направлением полета  $\alpha$ -частицы) к тяжелому атомному ядру с зарядом  $+Ze$  (рис. 3.7), действует кулоновская сила отталкивания величиной  $F_k(r)$ , где  $r$  — расстояние между ядром и  $\alpha$ -частицей. Результатом этого действия будет отклонение  $\alpha$ -частицы от первоначальной траектории.

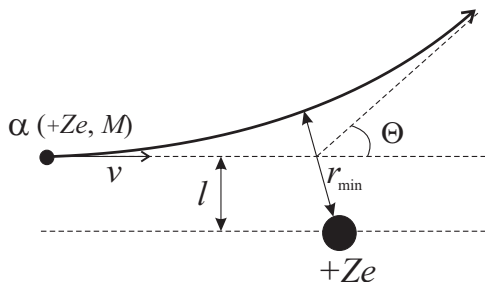


Рис. 3.7. Рассеяние  $\alpha$ -частицы ядром

Опираясь на законы классической механики и делая предположения, что ядро неподвижно, а рассеяние является «упругим столкновением», можно показать, что  $\alpha$ -частица будет двигаться по ветви гиперболы, асимптоты которой совпадают с направлениями скоростей до и после взаимодействия ее с ядром. Угол отклонения  $\Theta$ , равный углу между асимптотами гиперболы, находится по формуле системы СГС:

$$\operatorname{ctg} \frac{\Theta}{2} = \frac{Mv^2}{2Ze^2} l.$$

Эту формулу проверить экспериментально невозможно, поскольку в нее входит недоступное измерению прицельное расстояние  $l$ . На основе этой формулы Резерфорду в 1911 г. удалось



получить формулу для рассеяния  $\alpha$ -частиц, которая допускает экспериментальную проверку. Для этого он использовал понятие *эффективного поперечного сечения*  $d\sigma(\Theta)$ , которое представляет собой величину, характеризующую вероятность перехода системы двух взаимодействующих частиц в конечное состояние, определенное углом рассеяния  $\Theta$ . Оно имеет размерность площади и измеряется в барнах:  $1 \text{ барн} = 10^{-28} \text{ м}^2$ .

*Формула Резерфорда для рассеяния  $\alpha$ -частиц* имеет вид

$$\frac{dN(\Theta)}{N} = d\sigma^{macr}(\Theta) = n d\sigma(\Theta) = n \left( \frac{Ze^2}{Mv^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\Theta}{2}},$$

где  $N$  — число  $\alpha$ -частиц, падающих на поверхность рассеивающего вещества в единицу времени;  $dN(\Theta)$  — число  $\alpha$ -частиц, рассеянных в единицу времени на угол  $\Theta$  в пределах телесного угла  $d\Omega$ , равного  $2\pi \sin\Theta d\Theta$ ;  $d\sigma^{macr}(\Theta)$  — макроскопическое сечение, равное сумме микроскопических эффективных поперечных сечений  $d\sigma(\Theta)$  рассеивающих ядер;  $n$  — число рассеивающих ядер в единице объема.

Иногда формулу Резерфорда удобно записывать для дифференциального эффективного поперечного сечения  $d\sigma(\Theta)/d\Omega$ , характеризующего вероятность рассеяния на угол  $\Theta$  в единичный телесный угол:

$$\frac{d\sigma(\Theta)}{d\Omega} = \left( \frac{Ze^2}{Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\Theta}{2}},$$

так как здесь нет параметров ( $n, d\Omega$ ), зависящих от условий эксперимента.

В 1913 г. сотрудники Резерфорда произвели проверку формулы Резерфорда для рассеяния  $\alpha$ -частиц путем подсчета сцинтилляций, наблюдавшихся под разными углами  $\Theta$  за одинаковые

промежутки времени. Они установили, что опытные данные хорошо согласуются с теоретическими результатами, полученными по формуле Резерфорда, что свидетельствовало в пользу планетарной модели атома.

### 3.4. Планетарная модель Резерфорда водородоподобных атомов

Рассмотрим с точки зрения планетарной модели Резерфорда водородоподобные атомы, которыми называют ионы гелия  $\text{He}^+$ , лития  $\text{Li}^{2+}$  и т.д. У них в кулоновском поле ядра с зарядом  $+Ze$  движется со скоростью  $\vec{v}$  по круговой орбите радиуса  $R_0$  один электрон с отрицательным зарядом величиной  $e$  и массой  $m$  (рис. 3.8).

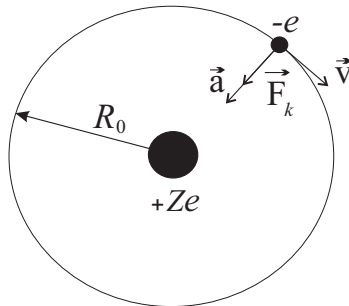


Рис. 3.8. Планетарная модель водородоподобного атома

Получим через характеристики, заданные для ядра и электрона, выражение для *внутренней энергии  $E$  атома*. В предположении, что ядро неподвижно, внутренняя энергия  $E$  атома равна полной механической энергии электрона, определяемой суммой его кинетической  $T_{\text{кин}}$  и потенциальной  $U$  энергий:

$$E = T_{\text{кин}} + U. \quad (3.6)$$

Кинетическая энергия  $T_{\text{кин}}$  в случае малых скоростей  $v$  вращения электрона ( $v \ll c$ ) равна

$$T_{\text{кин}} = \frac{mv^2}{2}.$$

Потенциальная энергия  $U$  электрона, находящегося на расстоянии  $R_0$  от ядра, является энергией кулоновского взаимодействия электрона и ядра (двух точечных зарядов  $-e$  и  $+Ze$ ), которая вычисляется по формуле

$$U(R_0) = -\int_{\infty}^{R_0} F_k(r) dr = Ze^2 \int_{\infty}^{R_0} \frac{dr}{r^2} = -\frac{Ze^2}{r} \Big|_{\infty}^{R_0} = -\frac{Ze^2}{R_0} \quad (\text{в системе СГС}).$$

Здесь за начало отсчета потенциальной энергии берется энергия системы, в которой электрон находится на бесконечности от ядра, а также принимаются во внимание следующие выражения для кулоновской силы притяжения  $\vec{F}_k(r)$ , действующей на электрон со стороны ядра:

$$\vec{F}_k(r) = -\text{grad}U(r) = -\frac{dU(r)}{d\vec{r}} = -\frac{dU(r)}{dr} \frac{d\vec{r}}{dr} = -\frac{dU(r)}{dr} \frac{\vec{r}}{r},$$

$$\vec{F}_k(r) = -e\vec{E}(r) = -\frac{Ze^2}{r^2} \frac{\vec{r}}{r} = F_k(r) \frac{\vec{r}}{r}.$$

Таким образом, для полной энергии  $E$  (см. выражение (3.6) запишем выражение

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{R_0},$$

которое можно упростить.

В атоме происходит равномерное движение электрона по окружности с линейной скоростью  $\vec{v}$ , которое является движением с ускорением  $\vec{a}$  из-за изменения направления скорости. Ускорение на-

правлено по радиусу к центру окружности и называется *нормальным* или *центростремительным ускорением*. По второму закону Ньютона механическая устойчивость атома будет достигнута, если вращение электрона по орбите радиуса  $R_0$  происходит с такой скоростью  $\vec{v}$ , при которой для центростремительной силы, роль которой выполняет сила кулоновского притяжения  $\vec{F}_k(r)$ , выполняется равенство

$$\vec{F}_k(R_0) = m \vec{a}.$$

Его можно переписать в виде:

$$\frac{Ze^2}{R_0^2} = \frac{mv^2}{R_0}.$$

Учитывая это равенство, найдем выражение для внутренней энергии  $E$  водородоподобного атома, когда электрон движется в кулоновском поле ядра по орбите радиуса  $R_0$ :

$$E = -\frac{Ze^2}{2R_0}. \quad (3.7)$$

Полная механическая энергия  $E$  электрона имеет отрицательное значение, поэтому его состояние будет связанным: движение ограничено в пространстве.

Планетарная модель атома Резерфорда сыграла важную роль в развитии теории строения атома, но и она оказалась ошибочной, в связи с тем, что обладала несколькими существенными недостатками:

а) с точки зрения классической электродинамики модель неустойчива;

б) вместо линейчатого спектра она дает непрерывный.

Обсудим противоречия планетарной модели и классической электродинамики.

Во время движения электрона по окружности радиуса  $R$  *электрический дипольный момент*  $\vec{d}$  атома периодически изменяется со временем  $t$ :

$$\vec{d}(t) = -e\vec{R}(t).$$

Электрон движется с центростремительным ускорением величиной  $a$ :

$$a = \left| \ddot{\vec{R}} \right| = \frac{v^2}{R} = \frac{Ze^2}{mR^2}.$$

Значит, согласно классической электродинамике он должен излучать электромагнитные волны, что, естественно, приводит к потере его энергии  $E$ . Поток излучения  $\Phi(t)$ , испускаемый электрическим диполем  $\vec{d}$ , находится по формуле электродинамики:

$$\Phi(t) = \frac{2}{3c^3} \underbrace{\left[ \ddot{\vec{d}} \right]^2}_{=e^2 a^2} = \frac{2Z^2 e^6}{3c^3 m^2} \frac{1}{R^4}.$$

С другой стороны, исходя из определения потока излучения и формулы (3.7), можем написать

$$\Phi(t) = -\frac{dE}{dt} = -\frac{Ze^2}{2R^2} \frac{dR}{dt},$$

где знак минус учитывает уменьшение энергии при излучении. Поэтому справедливо равенство

$$R^2 dR = -\frac{4}{3} \frac{Ze^4}{m^2 c^3} dt.$$

Проинтегрировав его с пределами интегрирования по времени от 0 до  $t$ , приходим к зависимости радиуса окружности от времени:

$$R^3(t) = R^3(0) - 4 \frac{Ze^4}{m^2 c^3} t = R^3(0) \left( 1 - \frac{t}{\tau} \right),$$

где  $\tau = \frac{m^2 c^3 R^3(0)}{4Ze^4}.$

Из полученного выражения видно, что расстояние  $R(t)$  от электрона до ядра убывает со временем  $t$ . В момент времени  $t = \tau$  электрон, двигаясь по спирали, должен упасть на ядро. Значит, время  $\tau$  — это время жизни резерфордовского атома. Из формулы для  $\tau$  можно оценить это время, оно равно примерно  $10^{-10}$  с. Следовательно, электрон должен упасть на ядро почти мгновенно.

При движении электрона по окружности радиуса  $R$  его *момент импульса*  $\vec{l}$  (*момент количества движения*), который определяется векторным произведением радиус-вектора и импульса:

$$\vec{l} = [\vec{R} \times \vec{p}] = m [\vec{R} \times \vec{v}], \quad (3.8)$$

является постоянной величиной (интегралом движения). Компонента момента импульса  $l$ , перпендикулярная плоскости, в которой вращается электрон, тоже интеграл движения и для нее выполняется равенство

$$l = mR^2\omega = mRv = \text{const.}$$

Значит, при непрерывном уменьшении расстояния  $R$  должна возрастать линейная скорость  $v$  электрона и непрерывно увеличиваться круговая частота  $\omega$  излучения. Это приводит к сплошному, а не линейчатому спектру, который наблюдается в эксперименте.

### 3.5. Квантовые постулаты Бора

Планетарная модель атома Резерфорда, построенная на представлениях классической физики, является неустойчивой и неспособной объяснить линейчатый характер атомного спектра. В 1913 г. Н. Бор, базируясь на предположениях, противоречащих классической электродинамике, разработал первую неклассическую теорию атома. На создание теории его подтолкнуло желание одновременно учесть три результата, полученные в области физики:

- 1) линейчатый характер спектров атомарных веществ;

2) предложенный Эйнштейном квантовый подход к излучению (поглощению);

3) предложенную Резерфордом планетарную модель атома.

Для того чтобы объединить эти научные достижения, Бор принимает классический подход к описанию движения электрона в атоме, т. е. планетарную модель, и одновременно выдвигает основные положения новой теории в виде двух постулатов, которые противоречат принципам классической физики.

Первый постулат называется *постулатом стационарных состояний* и утверждает, что атомы могут находиться только в определенных стационарных состояниях, не изменяющихся во времени без внешних воздействий.

В этих состояниях атомы имеют энергии  $E$ , значения которых образуют дискретный ряд:  $E_1, E_2, \dots$ . Состояние атома с минимальной энергией называется *основным (невозбужденным) состоянием*, все остальные называются *возбужденными состояниями*.

Стационарным состояниям соответствуют стационарные орбиты, по которым движутся электроны, не излучающие электромагнитные волны. Стационарными орбитами будут те, которые удовлетворяют *правилу квантования орбит*: модуль момента импульса  $|\bar{l}|$  электрона кратен постоянной Планка  $\hbar$ :

$$|\bar{l}| = n\hbar = n \frac{h}{2\pi}, \quad (3.9)$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots$ .

Второй постулат называется *постулатом частот* и устанавливает связь между значениями энергии  $E_n$  атома и частотами  $\nu$  испускаемого (поглощаемого) излучения. Он утверждает, что при переходе атома из одного стационарного состояния с энергией  $E_n$  в другое с энергией  $E_k$  испускается (поглощается) один фотон определенной частоты  $\nu$ , которая находится из равенства

$$h\nu = E_n - E_k. \quad (3.10)$$

Если выполняется неравенство  $E_n > E_k$ , то будет излучаться фотон, т. е. излучение происходит при переходе атома из состояния с большей энергией в состояние с меньшей энергией, при этом электрон переходит с удаленной от ядра орбиты на более близкую. Если  $E_n < E_k$ , то фотон поглощается.

*Постулаты Бора* о существовании стационарных состояний атома были экспериментально подтверждены опытом, выполненном в 1913 г. Дж. Франком и Г. Герцем. Они наблюдали за прохождением пучка электронов, ускоренных электрическим полем, через пары ртути Hg.

На рис. 3.9 приведена схема установки, которая использовалась в опыте. В стеклянном сосуде, который заполнен парами ртути под небольшим давлением ( $\approx 0,1$  мм рт. ст.), находятся три электрода: катод  $K$ , сетка  $C$  и анод  $A$ . Вследствие термоэлектронной эмиссии из катода вылетают электроны и ускоряются разностью потенциалов  $V_{kc}$ , приложенной между катодом и сеткой. Ее можно плавно менять потенциометром  $R$  и измерять вольтметром. В области пространства между катодом и сеткой двигающиеся электроны могут испытывать соударения с атомами ртути. Между сеткой и анодом устанавливалось постоянное напряжение  $V_{ca} \approx 0,5$  В для создания слабого задерживающего поля. Это поле должны были преодолеть электроны, которые не осели на сетке, чтобы, достигнув анода, создать ток  $I_a$ , регистрируемый гальванометром.

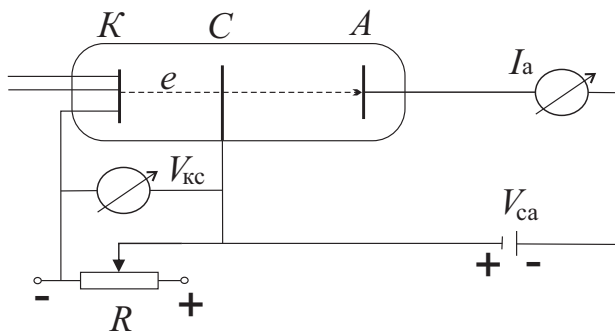


Рис. 3.9. Схема установки в опыте Франка — Герца



В опыте Франка и Герца измерялась зависимость силы анодного тока  $I_a$  от напряжения  $V_{кc}$ . Результат измерений представлен на рис. 3.10. Вначале наблюдается монотонный рост силы анодного тока  $I_a$  при увеличении ускоряющего напряжения вплоть до 4,9 В, затем происходит резкий спад тока, после чего все повторяется снова. Такой пилообразный ход кривой объясняется следующим образом. Согласно постулатам Бора атом ртути при соударении с электроном не может принять любую порцию энергии  $E$ , а только такую, которая осуществляет переход атома из основного состояния с энергией  $E_1$  в возбужденное с энергией  $E_2$ .

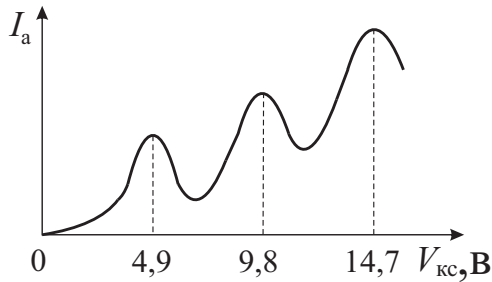


Рис. 3.10. Вольт-амперная кривая

Если значение кинетической энергии электрона

$$T_{кин} = mv^2/2 = eV_{кc}$$

меньше, чем разность  $\Delta E = E_2 - E_1$ , то соударение будет упругим и внутренняя энергия атома ртути не изменится. Кинетическая энергия  $T_{кин}$  электрона после соударения с атомом также не изменяется из-за того, что не меняется величина его скорости. Последнее утверждение является следствием закона сохранения импульса, поскольку масса электрона много меньше массы атома ртути. При упругих соударениях изменяется лишь направление скорости электронов, но это не мешает электронам достигать анода. При этом анодный ток  $I_a$  будет тем боль-

ше, чем больше напряжение  $V_{\text{кc}}$ , которое определяет кинетическую энергию  $T_{\text{кин}}$  электронов.

Если кинетическая энергия  $T_{\text{кин}}$  электрона больше  $\Delta E$ , то соударение становится неупругим. В этом случае электрон передает атому ртути энергию, равную  $\Delta E$ , и продолжает двигаться с меньшей кинетической энергией

$$T'_{\text{кин}} = T_{\text{кин}} - \Delta E.$$

Количество электронов, достигающих анод, резко уменьшится, поскольку многие электроны, столкнувшиеся с атомами ртути, не будут иметь кинетической энергии, достаточной для преодоления задерживающего поля между сеткой и анодом. Таким образом, неупругие столкновения являются причиной резкого падения силы анодного тока  $I_a$ .

Ближайшее возбужденное состояние атома ртути с энергией  $E_2$  отстает от основного состояния с энергией  $E_1$  на  $\Delta E = 4,9$  эВ, поэтому становится понятной зависимость анодного тока  $I_a$  от напряжения  $V_{\text{кc}}$  на начальном участке кривой  $I_a(V_{\text{кc}})$ . При кратных 4,9 В значениях напряжения  $V_{\text{кc}}$ , т. е. равных 9,8 В и 14,7 В, наблюдается также резкий спад кривой. Это происходит потому, что при данных значениях ускоряющего напряжения электроны могут испытывать соответственно два и три неупругих соударения с атомами ртути. При соударениях электроны тратят часть своей кинетической энергии на возбуждение атомов, переводя их из состояния с энергией  $E_1$  в состояние с энергией  $E_2$ .

### 3.6. Строение водородоподобных атомов в теории Бора

Применим теорию Бора к водородоподобным атомам, которые рассмотрим в планетарной модели Резерфорда. Такие атомы являются системами, состоящими из массивного точечного ядра с зарядом  $+Ze$  и одного электрона массой  $m$  и с зарядом  $-e$ , движущим-

ся в кулоновском поле ядра по окружности радиуса  $R$  с линейной скоростью  $\vec{v}$ .

Согласно выражению (3.7) напишем выражение для внутренней энергии  $E$  атома в единицах системы СГС

$$E = -\frac{Ze^2}{2R}.$$

Радиус  $R$  орбиты электрона находится из второго закона Ньютона, в котором сила записывается с учетом кулоновского взаимодействия между ядром и электроном:

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

Допустим, движение электрона происходит в плоскости  $XU$ , поэтому его момент импульса  $\vec{l}$  (см. выражение (3.8)) направлен вдоль координатной оси  $Z$ . Тогда длина  $l_z$  вектора  $\vec{l}$  вычисляется следующим образом:

$$l_z = m(x\dot{y} - y\dot{x}).$$

Если из прямоугольной системы координат перейти в полярную систему, координаты которых связаны преобразованиями:

$$x = R \cos \varphi,$$

$$y = R \sin \varphi,$$

то величину  $l_z$  момента импульса  $\vec{l}$  можно найти по формуле:

$$l_z = mR^2 \underbrace{\dot{\varphi}}_{=\omega = \frac{v}{R}} = mRv.$$

Учитывая правило квантования орбит (см. выражение (3.9)), напишем равенство

$$l_z = mRv = n\hbar.$$

Отсюда найдем выражение для скорости  $v$  электрона, записанного через радиус  $R$ :

$$v = \frac{n\hbar}{mR}.$$

Если подставить это выражение в выражение для радиуса  $R$  орбиты, то получим формулу для вычисления радиусов  $R_n$  орбит, на которых может находиться электрон в водородоподобном атоме:

$$R_n = \frac{\hbar^2 n^2}{mZe^2}. \quad (3.11)$$

В свою очередь, подставив формулу (3.11) в выражение для скорости  $v$ , придем к формуле для нахождения скорости  $v_n$  электрона на разрешенных орбитах:

$$v_n = \frac{Ze^2}{\hbar n}. \quad (3.12)$$

Наконец, после подстановки выражения для  $R_n$  (3.11) в формулу для внутренней энергии  $E$  водородоподобного атома в модели Резерфорда получим знаменитую формулу для определения значений энергии  $E_n$  атома или, другими словами, полной энергии электрона, находящегося на  $n$ -й стационарной орбите:

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2}. \quad (3.13)$$

Число  $n = 1, 2, 3, \dots$  называется *главным квантовым числом* и используется для стационарных орбит и значений энергии электрона на этих орбитах (для нумерации стационарных состояний атома и энергий в этих состояниях). Если  $n = 1$ , то электрон вращается по ближайшей к ядру орбите, а атом находится в основном состоянии с энергией  $E_1$ . Для остальных значений  $n > 1$  состояния атома будут возбужденными.

Запишем несколько формул для радиусов орбит и энергий электрона в атоме водорода, у которого  $Z = 1$ .

Первая орбита ( $n = 1$ ) имеет радиус  $R_1$ :

$$R_1 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,529 \text{ \AA}.$$

Он называется первым боровским радиусом.

Радиус  $R_n$  произвольной  $n$ -й орбиты электрона определяется выражением

$$R_n = R_1 n^2.$$

На рис. 3.11 схематично изображены стационарные орбиты в атоме водорода. Здесь же стрелками показаны переходы электрона с одной орбиты на другую при излучении атомом фотона.

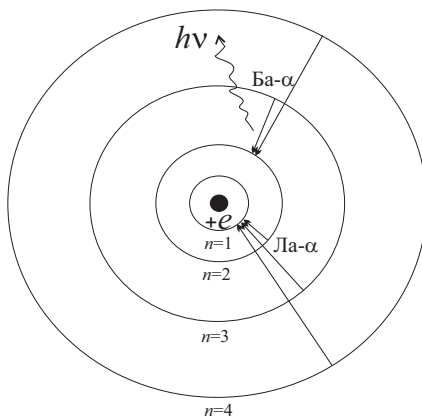


Рис. 3.11. Орбиты в модели атома водорода по Бору

Значение энергии  $E_1$  электрона на первой орбите равно

$$E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \approx -13,59 \text{ эВ}.$$

Энергия  $E_n$  электрона на  $n$ -й орбите находится как отношение

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}.$$

Энергетические состояния атомов изображают на энергетических диаграммах. Диаграмма уровней энергии атома водорода показана на рис. 3.12.

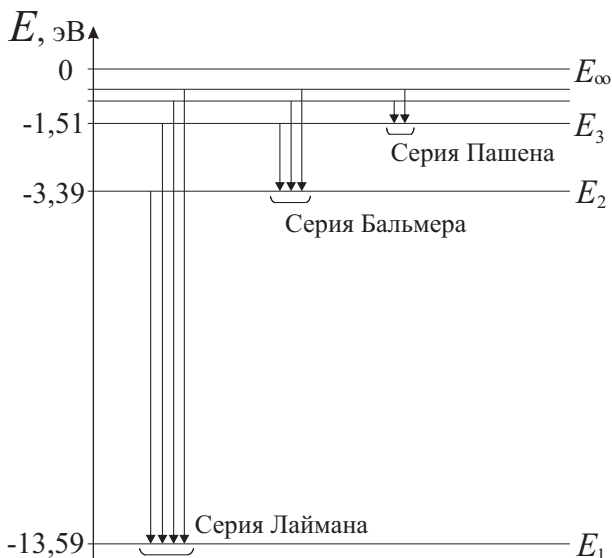


Рис. 3.12. Схема энергетических уровней атома водорода

На этом рисунке вертикальными стрелками отмечены квантовые переходы атома с одного энергетического уровня на другой при излучении атомом фотона.

Состояния электрона в атоме являются связанными, так как значения энергии электрона  $E_n < 0$ . Энергия связи  $E_{\text{св}, n}$  электрона, находящегося на  $n$ -й орбите атома, равна количеству энергии, которое необходимо затратить, чтобы перенести электрон с этой ор-

биты на бесконечность ( $n \rightarrow \infty$ ), сделав его свободным с энергией  $E_\infty = 0$ :

$$E_{\text{св}, n} = E_\infty - E_n.$$

Например, значение энергии связи  $E_{\text{св}, 1}$  электрона, находящегося на первой орбите атома водорода, равно 13,59 эВ.

Энергия ионизации  $E_{\text{ион}}$  атома или, как ее иногда называют, *первый ионизационный потенциал*, представляет собой разновидность энергии связи, она равна количеству энергии, которое необходимо затратить, чтобы удалить электрон от атома, находящегося в основном состоянии, на бесконечность и превратить его в положительный ион:

$$E_{\text{ион}} = E_\infty - E_1.$$

Например, для атома водорода энергия ионизации  $E_{\text{ион}}$  равна 13,59 эВ, как и энергия связи  $E_{\text{св}, 1}$  электрона.

Используя второй постулат Бора (см. равенство (3.10)) и формулу (3.13) для вычисления значений энергии  $E_n$  водородоподобных атомов, найдем частоту  $\nu$  фотонов, которые излучаются атомами при переходах электронов с  $n$ -й на  $k$ -ю орбиты ( $n > k$ ):

$$\nu = \frac{E_n - E_k}{h} = \frac{Z^2 m e^4}{4\pi\hbar^3} \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$

Перейдем в этой формуле от частот  $\nu$  к волновым числам  $\bar{\nu} = \frac{\nu}{c}$

спектральных линий:

$$\bar{\nu} = Z^2 \underbrace{\frac{m e^4}{4\pi\hbar^3 c}}_{=R} \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (3.14)$$

Для атома водорода полученная теоретическим образом формула (3.14) имеет точно такой же вид, какой имеет обобщенная формула Бальмера (3.2), найденная эмпирическим путем:

$$\bar{\nu} = R \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

где постоянная Ридберга  $R = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3c} = 109735,7 \text{ см}^{-1}$  (теоретическое значение).

Достаточно хорошее совпадение значения постоянной Ридберга, найденного в теории Бора, с экспериментальным значением и объяснение закономерностей в положении спектральных линий в спектре атома водорода, т. е. получение теоретическим путем обобщенной формулы Бальмера, были большим успехом теории Бора в построении модели атома.

### 3.7. Учет движения ядра в боровской модели атома

В предыдущем параграфе была рассмотрена модель водородоподобного атома по Бору в предположении, что электрон вращается вокруг неподвижного ядра. Такое допущение считалось бы оправданным, если бы масса  $M$  ядра была бесконечно большой по сравнению с массой  $m$  электрона. На самом деле отношение  $M/m$  — массы ядра атома водорода (протона) к массе электрона — равно 1836,15, а их движение происходит около общего центра инерции.

Это обстоятельство приводит к небольшим расхождениям между экспериментальными и теоретическими результатами, в частности в значении постоянной Ридберга. Однако несложно ввести поправку, которая учитывала бы и движение ядра помимо движения электрона. Для этого необходимо рассмотреть движение ядра и электрона в системе центра инерции и свести их движение к движению одной фиктивной частицы массой  $\mu$ , зависящей от  $M$  и  $m$ , около неподвижного центра по окружности с радиусом  $r$ , равным расстоянию между ядром и электроном.

Рассмотрим изложенный подход более детально. Допустим, в атоме ядро движется с линейной скоростью  $\vec{v}_я$ , а электрон —  $\vec{v}_э$ .



Местоположение ядра укажем с помощью радиус-вектора  $\vec{r}_я$ , проведенного из точки  $O$  (начало отсчета), а положение электрона определим радиус-вектором  $\vec{r}_э$ , как показано на рис. 3.13. Расстояние  $r$  между ядром и электроном равно модулю  $|\vec{r}|$  вектора  $\vec{r}$ :

$$\vec{r} = \vec{r}_я - \vec{r}_э. \quad (3.15)$$

В любой системе двух частиц можно найти геометрическую точку (обозначим ее буквой  $C$ ), совпадающую с положением их центра инерции или центра масс и называемую *центром инерции (центром масс)*.

Радиус-вектор  $\vec{r}_c$  точки  $C$  в атоме находится по формуле

$$\vec{r}_c = \frac{M\vec{r}_я + m\vec{r}_э}{M + m}. \quad (3.16)$$

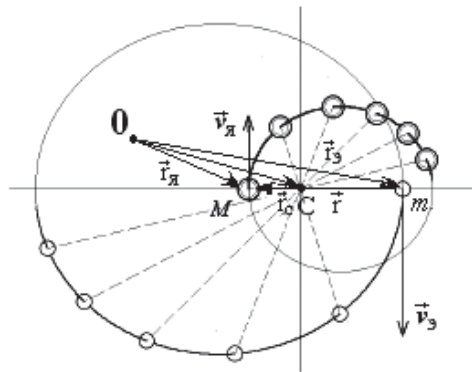


Рис. 3.13. Траектории ядра и электрона в атоме

Центр инерции атома обладает следующими свойствами:

- 1) находится на отрезке, который соединяет ядро и электрон;
- 2) делит отрезок, соединяющий ядро и электрон, на отрезки, у которых отношение длин обратно отношению масс частиц:

$$\frac{|\vec{r}_c - \vec{r}_я|}{|\vec{r}_c - \vec{r}_э|} = \frac{m}{M};$$

3) движется равномерно  $\dot{\vec{r}}_c = \text{const}$  и прямолинейно.

Из формул (3.15) и (3.16) выразим радиус-векторы  $\vec{r}_я$  и  $\vec{r}_э$  через векторы  $\vec{r}$  и  $\vec{r}_c$ :

$$\begin{cases} \vec{r}_я = \frac{m}{M+m} \vec{r} + \vec{r}_c, \\ \vec{r}_э = -\frac{M}{M+m} \vec{r} + \vec{r}_c. \end{cases}$$

Теперь запишем полную энергию  $E$  атома относительно точки  $O$ :

$$E = \frac{Mv_я^2}{2} + \frac{mv_э^2}{2} + U(|\vec{r}_я - \vec{r}_э|) = \frac{M\dot{\vec{r}}_я^2}{2} + \frac{m\dot{\vec{r}}_э^2}{2} + U(|\vec{r}|).$$

Произведем здесь замену векторов  $\vec{r}_я$  и  $\vec{r}_э$  на векторы  $\vec{r}$  и  $\vec{r}_c$ :

$$E = \frac{1}{2}(M+m)\dot{\vec{r}}_c^2 + \frac{1}{2}\frac{Mm}{M+m}\dot{\vec{r}}^2 + U(r).$$

Перейдем в систему отсчета с началом в точке  $C$ :  $\vec{r}_c = 0$ , т. е. в систему центра инерции. В этой системе полный импульс  $\vec{P}$  атома, равный сумме импульсов ядра и электрона, равен нулю ( $\vec{P}_{\text{цн}} = 0$ ), и не рассматривается движение атома как целого, а учитывается только относительное движение ядра и электрона внутри атома.

В системе центра инерции полная энергия  $E$  атома, равная его внутренней энергии, определяется выражением:

$$E_{\text{цн}} = \frac{1}{2}\frac{Mm}{M+m}\dot{\vec{r}}^2 + U(r) = \frac{1}{2}\mu\dot{\vec{r}}^2 + U(r),$$

где  $\mu = \frac{Mm}{M+m} = \frac{m}{1+m/M}$  называется *приведенной массой* ядра

и электрона.

Это выражение для энергии  $E$  атома формально совпадает с выражением для полной энергии одной частицы массой  $\mu$ , движущейся во внешнем центральном поле, в котором ее потенциальная энергия  $U(r)$  зависит от расстояния  $r$  до некоторого силового центра, взятого за начало отсчета. Из формулы для приведенной массы  $\mu$  видно, что при стремлении массы  $M$  ядра к бесконечности ( $M \rightarrow \infty$ ) масса  $\mu$  стремится к массе  $m$  электрона, а центр инерции совпадает с центром ядра.

Значит, учет движения ядра и электрона осуществляется, если рассматривается движение фиктивной частицы массой  $\mu$  относительно неподвижного центра. В этом случае значение постоянной Ридберга вычисляется по формуле

$$R = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c} \cdot \frac{1}{1+m/M}$$

и в точности совпадает с экспериментальным значением.

### 3.8. Магнитные свойства атома в теории Бора

В водородоподобном атоме электрон с отрицательным зарядом величиной  $e$  и массой  $m$ , вращающийся по окружности радиуса  $R$  с линейной скоростью  $\vec{v}$ , обладает моментом импульса  $\vec{I} = [\vec{R} \times \vec{p}]$  (см. рис. 3.14), который можно записать в виде

$$\vec{I} = mRv \vec{n}, \quad (3.17)$$

где  $\vec{n}$  — единичный вектор.

В то же самое время двигающийся по круговой орбите электрон эквивалентен контуру с током.

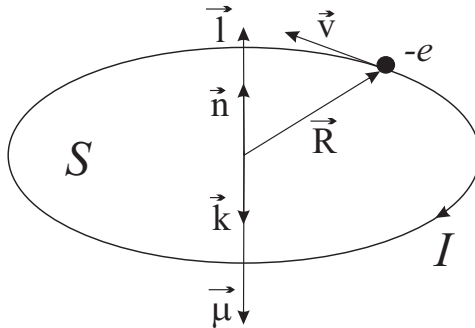


Рис. 3.14. Момент импульса и магнитный момент электрона в атоме

По определению *сила тока*  $I$  равна количеству заряда, протекающего в единицу времени через некоторую точку орбиты. В нашем случае сила тока  $I$  равна отношению модуля заряда  $e$  электрона к его периоду обращения  $T = 2\pi R / v$ :

$$I = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi R}.$$

За направление тока принято брать направление, противоположное движению отрицательно заряженного электрона.

Контур с током обладает *магнитным моментом*  $\vec{\mu}$ , направление которого определяют по правилу буравчика. Момент  $\vec{\mu}$  вычисляется по формулам:

$$\vec{\mu} = IS \vec{k} \quad (\text{в системе СИ}), \quad (3.18a)$$

$$\vec{\mu} = \frac{1}{c} IS \vec{k} \quad (\text{в системе СГС}), \quad (3.18b)$$

где  $S = \pi R^2$  — это площадь, охватываемая контуром;  $\vec{k}$  — единичный вектор нормали к поверхности  $S$ , с вершины которого ток виден идущим против хода часовой стрелки.

Вместо силы тока  $I$  и площади  $S$  в выражение (3.18б) подставим записанные выше выражения для этих величин и заменим вектор  $\vec{k}$  на  $\vec{n}$ . В результате получим следующую формулу для магнитного момента  $\vec{\mu}$  в системе единиц СГС:

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2c} Rv \vec{n}.$$

Из сравнения этой формулы и формулы для момента импульса  $\vec{I}$  электрона (3.17) видно, что магнитный момент  $\vec{\mu}$ , обусловленный орбитальным движением электрона, может быть записан через момент импульса  $\vec{I}$  электрона:

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2mc} \vec{I} = -\gamma_l \vec{I}, \quad (3.19)$$

где  $\gamma_l = \frac{e}{2mc}$  называется гиромагнитным отношением; знак « $-$ »

говорит о том, что векторы  $\vec{\mu}$  и  $\vec{I}$  антиколлинеарны (лежат на одной прямой, но противоположно направлены). Заметим, что для положительно заряженной частицы в формуле (3.19) был бы знак « $+$ ».

Правило квантования орбит в теории Бора говорит о том, что величина  $|\vec{I}|$  момента импульса  $\vec{I}$  принимает дискретные значения  $|\vec{I}| = n\hbar$ , поэтому и величина  $|\vec{\mu}|$  магнитного момента  $\vec{\mu}$  является квантованной:

$$|\vec{\mu}| = \gamma_l \hbar n = \frac{e\hbar}{2mc} n = \mu_b n,$$

где  $\mu_b = \frac{e\hbar}{2mc}$  — элементарный магнитный момент, называемый

«*магнетон Бора*». Таким образом, в теории Бора величина маг-

нитного момента  $\vec{\mu}$  атома кратна магнетону Бора  $\mu_b$ , который равен  $9,27 \cdot 10^{-24}$  Дж/Тл ( $9,27 \cdot 10^{-21}$  эрг/Гс).

Дальнейшее развитие атомной физики показало, что теории Бора присущи недостатки из-за внутренней противоречивости (она является соединением принципов классической физики с квантовыми постулатами, противоречащими им). Теория не могла объяснить интенсивность спектральных линий, поведение электрона в атоме в присутствии внешнего магнитного поля, оказалась справедливой только для водородоподобных атомов и непригодной для многоэлектронных атомов. В частности, с ее помощью невозможно было создать модель нейтрального атома гелия, следующего в периодической системе за атомом водорода. Теория Бора была лишь переходным этапом на пути построения последовательной теории строения атома, которой стала квантовая механика.

## 4. ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ЧАСТИЦ

---

### 4.1. Корпускулярно-волновой дуализм для света

**В** XVII–XIX веках были проведены многочисленные опыты со светом Р. Гуком, Х. Гюйгенсом, Т. Юнгом, О. Френелем, Ж. Фуко и др., в которых обнаруживались явления *интерференции* (пространственное перераспределение интенсивности света при наложении нескольких когерентных волн, сопровождающееся возникновением чередующихся максимумов и минимумов) и *дифракции* (отклонение света от прямолинейного направления распространения при прохождении вблизи преграды). Все эти опыты приводили к выводу о волновой природе света, который должен был рассматриваться в терминах волн.

После установления в 1864 г. Дж. Максвеллом законов электромагнитного поля было выдвинуто предположение о том, что свет — это совокупность электромагнитных волн. Электромагнитная природа света получила признание после опытов по исследованию электромагнитных волн, проведенных в 1888 г. Г. Герцем, и опытов по измерению светового давления, выполненных в 1900 г. П. Лебедевым.

С другой стороны, в начале XVIII века И. Ньютон дал научное обоснование того, что свет представляет собой поток частиц (корпускул), испускаемых светящимися телами. Кроме того, некоторые опытные факты, установленные в начале XX века (фотоэффект, эффект Комптона), противоречили представлениям о волновой природе света и для своего объяснения требовали корпускулярного (квантового) подхода к излучению.

На этапе зарождения корпускулярной и волновой теории ни та, ни другая не могли по отдельности объяснить всю совокупность известных фактов в поведении света. Корпускулярная теория могла объяснить процессы и явления, которые связаны с обменом энергией и импульсами между светом и веществом, но не объясняла особенности, возникающие при распространении света в различных средах, прохождении его через преграды и т. д., а волновая теория — наоборот.

Вначале казалось, что эти два разных взгляда на природу света взаимно исключают друг друга. Однако со временем было показано, что целый ряд оптических явлений, таких как преломление и отражение света, его прохождение через дифракционную решетку, можно рассматривать как с корпускулярной, так и волновой точек зрения. Это привело к заключению, что квантовые и волновые представления о свете являются равноправными и связанными между собой. Квантовый и волновой подходы не исключают друг друга, а взаимно дополняют и позволяют описывать подлинные закономерности распространения света и взаимодействия его с веществом. Таким образом, возник *корпускулярно-волновой дуализм* в учении о природе света.

Свет обнаруживает двойственную природу, другими словами, помимо волновых свойств могут проявляться и квантовые. В одних процессах он ведет себя как поток фотонов, в других как совокупность электромагнитных волн. Квантовые свойства обусловлены тем, что энергия, масса и импульс сосредоточены в фотонах. Волновые свойства обусловлены тем, что для фотона нельзя ука-



зять точно место, в котором он находится в определенный момент времени, а можно говорить только о вероятности обнаружения фотона в различных точках пространства, которая определяется квадратом амплитуды световой волны. Двойственная природа света видна в выражениях для корпускулярных характеристик: энергии и импульса, в которые входит частота (длина волны) света, являющаяся волновой характеристикой.

В проявлении двойственности свойств электромагнитного излучения наблюдается важная закономерность. У низкочастотного (длинноволнового) излучения, например, ИК лучей, квантовые свойства проявляются слабее, чем волновые свойства. У высокочастотного (коротковолнового) излучения, например,  $\gamma$ -лучей, наоборот, в большей степени видны квантовые свойства, а не волновые.

## 4.2. Гипотеза де Бройля

При изучении оптических явлений была обнаружена двойственная природа света. Вместе с этим, в начале XX века были проведены эксперименты, в которых у частиц вещества наблюдались волновые свойства. К ним относится эксперимент по рассеянию электронов на атомах аргона Ar, выполненный в 1921 г. К. Рамзауэром. Было обнаружено явление аномально слабого рассеяния медленных электронов (с энергией 0,6–1,1 эВ) атомами нейтральных газов, названное *эффектом Рамзауэра*.

При прохождении пучка электронов через атомарный газ происходит его ослабление вследствие рассеяния электронов на атомах газа. В классической механике рассеивание электрона рассматривается как искривление его траектории при упругом соударении с атомом. Степень отклонения электрона зависит от времени действия на него силы со стороны атома, т. е. времени пролета вблизи рассеивающего атома. Поэтому вероятность рассеивания  $w$  электрона должна монотонно уменьшаться с ростом его кинети-

ческой энергии  $T_{\text{кин}}$  (скорости), как показано штриховой линией на рис. 4.1.

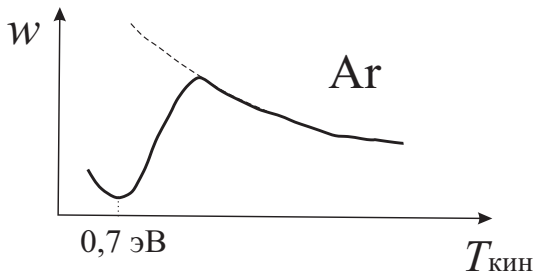


Рис. 4.1. Зависимость вероятности рассеивания от энергии электронов

В опыте Рамзауэра был получен другой результат (сплошная кривая на рис. 4.1). При некотором малом значении энергии электронов рассеяние практически исчезает и электроны проходят через газ как будто атомов на их пути нет. Для интерпретации наблюдаемого эффекта потребовалось отказаться от взгляда на электрон как на обычную классическую частицу.

В 1924 г. Л. де Бройль выдвинул гипотезу об универсальности корпускулярно-волнового дуализма, утверждая, что он присущ частицам вещества и не является особенностью одних световых частиц (фотонов). Согласно гипотезе де Бройля частица вещества может вести себя как волна и описываться не только корпускулярными характеристиками: массой, энергией и импульсом, но и волновой характеристикой — частотой (длиной волны). Соотношения между корпускулярными и волновыми характеристиками частиц точно такие же, как и для фотонов:

$$E = mc^2 = h\nu = hc/\lambda,$$

$$p = mv = h\nu/c = h/\lambda.$$

Таким образом, любой материальной частице массой  $m$ , движущейся со скоростью  $v$ , т. е. обладающей импульсом  $p = mv$ , мож-

но сопоставить волну, которая называется *волной де Бройля*, с длиной  $\lambda$ , вычисляемой по формуле

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}. \quad (4.1)$$

В качестве примера оценим порядок длины волны де Бройля  $\lambda$  для электрона, ускоренного разностью потенциалов  $V < 10$  кВ. Это нерелятивистский случай, поскольку скорость электронов  $v \ll c$ . Значит, можно воспользоваться формулой (1.9б) классической механики для вычисления модуля скорости  $v$  электронов:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{eV}{300}.$$

Выражая отсюда скорость  $v$  и подставляя ее в формулу (4.1), найдем

$$\lambda = \frac{h\sqrt{150}}{\sqrt{meV}} \approx \sqrt{\frac{150}{V}} \text{ \AA} = \frac{12,25}{\sqrt{V}} \text{ \AA}.$$

Видно, что длина волны де Бройля  $\lambda$  для электронов, ускоренных разностью потенциалов  $V = 150$  В, равна 1  $\text{\AA}$ . Она по порядку соответствует длине волны рентгеновских лучей. Следовательно, для обнаружения волновых свойств электронов необходимо использовать те же методы исследования, которые применяются при изучении дифракции и интерференции рентгеновских лучей, к примеру, использовать кристаллическую решетку.

*Гипотеза де Бройля* была экспериментально подтверждена в 1927 г. опытами К. Дэвиссона и Л. Джермера. Они изучали отражение электронов от поверхности кристалла никеля Ni. Схема установки приведена на рис. 4.2.

Электронной пушкой ЭП создавался пучок электронов, скорость которого задавалась разностью потенциалов  $V$ . Пучок направлялся под углом скольжения  $\varphi$  на кристаллические никелевые пластины и отражался от него (см. рис. 4.2). Эти пластины играли роль диф-

рационной решетки. Отраженные электроны улавливались коллектором  $K$ , соединенным с гальванометром  $G$ , по которому определяли силу тока и судили об интенсивности отражения электронов в различных направлениях.

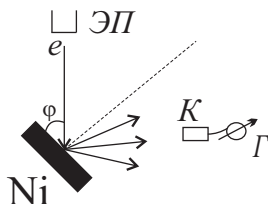


Рис. 4.2. Схема установки в опыте Дэвиссона и Джермера

Результаты измерений представлялись в виде полярных диаграмм интенсивности отражения электронов от кристалла никеля Ni, образец которой представлен на рис. 4.3.

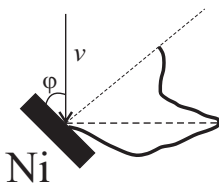


Рис. 4.3. Полярная диаграмма интенсивности отражения электронов

*Опыты Дэвиссона и Джермера* показали, что электроны ведут себя не как обычные частицы и отражаются от кристалла не по законам геометрической оптики. Было установлено, что интенсивность отражения электронов зависит от угла отражения и скорости электронов.

Дэвиссон и Джермер провели два вида опытов. Первый опыт был аналогом опыта по интерференционному отражению рентгеновских

лучей, выполненного в 1913 г. Г. Вульфом и У. Брэггом (см. гл. 8). Рентгеновские лучи испытывают интерференционное отражение от кристалла, когда их длина  $\lambda$  и угол скольжения  $\varphi$  удовлетворяют формуле Вульфа — Брэгга:

$$2d \sin\varphi = n \lambda, \quad (4.2)$$

где  $d$  — постоянная кристаллической решетки,  $n = 1, 2, \dots$  — порядок максимума отраженных лучей.

Для рентгеновских лучей условие (4.2) создается следующим способом. Монохроматические лучи с длиной волны  $\lambda$  направляются на кристалл, который может поворачиваться, изменяя угол скольжения  $\varphi$ . В опыте Дэвиссона и Джермера использовался другой способ. Поток электронов направлялся под определенным углом скольжения  $\varphi$  на кристалл никеля Ni, а за счет изменения разности потенциалов  $V$  в электронной пушке изменялась скорость электронов  $v$ , которая связана с длиной волны де Бройля  $\lambda$ . Условие Вульфа — Брэгга (4.2) в этом случае можно записать в виде

$$\sqrt{V} = n \cdot \frac{12,25}{2d \sin\varphi}.$$

Результаты опытов по отражению электронов оказались в хорошем согласии с данными, которые получали для рентгеновского излучения.

Второй опыт Дэвиссона и Джермера похож на опыт М. Лауэ по дифракции рентгеновских лучей, который был выполнен в 1912 г. (см. гл. 8). В опыте Лауэ наблюдалась дифракционная картина для рентгеновского излучения сплошного спектра, проходящего через кристалл. Она обусловлена интерференцией рассеянных вторичных волн. За счет нее распространение рассеянных лучей происходит только в определенных дискретных направлениях и для определенной длины волны  $\lambda$  в каждом из направлений.

Дэвиссон и Джермер исследовали отражение электронов, которые падали на кристалл никеля Ni с заданными скоростью  $v$  и углом

скольжения  $\varphi$ , при разных азимутальных углах кристалла (они поворачивали кристалл вокруг вертикальной оси). Было обнаружено, что сильное отражение электронов происходит лишь в определенных направлениях и при определенной скорости  $v$  в каждом таком направлении.

Таким образом, опыты Дэвиссона и Джермера показали, что у электронов проявляются свойства, характерные для волновых процессов, так как они ведут себя так же, как и рентгеновское излучение.

### 4.3. Свойства волн де Бройля

Перечислим некоторые свойства волн де Бройля.

1. Эти волны не являются физическими материальными волнами, их принято трактовать как волны вероятности. Физический смысл имеет квадрат амплитуды волны де Бройля, определяющий ее интенсивность. Значение последней в заданной точке пространства определяет вероятность обнаружения в этом же месте частицы, которой сопоставляется волна де Бройля.

2. Длина волны де Бройля уменьшается с увеличением массы частицы. Для макроскопических тел длина волны де Бройля много меньше размеров самих тел и лежит за пределом, доступным для наблюдения, поэтому волновые свойства у них не проявляются.

3. Длину волны де Бройля  $\lambda$  можно связать с кинетической энергией  $T_{\text{кин}}$  частицы, которой соответствует эта волна. Покажем это.

Начнем с релятивистского случая  $v \approx c$ . Величина импульса  $p$  частицы связана с ее полной энергией  $E$  соотношением

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}.$$

С другой стороны, полная энергия  $E$  выражается через кинетическую энергию  $T_{\text{кин}}$  ( $E = T_{\text{кин}} + m_0 c^2$ ). Учитывая это, выполним несложные преобразования формулы (4.1), после которых получим для длины волны де Бройля  $\lambda$  формулу

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{T^2 + 2m_0 c^2 T}}.$$

Для нерелятивистского случая  $v \ll c$  имеем:

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{T^2 + 2m_0 c^2 T}} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 T}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{T}{2m_0 c^2}}} \approx \frac{h}{\sqrt{2m_0 T}} = \frac{h}{m_0 v}.$$

4. Длина окружности радиуса  $r$ , которая может быть стационарной орбитой атома в теории Бора, должна равняться целому числу длин волн де Бройля

$$2\pi r = n\lambda.$$

5. Пространственное распространение волн де Бройля характеризуют фазовая  $v_\phi$  и групповая  $v_{\text{гр}}$  скорости. Установим связь между ними.

Рассмотрим волну де Бройля свободной микрочастицы, которая движется вдоль положительного направления координатной оси  $X$ . Этой волной является *бегущая плоская гармоническая волна* с круговой частотой  $\omega = 2\pi\nu$  и постоянной амплитудой  $A$ , а ее смещение  $\Psi$  относительно оси  $X$  для всех значений  $x$  и  $t$  определяется уравнением

$$\Psi(x, t) = A \cos(\omega t - kx) = A \cos \frac{Et - p_x x}{\hbar},$$

где  $k = 2\pi/\lambda$ ,  $E = \hbar\omega$ ,  $p_x = \hbar k$ , начальная фаза равна нулю. График функции  $\Psi$  в момент времени  $t = 0$  показан на рис. 4.4.

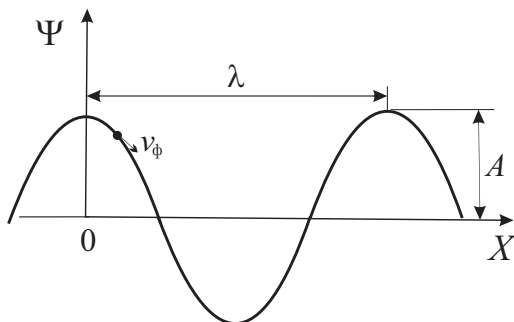


Рис. 4.4. График гармонической волны

*Фазовой скоростью*  $v_\phi$  волны называется скорость перемещения плоскости равной фазы в направлении распространения волны. Она находится из условия постоянства фазы волны:

$$(\omega t - kx) = \text{const.}$$

Дифференцируя это выражение по времени  $t$ , найдем фазовую  $v_\phi$  скорость:

$$v_\phi = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p_x} = v\lambda. \quad (4.3)$$

*Групповая скорость*  $v_{гр}$  волны — это скорость перемещения определенной амплитуды волны. Для гармонической волны нельзя ввести групповую  $v_{гр}$  скорость. Вследствие этого рассмотрим негармоническую волну де Бройля, получающуюся в результате наложения двух бегущих плоских гармонических волн  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , которые распространяются вдоль положительного направления координатной оси X с одинаковыми амплитудами  $A$  и почти равными частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$ :

$$\Psi(x, t) = \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t) = A \cos(\omega_1 t - k_1 x) + A \cos(\omega_2 t - k_2 x).$$

Применим тригонометрическую формулу сложения косинусов и получим выражение



$$\Psi(x, t) = 2A \cos\left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{2}t - \frac{k_1 - k_2}{2}x\right) \cos\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t - \frac{k_1 + k_2}{2}x\right) \approx$$

$$\approx \left| \text{так как } \omega_1 \approx \omega_2 \approx \omega_0 \right| \underbrace{\approx 2A \cos\left(\frac{\Delta\omega}{2}t - \frac{\Delta k}{2}x\right)}_{=A'} \cos(\omega_0 t - k_0 x) .$$

Найденное выражение можно трактовать следующим образом. Множитель, обозначенный  $A'$ , — это амплитуда, которая периодически медленно изменяется со временем  $t$  и при изменении координаты  $x$ , а аргумент последнего косинуса представляет собой фазу волны с частотой  $\omega_0$  и волновым числом  $k_0$ .

Итак, имеем бегущую волну с частотой  $\omega_0$  и модулированной амплитудой  $A'$ . На рис. 4.5 изображена такая волна в момент времени  $t = 0$ , рассматриваемая как суперпозиция двух гармонических волн с мало различающимися частотами.

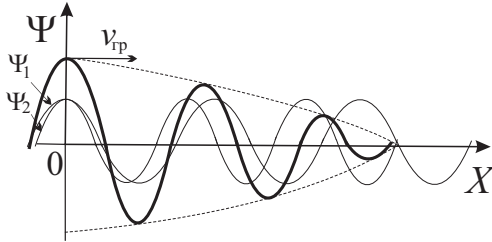


Рис. 4.5. График волны с изменяющейся амплитудой

Групповая  $v_{гр}$  скорость определяется из условия постоянства амплитуды  $A'$  волны:

$$\left(\frac{\Delta\omega}{2}t - \frac{\Delta k}{2}x\right) = \text{const.}$$

Беря производную координаты  $x$  по времени  $t$ , найдем формулу для групповой  $v_{гр}$  скорости:

$$v_{\text{гр}} = \frac{dx}{dt} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} \Big|_{\Delta k \rightarrow 0} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp_x}. \quad (4.4)$$

Сравним между собой фазовую  $v_{\text{ф}}$  и групповую  $v_{\text{гр}}$  скорости. Для этого в выражении (3.4) заменим  $\omega$  через  $v_{\text{ф}}k$  согласно выражению (3.3):

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(v_{\text{ф}}k)}{dk} = v_{\text{ф}} + k \frac{dv_{\text{ф}}}{dk}.$$

Учитывая, что волновое число  $k$  равно  $2\pi/\lambda$ , и преобразовывая это выражение, запишем

$$v_{\text{гр}} = v_{\text{ф}} + \frac{2\pi}{\lambda} \left( -\frac{\lambda^2}{2\pi} \frac{dv_{\text{ф}}}{d\lambda} \right) = v_{\text{ф}} - \lambda \frac{dv_{\text{ф}}}{d\lambda}.$$

Эта формула называется *формулой Рэлея*, она устанавливает соотношение между групповой и фазовой скоростью волн.

Когда волна распространяется в среде, в которой отсутствует дисперсия, т. е. *показатель преломления среды*

$$\mu = \frac{c}{v_{\text{ф}}}$$

не зависит от длины волны  $\lambda$  (волнового числа  $k$ ), тогда фазовая  $v_{\text{ф}}$  скорость равна групповой  $v_{\text{гр}}$  скорости

$$v_{\text{ф}} = v_{\text{гр}}.$$

Такое наблюдается, например, для света в вакууме.

Если среда обладает дисперсией  $\mu = f(\lambda)$ , то возможны следующие два случая. При нормальной дисперсии, когда показатель преломления  $\mu$  возрастает при уменьшении  $\lambda$ , имеем  $dv_{\text{ф}}/d\lambda > 0$ , значит, групповая  $v_{\text{гр}}$  скорость меньше фазовой  $v_{\text{ф}}$  скорости

$$v_{\text{гр}} < v_{\text{ф}}.$$

При аномальной дисперсии, когда  $\mu$  увеличивается при росте  $\lambda$ , имеем  $dv_{\text{ф}}/d\lambda < 0$ , поэтому групповая  $v_{\text{гр}}$  скорость больше фазовой  $v_{\text{ф}}$  скорости

$$v_{\text{гр}} > v_{\text{ф}}.$$

## 4.4. Соотношение неопределенностей Гейзенберга

Свойства микрочастиц своеобразны, так как обусловлены двойственностью их природы. Вследствие этого возникают ограничения в применении понятий классической физики при изучении свойств микрочастиц, которые отличаются от свойств обычных волн или макроскопических объектов.

Например, любая частица (тело), подчиняющаяся законам классической физики, в момент времени  $t$  занимает строго определенное место в пространстве, которое указывается радиус-вектором  $\vec{r}$  (координатами) и обладает определенным импульсом  $\vec{p}$ . Ее движение происходит по некоторой траектории. Возможность одновременного и точного измерения (в пределах погрешности измерений) положения и скорости классической частицы является столь характерным, что путем задания радиус-вектора  $\vec{r}$  и импульса  $\vec{p}$  задается состояние частицы.

В мире микрочастиц отсутствует традиционное понятие «траектория», поскольку в заданный момент времени  $t$  можно измерить точно либо координату микрочастицы, либо ее импульс. При этом вторая величина будет совершенно неизвестна. Это обстоятельство приводит к невозможности применения отмеченного выше способа задания состояния микрочастицы. Ограничение на связь координаты и импульса микрочастицы для определенного момента времени  $t$  выражает соотношение неопределенности Гейзенберга. Это соотношение было записано в 1927 г. В. Гейзенбергом и является следствием двойственности природы микрочастиц.

Найдем соотношение неопределенности Гейзенберга в рамках волнового подхода. Для этого воспользуемся понятием *волнового пакета* (ограниченное в пространстве волновое образование), который сопоставим микрочастице. Волновой пакет  $\Psi$ , который зависит от одной пространственной координаты  $x$  и времени  $t$ , можно получить наложением бесконечного множества гармонических волн, распространяющихся

вдоль положительного направления оси  $X$  с амплитудами  $A$  и почти равными частотами из малого промежутка  $2\Delta\omega$  около средней частоты  $\omega_0$ :

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A \cos(\omega t - kx) dk .$$

Для любой среды имеется зависимость  $\omega = f(k)$ , так как  $\omega = v_{\phi} k$ . Выполним разложение функции  $\omega(k)$  в ряд Тейлора около точки  $k_0$  по степеням  $\Delta k = k - k_0$  и ограничимся двумя первыми членами в этом разложении, предполагая, что интервал  $\Delta k$  мал:

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} \Delta k .$$

Подставим это разложение в выражение для волнового пакета  $\Psi$ , после чего введем новую переменную  $\Delta k = k'$ . Затем, выполняя ряд преобразований, приведем  $\Psi$ -функцию к виду:

$$\Psi = A \int_{-\Delta k}^{\Delta k} \cos \left[ \left( \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} t - x \right) k' \right] dk' \cos(\omega_0 t - k_0 x) .$$

После вычисления этого определенного интеграла получим следующее выражение:

$$\Psi = 2A\Delta k \underbrace{\frac{\sin \left[ \left( \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} t - x \right) \Delta k \right]}{\left( \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} t - x \right) \Delta k}}_{=A'} \cos(\omega_0 t - k_0 x) .$$

Из найденного выражения видно, что поведение модулированной амплитуды  $A'$  определяет функция вида

$$\frac{\sin \xi}{\xi} ,$$

$$\text{где } \xi = \left( \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k_0} t - x \right) \Delta k .$$

При изменении аргумента  $\xi$  указанная функция ведет себя следующим образом. Когда  $\xi \rightarrow 0$ , имеется главный максимум:  $\lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{\sin \xi}{\xi} = 1$ ,

при  $\xi \rightarrow \pm \pi, \pm 2\pi, \dots$  происходит пересечение с осью абсцисс:  $\frac{\sin \xi}{\xi} = 0$ .

На рис. 4.6 показан волновой пакет для начального момента времени  $t = 0$ . Волновой пакет нельзя трактовать как материальное образование, моделирующее микрочастицу. Этот термин имеет следующий простой смысл. Вероятность обнаружения микрочастицы, локализованной в определенном месте пространства, пропорциональна квадрату амплитуды соответствующего волнового пакета.

Для волнового пакета, изображенного на рис. 4.6, первые относительно главного максимума точки пересечения  $x_1$  и  $x_2$  с осью  $X$  определяются из условий

$$x_1 \cdot \Delta k = -\pi, \quad x_2 \cdot \Delta k = \pi.$$

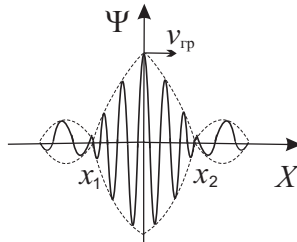


Рис. 4.6. Волновой пакет

Если отрезок  $\Delta x = x_2 - x_1$  принять за протяженность пакета, то приходим к равенству

$$\Delta x \cdot \Delta k = 2\pi.$$

Если за размер пакета принять расстояние между следующими симметрично расположенными относительно главного максимума пересечениями с осью  $X$ , то получим

$$\Delta x \cdot \Delta k = 4\pi.$$

В общем случае имеем

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq 2\pi.$$

Умножив обе части этого неравенства на постоянную Планка  $\hbar$  и учитывая, что  $p_x = \hbar k$ , получим

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq 2\pi\hbar = h, \quad (4.5)$$

где  $\Delta x$  — это область, в которой может быть обнаружена микрочастица, а  $\Delta p_x$  — изменение в этой области  $x$ -й компоненты импульса микрочастицы.

Для двух других декартовых координат  $y$  и  $z$  можно записать аналогичные неравенства:

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq h,$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq h.$$

Эти три неравенства называются *соотношениями неопределенностей Гейзенберга* для координат и компонент импульса частицы.

Согласно представленным соотношениям координаты и импульс микрочастицы не могут быть одновременно измерены. Из этих соотношений видно, что для координат и проекций импульса микрочастицы могут быть получены значения только с некоторой степенью неопределенности, и чем точнее известна координата, тем больше неопределенность в значении соответствующей проекции импульса.

Распространяется соотношение неопределенностей Гейзенберга и на такие физические величины, как энергия  $E$  частицы и время  $t$ :

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq 2\pi\hbar = h. \quad (4.6)$$

Неравенство показывает, что чем меньше время жизни  $\Delta t$  микрочастицы в некотором состоянии, тем больше неопределенность в определении ее энергии  $\Delta E$  в данном состоянии.

## 5. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

---

### 5.1. Основные положения квантовой механики

Как отмечалось в гл. 4, микрочастицы не являются ни частицами, ни волнами в традиционном смысле этих слов, так как у них обнаруживаются признаки и обычных частиц, и волн. В связи с этим классическая физика столкнулась с проблемой правильного описания движения таких объектов и их систем. В первой четверти XX века возникла необходимость в создании механики микрочастиц, учитывающей концепцию корпускулярно-волнового дуализма. Такая теория была разработана и называется она квантовая механика.

Процесс зарождения квантовой механики происходил по двум направлениям. Первое привело в середине 1925 г. к созданию В. Гейзенбергом формализма матричной механики, получившего дальнейшее развитие при участии М. Борна и П. Йордана. Они опирались на корпускулярные свойства микрочастиц. Второе направление, связанное с идеей де Бройля о наличии волновых свойств у микрочастиц, позволило в начале 1926 г. Э. Шредингеру построить волновую механику. Позднее выяснилось, что речь идет о двух формулировках, двух разных формах записи квантовой механики.

В шредингеровском подходе математический аппарат нерелятивистской квантовой механики базируется на следующих постулатах:

1. Чистые состояния микрочастиц описываются комплексными функциями  $\Psi$ , называемыми *волновыми функциями*, которые очень часто записываются в виде функций, зависящих от координат  $\vec{r}$  и времени  $t$ :

$$\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$$

и удовлетворяют *принципу суперпозиции состояний*, состоящему из двух утверждений:

а) если систему можно обнаружить в физически различных состояниях 1 или 2, описываемых соответственно  $\Psi_1$ - или  $\Psi_2$ -функциями, то она может оказаться в состоянии 3, описываемом  $\Psi_3$ -функцией, образующейся из  $\Psi_1$ - и  $\Psi_2$ -функций с помощью линейного преобразования:

$$\Psi_3 = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2,$$

где  $a_1$  и  $a_2$  — комплексные числа, не зависящие от времени  $t$ ;

б) если волновую  $\Psi$ -функцию умножить на любое не равное нулю комплексное число  $a$ , то полученная функция  $\Psi' = a\Psi$  будет соответствовать тому же состоянию.

2. *Наблюдаемой*  $f$ , которой называют измеряемую динамическую переменную (физическая величина, характеризующая микрочастицу в динамике), сопоставляется линейный самосопряженный (эрмитовый) оператор  $\hat{f}$ , определенный на множестве  $\Psi$ -функций. В квантовой механике используются формулы, которые связывают не динамические переменные, а соответствующие им операторы  $\hat{f}$ .

3. Результатом измерения наблюдаемой  $f$  является число, которое равно одному из возможных собственных значений соответствующего оператора  $\hat{f}$ .

4. Эволюция чистого состояния определяется уравнением, называемым *временным уравнением Шредингера*.  $\Psi$ -функции удовлетворяют этому дифференциальному уравнению.



Волновая  $\Psi$ -функция, описывающая состояние частицы, не имеет непосредственного физического смысла, но физический смысл приписывается квадрату ее модуля  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ , называемому *плотностью вероятности*, которая интерпретируется как вероятность обнаружить частицу в момент времени  $t$  в единичном объеме вокруг точки пространства, заданной  $\vec{r}$ . Значит, волновая функция играет роль амплитуды плотности вероятности. Такая вероятностная интерпретация  $\Psi$ -функции была дана в середине 1926 г. Борном.

Следовательно, *вероятность обнаружения*  $dW$  частицы в момент времени  $t$  в пределах объема  $dV_c$  равна произведению

$$dW = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV_c.$$

Плотность вероятности  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$  может быть измерена, поэтому она не обращается в бесконечность и записывается в виде однозначной функции координат и времени. Это накладывает ограничения на  $\Psi$ -функцию, которая должна быть однозначной, всюду конечной и непрерывной. Также непрерывными должны быть ее частные производные по координатам. Эти ограничения называются *условиями регулярности*  $\Psi$ -функции.

*Условие нормировки*  $\Psi$ -функции частицы, совершающей движение в ограниченной области пространства, записывается в виде равенства

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV_c = 1. \quad (5.1)$$

Интеграл равен единице, поскольку представляет собой вероятность обнаружения частицы в каком-либо месте пространства, которая является вероятностью достоверного события. Нормированная  $\Psi$ -функция определена с точностью до множителя, модуль которого равен единице, другими словами, до комплексного числа  $e^{i\alpha}$ , где  $\alpha$  — любое действительное число.

*Оператор*  $\hat{f}$  — это отображение  $\Psi$ -функции в функцию  $\Psi'$ :

$$\hat{f} \Psi = \Psi'.$$

Линейность оператора заключается в выполнении равенств:

$$\hat{f}(\Psi + \Psi') = \hat{f}\Psi + \hat{f}\Psi',$$

$$\hat{f}(a\Psi) = a\hat{f}\Psi,$$

где  $a$  — комплексное число.

Если  $\Psi$ -функция является собственной функцией оператора  $\hat{f}$ , то для него справедливо *уравнение на собственные функции и значения*:

$$\hat{f}\Psi = f_0\Psi.$$

Собственное значение  $f_0$  оператора  $\hat{f}$  численно равно значению наблюдаемой  $f$  квантовой системы, когда последняя находится в состоянии, описываемом  $\Psi$ -функцией.

Примерами действия оператора на функцию  $\hat{f}\Psi$  могут служить операция умножения на число или дифференцирование. Запишем в координатном представлении несколько операторов, широко используемых в квантовой механике.

*Оператор проекции импульса  $\hat{p}_x$  на координатную ось  $X$ :*

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

*Оператор импульса  $\hat{\vec{p}}$ :*

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla,$$

где  $\nabla$  — оператор набла (градиент), который относится к векторным дифференциальным операторам и в декартовой системе координат определяется выражением

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

*Оператор кинетической энергии  $\hat{T}_{\text{кин}}$  (нерелятивистский случай):*

$$\hat{T}_{\text{кин}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta,$$

где  $\Delta = \nabla^2$  — оператор Лапласа, который является дифференциальным оператором, имеющим в декартовых координатах вид

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

Волновые  $\Psi$ -функции используются для нахождения значений наблюдаемых  $f$  в состояниях, которые описываются этими функциями. В соответствии с принципом неопределенности значения наблюдаемых  $f$  равны их средним значениям  $\langle f \rangle$ , вычисляемым по формуле

$$\langle f \rangle_{\Psi} = \frac{\int_V \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{f} \Psi(\vec{r}, t) dV_c}{\int_V \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) dV_c}, \quad (5.2a)$$

где звездочка «\*» означает комплексное сопряжение.

Если  $\Psi$ -функции являются нормированными, то имеем

$$\langle f \rangle_{\Psi} = \int_V \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{f} \Psi(\vec{r}, t) dV_c. \quad (5.2b)$$

Формулы (5.2) являются следствием принципа статистического детерминизма — значение динамической переменной определяется не однозначно, а лишь с определенной вероятностью, задаваемой при помощи  $\Psi$ -функции.

## 5.2. Временное и стационарное уравнения Шредингера

Основным уравнением нерелятивистской квантовой механики является зависящее от времени уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t), \quad (5.3)$$

где  $\hat{H}$  — это *оператор Гамильтона* (гамильтониан, оператор функции Гамильтона), вид которого определяется физическими свойствами системы. Это линейное дифференциальное уравнение в частных производных, оно позволяет найти  $\Psi$ -функцию для любого момента времени  $t$ . Линейность уравнения Шредингера согласуется с принципом суперпозиции, и если функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  являются его решениями, то и их линейная комбинация тоже будет решением уравнения.

Несмотря на то, что уравнение (5.3) является дифференциальным уравнением первого порядка относительно времени, из-за наличия мнимой единицы оно имеет периодические решения. Поэтому  $\Psi$ -функцию называют волновой функцией, а само временное уравнение Шредингера — волновым уравнением.

Так же как уравнение Ньютона в классической механике или уравнения Максвелла в классической электродинамике, которые постулируются на основе обобщения большого количества экспериментальных данных, уравнение Шредингера не выводится строго теоретически из известных ранее соотношений. Его следует рассматривать как исходное предположение, справедливость которого доказывается тем, что все вытекающие из него следствия согласуются с опытными фактами.

Явный вид временного уравнения Шредингера для простейшей системы из одной частицы можно найти путем следующих рассуждений. Допустим имеется свободная частица. Из классической физики известно, что в нерелятивистском случае для нее справедливо равенство  $H = E = \frac{p^2}{2m}$ , т. е. функция Гамильтона равна пол-

ной механической энергии частицы, которая, в свою очередь, равна кинетической энергии. Следовательно, в силу принципа соответствия для операторов  $\hat{H}$  и  $\hat{T}_{\text{кин}}$  выполняется равенство  $\hat{H} = \hat{T}_{\text{кин}}$ .

Таким образом, уравнение (5.3) примет вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) \quad (5.4a)$$

и будет называться волновым уравнением Шредингера для свободной частицы.

Если частица движется в силовом поле, то ее функция Гамильтона равна сумме кинетической энергии  $\hat{T}_{\text{кин}}$  частицы и энергии  $U(\vec{r}, t)$  в силовом поле:

$$H = T_{\text{кин}} + U(\vec{r}, t).$$

В этом случае оператор Гамильтона  $\hat{H}$  равен сумме двух операторов  $\hat{T}_{\text{кин}}$  и  $\hat{U}(\vec{r}, t)$ :

$$\hat{H} = \hat{T}_{\text{кин}} + \hat{U}(\vec{r}, t) = \hat{T}_{\text{кин}} + U(\vec{r}, t),$$

где учтено, что оператор функции координат равен самой функции.

Следовательно, получаем уравнение:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t), \quad (5.4б)$$

которое называется *волновым уравнением Шредингера* для частицы.

Подчеркнем несколько особенностей волнового уравнения Шредингера.

1. Оно содержит первую производную по времени  $t$  и вторую производную по координатам, поэтому решения в общем случае будут комплексными (это отличает его от классического волнового уравнения, имеющего вторую производную по времени  $t$ , решения которого вещественные).

2. Уравнение относится к дифференциальным уравнениям в частых производных. Такие уравнения чаще всего не решаются в аналитическом виде. В связи с этим квантовая механика рассматривает очень мало задач, которые имеют аналитическое решение.

Если оператор Гамильтона  $\widehat{H}$  физической системы не зависит явно от времени  $t$  (например, внешнее силовое поле, в котором движется система, является потенциальным и не зависит явно от времени  $t$ ), то полная механическая энергия  $E$  есть постоянная величина. В этом случае система будет находиться в стационарном состоянии.

Волновая функция  $\Psi(\vec{r}, t)$  стационарного состояния записывается в виде произведения двух функций, из которых одна есть функция только координат  $\vec{r}$ , а другая — времени  $t$ :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right).$$

Тогда временное уравнение Шредингера (5.3) приводит к уравнению:

$$\widehat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (5.5)$$

которое называется *стационарным уравнением Шредингера*. Оно представляет собой уравнение на собственные функции  $\Psi(\vec{r})$  и собственные значения  $E$  оператора Гамильтона  $\widehat{H}$ . Данное уравнение позволяет найти  $\Psi(\vec{r})$ , т. е. часть волновой  $\Psi$ -функции, зависящей от координат  $\vec{r}$ .

Для свободной частицы стационарное уравнение Шредингера запишется в виде

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi(\vec{r}) = 0. \quad (5.6a)$$

Для частицы, движущейся в потенциальном поле, стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(\vec{r}))\Psi(\vec{r}) = 0. \quad (5.6b)$$

### 5.3. Простейшие задачи квантовой механики

С целью более основательного понимания методики решения простейших задач квантовой механики, связанных с определением собственных значений и собственных функций оператора Гамильтона, рассмотрим несколько идеализированных моделей физических систем.

**Пример 1.** Исследуем движение частицы массой  $m$  в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Считаем, что частица движется вдоль координатной оси  $X$ , а ее движение ограничено двумя непроницаемыми стенками с координатами  $x = 0$  и  $x = l$ . Потенциальная энергия  $U(x)$  частицы удовлетворяет требованиям:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & \text{при } x \leq 0 \text{ и } x \geq l, \\ 0, & \text{при } 0 < x < l. \end{cases}$$

Зависимость потенциальной энергии  $U(x)$  от координаты  $x$  показана на рис. 5.1.

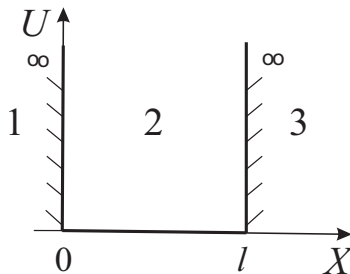


Рис. 5.1. Прямоугольная потенциальная яма шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками

Интервал  $0 < x < l$  ограничивает область пространства, в которой находится частица. Обозначим ее цифрой 2. Две другие обла-

сти с  $x \leq 0$  и с  $x \geq l$  обозначим цифрами 1 и 3 соответственно. Область 2 называется *одномерной прямоугольной потенциальной ямой* шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками.

Вначале рассмотрим, как ведет себя в такой яме обычная частица. Она движется с некоторой кинетической энергией  $T_{\text{кин}}$ , равной ее полной механической энергии  $E$ . При этом энергия  $E$  частицы может иметь любое значение от 0 до  $\infty$ . Подойдя к границе области 1 или 3, частица отразится от стенки и будет двигаться в противоположном направлении. Следовательно, частица не может быть вне потенциальной ямы, а может с равной вероятностью быть обнаружена в любом месте ямы с произвольным значением полной энергии  $E$ .

Микрочастица, не подчиняющаяся законам классической физики, ведет себя совершенно иначе. Чтобы показать это, требуется решить стационарное уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \Psi(x) = 0 .$$

В областях 1 и 3 вероятность обнаружения частицы и описывающая ее  $\Psi$ -функция равны нулю, потому что за пределы потенциальной ямы частица попасть не может. Условие непрерывности  $\Psi$ -функции требует, чтобы она равнялась нулю на границе потенциальной ямы. Таким образом, вводятся граничные условия:

$$\Psi(0) = 0 \text{ и } \Psi(l) = 0 . \quad (5.7)$$

В области 2  $\Psi$ -функция не будет равна нулю, а стационарное уравнение Шредингера запишется в виде однородного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + k^2 \Psi(x) = 0 ,$$

где  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ .



Общее решение данного уравнения удобно записать в виде

$$\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx ,$$

где  $A$  и  $B$  — константы. Среди этих  $\Psi$ -функций найдем те, которые удовлетворяют граничным условиям (5.7). При условии  $x = 0$  получим

$$\Psi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = 0 .$$

Отсюда следует, что для выполнения этого равенства необходимо константу  $B$  приравнять нулю. Значит,  $\Psi(x) = A \sin kx$ .

При условии  $x = l$  имеем

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

Это равенство справедливо при  $\sin kl = 0$ . Последнее равенство выполняется, когда  $kl = n\pi$  или  $k = \frac{n\pi}{l}$ , где  $n = 1, 2, \dots$ .

Следовательно,  $\Psi$ -функция зависит от числа  $n$ , которое нумерует состояния частицы, находящейся в потенциальной яме.  $\Psi$ -функция имеет вид

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

Константу  $A$  находят из условия нормировки (5.1):

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

Понижая степень подынтегрального выражения, вычислим интеграл

$$\int_0^l \sin^2 \frac{n\pi x}{l} dx = \int_0^l \frac{1 - \cos(2n\pi x / l)}{2} dx = l / 2 .$$

В результате получим  $A = \sqrt{\frac{2}{l}}$ .

Окончательно находим нормированную  $\Psi_n(x)$ -функцию

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x. \quad (5.8)$$

Умножив эту  $\Psi_n(x)$ -функцию на множитель  $e^{-iEt/\hbar}$ , получим

выражение для зависящей от времени  $t$  волновой  $\Psi_n(x, t)$ -функции  $n$ -го стационарного состояния. На рис. 5.2, а представлены графики  $\Psi_n(x)$ -функций для первых трех стационарных состояний ( $n = 1, n = 2$  и  $n = 3$ ).

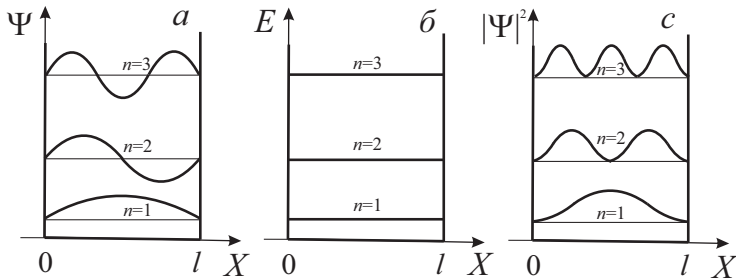


Рис. 5.2. Графики  $\Psi_n(x)$ -функций, уровни энергии и квадрат модуля волновых функций

Для определения полной энергии  $E$  частицы, находящейся в потенциальной яме, обратимся к ранее полученным результатам:

$$k^2 = \left( \frac{n\pi}{l} \right)^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E,$$

откуда следует, что энергия  $E$  имеет дискретные значения  $E_n$ :

$$E = E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2. \quad (5.9)$$

Граничным условиям (5.7) удовлетворяют значения  $E_n$  энергии  $E$ , которые зависят от числа  $n$ , являющегося квантовым числом. Это означает, что у частицы в потенциальной яме полная энергия  $E$  квантуется (см. рис. 5.2, б).

Таким образом, частица в яме находится лишь в тех стационарных состояниях, описываемых  $\Psi_n(x, t)$ -функциями, в которых ее энергия  $E$  равна  $E_n$ .

Найдем расстояние  $\Delta E_n$  между соседними энергетическими уровнями:

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

Оно с ростом  $n$  будет возрастать. Кроме того, чем меньше масса частицы и ширина ямы, тем больше  $\Delta E_n$ . По этой формуле можно оценить порядок  $\Delta E_n$  для электрона в атоме:  $\Delta E_n \sim 100n$  эВ.

Что касается относительного расстояния между соседними уровнями

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \sim \frac{1}{n} \rightarrow 0 \text{ при } n \rightarrow \infty,$$

то оно стремится к нулю при стремлении  $n$  к бесконечности. При больших значениях квантового числа  $n$  дискретность состояний перестает проявляться, происходит переход к непрерывному изменению энергии.

Вероятность обнаружения частицы в произвольный момент времени  $t$  определяется квадратом модуля волновой  $\Psi_n(x, t)$ -функции (плотностью вероятности):  $|\Psi_n(x, t)|^2 = |\Psi_n(x)|^2$ . Из рис. 5.2, в видно, что распределение плотности вероятности по координате неоднородно. Вероятность обнаружения частицы в потенциальной яме зависит от ее состояния и местоположения.

**Пример 2.** Рассмотрим прохождение частицы массой  $m$  с заданной полной механической энергией  $E$  через одномерный прямо-

угольный потенциальный барьер. Под барьером понимают ограниченную область пространства, разделяющую две другие области, в которых частица имеет меньшие значения потенциальной энергии. Предположим, что координатная ось  $X$  сонаправлена с направлением движения частицы. Частица движется в потенциальном поле, в котором ее потенциальная энергия, записанная как функция  $U(x)$  координат  $x$ , имеет вид, изображенный на рис. 5.3.

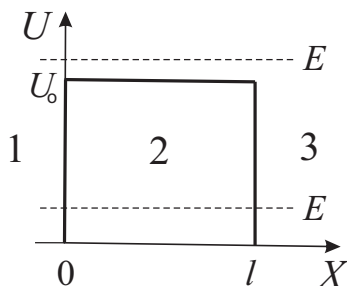


Рис. 5.3. Прямоугольный потенциальный барьер шириной  $l$  и высотой  $U_0$ .

Потенциальная энергия  $U(x)$  частицы равна:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{при } x \leq 0 \text{ и } x \geq l, \\ U_0, & \text{при } 0 < x < l. \end{cases}$$

Обозначим область одномерного пространства, определяемую неравенством  $x \leq 0$ , цифрой 1, интервалом  $0 < x < l$  (*прямоугольный потенциальный барьер* высотой  $U_0$  и шириной  $l$ ) цифрой 2, а неравенством  $x \geq l$  цифрой 3.

Рассмотрим, как ведет себя макроскопическая частица при прохождении такого потенциального барьера, который можно связать с возникновением сил отталкивания. Считаем, что частица начинает движение из области 1 в сторону барьера. В соответствии с законом сохранения энергии, если значение полной механической

энергии  $E$  частицы меньше значения  $U_0$  ( $E < U_0$ ), то частица отразится от потенциального барьера и останется в области 1, двигаясь в обратную сторону. Если имеет место неравенство  $E > U_0$ , то частица свободно преодолеет барьер и окажется в области 3.

Микрочастица ведет себя совсем по-другому. Всегда имеется некоторая вероятность, что при выполнении неравенства  $E < U_0$  частица пройдет сквозь потенциальный барьер и окажется в области 3. Это явление получило название *туннельный эффект*. При  $E > U_0$  частица может отразиться от барьера и оказаться в области 1.

Характеризуют эти процессы такие понятия, как *коэффициент прозрачности* (прохождения)  $D$  и *коэффициент отражения*  $R_{\text{отр}}$ . Под коэффициентом прозрачности  $D$  барьера понимают вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер, которая определяется как отношение плотности потока  $I_{\text{пр}}$  прошедших сквозь барьер частиц к плотности потока  $I_{\text{пад}}$  падающих на барьер частиц:

$$D = I_{\text{пр}} / I_{\text{пад}}.$$

Коэффициент отражения  $R_{\text{отр}}$  от барьера — это вероятность того, что частица испытает отражение от потенциального барьера, которая равна отношению плотности потока  $I_{\text{отр}}$  отраженных от барьера частиц к плотности потока  $I_{\text{пад}}$  падающих частиц:

$$R_{\text{отр}} = I_{\text{отр}} / I_{\text{пад}}.$$

Для этих коэффициентов справедливо соотношение

$$D + R_{\text{отр}} = 1,$$

так как сумма  $D$  и  $R_{\text{отр}}$  есть вероятность достоверного события: частица либо пройдет сквозь потенциальный барьер, либо отразится от него.

Для того чтобы найти значения коэффициентов  $D$  и  $R_{\text{отр}}$ , необходимо решить стационарное уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \Psi(x) = 0.$$

Поскольку потенциальная энергия  $U(x)$  является разрывной функцией, следует решить данное стационарное уравнение Шредингера для каждой из трех областей 1, 2 и 3 в отдельности и найти функции  $\Psi_1$ ,  $\Psi_2$  и  $\Psi_3$ , характеризующие состояние частицы в этих областях.

Опираясь на условия непрерывности  $\Psi$ -функции и ее первой производной  $\Psi'$  по координате  $x$  на границах областей, где имеется конечный скачок функции  $U(x)$ , запишем следующие граничные условия:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_1(0) = \Psi_2(0), \\ \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0) \end{array} \right. \text{ и } \left\{ \begin{array}{l} \Psi_2(l) = \Psi_3(l), \\ \Psi_2'(l) = \Psi_3'(l). \end{array} \right. \quad (5.10)$$

Для определенности будем считать, что  $E > U_0$ . Напишем стационарное уравнение Шредингера для области 1:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_1(x) + k^2 \Psi_1(x) = 0, \text{ где } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E;$$

области 2:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_2(x) + q^2 \Psi_2(x) = 0, \text{ где } q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0);$$

области 3:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_3(x) + k^2 \Psi_3(x) = 0.$$

Эти три однородных дифференциальных уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами имеют общие решения в виде

$$\Psi_1(x) = a_1 e^{ikx} + b_1 e^{-ikx},$$

$$\Psi_2(x) = a_2 e^{iqx} + b_2 e^{-iqx},$$

$$\Psi_3(x) = a_3 e^{ikx} + \underbrace{b_3 e^{-ikx}}_{=0} = a_3 e^{ikx}.$$

Общее решение является суперпозицией двух частных решений, каждое из которых, после умножения на  $e^{-iEt/\hbar}$ , представляет собой запись в комплексной форме выражения для плоской волны де Бройля. Если в показателе экспоненты перед  $ikx$  присутствует знак «+», то волна распространяется в положительном направлении оси  $X$ , если знак «-», то в отрицательном направлении.

Например, в выражении для  $\Psi_1$ -функции первое слагаемое соответствует падающей волне с амплитудой  $a_1$ , а второе слагаемое — отраженной волне с амплитудой  $b_1$ . В области 3 отраженной волны нет, значит, второе слагаемое в выражении для  $\Psi_3$  равно нулю.

Исходя из определения коэффициентов  $D$  и  $R_{\text{отр}}$ , а также учитывая, что плотность потока падающих частиц пропорциональна произведению волнового числа  $k$  и интенсивности падающей волны де Бройля, равной квадрату модуля  $|a_1|^2$  ее амплитуды  $a_1$ , плотность потока прошедших частиц пропорциональна  $k|a_3|^2$ , наконец, плотность потока отраженных частиц  $k|b_1|^2$ , для  $D$  и  $R_{\text{отр}}$  запишем следующие равенства:

$$D = \frac{|a_3|^2}{|a_1|^2} \quad \text{и} \quad R_{\text{отр}} = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2}.$$

Следовательно, чтобы вычислить коэффициенты  $D$  и  $R_{\text{отр}}$ , надо найти коэффициенты  $a_1$ ,  $b_1$  и  $a_3$ . Для этого воспользуемся граничными условиями (5.10), которые позволяют записать четыре уравнения.

При  $x = 0$  имеем:

$$\begin{aligned} a_1 + b_1 &= a_2 + b_2, \\ ka_1 - kb_1 &= qa_2 - qb_2. \end{aligned}$$

При  $x = l$ :

$$\begin{aligned} a_2 e^{iql} + b_2 e^{-iql} &= a_3 e^{ikl}, \\ a_2 e^{iql} - b_2 e^{-iql} &= a_3 \frac{k}{q} e^{ikl}. \end{aligned}$$

Решая эту систему из четырех уравнений, получим выражения для коэффициентов  $D$  и  $R_{\text{отр}}$ :

$$D = \left( 1 + \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2 ql}{4k^2 q^2} \right)^{-1}, \quad (5.11a)$$

$$R_{\text{отр}} = \left( 1 + \frac{4k^2 q^2}{(k^2 - q^2)^2 \sin^2 ql} \right)^{-1}. \quad (5.11b)$$

Таким образом, при выполнении неравенства  $E > U_0$  из выражений (5.11) следует, что  $D \neq 1$  и  $R_{\text{отр}} \neq 0$ . Этот результат отличается от того, который получается для макроскопической частицы  $D = 1$  и  $R_{\text{отр}} = 0$ .

Если рассматривать случай  $E < U_0$ , то аналогичные вычисления приводят к выражениям для коэффициентов  $D$  и  $R_{\text{отр}}$ , согласно которым  $D \neq 0$  и  $R_{\text{отр}} \neq 1$ , в то время как по классическим представлениям  $D = 0$  и  $R_{\text{отр}} = 1$ .

#### 5.4. Квантово-механическая теория водородоподобного атома

К дискретности энергетического спектра водородоподобных атомов, полученной в теории Бора с использованием постулатов, в квантовой механике приходят путем решения уравнения Шредингера. Чтобы показать это, рассмотрим водородоподобный атом с зарядом ядра  $+Ze$ . Ядро создает электростатическое кулоновское поле притяжения, которое относится к центральным сферически-симметричным полям. В этом поле около неподвижного ядра движется нерелятивистский электрон массой  $m$  и зарядом  $-e$ .



Потенциальная энергия  $U(r)$  электрона находится по формуле системы единиц СГС:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r},$$

где  $r$  — это расстояние между ядром и электроном. Поэтому оператор Гамильтона  $\widehat{H}$  указанной системы определяется выражением:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r}.$$

Поставим задачу о решении стационарного уравнения Шредингера:

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)\Psi(\vec{r}) = 0.$$

С такой потенциальной энергией  $U(r)$  решения  $\Psi(\vec{r})$  стационарного уравнения Шредингера находятся в аналитическом виде с определением значений энергии  $E$  атома в стационарных состояниях.

Из-за сферической симметрии потенциального поля задачу удобнее решать в сферической системе координат, центр которой совмещен с ядром атома. Собственную функцию  $\Psi(\vec{r})$  оператора Гамильтона  $\widehat{H}$  запишем через сферические координаты  $(r, \theta, \varphi)$ :  $\Psi(\vec{r}) = \Psi(r, \theta, \varphi)$ , как функцию трех переменных.

Оператор Лапласа  $\Delta$  в сферических координатах имеет вид:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\Delta_{\theta,\varphi}}{r^2},$$

где  $\Delta_{\theta,\varphi}$  — угловая часть оператора Лапласа

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Тогда стационарное уравнение Шредингера примет вид дифференциального уравнения в частных производных:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} \right) \Psi = 0.$$

Это уравнение допускает решение методом разделения переменных. Функцию  $\Psi \equiv \Psi(r, \theta, \varphi)$  можно искать в виде произведения функции  $R(r)$ , зависящей только от радиуса  $r$ , и функции  $Y(\theta, \varphi)$ , зависящей только от углов  $\theta$  и  $\varphi$  (сферическая функция):

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi).$$

Подставим это произведение функций в стационарное уравнение Шредингера, а затем умножим все члены на множитель  $r^2/(R \cdot Y)$  и сгруппируем члены, зависящие от радиальной переменной  $r$ , и отдельно от угловых переменных  $\theta$  и  $\varphi$ . Результатом этого будет равенство:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} \right) r^2 = - \frac{1}{Y \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{Y \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = \lambda.$$

Видно, что левая часть зависит от переменной  $r$ , правая часть — от  $\theta$  и  $\varphi$ , поэтому равенство частей возможно, когда каждая из них будет равна постоянной, которую обозначим буквой  $\lambda$ .

Таким образом, стационарное уравнение Шредингера распадается на два независимых уравнения — уравнение для радиальной части  $R(r)$  и угловой части  $Y(\theta, \varphi)$  функции  $\Psi(r, \theta, \varphi)$ :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} \right) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R = 0, \quad (5.12)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \lambda Y = 0. \quad (5.13)$$

К уравнению для функции  $Y(\theta, \varphi)$ , называемой *сферической функцией*, также можно применить метод разделения переменных и разде-

лить его на два уравнения. Для этого сферическую функцию  $Y(\theta, \varphi)$  запишем в виде произведения функции  $\Theta(\theta)$  и функции  $\Phi(\varphi)$ :

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi).$$

Подставляя это произведение функций в уравнение для  $Y(\theta, \varphi)$  и умножая все члены на множитель  $\sin^2\theta/(\Theta \cdot \Phi)$ , получим

$$\frac{\sin\theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \lambda \sin^2\theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = m_l^2.$$

Левая часть этого равенства зависит от угла  $\theta$ , правая часть — от  $\varphi$ , поэтому каждую из частей приравняем к постоянной, которую обозначим через  $m_l^2$ .

В результате уравнение (5.13) для сферической функции  $Y(\theta, \varphi)$  распадается на два более простых уравнения — уравнение для функции  $\Theta(\theta)$  и функции  $\Phi(\varphi)$ :

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left( \lambda - \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} \right) \Theta = 0, \quad (5.14)$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m_l^2\Phi = 0. \quad (5.15)$$

Следовательно, чтобы найти функцию  $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$ , необходимо последовательно решить три записанных выше дифференциальных уравнения — (5.12), (5.14) и (5.15). Рассмотрим эти уравнения, начиная с последнего.

Решения однородного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами (5.15) для функции  $\Phi(\varphi)$  с учетом ее нормировки имеют вид

$$\Phi_{m_l}(\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{im_l\varphi}. \quad (5.16)$$

Чтобы  $\Phi(\varphi)$  была однозначной функцией угла  $\varphi$ , она должна быть периодической с периодом  $2\pi$ :  $\Phi_{m_l}(\varphi) = \Phi_{m_l}(\varphi + 2\pi)$ . Значит,  $e^{im_l 2\pi} = 1$ . Из теории комплексных чисел известно, что это возмож-

но, когда число  $m_l$  принимает значения  $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Число  $m_l$  называется *магнитным орбитальным квантовым числом*.

Решениями уравнения (5.14) для функции  $\Theta(\theta)$  являются *присоединенные функции Лежандра*  $P_l^{m_l}(\cos\theta)$  степени  $l$  порядка  $m_l$ . В процессе нахождения этих решений учитывается, что число  $\lambda = l(l+1)$ , где  $l = 0, 1, 2, \dots$ , оно называется *орбитальным квантовым числом*. При этом выполняется неравенство  $|m_l| \leq l$ , т.е.  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ .

Итак, сферическую функцию  $Y(\theta, \varphi)$  с учетом ее нормировки

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l,m_l}^*(\theta, \varphi) Y_{l',m_l'}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{m_l m_l'}$$

определяет выражение (при  $m_l \geq 0$ ):

$$Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) = (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}} P_l^{m_l}(\cos\theta) e^{im_l\varphi}. \quad (5.17)$$

Наконец, решая уравнение (5.12) для радиальной части  $R(r)$  функции  $\Psi(r, \theta, \varphi)$  с учетом того, что  $R(r)$  конечна при стремлении  $r$  к нулю или бесконечности, получают следующее выражение для нахождения нормированной функции:

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2Z}{na}\right)^{l+3/2} e^{-\frac{Zr}{na}} r^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Z}{na}r\right), \quad (5.18)$$

где  $L_k^s(\xi)$  — *обобщенные полиномы Лагерра*.

При решении уравнения (5.12) получается рекуррентное соотношение для коэффициентов полинома Лагерра, из которого при условии конечности функции  $R(r)$  при  $r \rightarrow \infty$  находят формулу для вычисления значений энергии  $E_n$  электрона водородоподобного атома (энергии атома в стационарных состояниях), которая совпадает с формулой (3.13) из теории Бора:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{Z^2}{(n_r + l + 1)^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2} \quad (\text{в системе СГС}). \quad (5.19)$$

Таким образом, собственные значения  $E_n$  оператора  $\widehat{H}$  образуют дискретное множество и зависят от *главного квантового числа*  $n = n_r + l + 1$ , где  $n_r$  — это *радиальное квантовое число*. Поскольку каждое из чисел  $n_r$  и  $l$  принимает значения  $0, 1, 2, \dots$ , главное квантовое число будет целым и положительным числом:  $n = 1, 2, 3, \dots$ .

Наименьшее значение для орбитального квантового числа  $l$  равно нулю, а наибольшее (при заданном  $n$ ) равно  $n - 1$  и соответствует случаю, когда выполняется равенство  $n_r = 0$ . Следовательно,  $l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$ . Отметим, что для заданного квантового числа  $n$  существует  $n$  различных значений квантового числа  $l$ . Вместе с тем, при фиксированном  $l$  магнитное орбитальное квантовое число  $m_l$  может иметь  $(2l + 1)$  различных значения:  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ .

С учетом полученных выражений (5.17) для  $Y(\theta, \varphi)$  и (5.18) для  $R(r)$ , функция  $\Psi(\vec{r}) = \Psi(r, \theta, \varphi)$  записывается в виде

$$\Psi_{n,l,m_l}(\vec{r}) = \Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m_l}(\theta, \varphi). \quad (5.20)$$

Эта функция иногда называется *орбиталью*, она характеризуется тремя квантовыми числами:  $n$ ,  $l$  и  $m_l$ . Орбиталь описывает стационарное состояние электрона водородоподобного атома (стационарное состояние атома). Геометрическим представлением орбитали является *электронное облако* вокруг ядра, т. е. область пространства, в которой существует вероятность обнаружить электрон.

Главное квантовое число  $n$  нумерует орбитали и определяет значение энергии водородоподобного атома в стационарном состоянии.

Орбитальное квантовое число  $l$  характеризует форму электронного облака:  $l = 0$  — сферическая,  $l = 1$  — гантелеобразная,  $l = 2$  и выше — более сложная форма, и позволяет различать состояния, отличающиеся величиной момента импульса. Численным значениям  $l$  принято сопоставлять буквенные символы (строчные буквы латинского алфавита) по схеме:

$$l = 0 \leftrightarrow s,$$

$$l = 1 \leftrightarrow p,$$

$$l = 2 \leftrightarrow d \text{ и т. д.}$$

В качестве примера на рис. 5.4 приведены геометрические фигуры, представляющие два вида орбиталей.

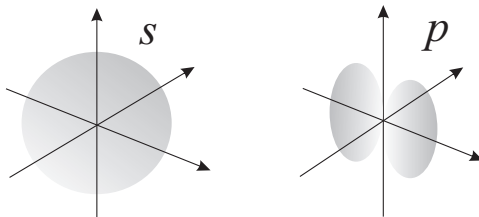


Рис. 5.4. Формы электронного облака

Магнитное орбитальное квантовое число  $m_l$  указывает ориентацию плоскости электронного облака относительно выбранного направления и определяет значения возможных проекций момента импульса на это направление.

В атомной физике для обозначения стационарных состояний электрона в атоме или атомных орбиталей используют специальную комбинацию из двух символов. Первым символом является число, равное значению главного квантового числа  $n$ , вторым — буква, соответствующая значению числа  $l$  по указанной выше схеме. Например, состояние, которое характеризуется квантовыми числами  $n = 1$  и  $l = 0$ , обозначается символом  $1s$ .

Из формулы (5.19) для энергии  $E_n$  электрона водородоподобного атома видно, что все энергетические уровни электрона, за исключением основного с  $n = 1$ , являются *вырожденными*. Это означает, что электрон в состояниях с одинаковым значением  $n$ , но различными значениями  $l$  и  $m_l$  имеет одинаковую энергию  $E_n$ . Каждый  $n$ -й уровень вырожден по квантовому числу  $l$  с кратностью  $n$ , в свою очередь каждый  $l$ -й подуровень вырожден по квантовому числу  $m_l$  с кратностью  $(2l + 1)$ . Полная *кратность вырождения*  $n$ -го энергетического уровня определяется суммой, которая равна  $n^2$ :

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{(n-1)n}{2} + n = n^2.$$

На рис. 5.5 представлена часть энергетической диаграммы водородоподобного атома для пяти состояний, в которых может находиться электрон. Здесь квадратиками обозначены квантовые ячейки, являющиеся символическим изображением орбиталей.

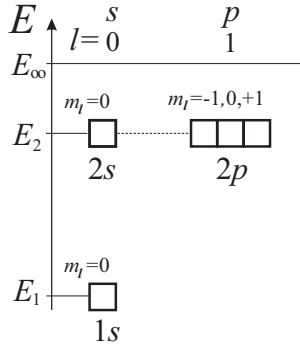


Рис. 5.5. Энергетическая диаграмма водородоподобного атома

Процесс испускания и поглощения электромагнитного излучения атомом сопровождается изменением его стационарного состояния, которое на энергетической диаграмме показывается квантовым переходом с одного энергетического уровня на другой. На эти переходы различные законы сохранения и симметрии накладывают ограничения. Значит, и на изменение квантовых чисел, характеризующих стационарные состояния атома, накладываются ограничения, называемые *правилами отбора*. Эти правила относятся только к дипольному излучению и поглощению, при котором изменяется дипольный момент атома, и не выполняются при других процессах в атоме.

Правило отбора для главного квантового числа  $n$  является следствием закона сохранения энергии. Атом может поглощать и испускать фотон, энергия которого  $h\nu$  равна разности энергий  $E_n$  ато-

ма в стационарных состояниях, поэтому  $\Delta l$  может быть любым.

Правило отбора для орбитального квантового числа  $l$  вытекает из закона сохранения момента импульса. Фотон обладает собственным моментом импульса, равным  $1\hbar$ , который может прибавляться к моменту импульса атома или вычитаться из него как при поглощении, так и при испускании фотона атомом, поэтому  $\Delta l = \pm 1$ .

На рис. 5.6 показана схема энергетических уровней атома водорода, на которой стрелками отмечены разрешенные правилом отбора по числу  $l$  квантовые переходы при излучении атомом фотона.

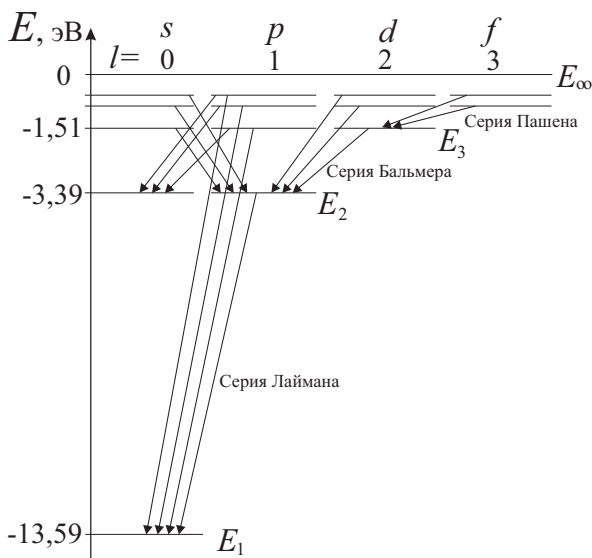


Рис. 5.6. Квантовые переходы, разрешенные правилом отбора по числу  $l$

Используя условные обозначения состояний электрона в атоме, переходы, ответственные за серию Лаймана, можно записать в виде  $np \rightarrow 1s$  ( $n = 2, 3, \dots$ ), а за серию Бальмера  $np \rightarrow 2s$ ,  $ns \rightarrow 2p$  и  $nd \rightarrow 2p$  ( $n = 3, 4, \dots$ ).

Правило отбора для магнитного орбитального квантового числа  $m_l$  выражает равенство:  $\Delta m_l = 0, \pm 1$ .



## 6. МЕХАНИЧЕСКИЙ И МАГНИТНЫЙ МОМЕНТЫ ЭЛЕКТРОНА

---

### 6.1. Орбитальный момент импульса и магнитный орбитальный момент

К одной из важных физических величин, характеризующих частицу, которая движется в центральном поле, относится момент импульса  $\vec{I} = [\vec{r} \times \vec{p}]$ . Для микрочастиц, например, электрона в атоме, нельзя напрямую использовать эту формулу, так как положение и импульс микрочастицы одновременно определить невозможно. В квантовой механике эту динамическую переменную  $\vec{I}$ , которая является угловым моментом, обусловленным движением в пространстве центра массы частицы, называют *орбитальным моментом импульса* и сопоставляют ей оператор

$$\hat{I} = [\hat{r} \times \hat{p}] = -i\hbar [\vec{r} \times \nabla].$$

Проекциям  $I_x$ ,  $I_y$  и  $I_z$  вектора  $\vec{I}$  на декартовы координатные оси  $X$ ,  $Y$  и  $Z$  также сопоставляются операторы  $\hat{I}_x$ ,  $\hat{I}_y$  и  $\hat{I}_z$ .

Удобно ввести понятие оператора квадрата момента импульса

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2,$$

который связан с величиной, равной квадрату длины  $|\vec{l}|^2$  вектора  $\vec{l}$ . Можно показать, что этот оператор коммутирует с оператором каждой из проекций момента импульса  $\hat{l}_x$ ,  $\hat{l}_y$  и  $\hat{l}_z$ , например,

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_z] = \hat{l}^2 \hat{l}_z - \hat{l}_z \hat{l}^2 = 0.$$

Равенство нулю коммутатора  $[\hat{l}^2, \hat{l}_z]$  означает, что, во-первых, операторы  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z$  имеют общие собственные функции, во-вторых, квадрат длины  $|\vec{l}|^2$  вектора  $\vec{l}$  и его компонента  $l_z$ , которые равны собственным значениям соответствующих операторов, можно измерить одновременно.

Вместе с тем операторы проекций  $\hat{l}_x$ ,  $\hat{l}_y$  и  $\hat{l}_z$  не коммутируют друг с другом, а следовательно, проекции  $\hat{l}_x$ ,  $\hat{l}_y$  и  $\hat{l}_z$  не могут быть измерены одновременно.

Рассмотрим два оператора  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z$ , которые в сферической системе координат записываются через переменные  $(r, \theta, \varphi)$ :

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi},$$

$$\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

где  $\Delta_{\theta, \varphi}$  — угловая часть оператора Лапласа.

Уравнения на собственные функции  $\Psi(\vec{r}) = \Psi(r, \theta, \varphi) \equiv \Psi$  и собственные значения этих операторов имеют вид:

$$\hat{l}^2 \Psi = l_l^2 \Psi, \quad (6.1)$$

$$\hat{l}_z \Psi = l_z \Psi. \quad (6.2)$$

Дифференциальные операторы  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z$  зависят только от угловых переменных  $\theta$  и  $\varphi$ , а значит, преобразовывать будут лишь ту часть  $\Psi$ -функции, которая зависит от этих углов.

Из сравнения уравнения (6.1) и уравнения (5.13), которое получено ранее для сферических функций  $Y(\theta, \varphi)$  (5.17), следует, что эти уравнения будут совпадать, если собственные функции  $\Psi$  оператора  $\hat{l}^2$  примут вид  $R_r \cdot Y(\theta, \varphi)$ , а его собственные значения  $l_l^2$  будут удовлетворять равенству

$$l_l^2 = \hbar^2 l(l+1),$$

где  $l$  — орбитальное квантовое число, которое принимает следующие значения  $0, 1, 2, \dots, (n-1)$ . Из записанного выше равенства следует, что модуль  $|\vec{l}|$  вектора  $\vec{l}$  не может принимать произвольное значение и вычисляется по формуле

$$|\vec{l}| = l_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}. \quad (6.3)$$

Таким образом, орбитальное квантовое число  $l$  определяет абсолютную величину орбитального момента импульса  $|\vec{l}|$ , или, по-другому, длину вектора  $\vec{l}$ , которая квантована и кратна постоянной Планка  $\hbar$ .

Если в уравнение на собственные функции и собственные значения оператора проекции момента импульса  $\hat{l}_z$  на ось  $Z$  (6.2) подставить собственные функции  $\Psi$  в виде произведения функций  $R_r \cdot Y(\theta, \varphi)$ , то придем к формуле для вычисления собственных значений  $l_z$  оператора  $\hat{l}_z$ :

$$l_z = \hbar m_l, \quad (6.4)$$

где  $m_l$  — магнитное орбитальное квантовое число:  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ . Это означает, что проекция орбитального момента  $l_z$  квантуется. Магнитное орбитальное квантовое число  $m_l$  определяет значение проекции  $l_z$  вектора  $\vec{l}$  на ось  $Z$  и связано с ориентацией вектора  $\vec{l}$  относительно этой оси.

Полученное выше квантование длины  $|\vec{l}|$  (6.3) и проекции  $l_z$  (6.4) орбитального момента  $\vec{l}$  называется *пространственным квантованием*. Квантование проекции  $l_z$  говорит о том, что направление вектора  $\vec{l}$  относительно оси  $Z$  не может быть произвольным. Возможны только  $(2l+1)$  различных направления, которые задаются углом  $\alpha$ , определяемым по формуле:

$$\cos \alpha = \frac{l_z}{|\vec{l}|} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}.$$

Для электрона, находящегося в  $p$ -состоянии, возможные направления орбитального момента  $\vec{l}$  длиной  $\sqrt{2}\hbar$  показаны на рис. 6.1.

Если известно значение проекции  $l_z$ , то значения проекций  $l_x$  и  $l_y$  не могут быть определены. В этом случае следует говорить только об ориентации момента  $\vec{l}$  относительно оси  $Z$ . Наглядно это можно представить следующим образом. Орбитальный момент импульса  $\vec{l}$  прецессирует вокруг оси  $Z$  по поверхности конуса с углом раствора, равным  $2\alpha$  (рис. 6.1).

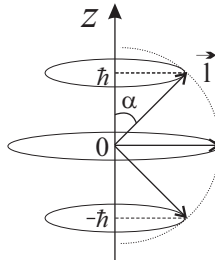


Рис. 6.1. Ориентации орбитального момента электрона в  $p$ -состоянии

Помимо механического момента  $\vec{l}$  электрон в атоме обладает еще и *магнитным орбитальным моментом*  $\vec{\mu}_l$ . Соотношение (3.19), связывающее эти моменты, было получено в теории Бора:

$$\vec{\mu}_l = -\gamma_l \vec{l} = -\frac{e}{2mc} \vec{l} = -g_l \frac{e}{2mc} \vec{l}, \quad (6.5)$$

где  $\gamma_l = g_l \frac{e}{2mc}$  — орбитальное гиромагнитное отношение. Здесь ввели обозначение  $g_l = 1$  — орбитальное гиромагнитное отношение, измеряемое в  $e/2mc$ .

Длина  $|\vec{l}|$  и проекция  $l_z$  момента импульса  $\vec{l}$  квантуются, поэтому длина  $|\vec{\mu}_l|$  и проекция  $\mu_{lz}$  магнитного орбитального момента  $\vec{\mu}_l$  тоже будут квантованными. Пространственное квантование имеет вид:

$$|\vec{\mu}_l| = \gamma_l |\vec{l}| = \gamma_l \hbar \sqrt{l(l+1)} = g_l \frac{e\hbar}{2mc} \sqrt{l(l+1)} = g_l \mu_b \sqrt{l(l+1)}, \quad (6.6)$$

$$\mu_{lz} = -\gamma_l l_z = -\gamma_l \hbar m_l = -g_l \frac{e\hbar}{2mc} m_l = -g_l \mu_b m_l, \quad (6.7)$$

где  $\mu_b = \frac{e\hbar}{2mc}$  — магнетон Бора.

Рассмотрим сейчас вопрос о том, что происходит с частицей, имеющей магнитный момент  $\vec{\mu}$ , при помещении ее в постоянное магнитное поле с индукцией  $\vec{B}$ , которая равна напряженности  $\vec{H}$  магнитного поля в вакууме и системе единиц СГС.

Магнитное поле будет воздействовать на магнитный момент  $\vec{\mu}$  частицы, в результате этого взаимодействия, во-первых, момент  $\vec{\mu}$  начнет ориентироваться относительно направления вектора  $\vec{H}$ , прецессируя с частотой, которая зависит от величины напряженности магнитного поля  $|\vec{H}|$ . Во-вторых, частица приобретет дополнительную энергию  $U$ , определяемую выражением

$$U = -\vec{\mu} \vec{B} = -\vec{\mu} \vec{H} = -|\vec{\mu}| |\vec{H}| \cos \alpha. \quad (6.8)$$

Эта потенциальная энергия  $U$  частицы, представляющая собой энергию взаимодействия момента  $\vec{\mu}$  с полем, зависит не только от длин  $|\vec{\mu}|$  и  $|\vec{H}|$  векторов  $\vec{\mu}$  и  $\vec{H}$ , но и от угла  $\alpha$  между направлениями векторов.

В этом случае энергия  $E$  частицы будет вычисляться по формуле

$$E = E_0 + U,$$

где  $E_0$  — энергия частицы в отсутствие поля. Из формулы (6.8) следует, что энергия  $U$  будет увеличивать энергию  $E_0$ , когда векторы  $\vec{\mu}$  и  $\vec{H}$  ориентированы в разные стороны, и уменьшать ее, когда векторы ориентированы в одном направлении.

Считаем, что координатная ось  $Z$  направлена так же, как вектор  $\vec{H}$ , т.е.  $\vec{H} = (0, 0, H)$ , тогда

$$U = -|\vec{\mu}| \cos \alpha H = -\mu_z H.$$

Поскольку проекция  $\mu_z$  магнитного момента  $\vec{\mu}$  на ось  $Z$  квантуется (см. (6.7)), энергия  $E$  частицы в магнитном поле принимает только дискретные значения.

Например, для электрона в водородоподобном атоме, обладающего магнитным орбитальным моментом  $\vec{\mu}_l$ , имеем

$$E = E_n - \mu_{lz} H = E_n + g_l \mu_b m_l H. \quad (6.9)$$

Энергетические уровни, которые в отсутствие магнитного поля были вырожденными по квантовому числу  $m_l$ , при наложении поля расщепляются на  $(2l+1)$  подуровней в соответствии с количеством возможных значений  $m_l$ , т.е. снимается вырождение по этому квантовому числу.

На рис. 6.2 представлено поведение первых двух энергетических уровней водородоподобного атома в магнитном поле. Согласно формуле (6.9) расстояние между соседними энергетическими подуровнями равно  $\mu_b H$ .

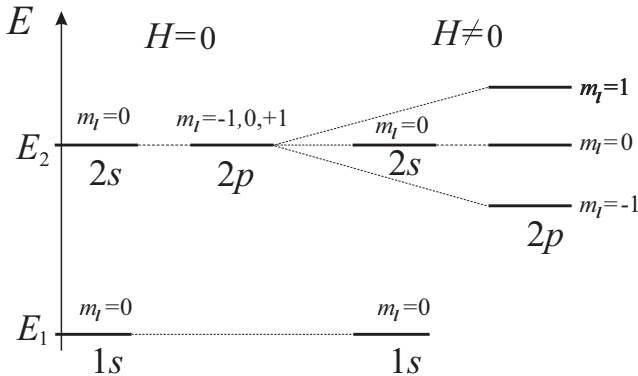


Рис. 6.2. Энергетическая диаграмма водородоподобного атома в магнитном поле

## 6.2. Спин и магнитный спиновый момент

В 1922 г. О. Штерн и В. Герлах провели опыт, в котором наблюдали расщепление пучка нейтральных атомов серебра Ag, проходящего через поперечное неоднородное магнитное поле. Этот опыт в дальнейшем подтвердил наличие спина у электронов и существование пространственного квантования.

В опыте Штерна и Герлаха узкий пучок атомов серебра, имеющих один валентный электрон, направлялся в область пространства, в которой ножевидным и вогнутым полюсными наконечниками электромагнита формировалось постоянное магнитное поле напряженности  $\vec{H}$  с высокой степенью неоднородности (см. рис. 6.3). Силовые линии магнитного поля направлены перпендикулярно движению пучка и сближаются у южного  $S$  полюса магнита.

Неоднородное магнитное поле действует на атомы, у которых имеется магнитный момент  $\vec{\mu}$  (не зависит от координат), с силой

$$\vec{F} = -\text{grad } U = -\text{grad}(-\vec{\mu}\vec{H}) = \vec{\mu}\nabla\vec{H}.$$

Если магнитное поле было бы однородным, то оно не оказывало бы воздействия на атомы (сила  $\vec{F} = 0$ ).

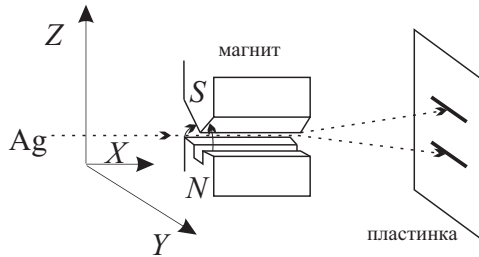


Рис. 6.3. Схема установки в опыте Штерна и Герлаха

После прохождения области с магнитным полем атомы попадали на стеклянную пластинку. На ней осевшие атомы создавали следы в виде горизонтальных полос.

Так как у полюса  $S$  магнит не имеет форму «ножа», то под ним отличной от нуля будет только  $z$ -я составляющая напряженности магнитного поля:  $\vec{H} = (0, 0, H(z))$ . Поэтому атомы,двигающиеся вдоль оси  $X$  вблизи полюса  $S$ , подвержены действию силы  $F_z$ , которая направлена по оси  $Z$  и пропорциональна  $z$ -й проекции  $\mu_z$  магнитного момента  $\vec{\mu}$  атомов и обусловлена градиентом напряженности  $\partial H(z)/\partial z$  неоднородного магнитного поля:

$$F_z = \mu_z \frac{\partial H(z)}{\partial z}.$$

Это сила является причиной изменения конфигурации пучка атомов и расщепления его на отдельные компоненты. Из-за наличия этой силы происходит расщепление пучка атомов вдоль оси  $Z$  на столько компонент, сколько возможных проекций  $\mu_z$  имеет магнитный момент  $\vec{\mu}$ .



В опыте Штерна и Герлаха на пластинке от осевших атомов серебра наблюдали две узкие горизонтальные полоски, которые были расположены симметрично относительно начального направления движения пучка атомов. Этот факт говорил о том, что в присутствии магнитного поля магнитный момент  $\vec{\mu}$  может иметь только две проекции  $\mu_z$ , одинаковые по величине и противоположные по знаку.

Таким образом, в выполненном Штерном и Герлахом опыте обнаружено пространственное квантование магнитного момента. Кроме того, по измерениям отклонений расщепленных пучков удалось вычислить величину проекции  $\mu_z$  магнитного момента  $\vec{\mu}$  атома серебра, которая оказалась равна одному магнетону Бора  $\mu_B$ .

В то время результаты опыта Штерна и Герлаха не могли объяснить с позиций классической физики. Магнитный момент влетевших в магнитное поле атомов серебра ориентирован случайным образом и может иметь любое направление в пространстве вследствие хаотического теплового движения атомов. Поэтому пролетевшие через магнит атомы должны образовать сплошную широкую полосу на пластинке. Это противоречит результатам опыта.

Вместе с тем квантовая теория давала такой результат. Если пучок состоит из атомов с валентным электроном, который находится в невозбужденном  $s$ -состоянии ( $l = 0$ ), т. е. атомов, обладающих нулевым магнитным орбитальным моментом  $\vec{\mu}_l$ , то пучок атомов не должен расщепляться в магнитном поле, поскольку это поле не оказывает никакого воздействия на атомы. Если валентный электрон атома находится в возбужденном  $p$ -состоянии ( $l = 1$ ), то атомный пучок должен распасться на три компоненты в соответствии с квантовым числом  $m_p$ , которое определяет количество возможных проекций  $\mu_{lz}$  магнитного орбитального момента  $\vec{\mu}_l$ .

Возникшая при интерпретации данных опыта Штерна и Герлаха проблема была преодолена в 1925 г. после того, как С. Гаудсмит и Дж. Уленбек для объяснения структуры спектров сложных атомов (имеют более одного электрона) предложили гипотезу о том,

что электрон обладает *собственным моментом импульса*  $\vec{s}$  (*спином*), не связанным с его движением в пространстве. Спин не имеет классического аналога, но для понимания того, как возникает эта физическая величина, может служить упрощенная модель в виде шара, вращающегося вокруг своей оси.

Спин электрона  $\vec{s}$  квантуется по правилам пространственного квантования. Для величины  $|\vec{s}|$  спина выполняется равенство

$$|\vec{s}| = \hbar\sqrt{s(s+1)}, \quad (6.10)$$

где  $s$  — это *спиновое квантовое число*.

Для проекции  $s_z$  спина  $\vec{s}$  на ось  $Z$  справедливо равенство

$$s_z = \hbar m_s, \quad (6.11)$$

где  $m_s$  — *магнитное спиновое квантовое число*. Оно принимает  $(2s+1)$  значения от  $-s$  до  $s$  через 1, характеризует ориентацию спина  $\vec{s}$  относительно оси  $Z$  и определяет возможные значения его проекции  $s_z$ .

Электрон обладает и *магнитным спиновым моментом*  $\vec{\mu}_s$ , который пропорционален спину

$$\vec{\mu}_s = -\gamma_s \vec{s} = -g_s \frac{e}{2mc} \vec{s}, \quad (6.12)$$

где  $\gamma_s = g_s \frac{e}{2mc}$  — *спиновое гиромагнитное отношение*.

Правила пространственного квантования для магнитного спинового момента  $\vec{\mu}_s$  записываются в виде

$$|\vec{\mu}_s| = \gamma_s |\vec{s}| = \gamma_s \hbar \sqrt{s(s+1)} = g_s \frac{e\hbar}{2mc} \sqrt{s(s+1)} = g_s \mu_b \sqrt{s(s+1)}, \quad (6.13)$$

$$\mu_{sz} = -\gamma_s s_z = -\gamma_s \hbar m_s = -g_s \frac{e\hbar}{2mc} m_s = -g_s \mu_b m_s. \quad (6.14)$$

Вернемся к результатам опыта Штерна и Герлаха. В этом опыте атомы пучка имели один валентный электрон, который в основном со-

стоянии обладает лишь магнитным спиновым моментом  $\vec{\mu}_s$ . Пучок в неоднородном магнитном поле расщеплялся на две компоненты, поэтому проекция  $\mu_{sz}$  магнитного спинового момента  $\vec{\mu}_s$  может принимать только два значения. Отсюда следует, что количество возможных значений для  $m_s$  равно двум:  $(2s+1) = 2$ . Значит, спиновое квантовое число  $s$  для электрона равно  $1/2$ :  $s = 1/2$ , а магнитное спиновое квантовое число  $m_s$  может принимать следующие два значения:  $m_s = \pm 1/2$ .

Кроме того, опыт Штерна и Герлаха показал, что величина  $|\mu_{sz}|$  проекции магнитного спинового момента  $\vec{\mu}_s$  равна одному магнетону Бора  $\mu_b$ . Поэтому спиновое гиромагнитное отношение  $g_s$ , измеряемое в  $e/2mc$ , равно 2, значит, спиновое гиромагнитное отношение  $\gamma_s$  в два раза больше орбитального гиромагнитного отношения  $\gamma_l$ :

$$\frac{\gamma_s}{\gamma_l} = 2.$$

Стационарные состояния электрона в атоме при учете спина  $\vec{s}$  описываются  $\Psi$ -функциями, которые записываются в виде произведения функций пространственных и спиновых координат:

$$\Psi_{n,l,m_l,m_s}(\vec{r}, \vec{s}) = \Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi) \cdot \chi_{m_s}(\vec{s}).$$

Различные электронные состояния характеризуются четырьмя квантовыми числами:  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  и  $m_s$ . В этом случае кратность вырождения  $n$ -го энергетического уровня водородоподобного атома равна  $2n^2$ .

### 6.3. Полный момент импульса, полный и эффективный магнитные моменты

Учет спина  $\vec{s}$  электрона приводит к необходимости рассматривать механический момент, называемый *полным моментом импульса*  $\vec{j}$ , который равен векторной сумме орбитального  $\vec{l}$  и собственного  $\vec{s}$  моментов (см. рис. 6.4):

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}. \quad (6.15)$$

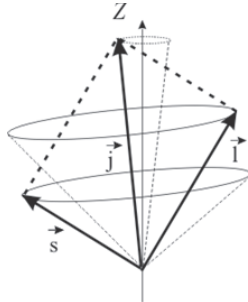


Рис. 6.4. Векторная диаграмма моментов импульса

Механические моменты  $\vec{l}$  и  $\vec{s}$  прецессируют вокруг направления вектора  $\vec{j}$  с одной и той же угловой скоростью, при этом сам вектор  $\vec{j}$  прецессирует вокруг оси  $Z$ .

Полный момент импульса  $\vec{j}$  является квантованной величиной, а пространственное квантование длины  $|\vec{j}|$  и проекции  $j_z$  на ось  $Z$  записывается в виде:

$$|\vec{j}| = \hbar \sqrt{j(j+1)}, \quad (6.16)$$

где  $j$  — внутреннее квантовое число, которое принимает значения

$$j = |l-s|, \quad l+s = |l-1/2|, \quad l+1/2;$$

$$j_z = \hbar m_j, \quad (6.17)$$

где  $m_j$  — магнитное внутреннее квантовое число. Оно принимает  $(2j+1)$  значения  $m_j = -j, \dots, j$  через 1, характеризует ориентацию вектора  $\vec{j}$  и определяет возможные значения проекции  $j_z$  относительно выделенной оси  $Z$ .

Правила отбора для внутреннего  $j$  и магнитного внутреннего  $m_j$  квантовых чисел имеют вид:

$$\Delta j = 0, \pm 1,$$

$$\Delta m_j = 0, \pm 1.$$

Стационарные состояния электрона в атоме удобно характеризовать четырьмя квантовыми числами:  $n, l, j$  и  $m_j$ . Это связано с тем, что проекции  $l_z$  и  $s_z$  моментов  $\vec{l}$  и  $\vec{s}$  на ось  $Z$  изменяются из-за прецессии этих моментов относительно направления вектора  $\vec{j}$  в то время как  $|\vec{j}|$  и  $j_z$  момента  $\vec{j}$  остаются постоянными (см. рис. 6.4).

Если считать моменты  $\vec{l}$  и  $\vec{s}$  независимыми друг от друга, как, например, в случае отсутствия сильного внешнего магнитного поля (допустим, направленного вдоль оси  $Z$ ), то стационарные состояния электрона принято характеризовать другими квантовыми числами:  $n, l, m_l$  и  $m_s$ . Это объясняется тем, что проекции  $l_z$  и  $s_z$  будут сохранять постоянные значения, так как прецессии моментов  $\vec{l}$  и  $\vec{s}$  происходят относительно оси  $Z$ .

Аналогично сложению орбитального  $\vec{l}$  и собственного  $\vec{s}$  моментов импульса электрона выполняется сложение соответствующих магнитных моментов  $\vec{\mu}_l$  и  $\vec{\mu}_s$ . Их сумма дает *полный магнитный момент*  $\vec{\mu}_j^n$  электрона:

$$\vec{\mu}_j^n = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s. \quad (6.18)$$

Векторная диаграмма всех моментов электрона в атоме изображена на рис. 6.5. Масштаб выбран так, чтобы длины векторов  $\vec{l}$  и  $\vec{\mu}_l$  были одинаковы. При этом условии вектор  $\vec{\mu}_s$  имеет длину, вдвое большую, чем длина  $\vec{s}$ , так как  $\gamma_s = 2\gamma_l$ . Очевидно, что вектор  $\vec{\mu}_j^n$  не антипараллелен вектору  $\vec{j}$ .

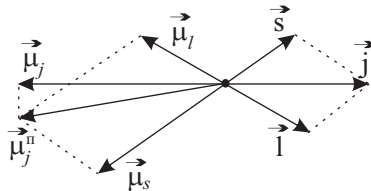


Рис. 6.5. Векторная диаграмма всех моментов электрона

Величина проекции  $|\vec{\mu}_j|$  вектора  $\vec{\mu}_j^n$  на прямую, на которой находится вектор  $\vec{j}$ , рассчитывается по формуле

$$|\vec{\mu}_j| = -\frac{\vec{\mu}_j^n \vec{j}}{|\vec{j}|}.$$

Соответствующий этой проекции момент  $\vec{\mu}_j$  называют *эффективным магнитным моментом* электрона. Он определяет поведение электрона в магнитных полях и выражается через полный момент импульса  $\vec{j}$ :

$$\vec{\mu}_j = -g_j \frac{e}{2mc} \vec{j}, \quad (6.19)$$

где  $g_j$  — *фактор Ланде* (безразмерный гиромагнитный множитель).

Пространственное квантование для эффективного магнитного момента  $\vec{\mu}_j$  электрона имеет вид:

$$|\vec{\mu}_j| = g_j \frac{e\hbar}{2mc} \sqrt{j(j+1)} = g_j \mu_b \sqrt{j(j+1)}, \quad (6.20)$$

$$\mu_{jz} = -g_j \frac{e\hbar}{2mc} m_j = -g_j \mu_b m_j. \quad (6.21)$$

Получим формулу для определения фактора Ланде  $g_j$ . Будем исходить из того, что для эффективного магнитного момента  $\vec{\mu}_j$  справедливым является выражение

$$\vec{\mu}_j = -|\vec{\mu}_j| \frac{\vec{j}}{|\vec{j}|} = \frac{\vec{\mu}_j^n \vec{j}}{|\vec{j}|}.$$

Учитывая выражения (6.5), (6.12) и (6.18), связывающие магнитные и механические моменты, для полного магнитного момента  $\vec{\mu}_j^n$  запишем

$$\vec{\mu}_j^n = -\frac{e}{2mc} \left( \underbrace{g_l}_{=1} \vec{l} + \underbrace{g_s}_{=2} \vec{s} \right).$$

Значит,

$$\vec{\mu}_j = -\frac{e}{2mc} \frac{(\vec{l} + 2\vec{s}) \cdot \vec{j}}{|\vec{j}|^2} \vec{j} = -\frac{e}{2mc} \underbrace{\frac{(\vec{l} + 2\vec{s}) \cdot \vec{j}}{|\vec{j}|^2}}_{=g_j} \vec{j}.$$

Сравнивая это выражение с выражением (6.19), видим, что

$$g_j = \frac{\vec{l} \cdot \vec{j} + 2\vec{s} \cdot \vec{j}}{|\vec{j}|^2}.$$

Принимая во внимание выражение (6.15), приведем  $g_j$  -фактор к виду

$$g_j = \frac{\vec{l}(\vec{l} + \vec{s}) + 2\vec{s}(\vec{l} + \vec{s})}{|\vec{j}|^2} = \frac{\vec{l}^2 + 2\vec{s}^2 + 3\vec{l}\vec{s}}{|\vec{j}|^2}.$$

Возведя выражение (6.15) в квадрат, найдем

$$2\vec{l}\vec{s} = |\vec{j}|^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2,$$

поэтому для фактора Ланде  $g_j$  запишем выражение

$$g_j = \frac{3|\vec{j}|^2 + \vec{s}^2 - \vec{l}^2}{2|\vec{j}|^2} = 1 + \frac{|\vec{j}|^2 + \vec{s}^2 - \vec{l}^2}{2|\vec{j}|^2}.$$

Здесь по формулам (6.3), (6.10), (6.16) заменим квадраты векторов их значениями:

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}. \quad (6.22)$$

Из этого окончательного выражения видно, что фактор Ланде  $g_j$  зависит от трех квантовых чисел  $j$ ,  $l$  и  $s$ .

## Б.4. Спин-орбитальное взаимодействие. Тонкая структура спектра

Зависящее от времени уравнение Шредингера (5.3) является нерелятивистским и не учитывает спин  $\vec{s}$  частиц. Ранее было показано, что решение стационарного уравнения Шредингера для водородоподобного атома приводит к квантованию энергии электрона (см. выражение (5.19)), значения  $E_n$  которой зависят только от главного квантового числа  $n$ .

Релятивистское обобщение уравнения Шредингера, учитывающее зависимость массы частицы от скорости, было получено в 1926 г. независимо друг от друга О. Клейном, В. Фоком и В. Гордоном. Оно называется *уравнением Клейна — Гордона — Фока* и для свободной частицы имеет вид линейного однородного дифференциального уравнения 2-го порядка:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\vec{r}, t) = -\hbar^2 c^2 \Delta \Psi(\vec{r}, t) + m_0^2 c^4 \Psi(\vec{r}, t).$$

Нерелятивистское уравнение, учитывающее наличие у частицы спина  $\vec{s}$  ( $s = 1/2$ ), предложено в 1927 г. В. Паули. Для частицы во внешнем магнитном поле, напряженность  $\vec{H}$  которого не зависит от времени, *уравнение Паули* записывают в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) - \frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\vec{\sigma}} \vec{H}) \Psi(\vec{r}, t),$$

где  $\Psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r}, t) \\ \Psi_2(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$  — *двухкомпонентная волновая функция*,

$\hat{\vec{\sigma}}$  — безразмерный оператор:

$$\hat{s} = \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}.$$



Релятивистское уравнение для частицы со спином  $\vec{s}$  ( $s = 1/2$ ) было предложено в 1928 г. П. Дираком. Для свободной частицы уравнение Дирака имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left( c \sum_{i=1}^3 \hat{\alpha}_i \hat{p}_i + \hat{\alpha}_0 mc^2 \right) \Psi(\vec{r}, t)$$

и формальное сходство с уравнением Шредингера (5.4а). Здесь  $\hat{\alpha}_0$  и  $\hat{\alpha}_i$  — линейные операторы, которые выражаются через четырехмерные матрицы. Матрица оператора  $\hat{\alpha}_0$  составлена из нулевой и единичной двумерных матриц, а матрицы операторов  $\hat{\alpha}_i$  — из матриц Паули, посредством которых записываются операторы  $\hat{\sigma}_i$ .

Уравнение Дирака дает более сложную формулу для вычисления значений  $E_{nj}$  энергии электрона водородоподобного атома, которые зависят как от главного квантового числа  $n$ , так и от внутреннего квантового числа  $j$ :

$$E_{nj} = E_n \left( 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right), \quad (6.23)$$

где  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$  — постоянная тонкой структуры,  $E_n$  — значения энергии электрона, которые находятся по формуле (5.19).

Энергетические уровни  $E_{nj}$  называются *уровнями тонкой структуры*. Разрешенные правилами отбора квантовые переходы между такими уровнями ответственны за структуру в спектрах излучения или поглощения атомов, называемую *тонкой структурой спектра*.

В отличие от формулы (5.19) в формулу (6.23) включены два дополнительных вклада, один из них  $\Delta E_{nl}$  учитывает зависимость массы электрона от его скорости (зависит от квантовых чисел  $n$  и  $l$ ), другой  $\Delta E_{nls}$  — наличие спина  $\vec{s}$  у электрона:

$$E_{nj} = E_n + \Delta E_{nl} + \Delta E_{njs}.$$

Рассмотрим вопрос об изменении энергии электрона водородоподобного атома только за счет учета спина  $\vec{s}$ . Ограничимся полуклассическими рассуждениями. Найдем выражение для  $\Delta E_{njs}$ , считая, что энергия  $(E_n + \Delta E_{nl})$  известна.

Пусть электрон массой  $m$  с зарядом  $-e$  и спином  $\vec{s}$  движется с линейной нерелятивистской скоростью  $\vec{v}$  (имеет импульс  $\vec{p}$ ) в кулоновском электростатическом поле ядра. Напряженность  $\vec{E}$  этого поля в месте нахождения электрона можно выразить через силу  $\vec{F}$ , с которой ядро воздействует на электрон, или через потенциальную энергию  $U$  электрона:

$$\vec{E} = -\frac{\vec{F}}{e} = \frac{1}{e} \text{grad} U(r) = \frac{1}{e} \frac{dU(r)}{dr} \frac{\vec{r}}{r}.$$

В системе отсчета, в которой электрон покоится, атомное ядро, вращаясь вокруг электрона, создает в месте его расположения как электрическое поле с напряженностью  $\vec{E}' = \vec{E}$ , так и магнитное поле с напряженностью  $\vec{H}'_l$ :

$$\vec{H}'_l = \frac{1}{c} [\vec{E} \times \vec{v}] = \frac{1}{cm} [\vec{E} \times \vec{p}].$$

С этим магнитным полем, обусловленным орбитальным движением ядра вокруг электрона, взаимодействует магнитный спиновый момент  $\vec{\mu}_s = -\frac{e}{mc} \vec{s}$  электрона. Такое взаимодействие называется *спин-орбитальным взаимодействием*.

Потенциальная энергия  $U_{sl}$ , которую электрон приобретает за счет спин-орбитального взаимодействия, находится по формуле

$$U_{sl} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{H}'_l.$$

Подставляя сюда выражения для напряженностей  $\vec{E}$  и  $\vec{H}'$ , получим

$$U_{sl} = \frac{e}{mc} \vec{s} \frac{1}{cm} \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} [\vec{r} \times \vec{p}] = \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} (\vec{s} \vec{l}).$$

Эта формула записана для неинерциальной системы отсчета, связанной сдвигающимся равноускоренно электроном.

В 1926 г. Л. Томас показал, что при переходе к системе отсчета, начало которой находится на ядре, в выражении для  $U_{sl}$  появляется множитель  $1/2$ :

$$U_{sl} = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} (\vec{s} \vec{l}). \quad (6.24)$$

Из-за наличия скалярного произведения  $\vec{s} \vec{l}$  в этой формуле спин-орбитальное взаимодействие трактуют как взаимодействие спинового  $\vec{s}$  и орбитального  $\vec{l}$  моментов электрона.

Значение энергии  $U_{sl}$  спин-орбитального взаимодействия зависит от ориентации магнитного спинового момента  $\vec{\mu}_s$  электрона относительно напряженности магнитного поля  $\vec{H}'$  или спина  $\vec{s}$  электрона относительно его орбитального момента импульса  $\vec{l}$ . Эти ориентации характеризует магнитное спиновое квантовое число  $m_s$ .

Из уравнения Дирака следует, что спин-орбитальное взаимодействие является релятивистским эффектом. Это взаимодействие формально получается, если энергию быстро движущихся во внешнем электромагнитном поле частиц, раскладывая в ряд, находить с точностью до  $v^2 / c^2$ .

Преобразуем формулу (6.24), принимая во внимание, что потенциальная энергия электрона в водородоподобном атоме с зарядом ядра  $+Ze$  определяется выражением

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}.$$

Следовательно,

$$\frac{dU(r)}{dr} = \frac{Ze^2}{r^2}.$$

Также учтем, что

$$\vec{s}\vec{l} = \frac{1}{2}(\vec{j}^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2),$$

тогда для энергии  $U_{sl}$  спин-орбитального взаимодействия получим

$$U_{sl} = \frac{1}{4} \frac{Ze^2}{m^2 c^2 r^3} (\vec{j}^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2). \quad (6.25)$$

Энергия ( $E_n + \Delta E_{nl}$ ) электрона за счет спин-орбитального взаимодействия изменяется на наблюдаемую в эксперименте величину  $\Delta E_{nls}$ , которая равна среднему значению  $\langle U_{sl} \rangle$  энергии спин-орбитального взаимодействия, вычисляемому по формуле

$$\Delta E_{nls} = \langle U_{sl} \rangle = \int_V \Psi_{nlm_l}^*(\vec{r}) U_{sl} \Psi_{nlm_l}(\vec{r}) dV_c,$$

где  $\Psi_{nlm_l}(\vec{r})$  — нормированная функция, описывающая стационарные состояния электрона с энергией ( $E_n + \Delta E_{nl}$ ) и не учитывающая наличие у электрона спина  $\vec{s}$ .

Из формулы (6.25) видно, что при вычислении  $\Delta E_{nls}$  надо найти следующие средние значения:  $\langle 1/r^3 \rangle$ ,  $\langle \vec{j}^2 \rangle$ ,  $\langle \vec{l}^2 \rangle$  и  $\langle \vec{s}^2 \rangle$ .

Среднее значение  $\langle 1/r^3 \rangle$  вычисляется для всех состояний электрона, кроме  $s$ -состояний:

$$\langle 1/r^3 \rangle = \frac{m^3 e^6 Z^3}{\hbar^6 n^3 l(l+1/2)(l+1)}.$$

Средние значения  $\langle \vec{j}^2 \rangle$ ,  $\langle \vec{l}^2 \rangle$  и  $\langle \vec{s}^2 \rangle$  квадратов механических моментов равны собственным значениям соответствующих операторов  $\vec{j}^2$ ,  $\vec{l}^2$  и  $\vec{s}^2$ :

$$\langle \vec{j}^2 \rangle = \hbar^2 j(j+1),$$

$$\langle \vec{l}^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1),$$

$$\langle \vec{s}^2 \rangle = \hbar^2 s(s+1).$$

Таким образом, находим выражение для  $\Delta E_{njls}$ , зависящей от квантовых чисел  $n, j, l > 0$  и  $s = 1/2$ :

$$\Delta E_{njls} = \frac{me^8 Z^4 (j(j+1) - l(l+1) - 3/4)}{4\hbar^4 c^2 n^3 l(l+1/2)(l+1)}. \quad (6.26)$$

Итак, спин-орбитальное взаимодействие, изменяя энергию  $(E_n + \Delta E_{nl})$  электрона в водородоподобном атоме на величину  $\Delta E_{njls}$ , приводит к возникновению новых энергетических уровней  $E_{nj}$  тонкой структуры.

На рис. 6.6 показана часть энергетической диаграммы водородоподобного атома с электроном в состояниях, в которых главное квантовое число  $n$  равно 1 и 2.

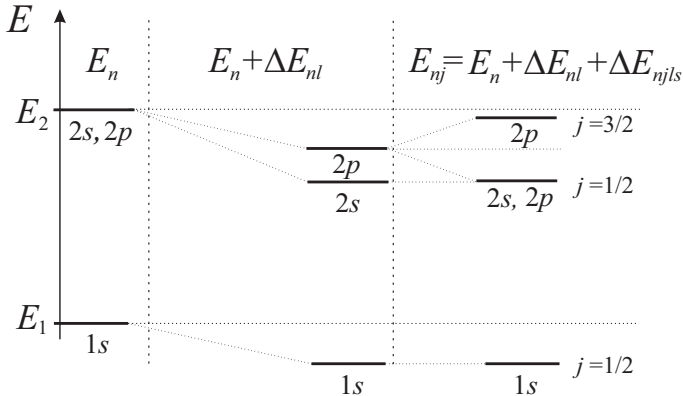


Рис. 6.6. Схема уровней водородоподобного атома с учетом релятивистских эффектов

Учет вклада  $\Delta E_{nl}$ , который описывает зависимость массы электрона от скорости, приводит к снятию вырождения всех энергетических уровней  $E_n$ , кроме уровней, соответствующих  $s$ -состояниям ( $l = 0$ ) электрона, по квантовому числу  $l$  и сдвигу уровней вниз на разные величины. Эти энергетические уровни ( $E_n + \Delta E_{nl}$ ) вырождены по квантовому числу  $m_s = \pm 1/2$ . Спин-орбитальное взаимодействие снимает это вырождение и расщепляет уровни, за исключением уровней  $s$ -состояний, на два подуровня тонкой структуры  $E_{nj}$ , характеризуемые внутренним квантовым числом  $j$ , равным  $1/2$  или  $3/2$ . Величина расщепления равна удвоенному значению  $\Delta E_{nls}$  и примерно в  $10^5$  раз меньше, чем расстояние между уровнями, отличающимися значением главного квантового числа. Каждый такой подуровень вырожден по магнитному внутреннему квантовому числу  $m_j$  с кратностью, равной  $(2j+1)$ . Это вырождение можно снять, поместив атом в магнитное поле.

## 7. СТРУКТУРА И СПЕКТРЫ СЛОЖНЫХ АТОМОВ

---

### 7.1. Энергетические состояния многоэлектронных атомов

До сих пор изучались различные характеристики водородоподобных атомов, содержащих только один электрон. Сейчас начнем рассматривать *многоэлектронные атомы*, имеющие более одного электрона, простейшим примером может служить атом гелия He (рис. 7.1). Теория таких атомов намного сложнее, чем теория водородоподобных атомов.

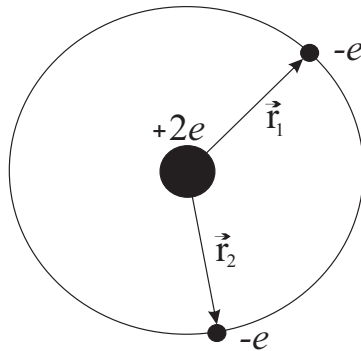


Рис. 7.1. Модель атома гелия

Возьмем многоэлектронный атом, у которого ядро имеет заряд  $+Ze$ , а количество электронов с массами  $m$ , зарядами  $-e$  и спинами  $\bar{s}$  равно  $Z$ . Решение квантово-механической задачи для этого сложного атома является трудоемким процессом. Оно подразумевает нахождение многоэлектронной функции  $\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{s}_1, \vec{r}_2, \vec{s}_2, \dots, \vec{r}_z, \vec{s}_z)$ , описывающей состояния всех  $Z$  электронов, и энергии  $E$  стационарных состояний атома путем решения стационарного уравнения Шредингера:

$$\hat{H} \Psi = E \Psi. \quad (7.1)$$

Строгого аналитического решения этого уравнения для рассматриваемой системы не существует, решение осуществляется с использованием различных приближенных методов. С целью упрощения процедуры поиска решений уравнения (7.1) применяется ряд допущений. Например, атомное ядро принято считать неподвижным.

В случае пренебрежения релятивистскими эффектами оператор Гамильтона  $\hat{H}$  атома записывается в виде (для системы единиц СГС):

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^Z \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_i} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^Z \frac{e^2}{r_{ij}}, \quad (7.2)$$

где  $r_i$  — расстояние между ядром и  $i$ -м электроном,  $r_{ij} = |\vec{r}_j - \vec{r}_i|$  — расстояние между  $i$ -м и  $j$ -м электронами. Здесь первая сумма — это оператор кинетической энергии  $T$  электронов, вторая и третья — потенциальной энергии  $U$  кулоновского взаимодействия, записанной в приближении парных взаимодействий. За вторую сумму ответственно кулоновское притяжение электронов к ядру, за третью — кулоновское отталкивание электронов друг от друга (межэлектронное взаимодействие). Множитель  $1/2$  в последнем члене позволяет избежать двойного суммирования.

Однако даже в этом приближении невозможно строго решить уравнение Шредингера (7.1) для многоэлектронного атома. Это



связано с последней суммой в выражении (7.2), которая перепутывает координаты электронов и не позволяет разбить уравнение Шредингера на совокупность уравнений для отдельных электронов.

Существующие приближенные методы решения уравнения Шредингера для сложного атома основываются на подходе, который сводит многоэлектронную задачу к одноэлектронной. В этом подходе каждый  $i$ -й электрон движется независимо от других в усредненном поле с эффективным потенциалом  $\Phi(\vec{r}_i)$  в месте нахождения  $i$ -го электрона, создаваемым всеми другими электронами. В этом случае потенциальная энергия  $U_{ee}$  электрон-электронного взаимодействия имеет вид:

$$U_{ee} = \sum_{i=1}^Z \Phi(\vec{r}_i) e. \quad (7.3)$$

Указанное поле зависит от состояния каждого электрона, тем самым состояние каждого электрона согласуется с состоянием всех остальных электронов, поэтому поле называют самосогласованным. Построение самосогласованного поля может быть осуществлено методом последовательных приближений (итераций) с применением вариационного метода при отыскании условного экстремума среднего значения полной энергии  $\langle E \rangle_{\Psi}$ . При этом гамильтониан  $\hat{H}$  атома уже не будет содержать в явном виде энергию межэлектронного взаимодействия, поэтому уравнение Шредингера преобразуется в систему уравнений для независимых электронов, которую можно решить численно и найти одноэлектронные  $\Psi_{n_i}(\vec{r}_i)$ -функции вида (5.20) и соответствующие значения энергии  $E_i$  одночастичного состояния.

Один из приближенных методов решения уравнения Шредингера был разработан в 1927 г. Д. Хартри. В *методе Хартри* при выполнении вариационной процедуры использовалась зависящая от пространственных координат пробная многоэлектронная функция  $\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_z)$ , представленная в виде произведения одно-

электронных функций:  $\Psi = \Psi_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)\dots\Psi_{n_z}(\vec{r}_z)$ . Варьирование по  $\Psi_{n_i}(\vec{r}_i)$  - функциям приводит к системе интегродифференциальных уравнений, в которой каждое из уравнений является уравнением, записанным для одного независимого электрона:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_i} - \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{j \neq i}^Z e^2 \int \frac{\Psi_{n_j}^*(\vec{r}_j)\Psi_{n_j}(\vec{r}_j)}{r_{ij}} d\vec{r}_j \right] \Psi_{n_i}(\vec{r}_i) = E_i \Psi_{n_i}(\vec{r}_i), \quad i = 1, 2, \dots, Z.$$

В 1930 г. В. Фок усовершенствовал этот метод, предложив использовать антисимметричную относительно перестановки координат электронов многоэлектронную  $\Psi$ -функцию, записанную в виде *детерминанта Слэтера* (определитель, построенный из одноэлектронных  $\Psi_{n_i}(\vec{r}_i)$  - функций). В результате получилась более сложная система уравнений для функций  $\Psi_{n_i}(\vec{r}_i)$ :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_i} - \frac{Ze^2}{r_i} + 2 \sum_{j=1}^{Z/2} e^2 \int \frac{\Psi_{n_j}^*(\vec{r}_j)\Psi_{n_j}(\vec{r}_j)}{r_{ij}} d\vec{r}_j \right] \Psi_{n_i}(\vec{r}_i) -$$

$$- \sum_{j=1}^{Z/2} \left[ e^2 \int \frac{\Psi_{n_j}^*(\vec{r}_j)\Psi_{n_i}(\vec{r}_j)}{r_{ij}} d\vec{r}_j \right] \Psi_{n_j}(\vec{r}_j) = E_i \Psi_{n_i}(\vec{r}_i), \quad i = 1, 2, \dots, Z/2.$$

В *методе Хартри — Фока* путем решения системы одноэлектронных уравнений находят  $\Psi_{n_i}(\vec{r}_i)$  - функции электронов, а значит, и пространственную функцию  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_z)$ , которые применяются для того, чтобы определить взаимодействие электрона с другими электронами, уточняя эффективный потенциал  $\Phi(\vec{r}_i)$ . Затем опять решается задача по поиску  $\Psi_{n_i}(\vec{r}_i)$  - функций с новым потенциалом. Итерационная процедура продолжается до достижения сходимости, пока новые функции  $\Psi_{n_i}(\vec{r}_i)$  и значения энергии  $E_i$  практически не будут отличаться от предыдущих. Следует отметить, что метод Хартри — Фока не пренебрегает частью энергии кулоновского

взаимодействия электронов (обменной энергией), которая учитывает корреляцию в движении электронов, обусловленную симметрией функции  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_z)$ .

Другой приближенный метод решения уравнения Шредингера предложил в 1927 г. Л. Томас и независимо от него в 1928 г. Э. Ферми. *Метод Томаса — Ферми* основан на понятии пространственно

зависимой электронной плотности  $n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^Z |\Psi_{n_i}(\vec{r})|^2$ , через кото-

рую выражаются кинетическая энергия  $T$  электронов и потенциальная энергия  $U$  кулоновского взаимодействия. Из системы одноэлектронных уравнений находят одноэлектронные  $\Psi_{n_i}(\vec{r})$ -функции, которые используются для расчета электронной плотности  $n(\vec{r})$  и уточнения эффективного потенциала  $\Phi(\vec{r})$ . Затем с новым потенциалом решается задача по определению  $\Psi_{n_i}(\vec{r})$ -функций, чтобы получить следующее приближение для эффективного потенциала.

До 1930 г. в методе Томаса — Ферми не учитывалась обменная энергия, пока П. Дирак не добавил слагаемое, определяющее эту энергию и записанное через электронную плотность. *Метод Томаса — Ферми — Дирака* рассматривают как предшественник современного метода теории функционала электронной плотности, в котором учитывается вклад в полную энергию от корреляционного движения электронов.

Электроны в сложных атомах движутся в электрическом поле ядра, которое отличается от кулоновского поля из-за наличия экранирующего действия более близких к ядру электронов. Электрическое поле многоэлектронного атома спадает при удалении от ядра быстрее, чем кулоновское дальнедействующее поле водородоподобного атома. Это является причиной того, что даже без учета спина электрона и релятивистских поправок (зависимости массы от скорости) энергия  $E_{nl}$  электрона в стационарных состояниях будет зависеть от главного  $n$  и орбитального  $l$  квантовых чисел:

$$E_{nl} = -\frac{me^4 (Z - \sigma_{nl})^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad (7.4)$$

где  $\sigma_{nl}$  — постоянная экранирования, зависящая от главного  $n$  и орбитального  $l$  квантовых чисел. Значение  $\sigma_{nl}$  увеличивается при росте количества электронов в атоме, а при одинаковом значении  $n$  увеличивается с возрастанием числа  $l$ .

На рис. 7.2 приведена диаграмма, на которой показана последовательность заполнения электронами одноэлектронных энергетических уровней сложных атомов, находящихся в основном состоянии.

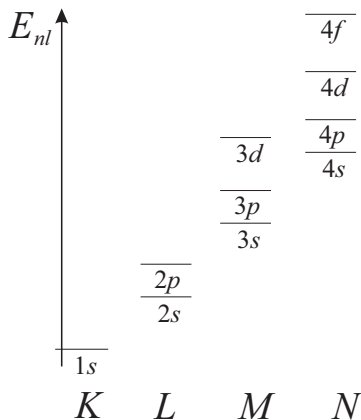


Рис. 7.2. Энергетические уровни электронов невозбужденных сложных атомов

Дадим несколько определений. *Электронная оболочка атома* — это совокупность электронных облаков, связанных с орбиталями (электронными состояниями) при заданном значении главного квантового числа  $n$  и заданном значении орбитального квантового числа  $l$ . Электронная оболочка с  $l = 0$  называется  $s$ -оболочкой, с  $l = 1$  —  $p$ -оболочкой, с  $l = 2$  —  $d$ -оболочкой и т. д.

*Электронный слой атома* — это совокупность близких по размеру электронных оболочек при заданном значении квантового числа  $n$ . Электронный слой, у которого  $n = 1$ , называется  $K$ -слоем,  $n = 2$  —  $L$ -слоем,  $n = 3$  —  $M$ -слоем и т.д. Каждый электронный слой содержит  $n$  электронных оболочек.  $K$ -слой содержит только одну  $s$ -оболочку,  $L$ -слой имеет уже две оболочки  $s$  и  $p$ , а в  $M$ -слое находятся  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -оболочки.

В атоме с  $Z$  электронами последние образуют конфигурацию, характеризуемую совокупностью квантовых чисел  $n_1, l_1, n_2, l_2, \dots, n_Z, l_Z$  и указывающую слои, оболочки и количество электронов в каждой оболочке. Электронная конфигурация атома отражает распределение электронов по состояниям с различными числами  $n$  и  $l$ . Например, для атома углерода  ${}_6\text{C}$  с шестью электронами электронная конфигурация записывается в виде  $1s^2 2s^2 2p^2$ . Заметим, что одной и той же электронной конфигурации соответствуют несколько состояний атома.

## 7.2. Механические моменты атома

Для идентификации состояния многоэлектронного атома без учета спин-орбитального взаимодействия применяется набор из четырех квантовых чисел:  $n, L, M_L, M_S$ , а с учетом спин-орбитального взаимодействия —  $n, L, J, M_J$ .

В первом случае орбитальный момент импульса  $\vec{L}$  и спин  $\vec{S}$  атома в сферически-симметричном поле ядра остаются постоянными по отдельности. Они равны сумме орбитальных моментов  $\vec{l}_i$  и спинов  $\vec{s}_i$  отдельных электронов соответственно:

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^Z \vec{l}_i, \quad (7.5)$$

$$\vec{S} = \sum_{i=1}^Z \vec{s}_i. \quad (7.6)$$

Длины этих векторов  $|\bar{L}|$ ,  $|\bar{S}|$  и значения их проекций  $L_z$ ,  $S_z$  на выделенное осью  $Z$  направление определяются с учетом пространственного квантования:

$$|\bar{L}| = \hbar\sqrt{L(L+1)}, \quad (7.7)$$

где  $L$  — орбитальное квантовое число атома:  $L = 0, 1, 2, 3, \dots$ ;

$$L_z = \hbar M_L, \quad (7.8)$$

где  $M_L$  — магнитное орбитальное квантовое число атома:  $M_L = 0, \pm 1, \dots, \pm L$ , т. е. принимает  $2L+1$  значения;

$$|\bar{S}| = \hbar\sqrt{S(S+1)}, \quad (7.9)$$

где  $S$  — спиновое квантовое число атома:  $S = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ ;

$$S_z = \hbar M_S, \quad (7.10)$$

$M_S$  — магнитное спиновое квантовое число атома:  $M_S = -S, \dots, +S$  через единицу, т. е. имеется всего  $2S+1$  значений.

Энергетический уровень атома, который соответствует состоянию с определенным значением  $L$  и  $S$ , называют *атомным термом*. Значениям орбитального квантового числа атома  $L$  ставятся в соответствие буквенные обозначения (прописные буквы латинского алфавита) по схеме:

$$L = 0 \leftrightarrow S,$$

$$L = 1 \leftrightarrow P,$$

$$L = 2 \leftrightarrow D \text{ и т. д.}$$

Во втором случае орбитальный момент  $\bar{L}$  и спин  $\bar{S}$  атома не сохраняются по отдельности. Постоянной величиной является только полный момент  $\bar{J}$  атома. Способ определения механического момента  $\bar{J}$  зависит от типа связи электронов в атоме. Рассмотрим два предельных случая.

В легких атомах спин-орбитальное взаимодействие значительно слабее межэлектронного взаимодействия, поэтому образуется связь

электронов, называемая  $L$ - $S$ -связь, или *связь Рассела — Саундерса*, для которой полный момент  $\vec{J}$  атома равен сумме

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad (7.11)$$

где  $\vec{L}$  и  $\vec{S}$  находятся соответственно по формулам (7.5) и (7.6). Длина  $|\vec{J}|$  и проекция  $J_z$  полного момента  $\vec{J}$  атома вычисляются по формулам:

$$|\vec{J}| = \hbar \sqrt{J(J+1)}, \quad (7.12)$$

$$J_z = \hbar M_J, \quad (7.13)$$

где  $J$  — внутреннее квантовое число атома:  $J = |L - S|, \dots, L + S$ ;  $M_J$  — магнитное внутреннее квантовое число атома:  $M_J = -J, \dots, +J$  через единицу, т. е.  $M_J$  может принимать  $2J + 1$  значения, причем

$$M_J = M_L + M_S.$$

Атомный терм с кратностью вырождения

$$\sum_{|L-S|}^{L+S} (2J+1) = (2L+1)(2S+1) \quad (7.14)$$

из-за спин-орбитального взаимодействия распадается на ряд подуровней с различными  $J$ . Эти подуровни называются *мультиплетами*. Они образуют уровни тонкой структуры. Количество мультиплетов равно  $2L + 1$  при выполнении неравенства  $S > L$  и  $2S + 1$  при  $L \geq S$ .

В тяжелых атомах спин-орбитальное взаимодействие велико по сравнению с межэлектронным взаимодействием, в них образуется  $j$ - $j$ -связь, согласно которой полный момент  $\vec{J}$  атома определяется как сумма полных моментов  $\vec{J}_i$  отдельных электронов:

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^Z \vec{J}_i, \quad (7.15)$$

где  $\vec{J}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$ .

В действительности во многих атомах реализуются промежуточные между  $L$ - $S$ -и  $j$ - $j$ -связью типы связей.

Напишем правила отбора для квантовых чисел  $L$ ,  $M_L$ ,  $S$ ,  $M_S$  и  $J$ ,  $M_J$  атома:

$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad (\Delta L = \pm 1, \text{ если } L_{\text{нач}} = 0 \text{ или } L_{\text{кон}} = 0),$$

$$\Delta M_L = 0, \pm 1,$$

$$\Delta S = 0,$$

$$\Delta M_S = 0,$$

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (\Delta J = \pm 1, \text{ если } J_{\text{нач}} = 0 \text{ или } J_{\text{кон}} = 0),$$

$$\Delta M_J = 0, \pm 1.$$

В спектроскопии для обозначения атомного мультиплета или состояния атома, которые характеризуются четырьмя квантовыми числами:  $n$ ,  $L$ ,  $S$  и  $J$ , используется комбинация символов:

$$n^{2S+1}(S, P, D\dots)_J,$$

где  $(2S + 1)$  — *мультиплетность по спину*. Например, основное состояние атома углерода  ${}_6\text{C}$  обозначается как  $2^3 P_0$ . Это означает, что состояние невозбужденного атома углерода характеризуют квантовые числа, принимающие значения:  $n = 2$ ,  $L = 1$ ,  $S = 1$  и  $J = 0$ .

### 7.3. Заполнение электронных оболочек и слоев

Обсудим закономерности заполнения электронами электронных оболочек и слоев (или энергетических уровней) атомов, находящихся в основном состоянии, при увеличении атомного номера. С этим вопросом непосредственно связана структура периодической системы химических элементов, созданной в 1869 г. Д. Менделеевым.

С обычной точки зрения, в невозбужденном атоме все электроны должны находиться в  $1s$ -состоянии, т. е. в состоянии с минимальной энергией. В действительности электроны, стремящиеся



занять  $1s$ -состояние, сталкиваются с ограничением, которое называется *принципом запрета Паули*. Данный принцип был постулирован в 1925 г. В. Паули и утверждает, что два *фермиона* (частицы с полужелым спином, подчиняющиеся статистике Ферми — Дирака) не могут одновременно находиться в одном и том же квантовом состоянии. В квантовом состоянии, которое описывает атомная орбиталь, характеризуемая тремя квантовыми числами  $n$ ,  $l$  и  $m_l$ , могут находиться только два электрона. Принцип Паули не распространяется на частицы с целым спином, которые называются *бозонами* (подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна).

Следовательно, электроны невозбужденного атома должны занимать такие квантовые состояния, в которых энергия атома была бы наименьшей, а распределение электронов по состояниям учитывало бы принцип Паули.

Рассмотрим электронную оболочку с заданным значением  $l$ , которой сопоставляется  $2(2l+1)$  орбиталей с различными  $m_l$  и  $m_s$ . Согласно принципу Паули независимо от значения главного квантового числа  $n$  на  $s$ -оболочке могут находиться два электрона с различными проекциями спинов (различными значениями  $m_s$ ), на  $p$ -оболочке — шесть электронов, орбитали которых отличаются значениями квантовых чисел  $m_l$  и  $m_s$ , а на оболочке с  $l = (n-1)$  не более  $4n-2$  электрона.

Порядок заполнения электронами электронной оболочки определяется с помощью эмпирического *правила Хунда*, сформулированного в 1927 г. Ф. Хундом на основе анализа атомных спектров: наименьшей энергией  $E_{\min}$  обладает состояние атома с наибольшим значением спинового квантового числа  $S_{\max}$ . Для такого состояния орбитальное квантовое число  $L$  атома должно иметь наибольшее значение  $L_{\max}$ , а внутреннее квантовое число  $J$  атома равно  $|L_{\max} - S_{\max}|$ , когда заполнено менее половины электронной оболочки, и  $L_{\max} + S_{\max}$  в остальных случаях. Таким образом, по правилу Хунда, при заданных значениях  $L_{\max}$  и  $S_{\max}$  только два крайних из возможных значений  $J$  реализуются в основных состояниях атомов.

В качестве примера рассмотрим невозбужденный атом углерода  ${}_6\text{C}$  с шестью электронами, которые образуют в соответствии с принципом Паули электронную конфигурацию  $1s^2 2s^2 2p^2$ . Для наглядного изображения электронного строения (электронной конфигурации) воспользуемся энергетической диаграммой (рис. 7.3). На этой диаграмме вертикальными стрелками внутри квантовых ячеек изображены электроны, находящиеся в тех состояниях, которые символизируют квантовые ячейки. Направление стрелки обозначает ориентацию спина электрона.

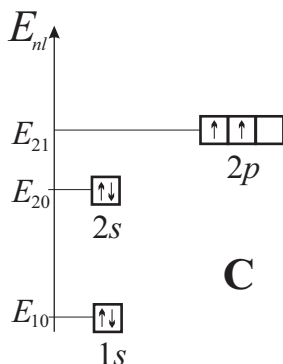


Рис. 7.3. Энергетическая диаграмма невозбужденного атома углерода

Согласно правилу Хунда сначала каждая из свободных орбиталей (квантовая ячейка) электронной оболочки заполняется одним электроном с «положительным» спином (проекция спина имеет положительный знак, а магнитное спиновое квантовое число  $m_s = 1/2$ ). После исчерпания свободных орбиталей на занятую электроном орбиталь (орбиталь с неспаренным электроном) добавляется второй электрон. В одной заполненной квантовой ячейке может находиться только два электрона со спинами противоположного знака, в результате суммарный спин этой орбитали становится равным нулю. Таким образом, в атоме углерода, находящемся в основном состо-

янии, два электрона образуют  $1s$ -оболочку, два других —  $2s$ -оболочку, остальные два электрона начинают создавать  $2p$ -оболочку.

Атомный мультиплет или состояние атома углерода зависит от состояний последних двух электронов, расположенных на внешней (валентной)  $2p$ -оболочке, поскольку для заполненных электронных оболочек квантовые числа  $L$ ,  $S$  и  $J$  атома равны нулю. Для определения основного состояния этого атома воспользуемся правилом Хунда.

Наибольшее значение спинового квантового числа  $S_{\max}$  атома достигается, когда спины  $\bar{S}$  обоих электронов направлены в одну сторону и создают максимальный спин  $\bar{S}_{\max}$  атома. Его величину определяет спиновое квантовое число  $S_{\max}$ , равное 1:  $S_{\max} = 1/2 + 1/2 = 1$ . При этом  $S_{\max}$  наибольшее значение орбитального числа  $L_{\max}$  атома равно 1, так как значение  $L = 2$  запрещено по принципу Паули (орбитальные моменты  $\bar{L}$  двух  $p$ -электронов не могут быть сонаправленными). Электронами заполнено менее половины  $p$ -оболочки, поэтому внутреннее квантовое число  $J$  равно нулю:  $J = 1 - 1 = 0$ . В итоге получаем, что основным состоянием атома углерода будет  $2^3 P_0$ -состояние. Например, состояние  $2^3 P_2$  будет возбужденным.

Обратимся к электронному слою, который при заданном значении главного квантового числа  $n$  объединяет

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$$

электронных состояний с различными  $l$ ,  $m_l$  и  $m_s$ . В  $K$ -слое может находиться 2 электрона, в  $L$ -слое — 8 электронов, в  $M$ -слое — 18 электронов и т. д.

Порядок заполнения электронами электронного слоя определяется эмпирическим правилом  $n+l$  (*правилом Маделунга* или *правилом Клечковского*), предложенного в 1936 г. Э. Маделунгом, и сформулированного в 1951 г. В. Клечковским: энергия атома последовательно повышается по мере увеличения суммы главного и орбитального квантовых чисел  $n+l$ , при одном и том же значении этой суммы относительно меньшей энергией обладает состояние с меньшим значением

главного квантового числа  $n$ . Поэтому заполнение электронами электронного слоя в атоме происходит в порядке возрастания суммы  $n+l$ .

В действительности же, начиная с  $n \geq 3$ , наблюдается нарушение порядка заполнения электронами оболочек в слоях (см. рис. 7.2):

$$1s < 2s < 2p < 3s < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f \cong 5d < 6p < 7s < 5f \cong 6d < 7p < 8s.$$

Итак, при увеличении атомного номера невозбужденного атома электроны образуют электронные оболочки и слои, и этот процесс можно описывать с учетом принципа Паули, правил Хунда и Клечковского.

#### 7.4. Оптические спектры щелочных металлов

Экспериментальные данные говорят о том, что у атомов с одинаковым строением наружной электронной оболочки аналогична структура оптических спектров поглощения или излучения. Это объясняется тем, что такие спектры обусловлены переходами слабо связанных внешних электронов на разрешенные правилами отбора энергетические уровни, имеющие похожее расположение. Внутренние электроны образуют с ядром атомный остов, поэтому участия в переходах не принимают.

Ярким примером могут служить атомы щелочных металлов: литий Li, натрий Na, калий K, рубидий Rb, цезий Cs, франций Fr, состоящие из атомных остовов и одного внешнего электрона. Их электронная конфигурация заканчивается на  $ns^1$ . Атомы щелочных металлов имеют одинаковые особенности в оптических спектрах, несмотря на то, что у них различные основные состояния:  ${}_3\text{Li} - 2^2S_{1/2}$ ,  ${}_{11}\text{Na} - 3^2S_{1/2}$ ,  ${}_{19}\text{K} - 4^2S_{1/2}$  и т. д., а также численные значения энергетических уровней. Оптические спектры атомов щелочных металлов, подобно спектрам водородоподобных атомов, состоят из нескольких частично перекрывающихся серий спектральных линий. Наиболее интенсивными являются главная, резкая, диф-

фузная и основная (Бергмана) серии. При поглощении *главная серия* соответствует квантовым переходам атома из основного состояния, а при излучении — переходам в основное состояние.

Рассмотрим схему энергетических уровней атомов щелочных металлов на примере атома лития Li. На рис. 7.4 изображены несколько термов  $E_{nL}$  этого атома. Стрелками отмечены разрешенные правилом отбора по квантовому числу  $L$  квантовые переходы при излучении атомом фотона.

При изменении атомом своего состояния, т. е. при переходе его с одного энергетического уровня  $E_{nL}$  на другой, в оптическом спектре появляется спектральная линия с длиной волны  $\lambda$ . В оптическом спектре атома лития Li выделяются следующие серии спектральных линий. *Главная серия*, которая связана с квантовыми переходами между атомными термами  $2S \leftrightarrow nP$  ( $n = 2, 3, \dots$ ), *резкая серия* —  $2P \leftrightarrow nS$  ( $n = 3, 4, \dots$ ), *диффузная серия* —  $2P \leftrightarrow nD$  ( $n = 3, 4, \dots$ ) и *основная серия* —  $3D \leftrightarrow nF$  ( $n = 4, 5, \dots$ ).

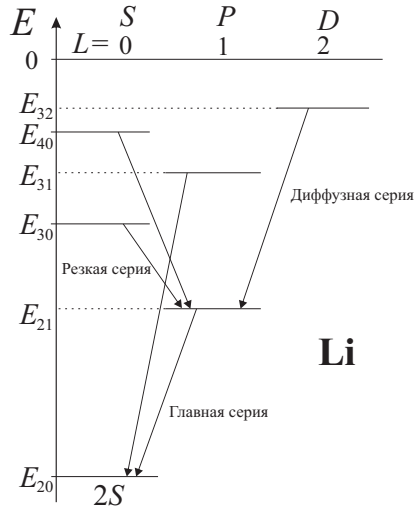


Рис. 7.4. Схема термов атома лития

С помощью приборов с высокой разрешающей силой в оптических спектрах атомов щелочных металлов и других элементов можно обнаружить тонкую структуру, обусловленную спин-орбитальным взаимодействием. Одни спектральные линии распадаются на несколько компонент, число которых может быть равно двум (дублеты), трем (триплеты), четырем (квартеты), пяти (квинтеты) и т. д. Другие спектральные линии остаются одиночными (синглеты). Расщепление линий вызвано расщеплением атомных термов на мультиплеты благодаря спин-орбитальному взаимодействию. Каждый  $P$ -терм распадается на два мультиплета с  $J=1/2$  и  $J=3/2$ , каждый  $D$ -терм на два мультиплета с  $J=3/2$  и  $J=5/2$  и т. д. Не расщепляется только  $S$ -терм, для которого  $J=1/2$ . Учет спин-орбитального взаимодействия приводит к более сложной системе энергетических уровней тонкой структуры  $E_{nJ}$ .

На рис. 7.5 представлен ряд мультиплетов атома лития Li, соответствующих различным состояниям валентного электрона. Здесь же показаны квантовые переходы, разрешенные правилом отбора по квантовому числу  $J$ .

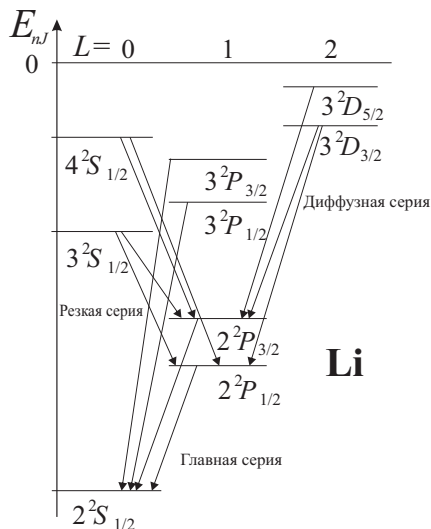


Рис. 7.5. Схема мультиплетов атома лития

Спектральные линии главной и резкой серии становятся дублетами, а диффузной серии — триплетами. Расстояние между энергетическими уровнями тонкой структуры убывает с возрастанием квантового числа  $n$ .

Подобная картина наблюдается и для других щелочных металлов. Однако заметим, что расщепление спектральных линий увеличивается с ростом заряда ядра атома. Например, наиболее интенсивная желтая линия (первая из главной серии) натрия состоит из двух компонент с  $\lambda_1 = 589,0$  и  $\lambda_2 = 589,6$  нм, а такая же линия для цезия — из компонент с  $\lambda_1 = 852,1$  и  $\lambda_2 = 894,4$  нм.

## 7.5. Спектр атома во внешнем магнитном поле

Структура оптического спектра атомов при помещении их в постоянное и однородное магнитное поле становится более сложной. Это обусловлено снятием вырождения энергетических уровней атомов в таком поле, приводящим к их расщеплению, а значит, и к расщеплению спектральных линий. Данное явление впервые наблюдал в 1896 г. П. Зееман, и называется оно в его честь *эффектом Зеемана*. Если спектральная линия расщепляется на три линейно поляризованные компоненты (триплет), тогда речь идет о простом или нормальном эффекте Зеемана. Название «нормальный» возникло из-за того, что расщепление линии на три компоненты удалось объяснить в 1897 г. Х. Лоренцу, который опирался на классическую электромагнитную теорию. Если спектральная линия расщепляется на более чем три компоненты, то это сложный или аномальный эффект Зеемана. Аномальный эффект не удалось рассчитать классическими методами, его объяснил в 1921 г. А. Ланде, введя понятие  $g$ -фактора Ланде.

В 1912 г. Ф. Пашеном и Э. Баком было установлено, что при увеличении напряженности  $\vec{H}$  магнитного поля сложный эффект Зе-

емана переходит в простой. Это явление носит название *эффект Пашена — Бака*.

Все перечисленные выше явления можно легко объяснить, основываясь на принципах квантовой механики. Для этого надо найти новые энергетические уровни, которые появляются за счет приобретения атомом дополнительной энергии  $U_H$ . В слабом магнитном поле они возникают при расщеплении уровней тонкой структуры:

$$E_{nJ} = E_{nL} + \langle U_{SL} \rangle,$$

где  $E_{nL}$  — значение энергетических уровней без учета спин-орбитального взаимодействия,  $\langle U_{SL} \rangle$  — величина энергии спин-орбитального взаимодействия, а в сильном магнитном поле — при расщеплении термов  $E_{nL}$ . Обсудим указанные эффекты.

Вначале рассмотрим влияние слабого магнитного поля. Этот предельный случай позволяет объяснить простой и сложный эффект Зеемана. Магнитное поле считается слабым, когда вызываемое им зеемановское расщепление мало по сравнению с расщеплением, обусловленным спин-орбитальным взаимодействием, т. е.  $U_H \ll U_{SL}$ . В этом случае взаимодействие моментов  $\vec{L}$  и  $\vec{S}$  атома больше взаимодействий магнитных моментов  $\vec{\mu}_L$  и  $\vec{\mu}_S$  с магнитным полем, поэтому атом характеризуют механический полный момент  $\vec{J}$  и эффективный магнитный момент  $\vec{\mu}_J$ :

$$\vec{\mu}_J = -g_J \frac{e}{2mc} \vec{J},$$

где  $g_J = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$  — это фактор Ланде.

В вакууме дополнительную энергию  $U_H$ , приобретаемую атомом в сильном магнитном поле, определяет взаимодействие магнитного поля напряженности  $\vec{H}$  и магнитного момента  $\vec{\mu}_J$  атома, прецессирующего с частотой Лармора

$$\omega_a = \frac{eH}{2mc}$$



вокруг направления вектора  $\vec{H}$ . Для вычисления  $U_H$  в системе единиц СГС используется формула

$$U_H = -\vec{\mu}_J \vec{H}.$$

Допустим имеется однородное магнитное поле, направленное вдоль оси  $Z$ :  $\vec{H} = (0, 0, H)$ , тогда

$$U_H = -\mu_{Jz} H.$$

При заданных условиях состояния атома удобно описывать нормированной волновой функцией  $\Psi_{nLJM_J}$ , характеризуемой набором четырех квантовых чисел  $n, L, J, M_J$ . Значения  $E_{nLJM_J}$  энергетических уровней атома в магнитном поле находятся по формуле

$$E_{nLJM_J} = E_{nJ} + \langle U_H \rangle = E_{nJ} - \int_V \Psi_{nLJM_J}^* (\hat{\mu}_{Jz} H) \Psi_{nLJM_J} dV.$$

Напряженность  $H$  поля не зависит от координат, поэтому ее можно вынести из-под интеграла. Среднее значение  $\langle \mu_{Jz} \rangle$  проекции  $\mu_{Jz}$  магнитного момента  $\vec{\mu}_J$  атома равно собственному значению оператора проекции  $\hat{\mu}_{Jz}$ , а именно  $\langle \mu_{Jz} \rangle = -g_J \mu_b M_J$ . Значит, для энергии получим

$$E_{nLJM_J} = E_{nJ} + g_J \mu_b M_J H, \quad (7.16)$$

где  $M_J = -J, \dots, J$ .

Таким образом, в постоянном и однородном магнитном поле снимается вырождение мультиплетов  $E_{nJ}$  атомов по магнитному внутреннему квантовому числу  $M_J$  и появляются  $(2J+1)$  зеемановских подуровня. Расстояние  $\Delta E$  между соседними зеемановскими подуровнями находится с помощью формулы:

$$\Delta E = g_J \mu_b H = g_J \omega_a \hbar.$$

Оно различно для разных мультиплетов  $E_{nJ}$  и зависит от фактора Ланде  $g_J$ , значение которого определяется квантовыми числами  $L, S$  и  $J$ . Такой вид расщепления энергетических уровней приводит к появлению сложного эффекта Зеемана.

Обсудим этот эффект на примере первой спектральной линии главной серии атома натрия Na. За ее появление в спектре излучения отвечает квантовый переход между следующими двумя термами  $E_{nL}$ :  $3^2P \rightarrow 3^2S$  (рис. 7.6). Спин-орбитальное взаимодействие вызывает расщепление  $P$ -терма на два мультиплета, поэтому данная линия представляет собой дублет, называемый желтым дублетом натрия. Он образуется при квантовых переходах между мультиплетами  $E_{nJ}$  тонкой структуры:  $3^2P_{1/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$  и  $3^2P_{3/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$ .

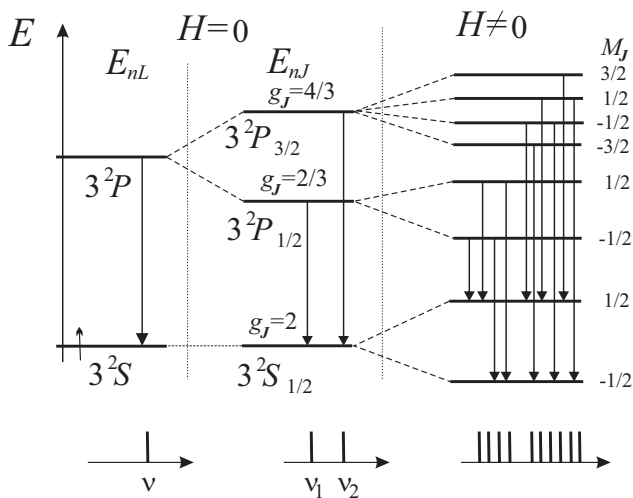


Рис. 7.6. Расщепление мультиплетов атома натрия в слабом магнитном поле

В магнитном поле мультиплеты с  $J = 1/2$  распадаются на два зеемановских подуровня, а с  $J = 3/2$  на четыре подуровня. Учитывая правила отбора для квантовых чисел, можно показать, что вместо первой спектральной линии желтого дублета появятся четыре линии, а вместо второй спектральной линии шесть линий.

Если спиновое квантовое число  $S$  атома равно нулю ( $S = 0$ ), т. е. его спин  $\vec{S} = 0$ , то внутренние и орбитальные квантовые числа равны:  $J = L$ . В этом случае мультиплеты  $E_{nJ}$  атомов расщепляются на  $(2L+1)$  зеемановских подуровня, расстояние  $\Delta E$  между которыми будет одинаковым:

$$\Delta E = \mu_b H = \omega_L \hbar,$$

так как  $g_J = 1$ . При таком расщеплении энергетических уровней наблюдается простой эффект Зеемана.

Проявление этого эффекта рассмотрим на спектральной линии парагелия, т. е. атома гелия  ${}^2\text{He}$ , у которого спин равен нулю:  $\vec{S} = 0$ . Основное состояние парагелия обозначается  $1^1S_0$ , и он имеет только синглетные состояния (рис. 7.7). В магнитном поле вместо одной спектральной линии возникнут три линии.

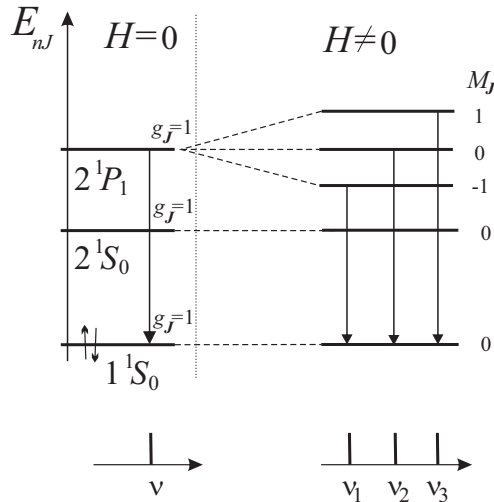


Рис. 7.7. Расщепление мультиплетов парагелия в слабом магнитном поле

Теперь рассмотрим действие сильного магнитного поля. Этот предельный случай может объяснить эффект Пашена — Бака. Магнитное поле будет сильным, когда зеемановское расщепление, вызываемое полем, превышает расщепление из-за спин-орбитального взаимодействия, т. е.  $U_H \gg U_{SL}$ . В таком магнитном поле взаимодействия магнитных моментов  $\vec{\mu}_L$  и  $\vec{\mu}_S$  с полем больше взаимодействия моментов  $\vec{L}$  и  $\vec{S}$  между собой. Следовательно, поле разрушает взаимодействие  $\vec{L}$  и  $\vec{S}$ , и нет смысла рассматривать полный момент  $\vec{J}$  атома, так как моменты  $\vec{L}$  и  $\vec{S}$  ведут себя независимо друг от друга.

В сильном однородном магнитном поле атом приобретет энергию

$$U_H = -(\mu_{Lz} + \mu_{Sz})H.$$

Состояния атома описываются нормированной волновой функцией  $\Psi_{nLM_LM_S}$  с квантовыми числами  $n$ ,  $L$ ,  $M_L$ ,  $M_S$ , поэтому значения энергетических уровней атома в магнитном поле вычисляются по формуле:

$$\begin{aligned} E_{nLM_LM_S} &= E_{nL} + \langle U_H \rangle = E_{nL} - \int_V \Psi_{nLM_LM_S}^* (\hat{\mu}_{Lz} + \hat{\mu}_{Sz}) H \Psi_{nLM_LM_S} dV = \\ &= E_{nL} + (M_L + 2M_S)\mu_b H, \end{aligned}$$

где  $M_L = -L, \dots, L$ ;  $M_S = -S, \dots, S$ .

В магнитном поле снимается вырождение атомных термов  $E_{nL}$  по квантовым числам  $M_L$  и  $M_S$  и образуются дополнительные подуровни. Такой распад энергетических уровней объясняет эффект Пашена — Бака.

Примером проявления этого эффекта может служить спектральная линия атома натрия Na, появляющаяся при квантовом переходе  $3^2P \rightarrow 3^2S$  между термами  $E_{nL}$  (см. рис. 7.8). Согласно правилу отбора для квантовых чисел в сильном магнитном поле вместо одной линии возникнут три линии.

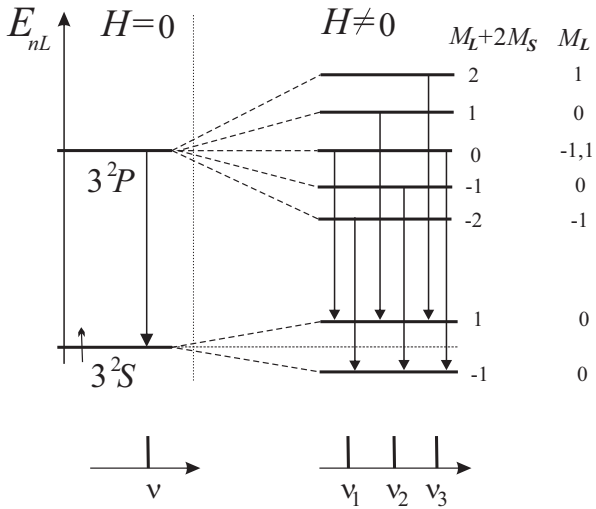


Рис. 7.8. Расщепление термов атома натрия в сильном магнитном поле

## 8. РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ

---

### 8.1. Особенности рентгеновского излучения

**В** 1895 г. В. Рентген в ходе экспериментов с катодными лучами, создаваемыми газоразрядной трубкой, заметил свечение (фотолюминесценцию) кристаллов соли бария, которые лежали недалеко от трубки за картоном. Излучение, которое вызывало это свечение, получило название *X-лучей*, или *рентгеновских лучей*.

По своей природе рентгеновское излучение является электромагнитным излучением, которое называется жестким излучением в случае малых длин волн  $\lambda \geq 0,02 \text{ \AA}$  и мягким излучением для больших длин волн  $\lambda \leq 100 \text{ \AA}$ . Рентгеновские лучи обладают рядом свойств, которые могут находить применение на практике:

- 1) невидимы для человеческого глаза;
- 2) распространяются прямолинейно;
- 3) оказывают на фотоэмульсию такое же действие, как видимый свет;
- 4) вызывают флуоресценцию некоторых веществ (разновидность фотолюминесценции, при которой энергия, поглощенная веществом, высвобождается в виде света достаточно быстро  $10^{-10} - 10^{-6} \text{ с}$ );

- 5) вызывают ионизацию газов;
- 6) обладают большой проникающей способностью сквозь разные объекты живой и неживой природы, не пропускающие лучи видимого света;
- 7) подвержены рассеянию и поглощению в веществах с закономерностями, отличающимися от закономерностей, свойственных излучению видимой области.

Например, поглощение рентгеновских лучей не зависит от оптических свойств поглощающего вещества, а зависит от длины волны  $\lambda$  излучения и от порядкового номера  $Z$  атомов поглощающего вещества. Чем больше длина волны  $\lambda$  рентгеновского излучения или атомный номер  $Z$ , тем сильнее поглощение рентгеновских лучей. Интенсивность  $J$  рентгеновских лучей экспоненциально убывает при увеличении пройденного пути  $d$  в поглощающем слое и определяется *законом Бугера*:

$$J = J_0 e^{-kd},$$

где  $J_0$  — начальная интенсивность излучения,  $k$  — линейный коэффициент ослабления, который зависит от плотности вещества и пропорционален  $Z^3\lambda^3$ .

Первичное взаимодействие рентгеновского излучения с веществом может происходить по трем механизмам:

1. *Когерентное рассеяние* (рассеяние с сохранением длины волны). Эта форма взаимодействия присутствует, когда фотоны рентгеновских лучей имеют меньшую энергию, чем энергия связи электрона с ядром атома. В этом случае энергии фотона недостаточно для освобождения электрона из атома вещества. Фотон изменяет направление распространения, а его энергия не изменяется. Поэтому длина волны рассеянного излучения остается неизменной.

2. *Фотоэффект*. Этот механизм с поглощением относительно низкоэнергетического рентгеновского излучения реализуется в том случае, когда энергия фотона превышает энергию связи электрона с ядром и фотон выбивает один из электронов. Оставшуюся часть

энергии, которую фотон не потратил на освобождение электрона, он передает электрону в форме кинетической энергии. Атом, потерявший электрон, становится положительным ионом. Продолжительность существования свободных электронов очень мала. Они поглощаются нейтральными атомами, которые превращаются в отрицательные ионы. Результатом является ионизация вещества.

3. *Некогерентное рассеяние* (эффект Комптона). Оно возникает, когда на вещество падает высокоэнергетическое рентгеновское излучение. Энергия фотонов таких рентгеновских лучей значительно больше, чем энергия ионизации атомов вещества. Взаимодействие фотона рентгеновских лучей происходит с одним из электронов внешней электронной оболочки атома, который имеет сравнительно слабую связь с атомным ядром. Высокоэнергетический фотон передает часть своей энергии электрону, который высвобождается из атома. Фотон, потеряв часть энергии, продолжает движение под некоторым углом к направлению первоначального движения. Значит, рассеянное рентгеновское излучение будет иметь длину волны, большую, чем первичное излучение.

4. Для генерирования рентгеновского излучения применяют рентгеновскую трубку (электровакуумный прибор), схематическое изображение которой приведено на рис. 8.1. Рентгеновская трубка состоит из стеклянного балона, в котором создается относительный вакуум (выкачен воздух до низкого давления  $10^{-7}$  мм рт. ст.) и в который впаяны два электрода: катод  $K$  и анод (антикатод)  $A$ . На катоде имеется нить накала из тугоплавкого металла (например, вольфрама). При подаче электрического тока низкого напряжения (около 10 В) на эту нить она раскаляется и возникает термоэлектронная эмиссия, при которой электроны отделяются от нити. Испущенные электроны под действием электрического поля, которое создается между катодом  $K$  и анодом  $A$ , начинают двигаться с ускорением в направлении анода. К электродам подводится высокое напряжение  $V_{ка}$  (от 10 до 500 кВ) за счёт чего достигается большая скорость движения электронов. С этой скоростью электроны бомбардируют



рабочую поверхность анода, расположенную под некоторым углом к направлению электронного пучка. Поверхность представляет собой впаянную в анод пластину из тяжелого металла, называемую зеркалом анода. При столкновении потока быстрых электронов с зеркалом анода возникает рентгеновское излучение.

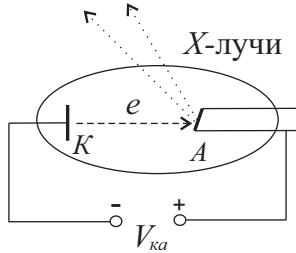


Рис. 8.1. Схема рентгеновской трубки

## 8.2. Виды рентгеновского излучения

В рентгеновском излучении выделяются две компоненты, которые называются *тормозным* и *характеристическим излучением*. Их появление напрямую связано с зависящей от напряжения  $V_{ка}$  кинетической энергией электронов, испытывающих столкновение с зеркалом антикатада.

Если напряжение  $V_{ка}$  между катодом и анодом меньше некоторого критического напряжения  $V_{кр}$ , являющегося характеристикой вещества зеркала анода:  $V_{ка} < V_{кр}$ , то у электронов, в результате их взаимодействия с электростатическим полем электронных оболочек атомов зеркала анода, резко замедляется скорость. Они теряют часть своей кинетической энергии, которая идет на создание рентгеновского излучения, называемого тормозным (см. рис. 8.2, а). При этом большую часть кинетической энергии (около 98 %) электроны передают атомам в виде тепла и лишь около 2 % энергии идет на образование тормозного рентгеновского излучения.

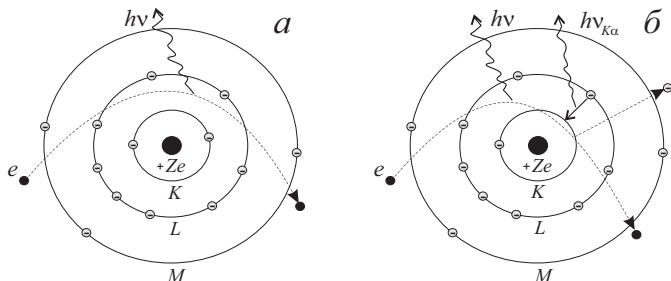


Рис. 8.2. Процесс создания рентгеновского излучения:  
 а — тормозного, б — характеристического

Спектр *тормозного рентгеновского излучения* является сплошным. Распределение интенсивности  $J$  излучения в зависимости от длины волны  $\lambda$  представляется кривой с максимумом (рис. 8.3). Интенсивность тормозного излучения прямо пропорциональна силе анодного тока, квадрату напряжения  $V_{\text{ка}}$  и порядковому номеру  $Z$  атомов вещества зеркала анода.

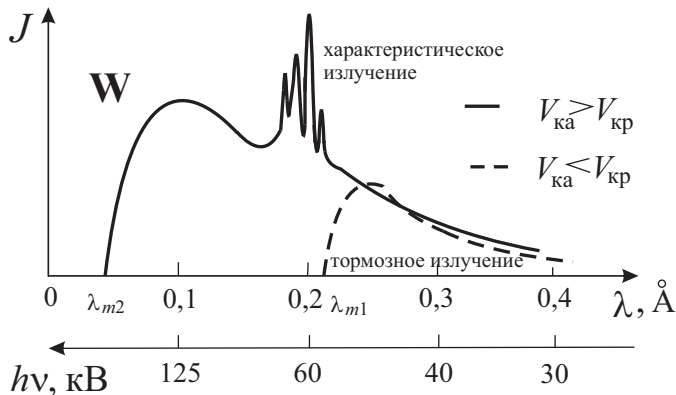


Рис. 8.3. Спектр рентгеновского излучения

Рентгеновские лучи не могут иметь энергию, большую, чем кинетическая энергия образующих их электронов. Наименьшая длина волны  $\lambda_m$  излучения соответствует максимальной кинетической энергии  $T_{\text{кин}}^{\text{max}} = eV_{\text{ка}}$  тормозящихся электронов. Поэтому со стороны малых длин волн рентгеновский спектр обрывается на значениях  $\lambda_m$ , которые уменьшаются при увеличении напряжения  $V_{\text{ка}}$ . Связь между величинами  $\lambda_m$  и  $V_{\text{ка}}$  определяется равенством

$$\frac{hc}{\lambda_m} = eV_{\text{ка}}.$$

Из него следует, что

$$\lambda_m V_{\text{ка}} = \frac{hc}{e} = \text{const}. \quad (8.1)$$

Для практических целей формулу (8.1) удобно переписать в виде:

$$\lambda_m = \frac{1,23}{V_{\text{ка}}},$$

$\lambda_m$  записывается в нм, а  $V_{\text{ка}}$  подставляется в кВ.

При увеличении напряжения  $V_{\text{ка}}$  между катодом и анодом можно добиться выполнения неравенства  $V_{\text{ка}} > V_{\text{кр}}$ . В этом случае энергия падающего электрона достаточно велика, и он, наряду с созданием тормозного излучения, может передать свою кинетическую энергию электрону с внутренней электронной оболочки атома зеркала анода. Если кинетическая энергия падающего электрона больше энергии связи электрона в атоме, то последний выбивается из атома, т. е. происходит ионизация одной из внутренних электронных оболочек атома. После этого более высокоэнергетический электрон атома (с более отдаленной от ядра оболочки) переходит на место выбитого электрона, в более низкое энергетическое состояние (см. рис. 8.2, б). При этом испускается рентгеновский фотон с энергией  $h\nu_{\text{ка}}$ , равной разности энергий начального и конечного состояний переходящего электрона.

Возникающее таким образом рентгеновское излучение называется характеристическим.

*Характеристическое рентгеновское излучение* имеет линейчатый спектр. Он показан на рис. 8.3 на фоне сплошного спектра тормозного излучения. В отличие от оптических спектров атомов, рассмотренных ранее, спектр характеристического излучения обусловлен изменением состояний электронов внутренних оболочек, а не внешних. Для разных химических элементов спектры характеристического излучения имеют подобный вид, поскольку внутренние электронные слои имеют аналогичное строение.

Спектрам характеристического рентгеновского излучения присущи следующие особенности:

1. Количество спектральных линий мало в отличие от оптических спектров, для которых могут наблюдаться десятки линий.

2. Положение спектральных линий зависит от вещества зеркала анода, при этом каждый элемент дает характерный для него спектр независимо от того, находится ли он в свободном состоянии или входит в состав химического соединения. Это также отличает рентгеновские спектры от оптических.

3. Спектральные линии монотонно смещаются в сторону коротких волн при переходе от легких атомов к тяжелым, и нет периодичности, какую можно наблюдать в структуре оптических спектров.

4. Спектральные линии образуют серии, обозначаемые буквами  $K$ ,  $L$ ,  $M$ , ... Название серии определяет электронный слой  $K$ ,  $L$ ,  $M$ , ..., на который происходит переход электрона.  $K$ -серия является самой коротковолновой.

В пределах каждой серии спектральные линии различаются нижним индексом. Если линия возникает при переходе электрона с ближайшего электронного слоя, то индексом будет греческая буква  $\alpha$ , если со следующих, более высокоэнергетических слоев, то буквы  $\beta$ ,  $\gamma$  и т. д. Например, спектральная линия, связанная с переходом электрона на  $K$ -й электронный слой с ближайшего  $L$ -слоя, называется  $K_\alpha$ -линией, а с  $M$ -слоя —  $K_\beta$ -линией.

Спектральные линии  $K$ -серии имеют наибольшую интенсивность. Интенсивность линий серий  $L$ ,  $M$ ,... и других мала из-за сильного поглощения соответствующего излучения с большей длиной волны в воздухе. Для каждой серии наиболее яркой является линия, отмечаемая буквой  $\alpha$ , поскольку наиболее вероятен переход электрона с ближайшего электронного слоя.

При наблюдении спектральных линий тонкой структуры рентгеновского спектра, появляющихся благодаря спин-орбитальному взаимодействию, линии нумеруются цифрами 1, 2, 3,... Например,  $K_\alpha$ -линия представляет собой дублет из близкорасположенных линий  $K_{\alpha 1}$  и  $K_{\alpha 2}$ . Среди всех спектральных линий  $K_{\alpha 1}$ -линия является самой интенсивной.

На рис. 8.4 представлена диаграмма электронных энергетических уровней с учетом спин-орбитального взаимодействия.

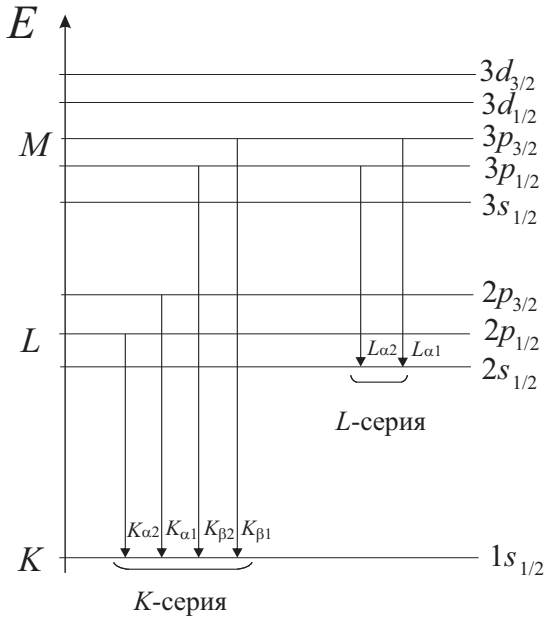


Рис. 8.4. Переходы электрона на диаграмме энергетических уровней

На диаграмме вертикальными стрелками показаны переходы внутренних электронов с излучением фотонов, которые допускаются правилами отбора по орбитальному  $l$  и внутреннему  $j$  квантовым числам:  $\Delta l = \pm 1$ ,  $\Delta j = 0, \pm 1$ , для двух серий.

В 1913 г. Г. Мозли, изучая структуру рентгеновских спектров разных химических элементов, установил эмпирически закон, связывающий волновое число  $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$  спектральной линии характеристического излучения с порядковым номером  $Z$  атома химического элемента:

$$\bar{\nu} = R \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right) (Z - \sigma)^2,$$

где  $R = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3c}$  — постоянная Ридберга;  $\sigma$  — постоянная экранирования (зависит от серии);  $k = 1$  для  $K$ -серии,  $k = 2$  для  $L$ -серии и т. д.

*Закон Мозли* формулируется следующим образом: корень квадратный из волнового числа  $\bar{\nu}$  спектральной линии находится в линейной зависимости от порядкового номера  $Z$  атома.

### 8.3. Дифракция и интерференционное отражение рентгеновских лучей

Рентгеновское излучение является по своей природе электромагнитным излучением, поэтому у него могут проявляться, наряду с квантовыми свойствами (например, эффект Комптона), еще и волновые. Наблюдение волновых свойств рентгеновских лучей впервые осуществлялось в опытах по их дифракции, которые были выполнены в 1912 г. М. Лауэ. В *опытах Лауэ* применялись разные кристаллы в качестве дифракционных решеток. Возможность на-

блюдать дифракционную картину, создаваемую рентгеновским излучением, основана на том, что длина волны рентгеновских лучей может быть величиной точно такого же порядка, что и постоянная кристаллической решетки ( $\sim \text{Å}$ ).

Схема установки, которую использовал Лауэ в своих опытах, изображена на рис. 8.5. Рентгеновской трубкой  $PT$  испускалось рентгеновское излучение, которое направлялось на толстый свинцовый экран  $СЭ$  с небольшим отверстием. Через это отверстие проходил узкий пучок рентгеновских лучей, имеющих сплошной спектр, который попадал на кристалл  $K$ . После прохождения через кристалл рентгеновское излучение падало на фотопластинку  $\Phi$ , на которой появлялась дифракционная картина в виде пятен.

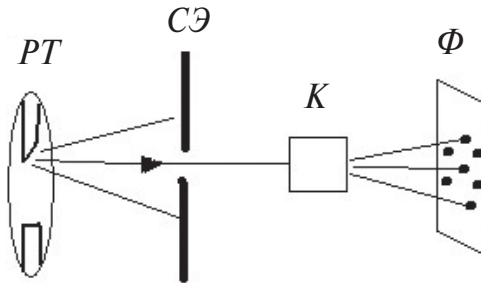


Рис. 8.5. Схема установки в опытах Лауэ

За наблюдаемую дифракционную картину ответственна интерференция вторичных волн, образующихся из-за рассеяния на отдельных атомах кристалла. Благодаря этой интерференции распространение рассеянных волн происходит лишь в определенных дискретных направлениях и для определенной длины волны  $\lambda$  в каждом таком направлении.

Получим условие дифракции рентгеновского излучения. Вначале рассмотрим одномерную решетку, которая образована атомами (рассеивающими центрами), расположенными вдоль прямой на расстоя-

нии  $d$  друг от друга (см. рис. 8.6). Размеры излучателя рентгеновских лучей и его удаленность много больше, чем межатомное расстояние, поэтому в первом приближении можно считать, что лучи, падающие на атомы, параллельны. Поэтому предположим, что на рассматриваемую линейную решетку падает плоская волна, нормаль к которой (или луч) образует с решеткой угол  $\varphi_0$ . На рис. 8.6 фронт падающей волны, проходящей через атомы  $A$  и  $B$ , обозначен отрезком  $AC$ .

Под влиянием падающей волны атомы становятся источниками сферических волн, которые расходятся во всех направлениях. Среди них выберем рассеянные лучи, лежащие в плоскости рисунка и образующие с решеткой угол  $\varphi$ . Фронт этой рассеянной волны обозначен как  $BD$ .

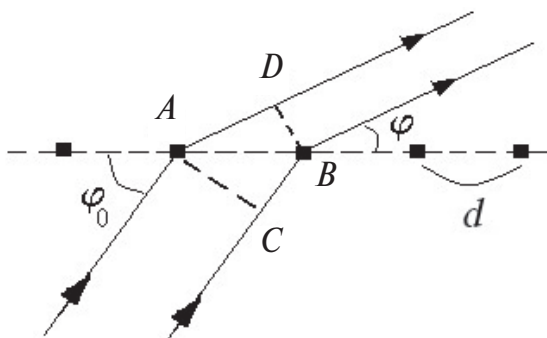


Рис. 8.6. Дифракция на линейной решетке

Разность хода  $\Delta$  между двумя падающими лучами и рассеянными атомами  $A$  и  $B$  определяет выражение

$$\Delta = AD - BC = d \cos \varphi - d \cos \varphi_0.$$

Рассеянные лучи будут интерферировать и давать в направлении, которое определяет угол  $\varphi$ , дифракционный максимум, при условии, что разность хода  $\Delta$  равна целому числу длин волн  $\lambda$ :

$$\Delta = d (\cos \varphi - \cos \varphi_0) = n\lambda,$$

где  $n$  — целое число.



Видно, что каждой длине волны  $\lambda$  излучения соответствует свой угол  $\varphi$ .

Если взять кубическую пространственную кристаллическую решетку, то условие дифракции задают три уравнения, которые называются *уравнениями Лауэ*:

$$\begin{aligned}d(\cos \varphi_1 - \cos \varphi_{10}) &= n_1 \lambda, \\d(\cos \varphi_2 - \cos \varphi_{20}) &= n_2 \lambda, \\d(\cos \varphi_3 - \cos \varphi_{30}) &= n_3 \lambda,\end{aligned}\tag{8.2}$$

где  $n_1, n_2, n_3$  — целые числа, нумерующие порядок спектра.

Углы  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ , определяющие направление рассеянного излучения, и углы  $\varphi_{01}, \varphi_{02}, \varphi_{03}$ , соответствующие падающему излучению, удовлетворяют геометрическим условиям:

$$\begin{aligned}\cos^2 \varphi_1 + \cos^2 \varphi_2 + \cos^2 \varphi_3 &= 1, \\ \cos^2 \varphi_{01} + \cos^2 \varphi_{02} + \cos^2 \varphi_{03} &= 1.\end{aligned}$$

Эти условия и условия дифракции (8.2) одновременно не выполняются для произвольного значения  $\lambda$ . Поэтому при заданных углах  $\varphi_{01}, \varphi_{02}, \varphi_{03}$  дифракционные максимумы можно наблюдать только для определенных длин волн  $\lambda$ .

Можно получить формулу для расчета длины волны  $\lambda$ , при которой пространственная решетка создает дифракционные максимумы. Для этого надо уравнения (8.2) записать в виде выражений для косинусов углов  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ . Затем каждый из косинусов возвести в квадрат, а потом сложить их почленно, принимая во внимание геометрические условия. В результате найдем

$$\lambda = -2d \frac{n_1 \cos \varphi_{10} + n_2 \cos \varphi_{20} + n_3 \cos \varphi_{30}}{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}.$$

Направление, в котором будет образовываться интерференционный максимум для найденной длины волны  $\lambda$ , задают углы  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ , получаемые из условия дифракции (8.2).

В 1913 г. независимо друг от друга У. Брэггом и Г. Вульфом был предложен другой метод рассмотрения и расчета дифракции рент-

рентгеновских лучей от кристаллической решетки. В их подходе дифракционное пятно рассматривается как результат интерференционного отражения лучей от кристаллических слоев.

Для того чтобы понять *метод Вульфа — Брэгга*, рассмотрим в кристалле две плоскости, параллельные его граням. На рис. 8.7 они отмечены штриховыми линиями. На этих плоскостях находятся атомы, расположенные друг от друга на расстоянии  $d$  (постоянная кристаллической решетки). Допустим на плоскости под углом  $\varphi$  падает пучок параллельных монохроматических лучей с длиной волны  $\lambda$  (плоская волна). Из-за их рассеяния атомами возникают волны, отраженные от каждой отдельной плоскости под углом, равным углу падения  $\varphi$ . Данный процесс не зависит от длины волны, поскольку разность хода  $\Delta$  между лучами, падающими на плоскость и отраженными, равна нулю. Это легко понять на примере верхней плоскости (рис. 8.7), на которую падает волна с фронтом  $AC$  и отражается с фронтом  $A'C'$ .

Примем во внимание, что отражение происходит одновременно от многих параллельных плоскостей. Вследствие интерференции лучей, отраженных разными плоскостями, полное отражение возможно не для любой длины волны, а только для той, которая удовлетворяет определенному условию.

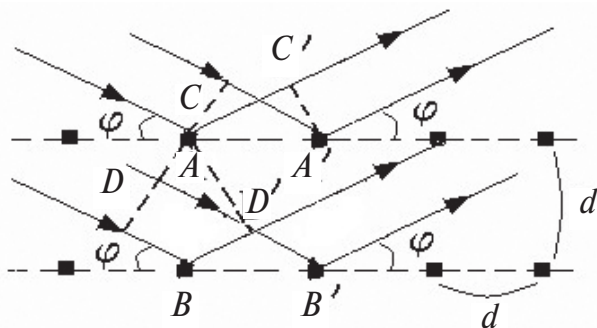


Рис. 8.7. Интерференционное отражение рентгеновских лучей

Отраженные от верхней плоскости лучи приобретают по отношению к лучам, отраженным от нижней плоскости, разность хода  $\Delta$  (рис. 8.7):

$$\Delta = DB + BD' = d \sin \varphi + d \sin \varphi = 2d \sin \varphi.$$

Точно такое же отражение происходит и от соседних плоскостей, поэтому в направлении зеркального отражения появятся налагающиеся друг на друга пучки лучей с одинаковой разностью хода. Если разность хода лучей окажется равной целому числу длин волн  $\lambda$ , то в рассматриваемом направлении будет наблюдаться максимальное отражение.

Итак, для интерференционного отражения рентгеновских лучей от кристалла при длине волны  $\lambda$  и угле скольжения  $\varphi$  должно выполняться условие

$$2d \sin \varphi = n\lambda,$$

которое называется *формулой Вульфа — Брегга*. Здесь  $n = 1, 2, \dots$  — порядок максимума отраженных лучей.

## 9. СТРУКТУРА И СПЕКТРЫ МОЛЕКУЛ

---

### 9.1. Двухатомные молекулы и их энергетические состояния

**В** предыдущих главах были затронуты различные вопросы, относящиеся к изолированным атомам. Сейчас перейдем к изучению свойств более сложных систем, а именно молекул, состоящих из атомов, которые связаны между собой химическими связями, обусловленными взаимодействием электронов внешних оболочек и их перераспределением. Ограничимся рассмотрением простейших двухатомных молекул. Основными видами химической связи в молекулах являются ковалентная и ионная.

*Ковалентная связь* образуется за счет обобществления электронных пар по обменному механизму, когда каждый из взаимодействующих атомов поставляет по равному числу электронов, или по донорно-акцепторному механизму, когда один атом (донор) передает в общее пользование электронную пару другому атому (акцептору).

Посредством обменного механизма возникают, во-первых, *неполярная ковалентная связь*, когда электроотрицательности атомов неметаллов равны, например, в молекуле водорода  $H_2$  (одна связь):



в молекуле кислорода  $O_2$  (две связи):



во-вторых, *полярная ковалентная связь*, когда атомы неметаллов имеют разную электроотрицательность, например, в молекуле хлороводорода HCl:



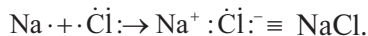
в молекуле воды H<sub>2</sub>O:



Примером образования ковалентной связи по донорно-акцепторному механизму является положительно заряженный комплексный катион аммония NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, в котором протон H<sup>+</sup>, обозначаемый иногда символом p<sup>+</sup>, присоединяется к молекуле аммиака NH<sub>3</sub>:



*Ионная связь* осуществляется между ионами металлов и неметаллов, когда электронная пара полностью принадлежит более электроотрицательному атому, становящемуся анионом. В отличие от ковалентной связи она не обладает направленностью и насыщаемостью (может присоединиться различное количество ионов). Ионные молекулы могут существовать в газообразном состоянии, к типичному случаю относятся молекулы NaCl:



В обычных условиях молекула находится в состоянии устойчивого равновесия, а ее атомы (точнее их ядра) совершают колебательные движения относительно центра инерции молекулы. Изменение положений ядер ведет к локальному изменению электронного состояния молекулы, в свою очередь, если происходит изменение состояний электронов в атоме молекулы, то это вызывает изменение взаимодействия между атомами, что влияет на их колебательное движение, а также ориентацию молекулы в пространстве как целого.

В случае пренебрежения поступательным движением молекулы, а также влиянием электронной, колебательной и вращательной подсистем друг на друга, ее полную энергию  $E_n$ , которая на-

ходится в некотором  $n$ -м электронном стационарном состоянии, можно записать в виде суммы электронной энергии  $E_{n, \text{эл}}$  и энергии колебательного движения  $E_{n, \text{кол}}$  ядер и энергии вращательного движения  $E_{n, \text{вр}}$  молекулы:

$$E_n = E_{n, \text{эл}} + E_{n, \text{кол}} + E_{n, \text{вр}}.$$

Экспериментально установлено, что электронная энергия  $E_{\text{эл}}$  молекулы в 10–100 раз превышает энергию ее колебательного движения  $E_{\text{кол}}$ , которая в 100–1000 раз больше энергии вращательного движения  $E_{\text{вр}}$ :

$$E_{\text{эл}} \gg E_{\text{кол}} \gg E_{\text{вр}}.$$

Кроме того, опытные данные и квантово-механические расчеты показывают, что все вклады в полную энергию  $E_n$  молекулы являются квантованными. Оценочные значения между соседними электронными уровнями  $\Delta E_{\text{эл}}$  равны  $\sim 1$  эВ, колебательными уровнями  $\Delta E_{\text{кол}}$  —  $\sim 10^{-2}$  эВ и вращательными уровнями  $\Delta E_{\text{вр}} \sim 10^{-4}$  эВ. Это означает, что каждый электронный уровень определенного стационарного состояния расщепляется на ряд подуровней, другими словами, его сопровождает своя система колебательных уровней, а у каждого колебательного уровня находится своя система вращательных уровней (рис. 9.1).

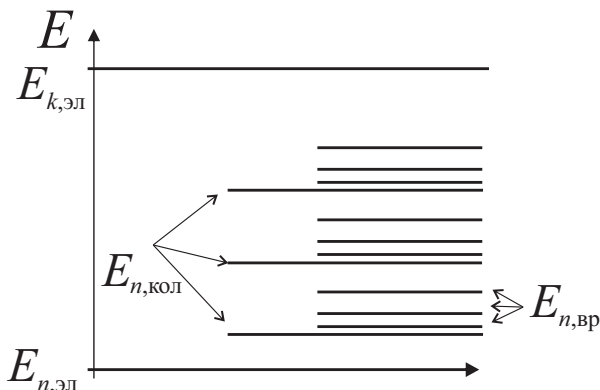


Рис. 9.1. Схема энергетических уровней двухатомной молекулы

Численные значения полной энергии  $E_n$  молекулы могут быть найдены в рамках квантовой механики. Для этого следует решить стационарное уравнение Шредингера, которое для двухатомной молекулы с массами ядер  $M_1, M_2$  и зарядами  $+Z_1e, +Z_2e$ , содержащей  $N$  электронов, имеет вид:

$$\widehat{H} \Psi_n(\vec{r}, \vec{R}) = E_n \Psi_n(\vec{r}, \vec{R}), \quad (9.1)$$

где  $\Psi_n(\vec{r}, \vec{R}) = \Psi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \vec{R}_2)$ ,  $\widehat{H}$  — оператор Гамильтона, который в пренебрежении релятивистскими эффектами записывается в виде (в системе СГС):

$$\widehat{H} = -\sum_{i=1}^2 \frac{\hbar^2}{2M_i} \Delta_{\vec{R}_i} - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_i} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{R}_2 - \vec{R}_1|} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 \frac{Z_j e^2}{|\vec{R}_j - \vec{r}_i|}, \quad (9.2)$$

где  $\vec{r}_i$  — радиус-вектор  $i$ -го электрона,  $\vec{R}_j$  — радиус-вектор  $j$ -го ядра. Здесь первая и вторая сумма — это операторы кинетической энергии ядер и электронов соответственно; третья и четвертая — потенциальные энергии кулоновского взаимодействия ядер друг с другом и электронов между собой, соответственно, а пятая сумма — потенциальная энергия кулоновского взаимодействия ядер с электронами.

Решение уравнения ищется с использованием приближенного метода, называемого *адиабатическим приближением* (в первоначальной формулировке известен как *метод Борна — Оппенгеймера*). Метод основывается на факте, что масса ядра много больше массы электрона, а значит, скорость движения ядер мала по сравнению со скоростью движения электронов. Движение частиц в молекуле разбивается на медленное движение ядер и быстрое движение электронов.

В нулевом приближении ядра считают неподвижными и рассматривают только электронное движение. Состояние электронов описывается *электронным уравнением Шредингера*:

$$\left( -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_i} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{R}_2 - \vec{R}_1|} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 \frac{Z_j e^2}{|\vec{R}_j - \vec{r}_i|} \right) \Psi_n(\vec{r}, \vec{R}) = E_{n, \text{эл}}(R) \Psi_n(\vec{r}, \vec{R}),$$

где  $R = |\vec{R}_1 - \vec{R}_2|$  — расстояние между фиксированными ядрами; функции  $\Psi_n(\vec{r}, \vec{R})$ , описывающие состояние электронной подсистемы, параметрически зависят от радиус-векторов закрепленных ядер, энергия  $E_{n, \text{эл}}(R)$  электронной подсистемы зависит только от  $R$ .

Затем учитывается движение медленной подсистемы в качестве малых поправок, при этом функция  $\Psi_n(\vec{r}, \vec{R})$  ищется в виде разложения по  $\Psi_n(\vec{r}, \vec{R})$ :

$$\Psi_n(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_m \Phi_{nm}(\vec{R}) \Psi_m(\vec{r}, \vec{R}).$$

Движение ядер будет описываться *ядерным уравнением Шредингера*, в котором энергия  $E_{n, \text{эл}}(R)$  играет роль потенциальной энергии ядер  $U_n(R)$ :

$$\left( -\sum_{i=1}^2 \frac{\hbar^2}{2M_i} \Delta_{\vec{R}_i} + E_{n, \text{эл}}(R) \right) \Phi_n(\vec{R}) = E_n \Phi_n(\vec{R}),$$

где  $\Phi_n(\vec{R})$  — ядерная волновая функция, описывающая состояние двух ядер молекулы.

Ядерное уравнение Шредингера удобно записывать в системе центра масс молекулы:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_R + E_{n, \text{эл}}(R) + \frac{\hbar^2 J_\theta (J_\theta + 1)}{2\mu R^2} \right) \Phi_n(R) = E_n \Phi_n(R),$$

где  $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$  — приведенная масса молекулы,  $J_\theta$  — *вращательное квантовое число*, характеризующее вращение молекулы как целого и принимающее значения 0, 1, 2, ...



Величина полного момента  $\vec{J}_p$  всей молекулы как целого, равно- го сумме моментов импульса ядер и электронов, квантуется по пра- вилу

$$|\vec{J}_p| = \hbar \sqrt{J_\sigma(J_\sigma + 1)}. \quad (9.3)$$

Принцип решения электронного уравнения Шредингера рас- сматривался ранее на примере сложного атома, поэтому остано- вимся на вопросе о решении ядерного уравнения Шредингера. Его решение зависит от аналитического вида кривой потенциа- льной энергии ядер  $U_n(R) = E_{n, \text{эл}}(R)$ , называемой иногда адиабати- ческим потенциалом. Его поиск для конкретных молекул связан с решением электронного уравнения Шредингера и является до- статочно трудной задачей. Тем не менее, можно сделать несколь- ко общих замечаний относительно вида кривой  $U_n(R)$  для устой- чивых молекул.

Между атомами молекулы существует взаимодействие, характе- ризуемое силами притяжения и отталкивания. Это взаимодействие приводит к образованию химической связи, и молекула становится устойчивой системой. При этом атомы не могут подходить сколь угодно близко друг к другу, поскольку возрастают силы отталкива- ния, с другой стороны, при удалении друг от друга на определен- ное расстояние связь между ними разрывается и взаимодействие становится пренебрежимо малым. Кривая  $U_n(R)$ , удовлетво- ряющая этим требованиям, должна иметь минимум в точке  $R = R_0$ , где  $R_0$  — *равновесное положение* атомов. Качественный вид потен- циальных кривых  $U_n(R)$  для двух электронных состояний молекулы показан на рис. 9.2.

На этом рисунке для разных электронных состояний мо- лекулы указаны ее *энергии диссоциации*  $D_0$  и  $D_0'$ , которые рав- ны работе, совершаемой для разрыва молекулы на изолирован- ные атомы, а также энергия  $E_a$  возбуждения свободных атомов молекулы.

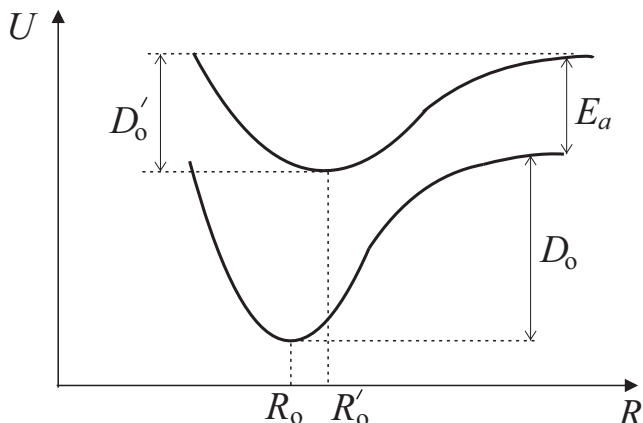


Рис. 9.2. Кривые потенциальной энергии молекулы

Введем обозначение  $U_n(R) \equiv U(R)$  и будем считать, что колебания атомов молекулы малы, т. е. невелико отклонение ядер  $u = R - R_0$  от положения устойчивого равновесия  $|u| \ll R_0$ . Тогда в разложении потенциальной энергии  $U(R)$  в ряд Тейлора около точки равновесия  $R_0$  по степеням смещений  $u$  можно ограничиться тремя членами разложения:

$$U(R) \approx U(R_0) + \left. \frac{dU}{dR} \right|_{R_0} u + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dR^2} \right|_{R_0} u^2,$$

где  $U(R_0)$  — значение энергии электронной подсистемы молекулы при  $R = R_0$ . Второй член разложения  $\left. \frac{dU}{dR} \right|_{R_0} = 0$ , так как

значение  $U(R_0)$  является минимумом функции  $U(R)$ . В третьем члене введем обозначение

$$k = \left. \frac{d^2U}{dR^2} \right|_{R_0},$$

это число представляет собой *коэффициент упругости* и называется *силовой постоянной*.

Тогда кривая  $U(R)$  аппроксимируется функцией параболического вида:

$$U(R) = U(R_0) + \underbrace{\frac{ku^2}{2}}_{=U(u)}. \quad (9.4)$$

Второе слагаемое  $U(u)$  в этой сумме описывает вклад гармонического колебательного движения ядер в потенциальную энергию  $U(R)$ .

Из формулы (9.4) следует, что в случае малых колебаний на атом со стороны другого атома действует сила  $\vec{F} = -k\vec{u}$ , называемая *квазиупругой силой*. При таком характере сил атомы в молекуле совершают гармонические колебания около общего центра тяжести. Значит, колебания молекулы происходят по закону гармонического осциллятора. При этом смещения  $u$  вычисляются по формуле

$$u = u_0 \cos 2\pi\nu_{\text{кол}} t,$$

где  $u_0$  — амплитуда,  $\nu_{\text{кол}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$  — *линейная собственная частота колебаний*.

Решая ядерное уравнение Шредингера с потенциальной энергией вида (9.4) (этот случай называется *гармоническим приближением*) при условии равенства нулю вращательного квантового числа  $J_a = 0$ , приходим к следующему выражению для энергии  $E_{n, \text{кол}} \equiv E_{\text{кол}}$  колебательного движения:

$$E_{\text{кол}} = h\nu_{\text{кол}} \left( \nu + \frac{1}{2} \right), \quad (9.5a)$$

где  $\nu$  — *колебательное квантовое число*, принимающее значения  $\nu = 0, 1, 2, \dots$ .

Из формулы (9.5 а) следует, что колебательная энергия  $E_{\text{кол}}$  является квантованной величиной, а колебательные уровни представляют собой систему равноотстоящих уровней. *Собственной частотой*  $\nu_{\text{кол}}$  колебаний называют частоту, соответствующую квантовому переходу между соседними колебательными уровнями. Правило отбора в гармоническом приближении для квантового числа  $\nu$  следующее:  $\Delta\nu = \pm 1$ .

Колебания атомов молекулы с большими амплитудами нельзя аппроксимировать колебаниями гармонического осциллятора. В этом случае необходимо учитывать следующие члены в разложении потенциальной энергии молекулы, например, кубический:

$$U(R) = U(R_0) + \frac{ku^2}{2} - \frac{cu^3}{2},$$

где  $c$  — коэффициент ангармоничности, модуль которого много меньше 1.

Тогда формула для колебательной энергии  $E_{\text{кол}}$  ангармонического осциллятора с учетом дополнительного кубического члена примет вид:

$$E_{\text{кол}} = h\nu_{\text{кол}} \left( \nu + \frac{1}{2} \right) - Ah\nu_{\text{кол}} \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (9.5б)$$

где  $A$  — константа, связанная с коэффициентом ангармоничности.

Влияние ангармонического возмущения состоит в сдвиге вниз каждого энергетического уровня гармонического осциллятора. Колебания атомов становятся *ангармоническими колебаниями*, а колебательные уровни не будут образовывать систему эквидистантных уровней. Правило отбора для квантового числа  $\nu$  будет таким:  $\Delta\nu = \pm 2, \pm 3, \dots$

Для определения значений вращательных уровней  $E_{\text{вр}}$  стационарного состояния молекулы рассмотрим ее как жесткий ротатор

с расстоянием  $R_0$  между атомами, который вращается вокруг центра масс. Тогда энергия вращения  $E_{\text{вр}}$  зависит от момента инерции  $I_i = \mu R_0^2$  молекулы относительно оси вращения и угловой скорости вращения  $\Omega$ :

$$E_{\text{вр}} = \frac{I_i \Omega^2}{2}.$$

Учитывая, что величина момента импульса ротатора  $J_p$  равна

$$J_p = I_i \Omega,$$

для энергии  $E_{\text{вр}}$  получаем формулу

$$E_{\text{вр}} = \frac{J_p^2}{2I_i}.$$

Поскольку величина полного момента всей молекулы как целого квантуется,  $E_{\text{вр}}$  тоже является квантованной величиной:

$$E_{\text{вр}} = \frac{\hbar^2}{2I_i} J_\sigma (J_\sigma + 1). \quad (9.6)$$

Согласно формуле (9.6) вращательные уровни образуют систему неравноотстоящих уровней, у которых расстояние между соседними уровнями возрастает при увеличении квантового числа  $J_\sigma$ . Правило отбора для квантового числа  $J_\sigma$  имеет вид  $\Delta J_\sigma = \pm 1$ .

Итак, в адиабатическом и гармоническом приближении полная энергия  $E_n$  молекулы, находящейся в  $n$ -м электронном состоянии, определяется выражением

$$E_n = U_n(R_0) + h\nu_{\text{кол}} \left( v + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} J_\sigma (J_\sigma + 1). \quad (9.7)$$

Схема электронных, колебательных и вращательных уровней двухатомной молекулы, соответствующая формуле (9.7), приведена на рис. 9.3.

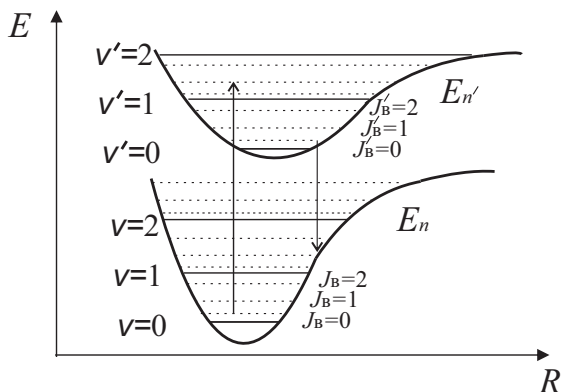


Рис. 9.3. Схема электронных, колебательных и вращательных уровней молекулы

В качестве примера на представленном выше рисунке вертикальными стрелками показаны квантовые переходы молекулы при поглощении и испускании фотона электромагнитного излучения, которые разрешены правилами отбора по колебательному и вращательному квантовому числу.

## 9.2. Общие сведения о молекулярных спектрах

При прохождении электромагнитного поля через вещество, состоящее из молекул (атомов), происходит взаимодействие молекул с электромагнитными волнами. Оно может приводить к изменению электронного, колебательного и вращательного движения молекул, при этом изменяются их состояния. Этот процесс отражается в квантовых переходах между соответствующими энергетическими уровнями молекул (рис. 9.3).

Система энергетических уровней молекулы, полученная в предыдущем параграфе, приводит к сложной структуре молекулярных спектров излучения (поглощения). Они состоят из практически периодических полос, каждая из которых представляет собой группу близко расположенных спектральных линий и называются *полосатыми спектрами*. Схематический вид молекулярного спектра, наблюдаемого на спектрографе, представлен на рис. 9.4.



Рис. 9.4. Вид молекулярного спектра

Частота  $\nu$  спектральной линии в таких спектрах определяется по формуле

$$h\nu = \Delta E_{\text{эл}} + \Delta E_{\text{кол}} + \Delta E_{\text{вр}},$$

где  $\Delta E = E' - E$ .

Остановимся на электронно-колебательной структуре молекулярного спектра. На рис. 9.5 схематично изображены две системы электронно-колебательных уровней, которые соответствуют основному и возбужденному электронному состоянию. Характерной особенностью квантовых переходов молекулы из одного электронно-колебательного состояния в другое является то, что не существует правил отбора для колебательного квантового числа  $\nu$  в отличие от чисто колебательных переходов. Оно может изменяться на произвольное целое число. Поэтому возможны переходы с любого колебательного уровня одного электронного состояния на все колебательные уровни другого электронного состояния.

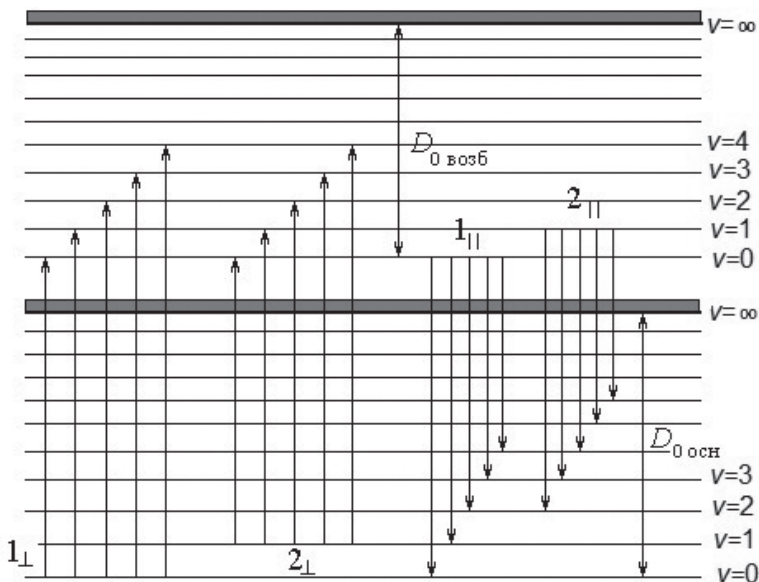


Рис. 9.5. Серии квантовых переходов на схеме электронно-колебательных уровней

В спектрах поглощения наблюдается серия спектральных линий, называемая поперечной серией Деландера. Она обусловлена переходами молекул с определенного колебательного уровня основного электронного состояния на все колебательные уровни возбужденного электронного состояния. Заполнение молекулами колебательных уровней происходит в соответствии с законом Больцмана. При комнатной температуре, когда  $k_b T = 0,026$  эВ, наиболее заселен колебательный уровень с  $v = 0$ , поэтому наблюдается первая поперечная серия Деландера ( $1_{\perp}$ ). При повышении температуры возрастает заполнение уровня с  $v = 1$  и появляется вторая поперечная серия Деландера ( $2_{\perp}$ ), линии которой перекрываются с линиями первой серии.



В спектрах излучения можно регистрировать серию линий, которую называют продольной серией Деландера (  $1_{II}, 2_{II}$  ). Она связана с квантовыми переходами с определенного колебательного уровня возбужденного электронного состояния на все колебательные уровни основного электронного состояния.

Частота излучения (поглощения) электромагнитных волн при рассмотренных выше переходах находится из выражения

$$h\nu = \Delta E_{\text{эл}} + \Delta E_{\text{кол}},$$

в котором первое слагаемое представляет собой разность энергий электронов молекулы в возбужденном и основном состояниях, а второе слагаемое определяет изменение колебательной энергии и записывается в виде разности:

$$\Delta E_{\text{кол}} = E_{\text{кол}}^{\text{в}} - E_{\text{кол}}^{\text{о}},$$

где  $E_{\text{кол}}^{\text{в}}$  и  $E_{\text{кол}}^{\text{о}}$  — энергии колебаний для возбужденного и основного электронных состояний соответственно. Для их вычисления используются формулы (9.5а) и (9.5б). Значения собственных частот в этих формулах для разных электронных состояний, вообще говоря, различны. Для возбужденных состояний, как правило, прочность связи атомов меньше, а равновесные расстояния между ядрами больше, чем для основного состояния. Следовательно, кривые потенциальной энергии идут более полого и сдвинуты. Значит, в возбужденных электронных состояниях частоты собственных колебаний и расстояния между соседними колебательными уровнями меньше, чем в основном.

### 9.3. Инфракрасное поглощение

Вследствие взаимодействия электромагнитных волн с веществом может наблюдаться их *поглощение*, под которым понимается явление уменьшения интенсивности перемещающихся через вещество

волн, происходящее из-за преобразования их энергии во внутреннюю энергию вещества. При этом энергия молекул повышается, значит, происходит переход на более высокий энергетический уровень молекул. Такие переходы определяют структуру спектра поглощения вещества.

Спектры излучения (поглощения) электромагнитных волн, связанные с изменением электронных состояний атомов молекулы, рассматривались в предыдущем параграфе. Эти спектры возникают при квантовых переходах между электронными уровнями с типичными разностями энергий порядка единиц эВ. Они лежат в области коротких волн, а именно, в близкой ИК, видимой и УФ областях. Особенности указанных спектров удобно рассматривать в рамках квантовой механики.

Спектры, обусловленные только колебательным или вращательным движением молекулы, находятся в более длинноволновой ИК-области. Диапазон ИК электромагнитных волн расположен между миллиметровым (крайне высокочастотным) радиоизлучением и красным концом видимого света. Весь ИК-диапазон условно делят на три участка, например, международная организация по стандартизации ISO рекомендует деление на следующие области в зависимости от длины волны  $\lambda$ :

ближняя:  $\lambda = 0,75-3,0$  мкм;

средняя:  $\lambda = 3,0-50$  мкм;

далекая:  $\lambda = 50-1000$  мкм.

Длинноволновую окраину ИК-диапазона иногда выделяют в отдельный диапазон — субмиллиметровое —  $\lambda = 0,1-1$  мм (терагерцевое  $\nu = 0,3-3$  ТГц) излучение, которое сильно поглощается проводящими материалами.

У длинноволнового излучения волновые свойства проявляются сильнее, чем у коротковолнового, поэтому появление колебательных и вращательных ИК-спектров молекул можно объяснить не только с помощью квантовой теории взаимодействия света с веществом, но и используя классическую волновую теорию.

В качестве примера обсудим вопрос о возникновении спектральной линии в колебательном ИК-спектре поглощения. С квантовой точки зрения появление такой линии объясняется просто. При облучении молекулы монохроматическим светом с частотой  $\nu$ , равной собственной частоте  $\nu_{\text{кол}}$  колебаний молекулы, происходит взаимодействие молекулы с фотоном падающего света, при котором она поглощает фотон и изменяет свое колебательное состояние, характеризваемое колебательным квантовым числом  $\nu$ . Полная энергия  $E$  молекулы увеличится на величину, равную энергии  $h\nu_{\text{кол}}$  падающего фотона. Это показано вертикальными стрелками на схеме колебательных энергетических уровней молекулы (рис. 9.6). В результате данного процесса в ИК-спектре поглощения на частоте  $\nu_{\text{кол}}$  возникнет спектральная линия.

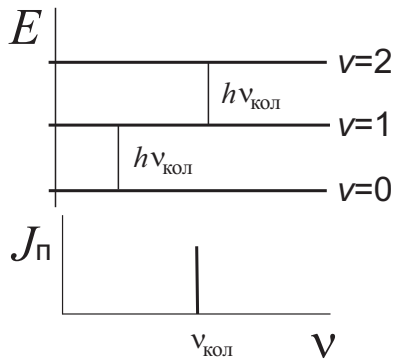


Рис. 9.6. ИК-поглощение монохроматического излучения

Сейчас обратимся к классической электродинамике, согласно которой поглощение (как и излучение) электромагнитного поля осуществляется заряженной частицей, движущейся ускоренно. Для простоты рассуждений рассмотрим двухатомную молекулу. Интенсивность поглощения  $J_{\text{п}}$  электромагнитной энергии прямо пропорциональна поглощаемому молекулой потоку излучения  $\Phi$ , кото-

рый, в свою очередь, зависит от изменяющегося со временем  $t$  ее электрического дипольного момента  $\vec{d}$  :

$$J_{\text{п}} \sim \Phi(t) = \frac{2}{3c^3} \left| \ddot{\vec{d}} \right|^2. \quad (9.8)$$

Величину электрического дипольного момента  $\vec{d}$  можно записать как функцию расстояния  $r$  между атомами молекулы и разложить в ряд Тейлора около точки равновесного положения атомов  $r_0$  по степеням смещений от положения равновесия:  $u = r - r_0$ . Эти смещения в случае их малых значений изменяются по закону гармонических колебаний  $u = u_0 \cos 2\pi\nu_{\text{кол}}t$ . Если в разложении ограничиться первыми двумя слагаемыми, то будет выполняться следующее равенство:

$$d(r) \approx d(r_0) + \left. \frac{d(d)}{dr} \right|_{r_0} u = d(r_0) + \left. \frac{d(d)}{dr} \right|_{r_0} u_0 \cos 2\pi\nu_{\text{кол}}t.$$

Следовательно, в гармоническом приближении величина электрического дипольного момента  $\vec{d}$  молекулы равна сумме двух членов, первый из них не зависит от времени  $t$ , а второй периодически изменяется во времени с частотой  $\nu_{\text{кол}}$ . Именно последний член ответственен за появление на частоте  $\nu_{\text{кол}}$  основной (или фундаментальной) линии в ИК-спектре поглощения. Ее интенсивность  $J_{\text{п}}$ , как следует из выражения (9.8), прямо пропорциональна квадрату первой производной величины электрического дипольного момента молекулы по межатомному расстоянию  $r$ :

$$J_{\text{п}} \sim \left( \frac{d(d)}{dr} \right)^2.$$

Значит, когда не равна нулю производная  $d(d)/dr$ , которая имеет размерность заряда и называется *эффективным зарядом молекулы*, в ИК-спектре поглощения возникает основная спектральная линия.

*Гетероядерные молекулы* хлороводорода HCl, бромоводорода HBr и т. д., между которыми устанавливается полярная ковалентная химическая связь, имеют отличный от нуля электрический дипольный момент. Его величина или направление будут изменяться под действием возбуждающего излучения, следовательно, в газах из этих молекул возможно наблюдение ИК-спектров поглощения.

У *гомоядерных молекул* H<sub>2</sub>, азота N<sub>2</sub> и т. д., атомы которых связаны при помощи неполярной ковалентной химической связи, электрический дипольный момент отсутствует. Не приобретают его молекулы и в процессе вращений и колебаний атомов. Значит, газы, образованные такими молекулами, не поглощают излучение в ИК-области.

#### 9.4. Комбинационное рассеяние

Колебательное и вращательное движение молекул при их взаимодействии с электромагнитными волнами ответственно не только за поглощение веществом излучения в ИК-области, но и за его рассеяние. Это явление было открыто в 1928 г. Л. Мандельштамом и Г. Ландсбергом при исследовании рассеяния света в молекулярных кристаллах и одновременно Ч. Раманом и К. Кришнаном в жидкостях. Оно называется *комбинационным рассеянием света* (КРС) (*эффектом Рамана*, или *рамановским рассеянием* в зарубежной литературе) и представляет собой неупругое рассеяние излучения из видимого или УФ диапазона частот на молекулах вещества (газообразного, жидкого или твердого). Сущность явления состоит в появлении в спектре рассеянного излучения не только спектральной линии на частоте, совпадающей с частотой  $\nu_0$  падающего излучения (называется *релеевская линия*), но еще и дополнительных линий.

Экспериментально установлены следующие закономерности КРС:

1. Дополнительные линии расположены симметрично по обе стороны относительно несмещенной спектральной линии первичного света. Если они находятся на низкочастотной стороне, то называются *стоксовыми (красными) спутниками*, а если на высокочастотной, то *антистоксовыми (фиолетовыми) спутниками*. Когда КРС связано с колебаниями атомов молекул, частоты  $\nu_c$  стоксовых и  $\nu_{ac}$  антистоксовых спутников удовлетворяют равенствам

$$\nu_c = \nu_o - \nu_{\text{кол}} \text{ и } \nu_{ac} = \nu_o + \nu_{\text{кол}},$$

где  $\nu_{\text{кол}}$  — собственные частоты колебаний атомов молекулы.

Спутники сопровождают каждую релеевскую линию. Значит, для их обнаружения необходимо, чтобы первичный свет был монохроматическим или представлял собой совокупность отдельных монохроматических компонент.

2. Частота  $\nu_{\text{кол}}$  не зависит от частоты  $\nu_o$  падающего света, а зависит от природы рассеивающего вещества. Следовательно, для заданного вещества спутники расположены на одинаковом расстоянии относительно любой релеевской линии.

3. При комнатной температуре интенсивность стоксовых спутников значительно больше интенсивности антистоксовых. С увеличением температуры интенсивность антистоксовых спутников возрастает.

4. Спутники частично поляризованы. Поляризация симметрично расположенных спутников одинакова, а различных спутников может отличаться.

5. Интенсивность  $J_p$  рассеянного света прямо пропорциональна числу рассеивающих молекул.

Некоторые из перечисленных закономерностей КРС, в частности, возникновение спутников, можно объяснить, основываясь на принципах классической электродинамики. Вследствие того, что частота  $\nu_o$  падающей на молекулу электромагнитной волны на несколько порядков превышает частоту  $\nu_{\text{кол}}$  колебаний атомов

молекулы, атомы почти не чувствуют падающего света. Падающая волна своим периодическим во времени электрическим полем с напряженностью  $E(t) = E_0 \cos 2\pi\nu_0 t$  воздействует на легкие электроны атомов с силой  $\vec{F}_e$ . В результате этого электроны совершают вынужденные колебания, что вызывает вторичное излучение электромагнитных волн, которое отвечает за процесс рассеяния.

Интенсивность  $J_p$  рассеянного света прямо пропорциональна квадрату модуля второй производной по времени от электрического дипольного момента  $\vec{d}$  молекулы, наведенного падающей электромагнитной волной:

$$J_p \sim \frac{2}{3c^3} |\ddot{\vec{d}}|^2. \quad (9.9)$$

Индукцированный электрический дипольный момент  $\vec{d}$ , в свою очередь, пропорционален напряженности  $E(t)$  электрической составляющей электромагнитной волны:

$$\vec{d} = \epsilon_0 \alpha \vec{E}(t) \quad (\text{в системе СИ}),$$

$$\vec{d} = \alpha \vec{E}(t) \quad (\text{в системе СГС}).$$

Коэффициент пропорциональности  $\alpha$  называется *поляризуемостью молекулы*. Он характеризует способность молекулы приобретать дипольный момент при взаимодействии с электромагнитной волной, другими словами, способность электронной оболочки молекулы смещаться относительно положения равновесия. При колебаниях атомов молекулы ее электронная оболочка деформируется. Недеформируемая и деформируемая электронные оболочки по-разному смещаются под воздействием электромагнитного поля. Значит, поляризуемость  $\alpha$  можно записать как функцию межатомного расстояния  $r$ :  $\alpha = \alpha(r)$ .

Рассмотрим двухатомную молекулу и разложим ее поляризуемость  $\alpha(r)$  в ряд Тейлора около точки равновесного положения ато-

мов  $r_o$  по степеням смещений  $u = r - r_o$ , которые в гармоническом приближении изменяются во времени по закону  $u = u_o \cos 2\pi\nu_{\text{кол}} t$ . Поскольку  $u$  малы, ограничимся первыми двумя членами:

$$\alpha(r) \approx \alpha(r_o) + \left. \frac{d\alpha}{dr} \right|_{r_o} u = \alpha(r_o) + \underbrace{\left. \frac{d\alpha}{dr} \right|_{r_o} u_o \cos 2\pi\nu_{\text{кол}} t}_{=\Delta\alpha}.$$

Поляризуемость  $\alpha(r)$  молекулы представляется в виде суммы постоянной части  $\alpha(r_o)$  и части  $\Delta\alpha$ , которая периодически изменяется во времени  $t$  с частотой  $\nu_{\text{кол}}$  из-за деформации электронной оболочки при колебаниях атомов.

Следовательно, в гармоническом приближении индуцируемый на молекуле электрический дипольный момент  $\vec{d}$  можно записать в виде:

$$\vec{d}(r) = (\alpha(r_o) + \Delta\alpha)\vec{E}_o \cos 2\pi\nu_o t = \vec{d}_{pp} + \vec{d}_{kp},$$

где  $\vec{d}_{pp} = \alpha(r_o)\vec{E}_o \cos 2\pi\nu_o t$  обуславливает возникновение релеевского когерентного рассеяния с частотой  $\nu_o$  падающего света;

$$\vec{d}_{kp} = \left. \frac{d\alpha}{dr} \right|_{r_o} \frac{\vec{E}_o u_o}{2} \cos 2\pi(\underbrace{\nu_o - \nu_{\text{кол}}}_{\nu_c})t + \left. \frac{d\alpha}{dr} \right|_{r_o} \frac{\vec{E}_o u_o}{2} \cos 2\pi(\underbrace{\nu_o + \nu_{\text{кол}}}_{\nu_{\text{ac}}})t$$

определяет некогерентное КРС с частотами  $\nu_c = \nu_o - \nu_{\text{кол}}$  и  $\nu_{\text{ac}} = \nu_o + \nu_{\text{кол}}$ .

Из выражения (9.9) видно, что на частотах  $\nu_c$  и  $\nu_{\text{ac}}$  интенсивность  $J_p$  спутников пропорциональна квадрату первой производной поляризуемости молекулы по межатомному расстоянию  $r$ :

$$J_p \sim \left( \frac{d\alpha}{dr} \right)^2.$$

Поэтому в спектре КРС появляются спутники, когда не равна нулю первая производная поляризуемости молекулы по межатомному расстоянию.



Например, у гетероядерных молекул, таких как  $\text{HCl}$ ,  $\text{NaCl}$  и т. д., атомы обладают замкнутыми устойчивыми электронными оболочками. Они практически не деформируются при колебаниях атомов, а значит, поляризуемость молекулы не изменяется. Вследствие этого спектры КРС в газах этих молекул не наблюдаются. У гомоядерных симметричных молекул типа  $\text{I}_2$ ,  $\text{Cl}_2$  и т. д. внешняя электронная оболочка сильно деформируется при колебаниях атомов молекулы. Благодаря этому будет происходить интенсивное КРС.

Возникновение спутников в спектре КРС, а также ряд перечисленных ранее закономерностей КРС удобно объяснять в рамках квантовой теории излучения. С точки зрения этой теории особенности КРС являются следствием закона сохранения энергии при неупругом соударении фотона падающего света, имеющего энергию  $E = h\nu_0$ , с молекулой, которая находится в некотором состоянии — для определенности считаем, что в колебательном состоянии, характеризуемом колебательным квантовым числом  $\nu$ . Схема колебательных энергетических уровней молекулы показана на рис. 9.7.

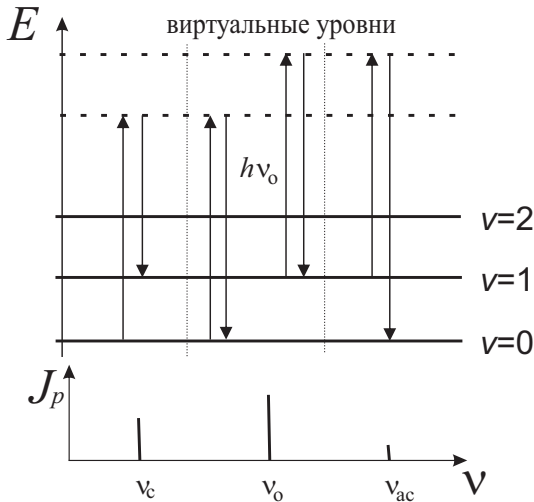


Рис. 9.7. Схема процесса КРС

Допустим, что энергия  $E$  падающего фотона больше разности энергий между соседними колебательными уровнями:  $h\nu_o > h\nu_{\text{кол}}$ . Процесс столкновения фотона с молекулой можно представить как переход молекулы через некоторое виртуальное состояние, т. е. воображаемое, промежуточное состояние, в котором нарушается обычная связь между энергией, импульсом.

Пусть до соударения с фотоном молекула находится в колебательном состоянии с  $\nu = 0$ . После соударения молекула может оказаться в своем первоначальном состоянии, а может перейти в другое состояние. В первом случае, согласно закону сохранения энергии  $h\nu_o = h\nu'_o$ , частоты падающего и рассеянного излучения равны  $\nu_o = \nu'_o$ , значит, рассеяние света будет релеевским. Во втором случае молекула переходит на более высокий колебательный уровень с  $\nu = 1$ , ее колебательная энергия увеличивается. Фотон, согласно закону сохранения энергии  $h\nu_o = h\nu_c + h\nu_{\text{кол}}$ , отдает часть своей энергии  $h\nu_{\text{кол}}$  на возбуждение молекулы. Рассеянный свет будет иметь частоту  $\nu_c = \nu_o - \nu_{\text{кол}}$ , меньшую, чем частота  $\nu_o$  падающего света. В спектре КРС появляется стоксовый спутник.

Если до столкновения с фотоном молекула находилась в колебательном состоянии с  $\nu = 1$ , то после их взаимодействия могут произойти перечисленные выше процессы, а также переход молекулы на более низкий колебательный уровень с  $\nu = 0$ :  $h\nu_o = h\nu_{\text{ас}} - h\nu_{\text{кол}}$ .

Из этого равенства следует, что молекула передает часть своей энергии  $h\nu_{\text{кол}}$  фотону, в результате чего КРС происходит с частотой  $\nu_{\text{ас}} = \nu_o + \nu_{\text{кол}}$ , которая больше, чем частота  $\nu_o$  падающего света. В спектре КРС возникает антистоксовый спутник.

Чтобы объяснить малую интенсивность антистоксовых спутников по сравнению со стоксовыми, следует вспомнить, что если вещество находится в термодинамическом равновесии при температуре  $T$ , то распределение молекул по колебательным состояниям подчиняется закону Больцмана. Функция распределения  $f(E_{\nu, \text{кол}})$  записывается в виде

$$f(E_{\nu, \text{кол}}) = A \exp\left(-\frac{E_{\nu, \text{кол}}}{k_b T}\right).$$

Из этого выражения следует, что при комнатной температуре значительная часть молекул заселяет в основном колебательный уровень с  $\nu = 0$ . Поэтому число переходов с возбужденных колебательных уровней на основной меньше, чем с основного уровня на возбужденные. Значит, интенсивность стоксовых спутников выше по сравнению с антистоксовыми. С ростом температуры количество молекул, находящихся в возбужденных состояниях, возрастает, следовательно, увеличивается число переходов, связанных с появлением антистоксовых спутников, что приводит к повышению их интенсивности.

## 10. СВОЙСТВА ЯДЕР. РАДИОАКТИВНОСТЬ И ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ

---

### 10.1. Характеристики атомных ядер

**До** настоящего момента времени рассматривались объекты атомных масштабов (атомы, молекулы) и методы их исследования, а также изучались различные характеристики и свойства. Перейдем к обсуждению *атомного ядра* — центральной части атома, в котором сосредоточена основная его масса.

После того как в 1919 г. Э. Резерфорд открыл протон, долгое время считалось, что ядро атома состоит из протонов и электронов. Однако такая модель находилась в противоречии с экспериментальными фактами, относящимися к спинам и магнитным моментам ядер. В 1932 г., сразу после открытия Дж. Чедвиком нейтрона, Д. Иваненко и В. Гейзенбергом была предложена протонно-нейтронная модель атомного ядра. Согласно их модели:

- 1) атомные ядра всех химических элементов состоят из *нуклонов*: протонов и нейтронов;
- 2) ядро заряжено положительно;

3) количество протонов в ядре равно *атомному* или *порядковому номеру*  $Z$  атома элемента, которое также называют *зарядовым числом*. Оно определяет заряд ядра в элементарных электрических зарядах  $e$  (в величинах заряда электрона);

4) суммарное количество нейтронов  $N$  и протонов  $Z$  равно *массовому числу*  $A$  атомного ядра:  $A = N + Z$ . Оно соответствует массе ядра в целых атомных единицах массы (сокращенно — а. е. м. =  $1/12$  массы атома  $M_a$  углерода С в основном состоянии, у которого  $A = 12$ ).

В ядерной физике часто используется термин *нуклид*, который является общим названием атома или атомного ядра. Для символического обозначения нуклида химического элемента применяется следующая схема:

$${}_Z X^A,$$

где буквой  $X$  обозначен символ химического элемента, нижний левый индекс — это зарядовое число  $Z$ , верхний правый индекс — массовое число  $A$ .

В природе встречаются нуклиды одного и того же химического элемента с одинаковыми зарядовыми числами  $Z$ , но с различными массовыми числами  $A$  (разное количество нейтронов). В 1913 г. Ф. Содди предложил называть их *изотопами*. Примерами изотопов водорода являются *протий*  ${}_1\text{H}^1$  (самый легкий изотоп), *дейтерий*  ${}_1\text{H}^2$  и *тритий*  ${}_1\text{H}^3$ . Известно более 3200 изотопов разных элементов. Нуклиды с одинаковым массовым числом  $A$ , но с разными зарядовыми числами  $Z$  называются *изобары*. Примеры изобары бериллия, бора и углерода —  ${}_4\text{Be}^{10}$ ,  ${}_5\text{B}^{10}$  и  ${}_6\text{C}^{10}$ . Наконец, нуклиды, имеющие одинаковое количество нейтронов, но различающиеся по числу  $Z$ , называются *изотоны*. Примерами изотонов могут служить нуклиды  ${}_6\text{C}^{14}$  и  ${}_7\text{N}^{15}$ , имеющие по 8 нейтронов.

Мерой взаимодействия между составляющими ядро нуклонами являются особые специфические силы, значительно превышающие

кулоновские силы отталкивания между протонами. Они называются *ядерными силами* и характеризуют сильное взаимодействие. Перечислим основные особенности ядерных сил:

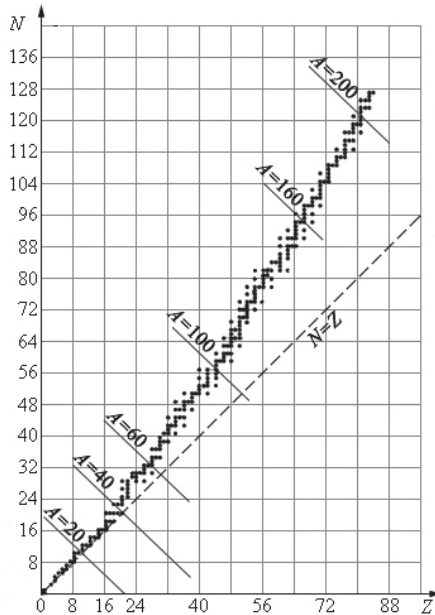
- 1) относятся к силам притяжения;
- 2) являются короткодействующими — их действие распространяется на расстояние примерно  $10^{-15}$  м;
- 3) имеют неэлектрическую природу, им свойственна зарядовая независимость;
- 4) свойственно насыщение, т. е. каждый нуклон в ядре взаимодействует с конечным числом ближайших к нему нуклонов;
- 5) зависят от взаимной ориентации спинов взаимодействующих нуклонов. Например, протон  $p^+$  и нейтрон  $n^0$  образуют *дейтрон* (ядро дейтерия  ${}_1\text{H}^2$ ), обозначаемый символом  $d$ , при условии параллельной ориентации их спинов;
- 6) не являются центральными.

Все атомные ядра можно разделить на стабильные и радиоактивные. Стабильные ядра остаются неизменными неограниченно долго, радиоактивные испытывают самопроизвольные превращения. Основными характеристиками *стабильного ядра* являются количество протонов  $Z$  и нейтронов  $N$ , радиус  $R_n$ , масса  $M_n$ , энергия связи  $E_{св}$ , спин  $\bar{I}$ , магнитный момент  $\bar{\mu}_I$ , квадрупольный электрический момент  $Q$ .

Критерием устойчивости атомных ядер является соотношение между количеством протонов и нейтронов:

$$\frac{N}{Z} = 0,98 + 0,015A^{2/3}. \quad (10.1)$$

На рис. 10.1 изображена  $N-Z$  диаграмма, которая соответствует этому уравнению и представляет собой зависимость количества нейтронов от протонов в стабильных ядрах. Точками отмечена область стабильности.

Рис. 10.1.  $N$ – $Z$  диаграмма атомных ядер

Из рис. 10.1 видно, что легкие ядра с  $A < 40$  устойчивы, когда  $N \approx Z$ . С ростом массового числа  $A$  более заметным становится электростатическое отталкивание между протонами и для компенсации этого отталкивания ядерным притяжением число нейтронов должно возрастать быстрее числа протонов, поэтому область устойчивости сдвигается в сторону  $N > Z$ . У ядер с  $Z > 83$ , которые следуют за висмутом, из-за большого количества протонов полная стабильность оказывается невозможной, они испытывают со временем самопроизвольные превращения.

Размер атомного ядра зависит от количества нуклонов и характеризуется радиусом, который имеет условный смысл из-за размытости границы ядра. Эксперименты по упругому рассеянию на ядрах

$\alpha$ -частиц, быстрых электронов, протонов и нейтронов позволили не только определить радиус ядер  $R_{\text{я}}$ , но и детально исследовать распределение плотности  $\rho(r)$  электрического заряда и ядерной материи в ядре. Эксперименты показали, что плотности заряда и ядерной материи почти постоянны во внутренней области всех ядер с  $A > 20$  и экспоненциально спадают за ее пределами (рис. 10.2).

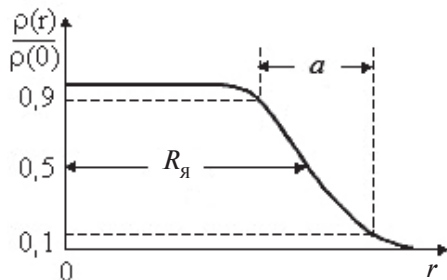


Рис. 10.2. Распределение плотности заряда ядра и ядерной материи

Выяснилось, что плотности распределения заряда и ядерной материи практически совпадают и описываются распределением Ферми:

$$\rho(r) = \frac{\rho(0)}{1 + \exp \frac{r - R_{\text{я}}}{0,228a}},$$

где  $\rho(0)$  — плотность заряда (ядерной материи) в центре ядра,  $a = 2,2 \cdot 10^{-15}$  м — параметр диффузности, характеризующий «размытость» поверхности ядра, равен интервалу, на котором плотность убывает с 90 % до 10 %,  $R_{\text{я}}$  — зарядовый (массовый) радиус, равен расстоянию, на котором плотность заряда (ядерной материи) спадает в два раза:

$$\rho(R_{\text{я}}) = \frac{\rho(0)}{2}.$$



Поскольку плотность ядерной материи практически не зависит от количества нуклонов в ядре, объем ядра пропорционален массовому числу  $A$ , а *радиус ядра* пропорционален корню кубического из  $A$ :

$$R_{\text{я}} \approx r_0 \cdot A^{1/3}. \quad (10.2)$$

Коэффициент пропорциональности  $r_0$  в этой эмпирической формуле для расчета радиуса ядра определяется экспериментально:  $r_0 = 1,1 \div 1,4 \cdot 10^{-15}$  м.

*Масса ядра*  $M_{\text{я}}$  и образующих его нуклонов выражается в а. е. м, которая может быть записана через килограммы:

$$1 \text{ а. е. м} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ кг},$$

или энергетические единицы — джоули, электронвольты:

$$1 \text{ а. е. м} = 1,51 \cdot 10^{-10} \text{ Дж} = 931,49 \text{ МэВ}.$$

Масса протона  $m_p$  примерно в 1836 раз превышает массу электрона  $m_e$ :

$$m_p = 1836,15 m_e = 1,007 \text{ а. е. м.} = 1,672 \cdot 10^{-27} \text{ кг} = 938,27 \text{ МэВ}.$$

Масса нейтрона  $m_n$  примерно на 0,14% больше, чем масса протона:

$$m_n = 1838,68 m_e = 1,009 \text{ а. е. м.} = 1,675 \cdot 10^{-27} \text{ кг} = 939,56 \text{ МэВ}.$$

Измерения показали, что масса ядра  $M_{\text{я}}$  всегда меньше суммы масс покоя составляющих его свободных протонов и нейтронов:

$$M_{\text{я}}(A, Z) < Zm_p + (A - Z)m_n.$$

Разность между суммой масс всех нуклонов ядра в свободном состоянии и массой ядра называется *дефектом (избытком) массы ядра*:

$$\Delta m = Zm_p + (A - Z)m_n - M_{\text{я}}(A, Z). \quad (10.3)$$

Дефект массы  $\Delta m$  ядра можно выразить через массу атома (атомную массу)  $M_{\text{а}}$ , которая является экспериментально измеряемой величиной:

$$\Delta m = Zm_p + (A - Z)m_n - M_{\text{я}}(A, Z), \quad (10.4)$$

где  $m$  – масса атома водорода, а атомная масса  $M_{\text{а}}$  определяется как

$$M_{\text{а}}(A, Z) = M_{\text{я}}(A, Z) + Zm_e - E_{\text{а}} / c^2,$$

где  $E_{\text{а}}$  – энергия связи электронов в атоме.

Дефект массы  $\Delta m$  характеризует *энергию связи*  $E_{\text{св}}$  нуклонов в ядре, представляющую собой энергию, равную работе, которую надо совершить, чтобы расщепить ядро на свободные нуклоны. Она пропорциональна дефекту массы и для ее расчета используется формула

$$E_{\text{св}} = \Delta m \cdot c^2 = [Zm_p + (A - Z)m_n - M_{\text{я}}(A, Z)]c^2. \quad (10.5)$$

Поясним эту связь. Согласно соотношению Эйнштейна  $E = mc^2$  уменьшение массы при образовании ядра означает уменьшение полной энергии системы нуклонов. Это объясняется тем, что протоны и нейтроны в ядре очень сильно притягиваются друг к другу ядерными силами. Чтобы разъединить их и удалить на большие расстояния друг от друга требуется совершить работу по преодолению ядерных сил притяжения. Поэтому полная энергия покоя ядра не равна энергии покоя составляющих его свободных нуклонов, а меньше ее на величину затраченной работы, которая численно равна энергии связи  $E_{\text{св}}$ . При синтезе ядер из нуклонов выделяется энергия, равная этой энергии связи.

Энергия связи, приходящаяся на один нуклон ядра, называется *удельной энергией связи*  $\varepsilon$  (или энергией связи на один нуклон). Она равна средней энергии, которую нужно затратить, чтобы удалить один нуклон из ядра. Удельную энергию связи  $\varepsilon$  можно вычислить, разделив энергию связи  $E_{\text{св}}$  ядра на число содержащихся в нем нуклонов  $A$ :

$$\varepsilon = \frac{E_{\text{св}}}{A}. \quad (10.6)$$

На рис. 10.3 представлен график зависимости удельной энергии связи  $\epsilon$  от массового числа  $A$  стабильных ядер. У разных ядер удельная энергия связи  $\epsilon$  неодинакова. Для самых легких ядер она сначала резко возрастает до 7,1 МэВ у гелия  ${}^4_2\text{He}$ . Затем, после ряда скачков, медленно возрастает и достигает максимума 8,7 МэВ для наиболее стабильных ядер с массовым числом  $A = 50 \div 60$ , а потом сравнительно медленно снижается к 7,5 МэВ для тяжелых ядер.

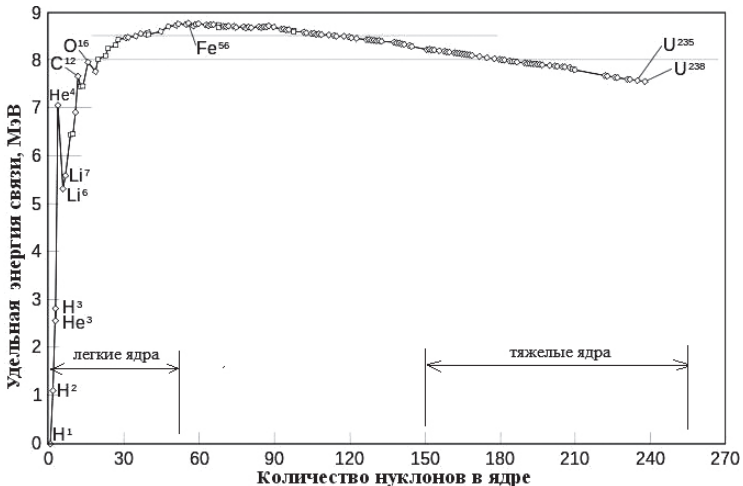


Рис. 10.3. Удельная энергия связи ядер

Анализ хода кривой на рис. 10.3 дает ценную информацию о свойствах ядер, о характере ядерных сил. Например, уменьшение удельной энергии связи при переходе к тяжелым ядрам, обусловленное увеличением энергии кулоновского отталкивания протонов, делает энергетически выгодным деление тяжелых ядер на более легкие. Резкое уменьшение  $\epsilon$  при переходе к легким ядрам связано с поверхностными эффектами, роль которых в этих ядрах велика, поскольку увеличивается отношение поверхности к объему. Легким ядрам энергетически выгодно сливаться друг с другом в более тяжелые.

В широком интервале массовых чисел  $A > 20$  значение удельной энергии связи  $\epsilon$  равно примерно 8 МэВ, поэтому можно записать равенство  $E_{\text{св}} = 8A$ . Приближенная независимость  $\epsilon$  от  $A$  говорит о свойстве насыщения ядерных сил.

## 10.2. Механический, магнитный и электрический квадрупольный моменты ядер

В атомных ядрах присутствует сильное по сравнению с прямым взаимодействием нуклонов спин-орбитальное взаимодействие, поэтому в них образуется  $i-i$ -связь. В соответствии с этой связью собственный момент импульса (спин)  $\vec{I}$  ядра с массовым числом  $A$  складывается из механических моментов  $\vec{i}$  нуклонов, другими словами, из их полных моментов импульсов:

$$\vec{I} = \vec{i}_1 + \vec{i}_2 + \dots + \vec{i}_A. \quad (10.7)$$

В свою очередь,  $\vec{i}$  нуклона равен сумме его спина  $\vec{s}$  и орбитального момента импульса  $\vec{l}$  (механический момент, обусловленный движением нуклона внутри ядра относительно его центра масс):

$$\vec{i} = \vec{s} + \vec{l}.$$

Согласно правилу пространственного квантования величина  $|\vec{I}|$  спина  $\vec{I}$  ядра определяется по формуле

$$|\vec{I}| = \hbar\sqrt{I(I+1)}, \quad (10.8)$$

где  $I$  — спиновое квантовое число, а его проекция  $I_z$  на ось  $Z$ :

$$I_z = \hbar M_I, \quad (10.9)$$

где  $M_I$  — ядерное магнитное квантовое число. Оно может принимать  $(2I + 1)$  значения  $M_I = -I, \dots, I$  через 1.

Экспериментально установлены следующие закономерности для спинов атомных ядер:

1) если массовое число  $A$  — четное, то спиновое квантовое число  $I$  ядра имеет целочисленное значение:  $I = n, n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ;

2) если  $A$  — нечетное, то  $I$  принимает полуцелое значение:  $I = n + 1/2$ ;

3) четно-четные ядра (состоящие из четного числа протонов и четного числа нейтронов) в основном состоянии имеют значение числа  $I = 0$ , что указывает на взаимную компенсацию моментов нуклонов («спаривание нуклонов»).

Ядро атома имеет магнитный момент  $\bar{\mu}_I$ , который по аналогии с магнитным моментом электрона выражается через спин  $\bar{I}$  ядра (в системе СГС):

$$\bar{\mu}_I = g_I \frac{e}{2m_p c} \bar{I}, \quad (10.10)$$

где  $g_I$  — *фактор ядра*, или *ядерное гиромагнитное отношение*, измеряемое в единицах  $e / 2m_p c$ . Оно зависит от внутреннего строения ядра и изменяется в пределах от  $-4$  до  $6$ .

Пространственное квантование для магнитного момента  $\bar{\mu}_I$  ядра определяется выражениями:

$$|\bar{\mu}_I| = g_I \frac{e\hbar}{2m_p c} \sqrt{I(I+1)} = g_I \mu_{\text{я}} \sqrt{I(I+1)}, \quad (10.11)$$

$$\mu_{I_z} = g_I \frac{e\hbar}{2m_p c} M_I = g_{\text{я}} \mu_{\text{я}} M_I. \quad (10.12)$$

где  $\mu_{\text{я}} = \frac{e\hbar}{2m_p c}$  — *ядерный магнетон*, который принимают за единицу измерения магнитных моментов ядер и нуклонов. Он равен  $5,05 \cdot 10^{-27}$  Дж/Тл в системе единиц СИ и  $5,05 \cdot 10^{-24}$  эрг/Гс в системе СГС.

Величину  $|\bar{\mu}_I| = \mu_I$  магнитного момента  $\bar{\mu}_I$  ядер или нуклонов принято характеризовать максимальным значением его проекции на ось квантования, соответствующим случаю  $M_I = I$ . Например, для величин спиновых магнитных моментов протона  $\mu_p$  и нейтрона  $\mu_n$ , у которых спиновое квантовое число  $s=1/2$ , а  $g_S \approx 5,56$  и  $-3,82$  соответственно, запишем:

$$\mu_p \approx 2,28\mu_{\text{я}},$$

$$\mu_n \approx -1,91\mu_{\text{я}}.$$

Знак минус в равенстве для нейтрона говорит о том, что направление его магнитного момента противоположно направлению спина.

Некоторые представления о распределении электрического заряда в ядре в основном состоянии и его структуре получают с помощью *электрического квадрупольного момента*  $Q_{\alpha\beta}$ , который записывается в виде тензора второго ранга и выражается через плотность  $\rho(\vec{r})$  электрического заряда ядра:

$$Q_{\alpha\beta} = \int \rho(\vec{r})(3r_\alpha r_\beta - r^2 \delta_{\alpha\beta}) dV_c.$$

Для аксиально-симметричного относительно координатной оси ядра достаточно задать электрический квадрупольный момент ядра в виде одной из диагональных компонент этого тензора. Условились в качестве такой компоненты брать  $zz$ -компоненту  $Q_{zz}$ , а ее величину  $Q$  измерять в единицах площади (или сечения взаимодействия), а точнее в барнах. Для этого необходимо компоненту  $Q_{zz}$  электрического квадрупольного момента поделить на величину элементарного электрического заряда  $e$ :

$$Q = \frac{Q_{zz}}{e} = \frac{1}{e} \int \rho(\vec{r})(3z^2 - r^2) dV_c.$$

Электрическим квадрупольным моментом  $Q$  обладают только те атомные ядра, у которых спиновое квантовое число  $I$  больше или

равно единице. Наличие у ядра квадрупольного момента говорит об его несферической форме, поскольку квадрупольный момент ядра — это величина, которая характеризует отклонение распределения электрического заряда в ядре атома от сферически симметричного. Квадрупольный момент  $Q$  будет положительным, если ядро вытянуто вдоль оси спина, и отрицательным, если оно растянуто в плоскости, перпендикулярной оси спина.

Если предположить, что вытянутые ядра являются эллипсоидами вращения, то степень их вытянутости можно характеризовать отношением  $\delta = a/b$ , где  $a$  и  $b$  — это большая и малая полуоси эллипсоида соответственно. Как правило, величина  $\delta \approx 1,02 \div 1,04$ , однако у некоторых тяжелых ядер она достигает значений  $1,2 \div 1,5$ .

Существуют магические ядра, у которых число  $Z$  равно одному из магических чисел\* 2, 8, 20, 50, 82, 114, ..., или  $N$  равно 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, ... (в атоме магические числа равны: 2, 10, 18, 36, 54, 86). Такие ядра имеют сферическую форму, которая соответствует наиболее устойчивым ядрам, поэтому для них  $Q = 0$ .

### 10.3. Модели ядер

Атомное ядро является, в общем случае, достаточно сложной системой нуклонов, для которой нет микроскопической теории, адекватно описывающей все явления, наблюдаемые в ядре. Для объяснения этих явлений вводятся феноменологические ядерные модели, которые должны описывать основные характеристики ядра, различные его свойства и процессы взаимодействия частиц с ядрами. Развиваются два типа моделей ядра: коллективные и одночастичные. Модели первого типа учитывают сильные взаимодействия нуклонов, второго типа опираются на представление о независимости

\* Магическим числом называется четное число, соответствующее количеству нуклонов в атомном ядре, при котором энергия связи следующего нуклона меньше, чем последнего.

нуклонов. Из большого количества моделей рассмотрим несколько наиболее известных.

**Капельная модель.** К моделям, учитывающим взаимодействия нуклонов, относится *капельная модель*. Она одна из самых ранних моделей строения атомного ядра, которую предложил в 1936 г. Н. Бор и развил Я. Френкель. В этой модели ядро рассматривается как сферическая равномерно заряженная капля жидкости.

Капельная модель основана на аналогии между поведением нуклонов в ядре и поведением молекул в капле жидкости. В обоих случаях действующие между частицами силы являются короткодействующими, которым свойственно насыщение. Для капли жидкости при заданных внешних условиях характерна постоянная плотность вещества. Ядра вблизи линии стабильности также имеют практически одинаковую плотность, не зависящую от числа нуклонов в ядре, что указывает на их практическую несжимаемость. Наконец, объем капли, как и объем ядра, пропорционален количеству частиц.

На основании этой простейшей модели с использованием принципа Паули К. Вайцзеккером была получена полуэмпирическая формула, позволяющая вычислить энергию связи ядра, а значит, и его массу, названная в его честь *формулой Вайцзеккера*:

$$E_{\text{св}} = a_0 A - a_{\text{п}} A^{2/3} - a_{\text{к}} \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_{\text{с}} \frac{(A/2 - Z)^2}{A} + a_{\text{ч}} A^{-3/4}, \quad (10.13)$$

где  $a_0 = 15,6$  МэВ;  $a_{\text{п}} = 17,2$  МэВ;  $a_{\text{к}} = 0,7$  МэВ;  $a_{\text{с}} = 94,8$  МэВ;

$$a_{\text{ч}} = \begin{cases} 33,6 \text{ МэВ,} & \text{четно-четные ядра,} \\ 0, & \text{четно-нечетные, нечетно-четные ядра,} \\ -33,6 \text{ МэВ,} & \text{нечетно-нечетные ядра.} \end{cases}$$

В формуле Вайцзеккера первый член описывает объемную энергию в предположении, что нуклоны ядра одинаковы и каждый взаимодействует только с близлежащими. Следовательно,



энергия связи должна быть пропорциональна полному количеству нуклонов  $A$ .

Второй член называется поверхностной энергией и является поправкой на эффект поверхностного натяжения. У нуклонов на поверхности ядра непосредственных соседей меньше, чем у нуклонов, находящихся внутри него, поэтому первые связаны со своими соседями слабее. Значит, поверхностные нуклоны вносят меньший вклад в полную энергию связи. Следовательно, общую энергию связи необходимо уменьшить на величину, пропорциональную количеству поверхностных нуклонов, которая пропорциональна площади поверхности ядра. В свою очередь площадь пропорциональна радиусу ядра  $R_{\text{я}}$  в квадрате, а он  $\sim A^{1/3}$ .

Третий член является поправкой на кулоновское отталкивание протонов, которое также приводит к уменьшению энергии связи. Он определяется из закона Кулона и предположения, что каждый из протонов при взаимодействии с остальными ( $Z-1$ ) протонами находится от них на расстоянии радиуса ядра  $R_{\text{я}}$ .

Четвертый член учитывает симметрию в протон-нейтронном составе атомных ядер. Энергетически более выгодно образование ядер, в которых количество протонов и нейтронов одинаково. Отклонение от этого равенства приводит к уменьшению энергии связи. Эффект симметрии не вытекает из капельной модели, а является следствием принципа Паули, роль которого можно учесть в моделях независимых частиц.

Последний член — это поправка на влияние четности массового числа  $A$  на устойчивость ядер, а значит, на энергию связи. Она представляет собой энергию спаривания.

С помощью капельной модели удастся описывать ядерные реакции при низких энергиях, процессы деления ядер. Вместе с тем, она не учитывает некоторые вклады в формуле Вайцзеккера, например энергию спаривания, не объясняет свойства возбужденных состояний ядер и особую стабильность магических ядер.

**Оболочечная модель.** Примером модели не взаимодействующих друг с другом нуклонов служит *оболочечная модель*. Ее предложили в 1949 г. М. Гепперт-Майер и Х. Иенсен. Атомное ядро представляется не как жидкость, а как газ, состоящий из нуклонов, движущихся в самосогласованном поле, создаваемом всей совокупностью нуклонов ядра. Основанием для ее введения служит то обстоятельство, что часть объема ядра не занята нуклонами, поскольку радиус нуклона маленький, около  $8,6 \cdot 10^{-16}$  м. Ядро подобно атому имеет оболочечную структуру, состоит из оболочек, содержащих протоны и нейтроны, которые обращаются вокруг друг друга.

В этой модели рассматривается движение нуклонов в сферически-симметричной потенциальной яме, в пределах которой обычно используется эффективный потенциал Вудса — Саксона. Он имеет вид, похожий на распределение плотности ядерного заряда или вещества в форме распределения Ферми. Для протонов добавляется еще кулоновское взаимодействие. Одночастичные собственные состояния нейтронов и протонов находят путем решения соответствующего уравнения Шредингера. Эти состояния, как и состояния электрона в атоме, характеризуются набором квантовых чисел:  $n, l, j, m_j$ .

Модель оболочек учитывает спин-орбитальное взаимодействие нуклонов. Она предполагает, что в соответствии с принципом Паули происходит заполнение протонами и нейтронами независимо друг от друга дискретных энергетических уровней, значения которых зависят от квантовых чисел  $n, l, j$ . На каждом энергетическом уровне может находиться  $(2j+1)$  тождественных нуклонов. С заполнением этих уровней модель связывает устойчивость ядер. Для основного состояния характерно полное заполнение всех нижних энергетических уровней.

Принцип Паули препятствует потере энергии нуклонов при их столкновениях, так как все низколежащие одночастичные состояния заняты. В связи с этим средняя длина свободного пробега ну-

клона оказывается больше размеров ядра и это позволяет говорить об индивидуальных «орбитах» нуклонов.

Оболочечная модель воспроизводит экспериментальные значения магнитных моментов ядер, объясняет существование особо устойчивых магических ядер, а также периодичность изменений свойств разных ядер. Эта модель дает особенно хорошие результаты для легких и средних ядер, находящихся в основном и слабо возбужденном состояниях. К недостаткам модели относят ее неспособность объяснять поведение сильно возбужденных ядер. Причиной этого являются те предположения, которые лежат в основе модели: сферическая симметрия эффективного потенциала, отсутствие взаимодействия между нуклонами.

## 10.4. Радиоактивный распад

*Радиоактивным распадом* или *радиоактивностью* называется процесс спонтанного (самопроизвольного) изменения состава (заряда  $Z$ , массового числа  $A$ ) или внутреннего строения нестабильных атомных ядер, сопровождающийся испусканием элементарных частиц, гамма-квантов или ядер (ядерных фрагментов). Радиоактивность, которая наблюдается у нестабильных изотопов, существующих в природе, называется естественной, а радиоактивность изотопов, полученных посредством ядерных реакций, называется искусственной.

*Естественная радиоактивность* была открыта в 1896 г. А. Беккерелем во время изучения фотолюминесценции солей урана. В 1898 г. М. Склодовская-Кюри и П. Кюри обнаружили радиоактивность тория, также ими были открыты радиоактивные химические элементы — радий и полоний, радиоактивность которых значительно сильнее радиоактивности урана и тория. Позднее было установлено, что все химические элементы, следующие за висму-

том, т. е. имеющие порядковый номер, больший 83, радиоактивны, однако и более легкие элементы могут быть радиоактивными.

*Искусственная радиоактивность* была открыта в 1934 г. супругами Ф. Жолио-Кюри и И. Жолио-Кюри. Они показали, что при бомбардировке  $\alpha$ -частицами стабильных ядер легких элементов — алюминия, бора, магния — образуются в результате ядерных реакций ядра других элементов, которые являются радиоактивными.

Радиоактивный распад относится к статистическим процессам, подчиняющимся законам статистики, поэтому теория радиоактивного распада строится на предположении об его вероятностном характере. Введем *вероятность распада ядра*  $\lambda$  за единицу времени, которая называется постоянной радиоактивного распада. Она определяет *среднее время жизни*  $\tau = 1/\lambda$  радиоактивного ядра.

Если радиоактивное вещество содержит  $N$  атомов, ядра которых распадаются независимо друг от друга, то можно считать, что число ядер  $dN$ , претерпевающих превращение за интервал времени  $dt$ , равно

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

знак минус указывает на то, что число радиоактивных ядер в процессе распада уменьшается. Величина  $\lambda N$  называется *активностью радиоактивного вещества*, она равна числу ядер, распадающихся за единицу времени. Единица активности в СИ — беккерель (Бк).

В записанном выше равенстве разделим переменные и выполним интегрирование

$$\ln N - \ln N_0 = -\lambda t.$$

Отсюда, переходя к показательной функции, получаем

$$N = N_0 e^{-\lambda t}, \quad (10.14)$$

где  $N_0$  — количество нераспавшихся ядер (в начальный момент времени  $t = 0$ ),  $N$  — количество нераспавшихся ядер в момент времени  $t$ .

Формула (10.14) выражает закон радиоактивного распада, открытый в 1903 г. Ф. Содди и Э. Резерфордом экспериментальным путем. Согласно ему число нераспавшихся ядер убывает со временем по экспоненциальному закону.

Выполнимость закона радиоактивного распада удобно проверить, отложив по оси абсцисс время  $t$ , а по оси ординат  $\ln N$ . Получается прямая линия (рис. 10.4), у которой тангенс угла  $\varphi$  наклона определяет постоянную радиоактивного распада  $\lambda$ :  $\operatorname{tg} \varphi = \lambda$ .

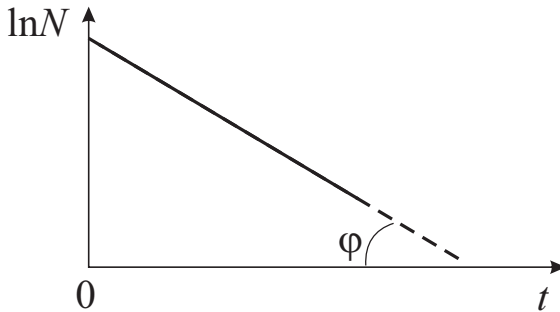


Рис. 10.4. Зависимость  $\ln N$  от времени

Количество ядер, которые распадаются за время  $t$ , определяется выражением

$$N_0 - N = N_0(1 - e^{-\lambda t}).$$

Интенсивность процесса радиоактивного распада характеризует период полураспада  $T_{1/2}$  радиоактивного ядра, т. е. время, за которое исходное число радиоактивных ядер в среднем уменьшается вдвое. Этот период  $T_{1/2}$  связан с постоянной радиоактивного распада  $\lambda$ :

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} \approx \frac{0,693}{\lambda}. \quad (10.15)$$

Период полураспада  $T_{1/2}$  для известных радиоактивных веществ изменяется в пределах от  $10^{-7}$  с до  $10^{15}$  лет.

Радиоактивное вещество является источником следующих видов излучения:  $\alpha$ -излучение,  $\beta$ -излучение (поток электронов или позитронов) и  $\gamma$ -излучение. Позитрон — это античастица для электрона, имеющая ту же массу, но противоположного знака электрический заряд. Альфа-излучение и электронное  $\beta$ -излучение были открыты в 1899 г. Э. Резерфордом,  $\gamma$ -излучение открыл в 1900 г. П. Виллар, а в 1934 г. Ф. Жолио-Кюри и И. Жолио-Кюри открыли позитронное  $\beta$ -излучение.

К основным типам радиоактивности относятся:

- 1) альфа-распад;
- 2) бета-распад;
- 3) спонтанное деление тяжелых ядер;
- 4) нуклонная радиоактивность;
- 5) кластерная радиоактивность.

Ядро, испытывающее радиоактивный распад, и ядро, возникающее в результате этого распада, называют материнским и дочерним ядрами соответственно. Если при радиоактивном распаде появляется дочернее ядро в возбужденном состоянии, которое затем испытывает переход в основное или более низкое возбужденное состояние, то такой тип радиоактивности сопровождается испусканием гамма-излучения.

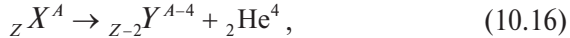
Изменение массового числа  $A$  и заряда  $Z$  дочернего ядра по отношению к материнскому описывается законом радиоактивных смещений, называемым также правилом радиоактивных смещений Содди — Фаянса. Этот закон был открыт в 1913 г. Ф. Содди и К. Фаянсом независимо друг от друга:

$$\left\{ \begin{array}{l} A' = A - 4 \\ Z' = Z - 2 \end{array} \right. \text{ для } \alpha\text{-распада}, \quad \left\{ \begin{array}{l} A' = A \\ Z' = Z \pm 1 \end{array} \right. \text{ для } \beta\text{-распада}.$$

### Альфа-распад

*Альфа-распадом* называется процесс самопроизвольного распада атомного ядра на другое ядро и  $\alpha$ -частицу (ядро атома гелия  ${}^4_2\text{He}$ ).

Этот распад происходит в соответствии с законом радиоактивных смещений по схеме:



где буквами  $X$  и  $Y$  обозначены символы химических элементов распадающегося (материнского) и образующегося (дочернего) атомных ядер соответственно. В результате  $\alpha$ -распада заряд  $Z$  ядра уменьшается на два, а массовое число  $A$  на четыре. Дочернее ядро  $Y$  содержит на 2 протона и 2 нейтрона меньше, чем материнское  $X$ .

Примером может служить распад изотопа урана  ${}_{92} \text{U}^{238}$  (уран-238) с образованием нестабильного изотопа тория-234 и стабильного изотопа гелия-4:



Альфа-распад из основного состояния наблюдается только у тяжелых ядер с массовым числом  $A$ , большим 200. При  $\alpha$ -распаде обычно происходит испускание  $\gamma$ -излучения, так как дочернее ядро возникает не только в основном состоянии, но и в возбужденном (рис. 10.5).

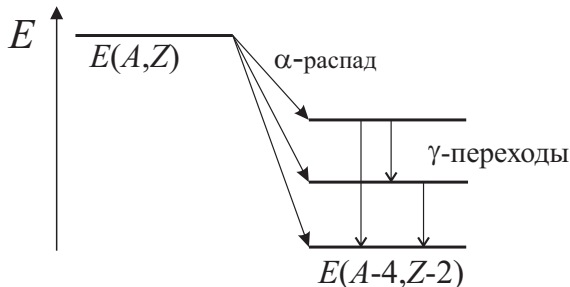


Рис. 10.5. Возможные  $\alpha$ -переходы с  $\gamma$ -переходами в дочернем ядре

Спектр  $\alpha$ -излучения дискретный, он состоит из нескольких линий, называемых тонкой структурой  $\alpha$ -излучения, и несет информацию об энергетических уровнях ядер.

Только при условии, что масса материнского ядра  $M_{\text{я}}(A, Z)$  больше суммы масс дочернего ядра  $M_{\text{я}}(A-4, Z-2)$  и  $\alpha$ -частицы  $M_{\alpha}$ , возможен  $\alpha$ -распад:

$$M_{\text{я}}(A, Z) > M_{\text{я}}(A-4, Z-2) + M_{\alpha}.$$

Величину кинетической энергии вылетающей  $\alpha$ -частицы  $T_{\alpha}$  можно найти, опираясь на законы сохранения энергии и импульса, и в системе центра масс при учете отдачи дочернего ядра она определяется выражением

$$T_{\alpha} = \frac{M_{\text{я}}(A-4, Z-2)}{M_{\text{я}}(A-4, Z-2) + M_{\alpha}} E_{\alpha},$$

где  $E_{\alpha} = [M_{\text{я}}(A, Z) - M_{\text{я}}(A-4, Z-2) - M_{\alpha}]c^2$  — энергия  $\alpha$ -распада, является положительной величиной и не превосходит 10 МэВ.

Для большинства ядер  $M_{\text{я}}(A-4, Z-2) \gg M_{\alpha}$ , поэтому основная часть энергии  $\alpha$ -распада уносится  $\alpha$ -частицей и лишь  $\approx 2\%$  — дочерним ядром. Кинетическая энергия  $T_{\alpha}$  испускаемых  $\alpha$ -частиц заключена в достаточно узком диапазоне  $4 \text{ МэВ} \leq T_{\alpha} \leq 9 \text{ МэВ}$ , при увеличении энергии  $\alpha$ -частиц период полураспада  $T_{1/2}$  ядер значительно уменьшается от  $10^9$  лет до  $10^{-7}$  с.

Теория  $\alpha$ -распада заложена в 1928 гг. Гамовым и независимо от него Р. Герни и Э. Кондоном. Она основывается на представлении о туннельном эффекте, который рассматривается в рамках квантовой механики. Используя простую модель, в которой предполагалось, что  $\alpha$ -частица постоянно существует в ядре, удалось объяснить зависимость вероятности  $\alpha$ -распада от кинетической энергии  $\alpha$ -частицы.

Результаты теории  $\alpha$ -распада согласовывались с эмпирическим законом Гейгера — Неттола, установленном экспериментально в 1911 г. Г. Гейгером и Дж. Нэттолом, который показывает зависимость между периодом полураспада  $T_{1/2}$  радиоактивных четно-четных изотопов и кинетической энергией  $T_{\alpha}$  вылетающей  $\alpha$ -частицы:

$$\lg T_{1/2} = C + B/(T_{\alpha})^{1/2},$$

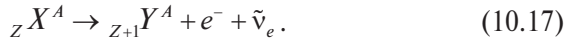
где  $C$  и  $B$  — некоторые постоянные, слабо зависящие от  $Z$ .



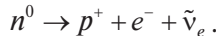
### Бета-распад

*Бета-распадом* называется процесс самопроизвольного превращения ядра в ядро с одинаковым массовым числом  $A$  (изобары) с испусканием электрона (бета-минус-распад), или позитрона (позитронный распад или бета-плюс-распад), или захвата электрона с одного из электронных слоев атома ( $E$ -захват), обычно из  $K$ -слоя ( $K$ -захват).

Первая разновидность бета-распада ( $\beta^-$ -распад) происходит по схеме закона смещений, предложенной в 1931 г. В. Паули:



В  $\beta^-$ -распаде слабое взаимодействие превращает один из нейтронов материнского ядра в протон, при этом испускаются электрон и электронное антинейтрино (частица с маленькой массой и нулевым электрическим зарядом):



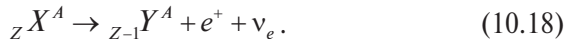
В качестве примера можно привести превращение ядра радиоуглерода-14 с периодом полураспада около 5600 лет в стабильное ядро азота-14:



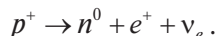
Бета-минус-распад происходит только тогда, когда масса материнского ядра  $M_{\text{я}}(A, Z)$  больше, чем сумма масс дочернего ядра  $M_{\text{я}}(A, Z+1)$  и электрона  $m_e$ . При выполнении этого условия энергия  $\beta^-$ -распада будет положительна:

$$E_{\beta^-} = [M_{\text{я}}(A, Z) - M_{\text{я}}(A, Z+1) - m_e]c^2.$$

Второй вид бета-распада ( $\beta^+$ -распад) протекает по схеме:



В  $\beta^+$ -распаде слабое взаимодействие превращает один из протонов материнского ядра в нейтрон с испусканием позитрона и электронного нейтрино (частица малой массы, электрически нейтральна):



Примером может быть распад изотопа натрия  $\text{Na}^{22}$  с образованием стабильного изотопа неона  $\text{Ne}^{22}$ :



Для бета-плюс-распада должно выполняться условие:

$$E_{\beta^+} = [M_{\text{я}}(A, Z) - M_{\text{я}}(A, Z-1) - m_{e^+}]c^2.$$

Наконец, для третьего вида бета-распада ( $E$ -захват), который обычно конкурирует с  $\beta^+$ -распадом, его открыл в 1937 г. Л. Альварес, схема процесса выглядит следующим образом:



Материнское ядро поглощает один из электронов своего атома, в результате чего один из протонов ядра превращается в нейтрон с испусканием электронного нейтрино:



Примером служит превращение ядер натрия  $\text{Na}^{22}$  в ядра неона  $\text{Ne}^{22}$ :

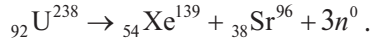


Бета-распад может сопровождаться испусканием  $\gamma$ -излучения.

Спектр электронного и позитронного  $\beta$ -излучения сплошной и простирается от 0 до  $T_{\text{max}}$  (верхняя граница  $\beta$ -спектра). В 1933 г. Э. Ферми, базируясь на квантовой механике, построил элементарную теорию  $\beta^-$ -распада. Ее использование позволило объяснить непрерывное распределение по энергиям вылетающих электронов.

### Спонтанное деление тяжелых ядер

*Спонтанное деление ядра* является делением, происходящим без внешнего возбуждения, в результате чего возникают осколки (ядра более легких элементов) и несколько нейтронов. Процесс самопроизвольного деления тяжелых ядер был обнаружен в 1940 г. Г. Флеровым и К. Петржаком во время исследования распада урана:



Впоследствии такой вид распада наблюдался и для других тяжелых ядер с массовым числом  $A$ , большим 232.

Причиной спонтанного деления является туннельный эффект. Теория этого процесса была развита Я. Френкелем, по аналогии с теорией  $\alpha$ -распада.

### **Нуклонная радиоактивность**

*Нуклонная радиоактивность* — это самопроизвольное превращение ядра в другое ядро с испусканием протона (протонный распад) или нейтрона (нейтронный распад).

Протонный распад наблюдается у легких ядер с большим избытком протонов, например  $\text{Co}^{53}$ , и происходит по следующей схеме закона смещений:



Этот вид распада впервые обнаружен в 1963 г. Флеровым.

В 2002 г. впервые наблюдался процесс одновременного излучения двух протонов (двухпротонный распад) изотопом железа  $\text{Fe}^{45}$ .

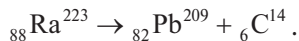
Нейтронный распад происходит только у изотопов легких элементов с избытком нейтронов, например бериллия  $\text{Be}^{13}$ , и выполняется по схеме:



### **Кластерная радиоактивность**

*Кластерная радиоактивность* — это процесс самопроизвольного испускания ядрами ядерных фрагментов (кластеров) тяжелее, чем  $\alpha$ -частица. Причиной кластерной радиоактивности является туннельный эффект.

Кластерный распад был открыт в 1984 г. исследователями Оксфордского университета, которые зарегистрировали превращение нестабильных изотопов радия  $\text{Ra}^{223}$  в изотопы свинца  $\text{Pb}^{209}$  с испусканием изотопа углерода  $\text{C}^{14}$



Вероятность вылета ядра  $C^{14}$  примерно в  $10^{10}$  меньше вероятности вылета  $\alpha$ -частицы.

Впоследствии кластерный распад наблюдался с излучением более тяжелых ядер.

## 10.5. Ядерные реакции

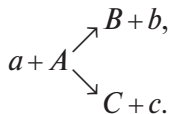
*Ядерной реакцией* называется процесс изменения состава и структуры атомного ядра, вызванный взаимодействием ядра с другим ядром или элементарной частицей.

Известно много различных видов ядерных реакций, которые зависят от типа бомбардирующих частиц, ядер-мишеней, энергий взаимодействующих частиц и многих других факторов. При этом в реакциях выполняются законы сохранения энергии, импульса, момента импульса, электрического заряда, количества нуклонов и других специфических ядерных параметров.

В общем случае ядерная реакция происходит при взаимодействии бомбардирующей частицы  $a$  с ядром-мишенью  $A$ , в результате чего образуется ядро  $B$  и испускается частица  $b$ . Символически это записывается так:



Начальный этап реакции  $a + A$  называется входным каналом, конечный этап  $B + b$  — выходным, а переход между ними, изображаемый стрелкой, — *каналом реакции*. Указанный процесс в некоторых ядерных реакциях может происходить неоднозначно, поскольку возможна реализация нескольких конкурирующих путей. Разные каналы ядерной реакции приводят к образованию различных частиц:



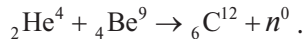
Вероятность протекания реакции характеризуется *ядерным сечением*  $\sigma$ , за единицу измерения которого принят барн. Ядерное сечение интерпретируется как площадь поперечного сечения ядрамишени, при попадании в которое бомбардирующей частицы произойдет реакция.

Перечислим несколько важных ядерных реакций, связанных с научными открытиями, о которых говорили ранее в этой главе.

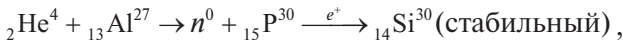
Первая искусственно вызванная ядерная реакция была осуществлена в 1919 г. Э. Резерфордом во время эксперимента, в котором наблюдали за прохождением  $\alpha$ -частиц через газообразный азот. Из-за взаимодействия  $\alpha$ -частиц с ядрами атома азота происходило их превращение в стабильное атомное ядро кислорода (трансмутация элементов) с вылетом протона — ядра протия  ${}_1\text{H}^1$ :



Результатом ядерной реакции, наблюдаемой в эксперименте по облучению  $\alpha$ -частицами бериллия, который был проведен в 1932 г. Дж. Чедвиком, являлось излучение нейтронов:



В 1934 г. Ф. Жолио-Кюри и И. Жолио-Кюри впервые создали искусственным путем радиоактивные изотопы фосфора-30:

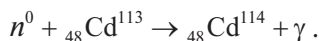


во время бомбардировки  $\alpha$ -частицами листа алюминия.

Из приведенных примеров видно, что ядерные реакции сопровождаются корпускулярным излучением (нейтронов, протонов), но могут и электромагнитным, тогда они будут называться *реакциями радиационного захвата*.

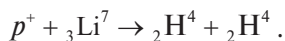


Примером является реакция захвата теплового нейтрона с энергией  $\approx 0,5$  эВ ядром кадмия-113 с образованием ядра более тяжелого изотопа кадмия-114:



Ядерные реакции происходят как с выделением, так и с поглощением энергии и называются соответственно экзоэнергетическими и эндоэнергетическими. Энергия, которая выделяется или поглощается в реакции, равна разности масс частиц в энергетических единицах до и после реакции и называется *энергией реакции*  $E_p$ . Для экзоэнергетических реакций  $E_p > 0$ , а для эндоэнергетических  $E_p < 0$ . Реакция, обратная экзоэнергетической, будет всегда эндоэнергетической.

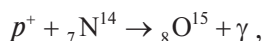
Примером экзоэнергетической реакции может служить ядерная реакция по превращению ядер лития в ядра гелия:

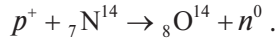


Такого рода реакция с выделением энергии 17,4 МэВ была впервые осуществлена в 1932 г. Дж. Кокрофтом и Э. Уолтоном, когда они облучали литиевую мишень пучком высокоэнергетичных протонов, полученных на ускорителе.

Для запуска реакции ядро должно получить энергию, которая превышает *порог реакции*. Он равен минимальной кинетической энергии налетающей частицы, при которой данная реакция может протекать. Величина порога реакции зависит от типа участвующих во взаимодействии частиц. Источниками частиц для проведения ядерных реакций могут быть: естественные и искусственные радиоактивные вещества, ускорители частиц, ядерные реакторы, космическое излучение.

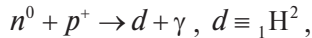
В зависимости от величины кинетической энергии налетающей на ядро-мишень частицы в выходном канале реакции могут образовываться различные частицы. Например, при взаимодействии протона с ядром азота  $\text{N}^{14}$  возможны реакции с образованием нестабильных изотопов кислорода и  $\gamma$ -кванта или нейтрона:



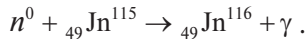


Ядерные реакции часто классифицируют по типу падающих частиц, вызывающих эти реакции. Выделяют реакции под действием нейтронов, электрически заряженных частиц (протонов,  $\alpha$ -частиц, ионов, электронов и т. п.) и  $\gamma$ -квантов.

Нейтроны не имеют электрического заряда, поэтому могут легко проникать в ядро при малых значениях кинетической энергии и эффективно с ним взаимодействовать, вызывая ядерные реакции. Для легких и средних ядер реакции под действием медленных нейтронов проходят по схеме реакции радиационного захвата. В результате образуются как стабильные изотопы, например, дейтрон  $d$  — ядро дейтерия  ${}_1\text{H}^2$  или *тяжелого водорода*, основная их часть образовалась во Вселенной по реакции:



так и радиоактивные:



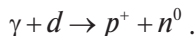
Ядерные реакции под действием быстрых нейтронов с энергиями более 1 МэВ могут приводить к вылету электрически заряженных частиц. Например, из-за действия нейтронов, образуемых космическими лучами в нижних слоях атмосферы Земли, на атомы азота-14 возникают  $\beta^-$  радиоактивные ядра радиоуглерода-14 и протоны:



Если в качестве бомбардирующих частиц используются заряженные частицы, которые несут положительный заряд, то они должны иметь достаточную кинетическую энергию, чтобы преодолеть кулоновское отталкивание ядра, попасть в область действия ядерных сил и вызвать ядерную реакцию.

Ядерные реакции под действием  $\gamma$ -квантов высоких энергий называются *фотоядерными реакциями* и происходят с испусканием нуклонов благодаря электромагнитному взаимодействию. Первой

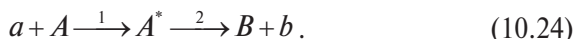
наблюдавшейся в 1934 г. Дж. Чедвиком и М. Гольдхабером фото-ядерной реакцией было расщепление дейтрона:



Несмотря на то, что характер взаимодействия между налетающими частицами и ядрами разнообразный, по механизму взаимодействия ядерные реакции делятся на два класса:

- 1) *реакции с образованием составного ядра*, проходящие при малых кинетических энергиях сталкивающихся частиц (до 10 МэВ);
- 2) *прямые ядерные реакции*, которые протекают за ядерное время, равное  $10^{-21} - 10^{-23}$  с, за которое частица пересекает ядро. Такой механизм реализуется при больших энергиях налетающих на ядра частиц.

Теория механизма ядерной реакции с образованием составного ядра была разработана в 1936 г. Н. Бором. Она легла в основу капельной модели ядра, которая используется для объяснений экспериментальных исследований большей части ядерных превращений. Согласно этой теории ядерная реакция является двухстадийным процессом:



На первом этапе в результате слияния налетающей частицы  $a$  с ядром-мишенью  $A$  образуется составное (промежуточное) ядро  $A^*$ . Оно всегда возникает в возбужденном состоянии, поскольку обладает избыточной энергией. Эта энергия приносится частицей  $a$  в ядро-мишень  $A$  в виде энергии связи нуклона в составном ядре и части его кинетической энергии.

На втором этапе внесенная энергия перераспределяется между нуклонами составного ядра, этот процесс достаточно медленный, примерно  $10^{-13} - 10^{-17}$  с. В течение этого времени из-за спонтанной флуктуации энергия может сконцентрироваться на нуклоне, находящемся вблизи границы ядра, в результате чего этот нуклон может его покинуть. Данный процесс, аналогичный испарению жидкости, приводит к распаду составного ядра на конечные продукты реакции.

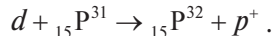


Кроме нуклонов составное ядро может испустить гамма-кванты. Время жизни составного ядра относительно их испускания определяется электромагнитным взаимодействием и равно приблизительно  $10^{-14}$  с, что значительно больше ядерного времени:



Для прямых ядерных реакций присущи все особенности прямого взаимодействия. Механизм прямых реакций проявляется, когда бомбардирующая частица взаимодействует с небольшой группой нуклонов ядра или, наоборот, ядро взаимодействует с малым количеством нуклонов налетающей частицы. Теория этого механизма была предложена С. Батлером. Механизм прямых ядерных реакций отличается от механизма с образованием составного ядра распределением импульсов частиц-продуктов относительно импульса бомбардирующих частиц, а также распределением по энергиям.

По механизму прямых ядерных реакций протекает реакция срыва с участием дейтрона, состоящего из нейтрона и протона, когда нейтрон дейтрона поглощается ядром-мишенью, а протон, которому мешают войти в ядро кулоновские силы, движется дальше:

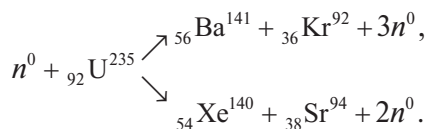


Среди ядерных реакций выделяют реакции деления и синтеза (объединения) ядер.

*Реакция ядерного деления* — это процесс, при котором из одного атомного ядра возникают, как правило, два ядра-осколка, близких по массе. Такие реакции энергетически выгодны для стабильных ядер с массовым числом  $A > 100$ .

*Реакция деления урана* является одной из известных реакций деления, которая впервые была зарегистрирована в конце 1938 г. О. Ган и Ф. Штрассман при облучении нейтронами урана. В начале 1939 г. Л. Майтнер и О. Фриш при объяснении этой реакции впервые употребили термин «деление» урана.

В результате взаимодействия тепловых нейтронов с одним из природных изотопов урана  $U^{235}$  появляются два радиоактивных ядра с массовыми числами примерно от 80 до 150. Каналы этой реакции различные, могут образовываться около 50 разных пар изотопов. Например, возникают ядра бария  $Ba^{141}$  и криптона  $Kr^{92}$  или ксенона  $Xe^{140}$  и стронция  $Sr^{94}$  :

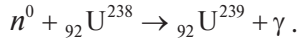


В данной ядерной реакции высвобождается огромное количество энергии. Оценку выделяющейся при делении ядра энергии можно сделать с помощью удельной энергии связи нуклонов в ядре. В элементарном акте деления урана выделяемая энергия равна около 200 МэВ.

Кроме того, Ф. Жолио-Кюри и одновременно Э. Ферми обнаружили, что при делении урана происходит испускание вторичных нейтронов (нейтроны деления). Образовавшиеся нейтроны могут вызывать деление других ядер урана, причем количество нейтронов в каждом последующем акте деления растет в геометрической прогрессии. Такой лавинообразный процесс называется цепной ядерной реакцией. Ее существование послужило основой для идеи о создании самоподдерживающейся цепной ядерной реакции деления и ее использовании в качестве источника энергии.

Другой наиболее распространенный в природных условиях изотоп урана  ${}_{92}U^{238}$  (составляет 99,3 % из всего урана) может вступать в реакцию деления лишь под влиянием быстрых нейтронов с энергией, близкой к 1 МэВ. При его бомбардировке медленными нейтронами энергии возбуждения недостаточно для деления ядра урана  $U^{238}$ , и вместо деления происходит цепочка реакций с возникновением ядер трансурановых элементов (элементы с атомными номерами больше 92).

Вначале реализуется ядерная реакция радиационного захвата с образованием изотопа урана  $U^{239}$  :



Уран-239 является  $\beta^-$  радиоактивным с периодом полураспада 24 мин, его ядро превращается в ядро атома нептуния  $Np^{239}$  :



Ядро нептуния-239 также  $\beta^-$  радиоактивно с периодом полураспада около двух дней, оно превращается в относительно стабильное ядро плутония  $Pu^{239}$  :



Такая схема получения трансуранов  ${}_{93}Np^{239}$  и  ${}_{94}Pu^{239}$  была известна уже в 1934 г. Э. Ферми, когда он начал облучать нейтронами уран. В настоящее время известны другие схемы получения нептуния и плутония.

В дальнейшем были обнаружены реакции ядерного деления, происходящие с другими ядрами, например плутония  $Pu^{239}$ , и под действием других частиц, например протонов.

Ядерное деление можно интерпретировать в рамках капельной модели ядра с образованием составного ядра. После захвата падающей частицы ядро переходит в возбужденное состояние, оно совершает колебательные движения, связанные с отклонениями от сферической формы. Начинается процесс деления атомного ядра, при котором изменяется его форма. Сферическая форма ядра деформируется сначала в вытянутый сфероид, у которого на экваторе образуется перетяжка. Затем возникает гантелеобразная фигура с тонким перешейком. Если энергия возбуждения превысит характерное критическое значение порога реакции, то кулоновские силы отталкивания между протонами в перешейке будут преобладать над ядерными силами притяжения. Это приведет к разрыву перешейка и образованию быстро разлетающихся ядер-осколков.

*Реакция ядерного синтеза* — это процесс слияния двух атомных ядер с образованием нового, как правило, более тяжелого ядра. Кроме ядра в ходе реакции синтеза могут образовываться различные элементарные частицы и кванты электромагнитного излучения.

Ядерный синтез может быть энергетически выгоден для стабильных ядер с массовым числом  $A < 60$ . Он происходит с выделением энергии, так как нуклоны в образовавшемся в результате слияния ядре связаны сильнее, чем в исходных ядрах.

Для объединения двух положительно заряженных ядер необходимо сблизить их на расстояние порядка  $10^{-15}$  м, на котором действие сильного взаимодействия будет превышать электростатическое отталкивание ядер. Это возможно, когда кинетическая энергия взаимодействующих ядер достаточно большая и позволяет преодолеть кулоновский барьер, другими словами, потенциальную энергию кулоновского межъядерного взаимодействия. Условия для возникновения такой ядерной реакции могут быть созданы двумя способами.

1. Использовать ускорители электрически заряженных частиц, таких как протоны, дейтроны, ионы различных атомов. В природной среде синтез ядер осуществляется при столкновении частиц космических лучей с ядрами ионизированного газа, например в ионосфере Земли.

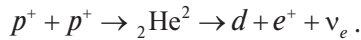
2. Нагревать вещество из легких элементов до чрезвычайно высоких температур, близких к  $10^8$  К в термоядерном реакторе. В природе такой синтез происходит в звездах. Тогда говорят о термоядерном синтезе (термоядерной реакции).

*Термоядерным синтезом* называют разновидность реакции синтеза, когда легкие атомные ядра объединяются обычно в более тяжелые за счет кинетической энергии их теплового движения, приобретаемой в условиях высоких температур. Такие температуры необходимы для сообщения ядрам кинетической энергии, достаточной, чтобы сблизиться до расстояний, сравнимых с радиусом действия ядерных сил.

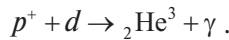
*Термоядерные реакции* являются самыми распространенными во Вселенной реакциями и относятся к экзоэнергетическим. Энергия, которая выделяется в процессе этих реакций, обеспечивает поддержание высоких температур, что способствует продолжению синтеза. Ее значение в расчете на один нуклон существенно превышает удельную энергию, выделяющуюся в процессе реакции деления тяжелых ядер. Со всем этим связывают возможность применения термоядерной реакции в энергетике в случае решения проблемы ее управлением.

Среди многочисленных термоядерных реакций, которые протекают в звездах, прежде всего следует отметить реакции синтеза ядер изотопов самого распространенного во Вселенной водорода. В результате их слияния (сгорания водорода) по циклу из трех стадий, называемому *протонно-протонным циклом*, образуются атомные ядра гелия-4.

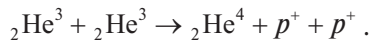
Вначале из двух протонов возникает промежуточное ядро гелия-2, которое сразу же испытывает  $\beta^+$ -радиоактивный распад с появлением дейтрона:



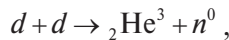
Затем дейтрон, сталкиваясь с протоном, вступает с ним в реакцию с образованием стабильного ядра гелия-3:



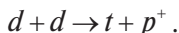
Наконец, заканчивается цикл реакцией между ядрами гелия-3 с освобождением двух протонов:



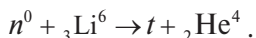
В земных условиях особый интерес представляют термоядерные реакции с участием дейтронов, поскольку существующие на Земле запасы дейтерия практически неисчерпаемы (он входит в состав воды). По одному каналу реакции образуется ядро гелия-3:



по второму каналу создается тритон  $t$  — ядро трития  ${}_1\text{H}^3$  ( $t \equiv {}_1\text{H}^3$ ):



Тритий  ${}_1\text{H}^3$  иногда называется *сверхтяжелым водородом*. Он является  $\beta^-$  радиоактивным изотопом водорода с периодом полураспада около 12 лет и распадается с образованием гелия-3. В промышленных масштабах его получают в ядерных реакторах при облучении быстрыми нейтронами ядер распространенного в природе лития-6:

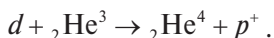


Особенно большая энергия выделяется в реакции синтеза дейтрона и тритона, в результате которой образуется ядро гелия-4 и вылетает нейтрон. Реакция записывается в виде:



Выделенная в этом акте энергия равна 17,6 МэВ, что составляет около 3,5 МэВ на один нуклон, в то время как в процессе деления ядер урана освобождается примерно 0,9 МэВ энергии на нуклон. Следует сказать, что большую часть энергии около 14,1 МэВ уносит с собой нейтрон как более легкая частица.

Перспективным термоядерным синтезом без образования быстрых нейтронов, которые порождают значительное количество радиоактивных отходов, является слияние дейтрона и ядра гелия-3:



Запасы гелия-3 на Земле малы — около тонны, однако его можно получать из лития-6 через реакцию образования трития на существующих ядерных реакторах.

К «безнейтронным» термоядерным реакциям относится также синтез дейтрона и ядра лития-6 с образованием двух ядер гелия-4:



Осуществление управляемого течения термоядерного синтеза является чрезвычайно важной задачей, решение которой позволит человечеству получить в распоряжение фактически неограниченный источник энергии.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

---

1. Шпольский, Э. В. Атомная физика / Э. В. Шпольский. — М. : Наука, 1984. — Т. 1. — 552 с.
2. Шпольский, Э. В. Атомная физика / Э. В. Шпольский. — М. : Наука, 1974. — Т. 2. — 447 с.
3. Сивухин, Д. В. Атомная и ядерная физика / Д. В. Сивухин. — М. : Наука, 1986. — 416 с.
4. Добрецов, Л. Н. Атомная физика / Л. Н. Добрецов. — М. : Физматгиз, 1960. — 348 с.
5. Савельев, И. В. Курс общей физики / И. В. Савельев. — М. : Наука, 1988. — Т. 2. — 496 с.
6. Савельев, И. В. Курс общей физики / И. В. Савельев. — М. : Наука, 1987. — Т. 3. — 317 с.
7. Фриш, С. Э. Курс общей физики / С. Э. Фриш, А. В. Тиморева. — М. : ГИТ-ТЛ, 1957. — Т. 3. — 608 с.
8. Гольдин, Л. Л. Введение в квантовую физику / Л. Л. Гольдин, Г. И. Новикова. — М. : Наука, 1988. — 656 с.
9. Иродов, И. Е. Сборник задач по атомной физике и ядерной физике / И. Е. Иродов. — М. : Энергоатомиздат, 1984. — 215 с.

## АЛФАВИТНО-ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

---

- Адиабатическое приближение 205  
Активность радиоактивного вещества 242  
Альфа-излучение 244  
Альфа-распад 244  
Ангармоническое колебание 210  
Анион 6  
Антистоксовый спутник 220  
Атомное ядро 226  
Атомный номер 227  
Атомный терм 172
- Бегущая плоская гармоническая волна 109  
Бета-излучение 244  
Бета-распад 247  
Бозон 175
- Вероятность обнаружения 119  
— распада ядра 242  
Внутреннее квантовое число 154  
Внутренняя энергия атома 80  
Возбужденное состояние 85  
Волновой пакет 113  
— число 67  
— уравнение Шредингера 123  
— функция 118  
Волна де Бройля 105  
Вращательное квантовое число 206
- Временное уравнение Шредингера 118, 121  
Вырожденный уровень 140
- Гамма-излучение 244  
Гармоническое приближение 209  
Гетероядерная молекула 219  
Гипотеза де Бройля 105  
Главная серия 179  
Главное квантовое число 90, 139  
Гомоядерная молекула 219  
Групповая скорость 110
- Двухкомпонентная волновая функция 158  
Дейтерий 227  
Дейтрон 228  
Детерминант Слэтера 168  
Дефект массы 231  
Дифракция 101  
Диффузная серия 179
- Естественная радиоактивность 241
- Закон Кирхгофа 37  
— кратных отношений 5  
— Мозли 196  
— простых объемных отношений 6  
— радиоактивного распада 243



- об электролизе 6
- смещения Вина 41
- Бугера 189
- Стефана — Больцмана 39
- фотоэффекта 51
  
- Запирающее напряжение 54
- Зарядовое число 227
  
- Излучение 29
- Изобары 227
- Изотоны 227
- Изотопы 227
- Интегральная энергетическая величина 34
- Интенсивность излучения 32
- Интерференция 101
- Ионная связь 203
- Искусственная радиоактивность 242
- Испускающая способность 35
  
- Каналовые лучи 7
- Канал реакции 250
- Капельная модель 238
- Катион 6
- Катодные лучи 7
- Квазиупругая сила 209
- Кинетическая энергия 12
- Кластерная радиоактивность 249
- Ковалентная связь 202
- Когерентное рассеяние 189
- Колебательное квантовое число 209
- Комбинационный принцип Рица 69
- Комбинационное рассеяние света 219
- Комптоновская длина волны 64
- Корпускулярно-волновой дуализм 102
- Коэффициент ангармоничности 210
  - отражения 131
  - прозрачности 131
- упругости 209
- Красная граница 53
- спутник 220
- Кратность вырождения 140
  
- Линейная собственная частота колебаний 209
- Линейчатый спектр 65
- Люминесценция 30
  
- Магнетон Бора 99
- Магнитное внутреннее квантовое число 154
  - орбитальное квантовое число 138
  - спиновое квантовое число 152
- Магнитный момент 98
  - орбитальный момент 146
  - спиновый момент 152
- Масса ядра 231
- Массовое число 227
- Метод Борна — Оппенгеймера 205
  - Вульфа — Брэгга 200
  - Томаса — Ферми 169
  - Томаса — Ферми — Дирака 169
  - Хартри — Фока 168
  - Хартри 167
- Микроскопический объект 3
- Многоэлектронный атом 165
- Модель атома Томсона 70
- Момент импульса 84
- Момент количества движения 84
- Мощность излучения 30
- Мультиплет 173
- Мультиплетность по спине 174
  
- Наблюдаемая 118
- Невозбужденное состояние 85
- Некогерентное рассеяние 190
- Неполярная ковалентная связь 202
- Нормальное ускорение 82

- Нуклид 227  
Нуклон 226  
Нуклонная радиоактивность 249
- Обобщенная формула Бальмера 68  
— полином Лагерра 138  
Оболочечная модель 240  
Объемной плотности 33  
Одномерная прямоугольная потенциальная яма 126  
Оператор 119  
— Гамильтона 122  
— импульса 120  
— кинетической энергии 120  
— Лапласа 121  
— проекции импульса 120  
Опыт Милликена 19  
— Гейгера и Марсдена 75  
— Дэвиссона и Джермера 106  
— Лауэ 196  
— Кауфмана 22  
— Рамзауэра 104  
— Томсона 18  
— Франка и Герца 87  
— Штерна и Герлаха 149  
Орбиталь 139  
Орбитальное гироманнитное отношение 147  
Орбитальное квантовое число 138  
Орбитальный момент импульса 143  
Освещенность 31  
Основная серия 179  
Основное состояние 85
- Парагелий 185  
Первый ионизационный потенциал 93  
Период полураспада 243  
Планетарная модель атома 77  
Плотность вероятности 119
- Поверхностная яркость 32  
Поглощательная способность 36  
Поглощение 215  
Показатель преломления среды 112  
Полная механическая энергия 12  
— магнитный момент 155  
— момент импульса 153  
Полосатый спектр 213  
Поляризуемость молекулы 221  
Полярная ковалентная связь 203  
Порог реакции 252  
Порядковый номер 227  
Постоянная Больцмана 43  
— Вина 41  
— Планка 46  
— Ридберга 67  
— Стефана — Больцмана 39  
Постулат стационарных состояний 85  
— частот 85  
— Бора 86  
Потенциальная энергия 12  
Поток излучения 30  
Правило Хунда 175  
— отбора 141  
— Клечковского 177  
— Маделунга 177  
— квантования орбит 85  
Приведенная масса 97  
Принцип запрета Паули 175  
— суперпозиций состояний 118  
Присоединенная функция Лежандра 138  
Прицельное расстояние 78  
Пространственное квантование 146  
Протий 227  
Протонно-протонный цикл 259  
Прямоугольный потенциальный барьер 130  
Прямая ядерная реакция 254

- Равновесное положение 207  
 Радиальное квантовое число 139  
 Радиоактивность 241  
 Радиоактивный распад 241  
 Радиус ядра 231  
 Разность потенциалов 12  
 Рамановское рассеяние 219  
 Реакция с образованием составного ядра 254  
   — деления урана 255  
   — ядерного деления 255  
   — ядерного синтеза 258  
   — радиационного захвата 251  
 Резкая серия 179  
 Релеевская линия 219  
 Рентгеновские лучи 188  
  
 Сверхтяжелый водород 260  
 Связь Рассела — Саундерса 173  
 Серия Бальмера 66  
   — Брэкета 68  
   — Лаймана 67  
   — Пашена 68  
   — Пфунда 68  
 Сила излучения 30  
   — Лоренца 9  
   — тока 98  
 Силовая постоянная 209  
 Сложный атом 166  
 Собственная частота 210  
 Собственный момент импульса 152  
 Соотношения неопределенности Гейзенберга 116  
 Спектральная мощность излучения 34  
   — терм 69  
   — энергетическая величина 34  
 Спин 152  
 Спиновое гиромагнитное отношение 152  
   — квантовое число 152  
 Спин-орбитальное взаимодействие 160  
 Спонтанное деление ядра 248  
 Среднее время жизни 242  
   — значение 121  
 Стабильное ядро 228  
 Стационарное уравнение Шредингера 124  
 Стоксовый спутник 220  
 Сферическая функция 136  
  
 Температурное излучение 30  
 Тепловое излучение 30  
 Термодинамический закон Вина 39  
 Термоядерная реакция 259  
   — синтез 258  
 Ток насыщения 54  
 Тонкая структура спектра 159  
 Тормозное рентгеновское излучение 191, 192  
 Третий 227  
 Туннельный эффект 131  
 Тяжелый водород 253  
  
 Удельная энергия связи 232  
   — заряд 8  
 Уравнение Дирака 159  
   — на собственные функции и значения 120  
   — Паули 158  
   — Шредингера 121  
   — Клейна — Гордона — Фока 158  
   — Эйнштейна для фотоэффекта 57  
   — Лауэ 199  
 Уровень тонкой структуры 159  
 Условие нормировки 119  
 Условие регулярности 119  
 Фазовая скорость 110

- Фактор Ланде 156  
— ядра 235  
Фермион 175  
Фиолетовый спутник 220  
Формула Резерфорда для  
рассеяния 79  
— Рэлея 112  
— Вульфа — Брэгга 107, 201  
— Эйнштейна 26  
— Вайцзеккера 238  
— Рэлея — Джинса 45  
— Бальмера 67  
— для внутренней энергии 90  
— Планка 48  
Фотолюминесценция 30  
Фотоэффект 50, 189  
Фотоядерная реакция 253
- Характеристическое излучение 191  
Характеристическое рентгеновское  
излучение 194  
Хемилюминесценция 30
- Центр инерции 95  
Центр масс 95  
Центростремительное ускорение 82  
Циклотронная частота 16
- Частота Лармора 182
- Электрический дипольный момент 82  
— квадрупольный момент 236  
Электролюминесценция 30
- Электромагнитное излучение 29  
Электрон 8  
Электронная оболочка атома 170  
— облако 139  
— слой атома 171  
— уравнение Шредингера 205  
Энергетическая светимость 31  
Энергия реакции 252  
— диссоциации 207  
— связи нуклонов в ядре 232  
— ионизации 93  
— связи электрона в атоме 92  
Эффективное поперечное сечение 79  
— заряд молекулы 218  
— магнитный момент 156  
Эффект Зеемана 181  
— Комптона 58  
— Рамана 219  
— Рамзауэра 103  
— Пашена — Бака 182
- Ядро 226  
Ядерное гиромагнитное  
отношение 235  
— реакция 250  
— модель атома 77  
— магнетон 235  
— сечение 224  
— уравнение Шредингера 206  
— сила 228
- $j$ - $j$  связь 173  
 $X$ -лучи 188

# ОГЛАВЛЕНИЕ

---

ПРЕДИСЛОВИЕ .....	3
<b>1. АТОМИСТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ</b>	
<b>О ВЕЩЕСТВЕ .....</b>	<b>5</b>
1.1. Ряд доказательств атомного строения вещества .....	5
1.2. Заряженная нерелятивистская частица в электрическом и магнитном полях.....	9
1.3. Определение электрического заряда электрона.....	18
1.4. Основы релятивистской динамики частицы.....	21
<b>2. КВАНТОВАЯ ПРИРОДА ИЗЛУЧЕНИЯ .....</b>	<b>29</b>
2.1. Виды излучения. Энергетические величины излучения .....	29
2.2. Тепловое равновесное излучение .....	34
2.3. Законы теплового излучения .....	37
2.4. Формула Рэлея — Джинса .....	42
2.5. Формула Планка.....	45
2.6. Внешний фотоэффект .....	50
2.7. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта.....	56
2.8. Эффект Комптона .....	58
<b>3. МОДЕЛИ СТРОЕНИЯ АТОМА .....</b>	<b>65</b>
3.1. Закономерности в атомных спектрах. Формула Бальмера .....	65

---

3.2. Модель атома Томсона.....	69
3.3. Опыты по рассеянию альфа-частиц. Планетарная модель атома .....	74
3.4. Планетарная модель Резерфорда водородоподобных атомов.....	80
3.5. Квантовые постулаты Бора .....	84
3.6. Строение водородоподобных атомов в теории Бора .....	88
3.7. Учет движения ядра в боровской модели атома .....	94
3.8. Магнитные свойства атома в теории Бора .....	97
4. ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ЧАСТИЦ .....	101
4.1. Корпускулярно-волновой дуализм для света .....	101
4.2. Гипотеза де Бройля.....	103
4.3. Свойства волн де Бройля.....	108
4.4. Соотношение неопределенностей Гейзенберга .....	113
5. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ .....	117
5.1. Основные положения квантовой механики .....	117
5.2. Временное и стационарное уравнения Шредингера .....	121
5.3. Простейшие задачи квантовой механики.....	125
5.4. Квантово-механическая теория водородоподобного атома .....	134
6. МЕХАНИЧЕСКИЙ И МАГНИТНЫЙ МОМЕНТЫ ЭЛЕКТРОНА .....	143
6.1. Орбитальный момент импульса и магнитный орбитальный момент .....	143
6.2. Спин и магнитный спиновый момент.....	149
6.3. Полный момент импульса, полный и эффективный магнитные моменты.....	153
6.4. Спин-орбитальное взаимодействие. Тонкая структура спектра .....	158

---

7. СТРУКТУРА И СПЕКТРЫ СЛОЖНЫХ АТОМОВ .....	165
7.1. Энергетические состояния многоэлектронных атомов .....	165
7.2. Механические моменты атома .....	171
7.3. Заполнение электронных оболочек и слоев .....	174
7.4. Оптические спектры щелочных металлов .....	178
7.5. Спектр атома во внешнем магнитном поле .....	181
8. РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ .....	188
8.1. Особенности рентгеновского излучения .....	188
8.2. Виды рентгеновского излучения .....	191
8.3. Дифракция и интерференционное отражение рентгеновских лучей .....	196
9. СТРУКТУРА И СПЕКТРЫ МОЛЕКУЛ .....	202
9.1. Двухатомные молекулы и их энергетические состояния .....	202
9.2. Общие сведения о молекулярных спектрах .....	212
9.3. Инфракрасное поглощение .....	215
9.4. Комбинационное рассеяние .....	219
10. СВОЙСТВА ЯДЕР. РАДИОАКТИВНОСТЬ И ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ .....	226
10.1. Характеристики атомных ядер .....	226
10.2. Механический, магнитный и электрический квадрупольный моменты ядер .....	234
10.3. Модели ядер .....	237
10.4. Радиоактивный распад .....	241
10.5. Ядерные реакции .....	250
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК .....	261
АЛФАВИТНО-ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ .....	262

*Учебное издание*

**Кислов** Алексей Николаевич

# АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

Редактор *Н. П. Кубыщенко*  
Верстка *Е. В. Ровнушкиной*



Подписано в печать 08.02.2017. Формат 60×84 1/16.  
Бумага писчая. Цифровая печать. Усл. печ. л. 15,8.  
Уч.-изд. л. 11,2. Тираж 50 экз. Заказ 43.

Издательство Уральского университета  
Редакционно-издательский отдел ИПЦ УрФУ  
620049, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 5  
Тел.: 8 (343) 375-48-25, 375-46-85, 374-19-41  
E-mail: rio@urfu.ru

Отпечатано в Издательско-полиграфическом центре УрФУ  
620075, Екатеринбург, ул. Тургенева, 4  
Тел.: 8 (343) 350-56-64, 350-90-13  
Факс: 8 (343) 358-93-06  
E-mail: press-urfu@mail.ru

*Для заметок*





### **КИСЛОВ АЛЕКСЕЙ НИКОЛАЕВИЧ**

Доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики и прикладной математики физико-технологического института Уральского федерального университета им. Б. Н. Ельцина. Автор 80 научных публикаций, одной монографии и трех учебных пособий.

Область научных интересов — динамика решетки дефектных кристаллов и наноструктурных материалов.