Р. КРИСТИ
А. ПИТТИ

Строение вещества: введение в современную физику

Р. КРИСТИ, А. ПИТТИ

Строение вещества: введение в современную физику

Перевод с английского
под редакцией
проф. Ю. М. ШИРОКОВА

ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
МОСКВА 1969

53
К-82
УДК 530.1

Robert W. Christy, Agnar Pytte
Dartmouth College

The structure of matter: an introduction to modern physics

W. A. Benjamin, INC
New York — Amsterdam
1965

Строение вещества: введение в современную физику, Р. Кристи, А. Питти, монография, изд-во «Наука», Главная редакция физико-математической литературы, 1969, стр. 596.

Книга представляет собой учебник физики повышенного типа для втузов. Главной особенностью изложения является подчеркивание тесной связи микроскопической структуры вещества с его макроскопическими характеристиками. Эту тесную связь авторы считают главной отличительной чертой современной физики. Книга состоит из пяти частей. В первой части излагаются дополнительные сведения из механики, в том числе вопрос о рассеянии частиц. Во второй части изложены вопросы кинетической теории материи, не требующие привлечения квантовой механики, такие как уравнение состояния газа, явления переноса свойства плазмы, дефекты в кристаллах и др. В третьей части кратко изложены основы квантовой механики. В четвертой части трактуются вопросы атомной физики и физики твердого тела, теория которых существенно базируется на квантовой механике. Это — структура атомов и молекул, вырожденный электронный газ и зонная теория. В пятой части кратко изложены основы физики ядра и элементарных частиц.

Книга является оригинальной как по отбору материала, так и по методике его изложения. В конце каждого раздела имеется несколько хорошо подобранных задач.

Для понимания книги достаточно уметь дифференцировать, интегрировать и иметь элементарные понятия о теории вероятностей, о векторной алгебре и о математическом анализе для функций нескольких переменных.

Рис. 288. Табл. 16. Библ. 20 назв.

2-3-2
64-69

Оглавление

От редактора русского перевода 10
Предисловие 13
Введение 17

Часть первая
КЛАССИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА 23

Глава 1
Векторы и уравнения движения 24

§ 1.1. Векторная алгебра 24
§ 1.2. Векторный анализ 29
§ 1.3. Векторные операторы 30
§ 1.4. Сила и масса 31
§ 1.5. Законы сил 35
Задачи 38

Глава 2
Преобразования Лоренца 41

§ 2.1. Измерение длин и промежутков времени и принцип относительности 42
§ 2.2. Преобразования Галилея 45
§ 2.3. Преобразования Лоренца 48
§ 2.4. Сокращение длины и замедление времени . . . 51
§ 2.5. Относительность расстояний и промежутков времени 52
§ 2.6. Преобразование скорости и релятивистский импульс 56
Задачи 60

Глава 3
Законы сохранения в механике 61

§ 3.1. Сохранение импульса 61
§ 3.2. Работа и кинетическая энергия 62
§ 3.3. Потенциальная энергия 67
§ 3.4. Сохранение энергии 67
§ 3.5. Сохранение момента импульса 69
§ 3.6. Приведенная масса 72
Задачи 76

Глава 4
Гармонический осциллятор 81

§ 4.1. Одномерный осциллятор 81
§ 4.2. Двумерный осциллятор 86
§ 4.3. Затухающее гармоническое движение 87
§ 4.4. Колебания молекул 90
Задачи 91

Глава 5
Силы, обратно пропорциональные квадрату расстояния 94

§ 5.1. Потенциал $1/r$ 95
§ 5.2. Эффективная потенциальная энергия 97
§ 5.3. Замкнутые орбиты 99
§ 5.4. Движение планет 104
§ 5.5. Незамкнутые орбиты 109
§ 5.6. Резерфордовское рассеяние 113
Задачи 115

Глава 6
Столкновения и рассеяние 118

§ 6.1. Упругие столкновения 120
§ 6.2. Неупругие столкновения 124
§ 6.3. Распад нестабильных частиц 127
§ 6.4. Поперечное сечение рассеяния 129
§ 6.5. Кулоновское рассеяние 133
Задачи 136

Часть вторая
КИНЕТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ВЕЩЕСТВА 139

Глава 7
Уравнение состояния газа 141

§ 7.1. Уравнение состояния идеального газа 142
§ 7.2. Межмолекулярные силы 146
§ 7.3. Уравнение Ван-дер-Ваальса 147
Задачи 152

Глава 8
Явления переноса в газах 154

§ 8.1. Средняя длина свободного пробега 154
§ 8.2. Теплопроводность 158
§ 8.3. Силы отталкивания 163
§ 8.4. Вязкость 166
§ 8.5. Диффузия 169
§ 8.6. Явления переноса в газах 171
Задачи 175

Глава 9
Распределение Максвелла — Больцмана 178

§ 9.1. Функции распределения 179
§ 9.2. Распределение Максвелла по скоростям 181
§ 9.3. Вычисление средних значений и понятие температуры 183

§ 9.4. Распределение Максвелла для абсолютной величины скорости 135
§ 9.5. Эффузия 138
§ 9.6. Распределение Больцмана 139
§ 9.7. Барометрическая формула 141
§ 9.8. Теплоемкость многоатомных газов 142
Задачи 145

Глава 10

Слабо ионизованные газы 147

§ 10.1. Ионизация газа, находящегося в термодинамическом равновесии 148
§ 10.2. Диффузионный ток 203
§ 10.3. Проводимость 204
§ 10.4. Газовый разряд 207
§ 10.5. Подвижность 209
Задачи 210

Глава 11

Свойства плазмы 211

§ 11.1. Состояние плазмы 211
§ 11.2. Плазменные колебания 214
§ 11.3. Дебаевская экранировка и дебаевский радиус 216
§ 11.4. Проводимость 221
§ 11.5. Амбиполярная диффузия и экранирующие слои 224
§ 11.6. Плазма в магнитном поле 228
Задачи 233

Глава 12

Уравнение состояния твердых тел 234

§ 12.1. Деформации и напряжения 235
§ 12.2. Модули упругости 237
§ 12.3. Тепловое расширение и уравнение состояния 239
Задачи 241

Глава 13

Строение кристаллов 243

§ 13.1. Кристаллы 243
§ 13.2. Простые кристаллические структуры 246
§ 13.3. Структура элементов 249
§ 13.4. Структура соединений 250
§ 13.5. Плотность кристаллов и межатомные расстояния 252
§ 13.6. Дифракция рентгеновских лучей 255
§ 13.7. Условие Брэгга 257
§ 13.8. Метод Лауэ 259
Задачи 261

Глава 14

Механические и тепловые свойства кристаллов 263

§ 14.1. Межатомные силы 264
§ 14.2. Внутримолекулярные силы 266
§ 14.3. Энергия связи кристалла 268
§ 14.4. Модуль упругости 271

§ 14.5. Тепловые колебания 274
§ 14.6. Теплоемкость 276
§ 14.7. Коэффициент теплового расширения 279
Задачи 280

Глава 15

Дефекты в твердых телах 283

§ 15.1. Типы дефектов 284
§ 15.2. Концентрация дефектов решетки 286
§ 15.3. Диффузия 290
§ 15.4. Ионная проводимость 293
§ 15.5. Пластическая деформация 296
§ 15.6. Дислокации 298
Задачи 300

Часть третья

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА 301

Глава 16

Волновое уравнение 302

§ 16.1. Колеблющаяся струна 303
§ 16.2. Решения волнового уравнения 305
§ 16.3. Граничные условия 307
§ 16.4. Ряды Фурье 310
§ 16.5. Волны в трех измерениях 312
§ 16.6. Звуковые волны 315
Задачи 320

Глава 17

Частицы света 322

§ 17.1. Комптон-эффект 323
§ 17.2. Рождение электронно-позитронных пар 327
§ 17.3. Фотоэффект и поглощение гамма-излучения . . 328
§ 17.4. Фотоэмиссия электронов 333
Задачи 336

Глава 18

Излучение и поглощение света 337

§ 18.1. Спектр и энергетические уровни атома водорода 338
§ 18.2. Атом Бора 340
§ 18.3. Возбуждение и ионизация водородоподобных систем 343
§ 18.4. Излучение черного тела 345
§ 18.5. Энергетические уровни гармонического осциллятора 347
§ 18.6. Теплоемкость твердых тел 350
Задачи 353

Глава 19

Электронные волны 355

§ 19.1. Электронная оптика 355
§ 19.2. Дифракция электронов 357

§ 19.3. Принцип неопределенностей Гейзенберга . . . 360
§ 19.4. Измеримость в квантовой механике 363
Задачи 366

Глава 20

Волновая механика 368

§ 20.1. Уравнение Шредингера 368
§ 20.2. Вероятностная интерпретация $|\psi|^2$ 370
§ 20.3. Физические величины как операторы 372
§ 20.4. Свободная частица 374
§ 20.5. Частица в ящике 376
§ 20.6. Потенциальная яма 378
§ 20.7. Средние значения результатов измерений 382
§ 20.8. Волновая механика в трех измерениях 385
§ 20.9. Постулаты квантовой механики 389
Задачи 390

Часть четвертая

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА МАТЕРИИ 391

Глава 21

Атом водорода 392

§ 21.1. Уравнение Шредингера для атома водорода . . 392
§ 21.2. Волновые функции и энергетические уровни при $l = 0$ 394
§ 21.3. Волновые функции и энергетические уровни при $l > 0$. 400
Задачи 404

Глава 22

Многоэлектронные атомы 405

§ 22.1. Одноэлектронное приближение 405
§ 22.2. Принцип запрета Паули 407
§ 22.3. Спин электрона 410
§ 22.4. Оболочечная структура атомов 412
§ 22.5. Периодическая система 415
§ 22.6. Квантовые числа состояния электрона 417
Задачи 422

Глава 23

Атомные спектры 423

§ 23.1. Спин-орбитальное расщепление 424
§ 23.2. Спектры щелочных металлов 426
§ 23.3. Двухэлектронные спектры 423
§ 23.4. Рентгеновские лучи 431
§ 23.5. Поглощение рентгеновских лучей 433
Задачи 434

Глава 24

Молекулярная связь 436

§ 24.1. Молекулярный ион H_2^+ 437
§ 24.2. Молекула H_2 и гомеополярная связь 440
§ 24.3. Ионная связь, многоатомные молекулы 441

§ 24.4. Возбужденные состояния 443
§ 24.5. Молекулярные спектры 445
Задачи 449

Глава 25

Электронная зонная теория твердых тел 451

§ 25.1. Происхождение электронных энергетических зон 451
§ 25.2. Разделение на металлы и изоляторы 454
§ 25.3. Электронные волновые функции и эффективная масса 456
§ 25.4. Плотность состояний и энергия Ферми 459
§ 25.5. Оптическое поглощение 462
Задачи 465

Глава 26

Электронные свойства твердых тел 467

§ 26.1. Равновесное тепловое распределение электронов 467
§ 26.2. Распределение Ферми — Дирака 471
§ 26.3. Тепловое возбуждение электронов 473
§ 26.4. Электронная теплоемкость 475
§ 26.5. Электронная проводимость 477
§ 26.6. Электро- и теплопроводность 480
§ 26.7. Средний свободный пробег электрона 483
Задачи 486

Часть пятая

ЯДЕРНЫЕ ЧАСТИЦЫ 487

Глава 27

Основные свойства ядер 490

§ 27.1. Составные части ядра 490
§ 27.2. Стабильные ядра 492
§ 27.3. Энергия связи ядра 494
§ 27.4. Размеры ядер 495
§ 27.5. Насыщение ядерных сил 496
§ 27.6. Электрические и магнитные свойства ядер . . 497
Задачи 498

Глава 28

Ядерные силы 499

§ 28.1. Система двух нуклонов 499
§ 28.2. Прямоугольная потенциальная яма 501
§ 28.3. Нейтрон-протонное рассеяние 506
§ 28.4. Проблема ядерных сил 512
Задачи 515

Глава 29

Строение ядер 516

§ 29.1. Капельная модель ядра 517
§ 29.2. Оболочечная модель ядра 522
Задачи 531

Глава 30

Радиоактивный распад и ядерные реакции 532

§ 30.1. Радиоактивность 532
§ 30.2. Гамма-распад 534
§ 30.3. Бета-распад 536
§ 30.4. Альфа-распад 538
§ 30.5. Деление ядер 541
§ 30.6. Слияние ядер 543
§ 30.7. Другие реакции 545
Задачи 547

Глава 31

Элементарные частицы 548

§ 31.1. Открытие частиц 549
§ 31.2. Взаимодействия элементарных частиц 559
§ 31.3. Принципы инвариантности и законы сохранения 560
Задачи 571

ПРИЛОЖЕНИЯ

I. Таблицы 573
II. Единицы и переводные множители 588
III. Физические константы 591
Предметный указатель 592

От редактора русского перевода

За последнее десятилетие возникла новая специальность: инженер-физик. Таких специалистов, понимающих толк в проектировании и технологии и вместе с тем знающих современную физику, становится все больше и больше. В целом ряде втузов имеются специальности и даже факультеты с более глубоким и обширным, чем обычно, циклом физико-математических дисциплин. Нетрудно предвидеть, что число таких физико-технических специальностей и факультетов будет расти. И уже сейчас имеется острая нужда в хорошем учебнике физики повышенного типа для инженерных, химических, геологических и других специальностей с физическим уклоном.

Предлагаемая книга, мне кажется, удачно заполняет имеющийся в этом отношении пробел в нашей учебной литературе. Книга написана с большим педагогическим мастерством. Она легко и с интересом читается. Но эта простота не имеет ничего общего с упрощенностью.

Материал всюду излагается на современном научном уровне. Важнейшим достоинством книги является пронизывающая ее связь макроскопического описания явлений с их микроскопическим, т. е. атомно-молекулярным, механизмом. Глубокое понимание этой связи в каждом конкретном случае особенно важно для многих инженерных специальностей. Для примера достаточно сказать, что полупроводниковый диод невозможно было бы изобрести методом эмпирического подбора комбинаций различных материалов. И только после глубокого изучения структуры электронных квантовомеханических уровней в кристалле теоретикам стало ясно, что такой диод можно сделать из тщательно очищенного германия с небольшими добавками других элементов определенного вида. Таких примеров можно привести много.

Хорошо подобрано содержание книги. В соответствии с прикладной значимостью главная роль в книге отведена физике твердого тела. Тут и структура атомов и молекул, теплоемкость, явления переноса, механические явления, разнообразные дефекты, типы связей в кристаллах, электропроводность, тепловое расширение и целый ряд других вопросов. Но наряду с этим в книге можно найти и основные свойства газов, плазмы, атомных ядер. Для того чтобы не заставлять читателя смотреть по ходу изучения книги в другие учебники, авторы привели некоторые дополнительные сведения из классической механики, а также довольно подробно и просто изложили основы квантовой механики в объеме, необходимом для понимания структуры атомов и молекул, а также квантовых явлений в твердом теле. При рассмотрении каждого вопроса авторы везде, где только можно, производят численные оценки различных коэффициентов и параметров. Это — тоже важное достоинство книги, так как умение производить простые численные оценки необходимо для любого инженера-физика, а научиться этому можно далеко не по каждому учебнику. Для активизации изучения книги в конце каждой главы приведены прекрасно подобранные задачи.

Конечно, не все в книге бесспорно. Так, в ней слишком урезана ядерная физика, прикладное значение которой непрерывно возрастает. Спорным (но я не решаюсь сказать отрицательным!) является решение авторов не вводить в книгу никаких технических применений физики. В книге ни слова не сказано ни о лазере, ни о конструкции ядерного реактора. Авторы также совершенно не касаются вопросов о физических приборах и измерениях, считая, что это дело лабораторных работ. Это решение авторов тоже спорно, так как, помимо всего прочего, далеко не каждый современный физический прибор можно продемонстрировать в физической лаборатории даже первоклассного втуза. С другой стороны, авторы, не рассматривая технические приложения и приборы, сэкономили много места, которым они эффективно воспользовались, изложив многие нужные для инженера физические вопросы.

Авторы предназначают свой учебник для студентов нефизических специальностей, уже прослушавших общий курс физики. Надо, однако, иметь в виду, что как школьные, так и вузовские программы по физике различны в различных странах и различных институтах и колледжах. Соответствие книги Р. Кристи и А. Питти

с нашими учебными программами примерно таково. Непосредственно после средней школы изучать эту книгу трудновато, так как авторы предполагают известными некоторые сведения из механики и электромагнитной теории, которые в средней школе не излагаются. Студенту, прослушавшему стандартный втузовский курс общей физики, многие из излагаемых в книге вопросов будут слегка (но только слегка!) знакомы. Поэтому можно ожидать, что книга Кристи и Питти окажется прекрасным учебным пособием не только для студентов нефизических специальностей с расширенным курсом физики, но и для всех студентов технических вузов и даже физических факультетов университетов. Много ценного найдут в этой книге и преподаватели физики. Молодые специалисты, соприкасающиеся с физикой, могут использовать эту просто и ясно написанную книгу для расширения научного кругозора и подготовки к чтению более сложных монографий и журнальных статей.

Книга переведена Г. Я. Мякишевым. Перевод сделан без изменений и сокращений. Исправлены немногочисленные замеченные опечатки. Добавлены ссылки на учебную и монографическую литературу на русском языке.

Ю. М. Широков

Москва
14. XI 1968 г.

Предисловие

Первоначально настоящая книга предназначалась для двухсеместрового курса современной физики, следующего за стандартным курсом общей физики. С некоторыми сокращениями книга может быть использована и для односеместрового курса. В отношении математической подготовки предполагается лишь хорошее знание дифференциального и интегрального исчисления. Дартмутский курс, для которого была написана книга, совершенствовался в течение последних десяти лет. Он был обязательным для всех физических и инженерных специальностей как один из основных предметов второго курса. Кроме того, он читался на втором курсе для многих химических и некоторых математических и геологических специальностей. На этом курсе базируются все дальнейшие физические курсы.

Настоящая книга, конечно, не первая попытка изложить современную физику в элементарной форме. Общей тенденцией книг такого рода за последнее десятилетие было постепенное повышение уровня сложности в соответствии с прогрессом в изложении курсов общей физики. Целью нашей книги является шаг вперед в ином направлении, уходящем в сторону от чисто описательного, феноменологического подхода. Именно поэтому мы сделали курс двухсеместровым и включили в него в большом объеме ряд фундаментальных вопросов классической механики (ч. I) и кинетической теории (ч. II). Более строгое изложение дает возможность студенту освоить эти области физики глубже, чем по обычному элементарному курсу. (С другой стороны, мы не имеем намерения заменять существующие курсы классической физики, но надеемся, что уровень этих курсов теперь может быть повышен.)

Пожалуй, наиболее примечательной особенностью нашей точки зрения является понимание термина «современная» физика. Обычно в учебниках термин современная относится прежде всего к двум

великим революциям в физике, которые произошли полстолетия назад, а именно к квантовой механике и теории относительности, особенно, когда дело касается атомной и ядерной физики. С другой стороны, в обычной разговорной речи современный означает «сегодняшний», а многие вопросы физики наших дней, в частности физики плазмы и твердого тела, не являются ни релятивистскими, ни квантовыми. Мы считаем, что на самом деле физику наших дней, а также химию (и в значительной мере инженерные науки) более всего отличает выдвижение на первый план *микроскопического* подхода. Поэтому мы выбрали в качестве организующего принципа *структуру вещества*. Нашей целью является понимание наблюдаемых свойств вещества через взаимодействие его микроскопических составных частей. Грубо говоря, первая половина книги является классической, в смысле не квантовой. Разделение на то, что может и что не может быть объяснено в рамках классической механики, мотивируется не консерватизмом, а признанием практической важности классических понятий и способов рассуждений в тех случаях, когда они применимы. К тому же, ограниченность классических представлений в качестве приближений к релятивистской и квантовой теориям в равной мере хорошо освещается как случаями, когда эти представления применимы, так и случаями, когда эта применимость не имеет места.

Наш план состоит в том, чтобы после рассмотрения фундаментальных вопросов классической механики (ч. I) сразу же начать с взаимодействия атомов, не углубляясь в их структуру. В ч. III вводится квантовая механика, после чего в ч. IV и V рассматриваются внутриатомные явления, происходящие на расстояниях порядка размера атома и меньших. Такое расположение материала имеет ряд преимуществ с педагогической точки зрения. В первой половине курса изложение может быть полностью классическим, в то время как внутриатомная структура и структура ядра, рассматриваемые во второй половине, являются существенно квантовыми. Таким образом, изложение квантовой механики с присущими ей концептуальными и математическими трудностями мы откладываем настолько, насколько это возможно. При введении трехмерного уравнения Шредингера неизбежно использование некоторых свойств уравнений в частных производных. В нашем изложении это уравнение вводится после того, как студенты прослушают матема-

тику еще один семестр. По этим же, связанным с математикой, причинам в книге делается больший упор на механику и частицы, за счет относительного пренебрежения электромагнетизмом и полями. Мы отказались от использования методов и представлений квантовой теории поля, поскольку мы не предполагаем у студента соответствующей математической подготовки, в частности знакомства с уравнениями в частных производных.

Задачи, имеющиеся в конце каждой главы, тщательно подобраны с целью развить и закрепить узловые вопросы текста. Особенностью ряда задач является то, что отдельные числовые данные в них намеренно опущены. Предполагается, что студенты будут разыскивать эти данные в справочниках и тем самым получат важные для дальнейшего навыки в нахождении нужной информации *). Другие данные, которые не так просто разыскать (в особенности это относится к ядерной физике и физике элементарных частиц), приведены в таблицах, включенных в текст. Кроме того, в конце каждой главы даны ссылки на небольшое количество других книг, число которых таково, что, как можно надеяться, студент ими воспользуется.

Отличительной чертой книги является упор на теоретическое понимание явлений и на согласие теорий с экспериментально наблюдаемыми результатами. Аппаратуре, с помощью которой реально проводятся эксперименты, почти не уделяется внимания. Мы считаем, что освоение и оценка по достоинству методов и технических средств, используемых в реальных физических экспериментах, являются задачей лабораторных работ.

Для того чтобы изложить материал в более подготовленной аудитории в течение одного семестра, некоторые части курса можно опустить. Для облегчения планировки такого сокращенного изложения укажем, что, хотя в целом нашей целью была логическая стройность и взаимозависимость, все же некоторые ранние главы и параграфы могут быть опущены без нарушения связанности изложения. Эти параграфы, хотя и не обязательно неважные сами по себе, не используются существенным образом в дальнейшем тексте. (Некоторые параграфы, конечно, могут быть уже знакомы

*) Все эти необходимые данные могут быть найдены в Handbook of Chemistry and Physics, «Химия», 1968. *(Прим. ред.)*

аудитории.) По нашему мнению, в первой части допустимы следующие сокращения: гл. 2, §§ 4.2, 4.3, 5.4, 9.5, 9.7, 10.1, 10.4; гл. 11; гл. 12; §§ 13.3, 13.4, 13.8, 14.4, 14.7 и гл. 15.

Мы считаем исключительно важным введение современного микроскопического подхода к явлениям на возможно ранней стадии учебного плана, но так, чтобы изложение не было чисто описательным. Связь с областями, в которых ведутся интенсивные научные исследования, существенна для понимания физики как живой и развивающейся науки. Для будущих физиков такой контакт должен, по возможности, предшествовать окончательному выбору ими кафедры по специальности. Для большинства студентов инженерных и химических специальностей настоящий физический курс является последним. Для них курс дает строгое обоснование материала, на котором зиждется большая часть их будущей работы. Этим студентам мы надеемся дать понять, что́ делает физику столь волнующей для современных физиков.

Мы хотим поблагодарить профессора Петера Ролла из Принстонского университета за внимательное прочтение рукописи и за ряд полезных замечаний.

Роберт В. Кристи, *Агнар Питти*

Ганновер, Нью Хемпшир,
Март 1965

Введение

В современной науке человек описывает захватывающую картину микроскопического мира, населенного молекулами, ядрами, мезонами и тому подобным, которые подчиняются странным законам, не всегда похожим на законы, описывающие привычные события, вроде движения бильярдных шаров или падения камней. Обитатели этого мира электронов проводимости, нуклеиновых кислот и т. д. никогда не будут непосредственно восприниматься органами чувств человека (хотя мы и можем вплотную приблизиться к такому восприятию, если проникнемся ощущением того, что наблюдать что-то в микроскоп означает реально «видеть»). Несмотря на это, почти все статьи, публикуемые сейчас в физических журналах, касаются прямо или косвенно этого микроскопического мира. Даже те отрасли, которые принадлежат прикладным наукам и технике, в конечном счете «объясняются» через понятие типа макромолекул, валентных связей или зонной структуры твердого тела. Основная цель этой книги состоит в том, чтобы ввести вас в этот микроскопический мир.

При этом мы вовсе не будем стараться усиленно убеждать вас, что эти фундаментальные частицы существуют. Хронология открытий и идей, направлявших человечество к введению микроскопических концепций, принадлежит истории науки, а логический анализ связей между этими концепциями и экспериментально наблюдаемыми показаниями приборов принадлежит философии. Эти захватывающие вопросы заслуживают вашего внимания, но они не относятся к самой физике. Поэтому мы не будем уделять уж очень большого внимания исторической и философской аргументации, а примем рабочую точку зрения физика, для которого понятие «электрон» столь же реально, как, скажем, понятие «звезда». Несомненно, что можно видеть испускаемый звездой свет, но звезд нельзя потрогать, и поэтому представление о том, что звезда — это очень горячий и имеющий сложную структуру газ, состоящий из ядер и

электронов, а, скажем, не дыра в небесной тверди, требует весьма изощренного подбора интерпретационных заключений. Но в определенных обстоятельствах можно с несомненностью видеть и свет, испускаемый электроном. Поэтому мы не будем пытаться воспроизводить все детали того, каким образом нынешнее понятие электрона возникло из остроумных моделей, предлагавшихся наделенными воображением физиками для объяснения не согласующихся друг с другом опытных фактов. Вместо этого мы будем стараться изучать свойства частиц, законы, описывающие их движение, и методы, позволяющие получать из общих законов такие выводы, которые можно непосредственно сравнивать с данными экспериментов, проведенных с реальными уже в макроскопическом смысле предметами. (Мы не будем уделять большого внимания экспериментальным методам, с помощью которых все эти наблюдения делаются, но надеемся на то, что некоторое знакомство с ними вы получите при выполнении лабораторных работ.)

Авторитетный тон предыдущего высказывания не предназначен для выкорчевывания из вас здорового скептицизма. Наоборот, склонность к сомнениям и перепроверкам является существенной составной частью каждого ученого и, в несколько ином ракурсе, каждого инженера. Наш подход просто содержит совет о том, что временно, в качестве эвристической программы вам будет гораздо полезнее использовать ваши критические наклонности в направлении поиска ошибок у ваших учителей и у авторов учебников. Скептицизм конструктивный требует очень больших интеллектуальных усилий, существенно бóльших, чем скептицизм при изучении. В конечном счете самые основные идеи в физике не застрахованы от критицизма. С 1900 г. основы физики были изменены в двух далеко идущих отношениях. Влияние создания теории относительности Эйнштейном и формулировки квантовой теории Шредингером и Гейзенбергом распространилось далеко за пределы самой физики и проявилось не только в технике, но даже в философских взглядах человека на себя и на свое отношение к окружающему миру. Тут можно отметить, что такие коренные и глубокие пересмотры основ являются довольно редкими событиями в истории. Будут ли такие события учащаться с общим ускорением развития науки или останутся творениями подлинно редких личностей — вопрос открытый.

Развивая и детализируя общую картину микроскопического строения вещества, мы можем разделить весь материал на две большие группы.

В первую группу входят такие вытекающие из атомного строения газов, жидкостей и твердых тел свойства, для объяснения которых в основном достаточна классическая механика. Атомы и молекулы являются достаточно массивными объектами, так что если исключить случай очень низких температур, то использование новой квантовой механики для описания их движения не является необходимым. (Конечно, квантовую механику можно использовать и здесь: это — более полная теория, и она дает те же ответы, что и классическая механика в тех случаях, когда последняя является применимой; но использование квантовой механики здесь привело бы к большей громоздкости.) Поэтому в ч. I излагаются некоторые методы классической механики. Вероятно, эта часть не содержит каких-либо принципиально новых для вас идей. В ч. II эти методы применяются к описанию свойств вещества, состоящего из скопления большого числа молекул. Здесь уже вводится новый фундаментальный принцип. Статистический принцип Больцмана существен для исследования ансамблей из очень большого числа объектов, когда изучение точного поведения любого единичного объекта является безнадежной задачей. Этот принцип проявляет себя через «температуру» — понятие, не возникающее в механике отдельной частицы и в то же время целиком переносимое в квантовую механику.

Во вторую большую группу вопросов мы относим исследование внутренней структуры самого атома. Здесь уже квантовая механика существенна, поскольку классическая механика обычно дает неправильные и даже бессмысленные ответы. Поэтому в ч. III мы начинаем изучение законов и формализма квантовой теории. В ч. IV эта теория применяется к описанию строения атомов, как изолированных, так и взаимодействующих друг с другом. В ч. V излагается в какой-то мере аналогичная теория строения атомного ядра.

До сих пор мы не касались другой великой революции в физике двадцатого столетия — теории относительности. Изложение этой теории можно разделить на две части. В гл. 1 и 3 мы излагаем механические эффекты релятивистского изменения массы со скоростью,

уделяя особое внимание влиянию эффектов на процессы столкновения частиц. В дальнейшем эти результаты используются там, где оказываются нужными. В гл. 2 мы проводим анализ пересмотра понятий пространства и времени, с необходимостью вытекающего из этой теории, и излагаем соответствующий математический аппарат. Этот материал отражает наиболее глубокие черты теории относительности и содержит основы формализма самой фундаментальной из физических теорий, но в нашем дальнейшем изложении мы всем этим не пользуемся. Объединение специальной теории относительности с квантовой механикой ведет к предсказанию существования антиматерии. Но наше изучение частиц и античастиц будет ограничено феноменологическим уровнем. Мы не будем излагать релятивистскую квантовую механику из-за ее математической сложности. Обычно термин «классический» чаще употребляется в смысле «нерелятивистский», а не «неквантовый». Во избежание недоразумений, мы используем в книге только второе из этих значений. Таким образом, любое описание является, с одной стороны, либо релятивистским, либо нерелятивистским, а с другой стороны, либо квантовым, либо классическим.

В отношении математической подготовки мы предполагаем хорошее владение дифференцированием и интегрированием функций одной переменной, а также некоторое знакомство с теорией вероятности, векторной алгеброй и анализом для функций нескольких переменных. Во многих случаях будут выводиться и решаться дифференциальные уравнения, но мы не предполагаем у вас больших предварительных познаний в этой области. Одна из целей этой книги — предоставить вам возможность оттренировать приобретенные вами математические знания, почувствовать их полезность и действенность для приложений и даже расширить ваше знание математики, т. е., коротко говоря, научить вас производить сложные, строгие и точные выкладки.

Однако другая и, быть может, более важная цель состоит в том, чтобы научить вас производить простые, грубые, приближенные оценки. Эти две цели выглядят противоречивыми, но на самом деле они дополняют друг друга: если вы совершенно не представляете, чего следует ожидать в какой-то данной физической ситуации, то обычно полезно сначала попытаться сделать очень грубую оценку порядка величины эффекта. Этот шаг в действительности даст вам

гораздо бо́льшую информацию, чем последовательные, очень точные, но и очень трудоемкие вычисления. Например, если вы совершенно не представляете себе, будет ли некая энергетическая установка давать мощность микроватт или мегаватт, то колоссальную информацию вам даст оценка того, что эта мощность будет порядка 100 *вт* (т. е. не 10 и не 1000). Для некоторых целей может оказаться интересным уточнить, что эта мощность равна 60 *вт*, а не 75, например, но это различие очень слабое, если его сравнить с различием между 100 *вт* и 100 *Мвт*. Получение реальных (но не обязательно точных) значений различных величин является одним из краеугольных камней физики.

Мы не можем закончить наше введение, не затронув довольно тривиального вопроса о единицах, в которых выражаются различные величины. Выбор системы единиц *) в большинстве случаев является вопросом удобства, хотя имеются любители строгого подхода к этой проблеме. Для атомной и электронной физики наиболее удобна система СГС (гауссова), которой мы и будем обычно пользоваться. Для расчета цепей переменного тока более удобна система МКСА, так как в ней единицы для электрических величин совпадают с теми, которые используются в технике. Поэтому системой МКСА предпочитают пользоваться инженеры. По этим же соображениям в механических вычислениях обычно пользуются английскими мерами **). Уравнения механики имеют один и тот же вид, независимо от того, в каких единицах они записаны, а электромагнитные уравнения принято записывать с несколько различающимися константами, в зависимости от того, используется система СГС или МКСА. Например, закон Кулона для электрической силы в единицах СГС имеет вид $F = q_1 q_2 / r^2$, а в единицах МКСА $F = q_1 q_2 / (4\pi\varepsilon_0 r^2)$. Для физиков это различие является основным доводом в пользу системы СГС: именно, при использовании этой системы во многие формулы входит скорость света c, являющаяся интуитивно осмысленной физической константой, в противоположность менее естественным константам ε_0 и μ_0 системы МКСА. По окончании вычислений в системе СГС электрические единицы приходится переводить в вольты и амперы.

*) С 1 января 1963 г. в СССР принята в качестве предпочтительной Международная система единиц (СИ). В приложении к книге даны переводные множители, связывающие системы СГС и МКСА с СИ. (*Прим. ред.*)

**) В Англии. (*Прим. ред.*)

С другой стороны, в системе МКСА магнитные единицы по окончании вычислений приходится переводить в обычно употребляемые гауссы и эрстеды. В любом случае эти переводы из одной системы в другую причиняют не больше беспокойства, чем перевод дюймов в сантиметры. Переводные множители между разными системами приведены в приложении II. Имеется и большое количество других часто используемых единиц — ангстрем, световой год, калория, электрон-вольт и т. д., которые являются внесистемными, но продолжают использоваться из-за их удобства. Мы надеемся, что вы приобретете достаточную гибкость в использовании единиц, станете, так сказать, полиглотом, чтобы иметь возможность свободно общаться со специалистами из различных отраслей науки и техники.

Часть первая

Классическая механика

Наша цель состоит в том, чтобы ознакомить вас с микроскопической структурой материи. Изложение будет базироваться на том, что вы уже изучали в курсе общей физики, особенно в разделе «Механика». Действительно, мы увидим, что изучение атомного строения материи — газов, жидкостей и твердых тел — в значительной степени может быть проведено в рамках классической механики частиц. Когда же мы перейдем к изучению внутренней структуры самого атома, т. е. электронной структуры материи, то понадобится новая, квантовая механика. Но даже квантовая теория существенно опирается на представления классической механики.

Таким образом, знание классической механики должно предшествовать изучению структуры вещества. Курс общей физики не всегда является достаточным фундаментом для вопросов, которые будут рассматриваться здесь. Поэтому содержанием первой части книги являются те вопросы классической (противопоставляемой квантовой) механики, которые непосредственно относятся к нашему проникновению в структуру материи.

Глава 1

Векторы и уравнения движения

Координата, скорость, ускорение и сила являются хорошо знакомыми понятиями. Однако перед тем как переходить к каким бы то ни было новым физическим понятиям, будет полезно пересмотреть определения этих величин с более точной и элегантной математической точки зрения. В соответствии с этим мы введем в этой главе определения векторов и некоторых математических операций с ними, после чего перечислим наиболее важные виды сил (как векторов).

§ 1.1. Векторная алгебра

Поскольку наш мир является трехмерным, то для того чтобы описывать адекватно события, происходящие в трехмерном пространстве, мы должны ввести подходящие математические величины. Если мы выберем некоторую декартову систему координат, то точка (например, точка, где находится какая-то частица) характеризуется *тройкой чисел* (x, y, z), где x, y и z — координаты частицы (рис. 1.1). Сокращенно координаты точки представляются вектором

$$\mathbf{r} \equiv (x, y, z).$$

Вектор $\mathbf{r}$ называется *радиусом-вектором* и представляет собой упорядоченную тройку чисел, которые являются тремя координатами частицы. В дальнейшем мы увидим, что могут быть и другие векторы, так что не каждый вектор характеризует положение частицы, но все векторы являются упорядоченными тройками чисел. Следовательно, вектор является математическим понятием, существенно отличающимся от единичного числа. Для того чтобы подчеркнуть различие между вектором и числом, число называют *скаляром*. В тексте векторы будут обозначаться прямым жирным (**r**) шрифтом, а скаляры — *светлым курсивом* (r). Как мы вскоре увидим, только что приведенное определение вектора совпадает с более элементарным представлением этой величины в виде некоторой «стрелки». Однако общую математическую теорию гораздо удобнее развивать, определяя вектор как тройку чисел.

Наше определение радиуса-вектора выглядит зависящим от произвола в выборе координатной системы. На самом деле, однако, это определение можно сделать *инвариантным* *) (т. е. не зависящим от какой бы то ни было координатной системы), указав, как преобразуются координаты при переходе от одной координатной системы к другой. Нам нет надобности рассматривать эту проблему, несмотря на ее фундаментальность. Стоит, однако, отметить, что не каждая упорядоченная тройка чисел образует вектор. Например, давление, объем и температура некоторой массы газа (P, V, T) образуют тройку чисел, которая не является вектором, поскольку в отличие от координат частиц числа P, V и T не зависят от выбора координатной системы, т. е. не меняются при преобразовании координат. У нас этой трудности не возникнет, поскольку все векторы, которые мы будем вводить, могут быть непосредственно определены через радиус-вектор частицы, так что этот радиус-вектор может рассматриваться как эталон вектора. Сначала мы опишем формально некоторые свойства векторов и операций над ними, а затем убедимся, что эти свойства и операции имеют полезную физическую интерпретацию.

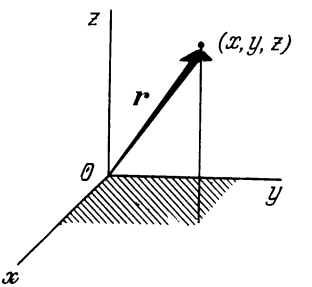


Рис. 1.1.

Длина вектора $\mathbf{r}$ определяется как

$$|\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

и часто записывается в виде $|\mathbf{r}| = r$ (та же буква, но светлая и курсивом). Длина вектора не является вектором, это обычное число — скаляр. Геометрически вектор может быть представлен стрелкой из начала координат к рассматриваемой точке, так что длина вектора есть не что иное, как длина линии от начала координат до этой точки (рис. 1.1). Эта длина называется *модулем* вектора.

Произведение скаляра a и вектора $\mathbf{r}$ определяется как другой вектор:

$$a\mathbf{r} \equiv (ax, ay, az).$$

Геометрически этот вектор можно представлять себе как стрелку, направленную в ту же сторону, что и $\mathbf{r}$, но с длиной, в a раз большей, т. е. $a\mathbf{r}$ также является вектором.

Сумма двух векторов также является вектором, определяемым соотношением

$$\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 \equiv (x_1 + x_2, y_1 + y_2, z_1 + z_2).$$

*) Более точно *ковариантным*. (*Прим. ред.*)

Геометрически сумма векторов $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ является диагональю параллелограмма со сторонами $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ или, что то же самое, третьей стороной треугольника, образованного векторами $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, последовательно приставленными друг к другу (рис. 1.2, *а*).

Эти правила умножения на скаляр и сложения определяют *векторную алгебру*. Векторная алгебра может рассматриваться как абстрактная математическая схема, о которой мы имеем некоторое конкретное представление, или просто как сокращенное

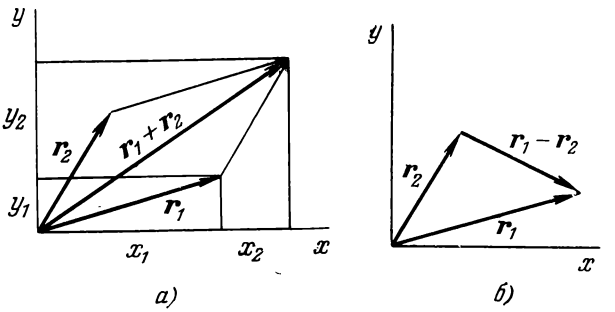


Рис. 1.2.

обозначение для только что рассмотренных геометрических связей. Мы здесь не будем подчеркивать этой математической интерпретации, а лишь отметим, что, согласно приведенным определениям, сложение является ассоциативным и коммутативным, а умножение на скаляр — дистрибутивным. Например,

$$\mathbf{r}_1 + (\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3) = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) + \mathbf{r}_3,$$
$$\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_1,$$
$$a(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) = a\mathbf{r}_1 + a\mathbf{r}_2,$$
$$(a_1 + a_2)\mathbf{r} = a_1\mathbf{r} + a_2\mathbf{r}.$$

Вычитание двух векторов можно определить через сложение (рис. 1.2, *б*):

$$\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_3, \text{ если и только если } \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3.$$

Следовательно,

$$\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = (x_1 - x_2,\ y_1 - y_2,\ z_1 - z_2).$$

Эффективность операции сложения становится очевидной, если $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ трактовать как координаты двух различных частиц; тогда $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ является вектором, описывающим их относительное расстояние. Или же, если $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ рассматривать как последовательные координаты одной и той же частицы, то $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ представляет со-

бой *смещение* частицы из одного положения в другое. Полезность умножения на скаляр будет пояснена чуть ниже.

Другой полезной операцией является *скалярное произведение* двух векторов:

$$\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2 \equiv x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2.$$

Скалярное произведение коммутативно, т. е. $\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_2\mathbf{r}_1$. Оно является скаляром (числом) и представляет собой функцию (т. е. зависит) от двух векторов $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$. Скалярное произведение есть *скалярная функция от двух векторов*. Можно показать геометрически, что скалярное произведение равно

$$\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2 = r_1r_2\cos\theta,$$

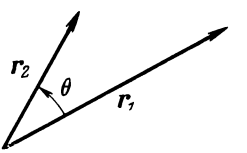


Рис. 1.3.

где θ — угол между векторами $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ (рис. 1.3). Заметим, что длина вектора является квадратным корнем из скалярного произведения этого вектора на самого себя: $r = \sqrt{\mathbf{r}\mathbf{r}}$.

В физике находит применение также и другого типа произведение двух векторов, а именно *векторное произведение*:

$$[\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2] \equiv (y_1z_2 - z_1y_2,\ z_1x_2 - x_1z_2,\ x_1y_2 - y_1x_2).$$

Это произведение некоммутативно. Действительно, $[\mathbf{r}_2\mathbf{r}_1] = -[\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2]$, так что это произведение иногда называется *антикоммутативным*. Векторное произведение является *векторной функцией от двух векторов*, поскольку каждой паре векторов $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ здесь сопоставляется новый вектор $[\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2]$. Можно показать, что векторное произведение может быть представлено также в форме

$$|\,[\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2]\,| = r_1r_2\sin\theta$$

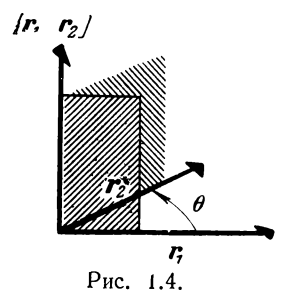


Рис. 1.4.

с указанием, что вектор $[\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2]$ направлен перпендикулярно $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, причем так, что $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ и $[\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2]$ образуют правовинтовую тройку (рис. 1.4). Заметим, что векторное произведение двух параллельных векторов равно нулю.

При оперировании с векторами оказывается особенно удобным представлять все векторы как линейные комбинации трех определенным образом выбранных векторов, называемых *базисными* (или *ортами*). Эти три базисных вектора направлены вдоль соответствующих координатных осей:

$$\mathbf{e}_x \equiv (1,\ 0,\ 0),\ \mathbf{e}_y \equiv (0,\ 1,\ 0),\ \mathbf{e}_z \equiv (0,\ 0,\ 1).$$

Тогда с помощью только что определенных правил сложения векторов и умножения вектора на скаляр легко получить, что

$$\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z.$$

Стоящие перед базисными векторами скалярные множители x, y и z называются *компонентами вектора* $\mathbf{r}$. Сами базисные векторы являются *единичными*, поскольку их длины равны 1:

$$\mathbf{e}_x\mathbf{e}_x = \mathbf{e}_y\mathbf{e}_y = \mathbf{e}_z\mathbf{e}_z = 1. \tag{1.1}$$

Кроме того, базисные векторы взаимно перпендикулярны или, что то же, *ортогональны*:

$$\mathbf{e}_x\mathbf{e}_y = \mathbf{e}_y\mathbf{e}_z = \mathbf{e}_z\mathbf{e}_x = 0. \tag{1.2}$$

Единичные ортогональные векторы называются *ортонормированными*. Пользуясь правилом векторного умножения, нетрудно получить и другое полезное соотношение между ортонормированными базисными векторами:

$$[\mathbf{e}_x\mathbf{e}_y] = \mathbf{e}_z, \quad [\mathbf{e}_y\mathbf{e}_z] = \mathbf{e}_x, \quad [\mathbf{e}_z\mathbf{e}_x] = \mathbf{e}_y. \tag{1.3}$$

Поэтому, когда нам понадобится отнести векторы к конкретной координатной системе, мы всегда будем представлять их линейной комбинацией базисных векторов, а не тройкой чисел. Действительно, если запомнить уравнения (1.1), (1.2) и (1.3), выражающие соотношения между базисными векторами, то уже не обязательно помнить определение векторных операций через тройки чисел. Все вычисления могут быть проделаны с помощью ассоциативных и коммутативных соотношений для сложения, дистрибутивного закона для умножения вектора на скаляр и соотношения коммутативности для двух типов произведения векторов.

Например, если

$$\mathbf{r}_1 = x_1\mathbf{e}_x + y_1\mathbf{e}_y + z_1\mathbf{e}_z, \quad \mathbf{r}_2 = x_2\mathbf{e}_x + y_2\mathbf{e}_y + z_2\mathbf{e}_z,$$

то

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2 = (x_1\mathbf{e}_x + y_1\mathbf{e}_y + z_1\mathbf{e}_z)\,(x_2\mathbf{e}_x + y_2\mathbf{e}_y + z_2\mathbf{e}_z) = \\ = x_1x_2\mathbf{e}_x\mathbf{e}_x + x_1y_2\mathbf{e}_x\mathbf{e}_y + x_1z_2\mathbf{e}_x\mathbf{e}_z + \\ + y_1x_2\mathbf{e}_y\mathbf{e}_x + y_1y_2\mathbf{e}_y\mathbf{e}_y + y_1z_2\mathbf{e}_y\mathbf{e}_z + \\ + z_1x_2\mathbf{e}_z\mathbf{e}_x + z_1y_2\mathbf{e}_z\mathbf{e}_y + z_1z_2\mathbf{e}_z\mathbf{e}_z = \\ = x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2.\end{aligned}$$

Заметим также, что два вектора равны тогда и только тогда, когда равны их компоненты.

§ 1.2. Векторный анализ

Теперь мы введем новые векторные функции и перейдем к векторному анализу. Эти новые векторные функции также являются не чем иным, как сокращенными обозначениями для выражений, которые могут быть записаны обычным путем. Допустим, что координаты частицы являются функциями скалярной величины — времени t, т. е. что частица движется:

$$x = x(t), \quad y = y(t), \quad z = z(t).$$

Тогда положение частицы является *векторной функцией от скаляра*:

$$\mathbf{r}(t) = x(t)\,\mathbf{e}_x + y(t)\,\mathbf{e}_y + z(t)\,\mathbf{e}_z.$$

Определим теперь *производную* $\mathbf{r}$ по t (рис. 1.5) соотношением

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} \equiv \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\mathbf{r}(t+\Delta t) - \mathbf{r}(t)}{\Delta t} = \frac{dx}{dt}\mathbf{e}_x + \frac{dy}{dt}\mathbf{e}_y + \frac{dz}{dt}\mathbf{e}_z.$$

Предполагается, что наша координатная система фиксирована, так что единичные векторы $\mathbf{e}$ не зависят от времени. Для обозначения производной по времени часто используется обозначение, идущее от Исаака Ньютона:

$$d\mathbf{r}/dt = \dot{\mathbf{r}}, \quad dx/dt = \dot{x} \text{ и т. д.}$$

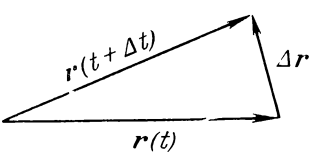


Рис. 1.5.

Производная по времени от радиуса-вектора $\mathbf{r}$ представляет собой новый вектор, называемый *скоростью*. Компонентами скорости являются производные по времени от трех координат:

$$\mathbf{v} \equiv \dot{\mathbf{r}}, \quad v_x = \dot{x} \text{ и т. д.}$$

Скорость является векторной функцией времени, а ее производная по времени представляет собой новый вектор, называемый *ускорением*:

$$\mathbf{a} \equiv \dot{\mathbf{v}}, \text{ так что } \mathbf{a} = \ddot{\mathbf{r}} = d^2\mathbf{r}/dt^2.$$

Эти определения дают геометрическое описание движения в трехмерном пространстве или, что то же, его *кинематику*.

Теперь, после построения аппарата, необходимого для описания движения, мы можем приступить к введению физики, т. е. к *динамике*. Для этого мы определим силы и другие физические величины через уже определенные выше радиус-вектор и векторы скорости и ускорения.

§ 1.3. Векторные операторы

Прежде чем закончить изложение формальных операций с векторными функциями, мы сделаем небольшое отступление, для того чтобы рассмотреть производные не только по времени, но и по пространственным координатам, поскольку они также понадобятся нам в дальнейшем. Рассмотрим функцию $f = f(x, y, z)$. Эту функцию можно трактовать как *скалярную функцию от вектора* $f = f(\mathbf{r})$, поскольку $\mathbf{r}$ определяется численными значениями величин x, y и z, через которые в свою очередь определяется численное значение функции f. Простейшим примером является длина вектора $\mathbf{r}$:

$$f(\mathbf{r}) = |\mathbf{r}| \quad \text{или} \quad f(x, y, z) = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}.$$

Так как $f(x, y, z)$ является функцией x, ее можно дифференцировать по x, считая y и z константами. Такого рода производная называется *частной производной по* x и обозначается через $\partial f/\partial x$. В приведенном примере

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{x}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}}.$$

Аналогичным образом определяются и вычисляются частные производные по y и z. Далее нам придется воспользоваться величиной

$$\frac{\partial f}{\partial x}\mathbf{e}_x + \frac{\partial f}{\partial y}\mathbf{e}_y + \frac{\partial f}{\partial z}\mathbf{e}_z.$$

Эта величина является *векторной функцией от радиуса-вектора*. Ее компонентами являются все три возможные частные производные исходной скалярной функции f.

Поскольку такого рода векторные функции часто встречаются в физике, удобно ввести оператор ∇ (читается «набла»), переводящий скалярную функцию f в векторную функцию ∇f:

$$\nabla f \equiv \frac{\partial f}{\partial x}\mathbf{e}_x + \frac{\partial f}{\partial y}\mathbf{e}_y + \frac{\partial f}{\partial z}\mathbf{e}_z. \tag{1.4}$$

Функция ∇f называется *градиентом* f. Оператор ∇ является *векторным дифференциальным оператором*, ибо он преобразует исходную скалярную функцию в вектор и в то же время дифференцирует ее. Градиент f обладает интересными геометрическими свойствами, которые ответственны за термин «градиент», но обсуждение этих свойств нам придется пока отложить. Мы можем, однако, отметить, что

$$\nabla f d\mathbf{r} = \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy + \frac{\partial f}{\partial z}dz.$$

Это выражение называется полным дифференциалом $f(x, y, z)$:

$$df \equiv \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy + \frac{\partial f}{\partial z} dz.$$

Дифференциал df приближенно представляет собой приращение f, когда x, y и z получают одновременно приращения dx, dy и dz соответственно.

Оператор набла достаточно похож на вектор, чтобы подсказать введение двух других операторов, получающихся из него по правилам скалярного и векторного произведений векторов. Если

$$\mathbf{f} = f_x \mathbf{e}_x + f_y \mathbf{e}_y + f_z \mathbf{e}_z$$

является *векторной функцией радиуса-вектора* $\mathbf{r}$, так что

$$f_x = f_x(x, y, z), \quad f_y = f_y(x, y, z), \quad f_z = f_z(x, y, z),$$

то мы можем определить величины $\nabla \mathbf{f}$ и $[\nabla \mathbf{f}]$. Представив оператор ∇ в виде

$$\nabla \equiv \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

и распространив на оператор ∇ правила умножения векторов, мы придем к определениям:

$$\nabla \mathbf{f} = \frac{\partial f_x}{\partial x} + \frac{\partial f_y}{\partial y} + \frac{\partial f_z}{\partial z},$$

$$[\nabla \mathbf{f}] = \left(\frac{\partial f_z}{\partial y} - \frac{\partial f_y}{\partial z}\right)\mathbf{e}_x + \left(\frac{\partial f_x}{\partial z} - \frac{\partial f_z}{\partial x}\right)\mathbf{e}_y + \left(\frac{\partial f_y}{\partial x} - \frac{\partial f_x}{\partial y}\right)\mathbf{e}_z. \quad (1.5)$$

Первая из этих величин называется *дивергенцией* $\mathbf{f}$, а вторая — *ротором* $\mathbf{f}$ *). Хотя эти величины исключительно важны для описания течения жидкости и поведения электромагнитных полей, мы будем редко пользоваться ими в этой книге.

§ 1.4. Сила и масса

Для того чтобы придать чисто геометрическому описанию движения физическое содержание, введем новое фундаментальное понятие — «силу». После этого мы приведем несколько общих законов, касающихся некоторых определенных сил. На этой простой основе мы будем в состоянии развить теорию необыкновенно большого количества явлений, хотя в дальнейшем мы увидим, что для понимания некоторых аспектов микроскопической структуры вещества необходимы видоизменения и добавления.

*) В литературе векторные дифференциальные операции градиент, дивергенция и ротор часто означают соответственно через $\operatorname{grad} f$, $\operatorname{div} \mathbf{f}$, $\operatorname{rot} \mathbf{f}$. (*Прим. ред.*)

Прежде чем определять силу, представим себе, что мы уже определили *массу*. Под массой мы будем понимать массу покоящегося или очень медленно движущегося тела. Опуская множество интересных философских проблем, мы можем с достаточной (на самом деле полной) строгостью сказать, что масса есть то, что измеряется на рычажных весах. В процессе логического развития физики различные понятия определяются точно через понятия, введенные раньше. В этой логической схеме можно вернуться к исходной точке, где может быть перечислено несколько понятий, уже не сводимых к другим (поскольку схема является конечной и не циклической). Такие первичные понятия, как «длина», «время» и «масса», могут быть введены посредством *операционного определения*, подобного только что указанному для «массы». В операционном определении точно указывается, каким образом данная величина измеряется. В нашем случае рычажные весы дают для массы тела только одно число, и «масса» является скаляром.

Для того чтобы прийти к определению силы, мы дадим еще определение *импульса*. Импульс $\mathbf{p}$ медленно движущейся частицы массы m определяется соотношением

$$\mathbf{p} \equiv m\mathbf{v}. \tag{1.6}$$

По определению импульс является вектором, так как он равен скаляру, умноженному на вектор. Таким образом, импульс частицы просто пропорционален ее скорости. Однако, как мы увидим в гл. 3 и 6, в ряде случаев он оказывается полезной величиной. Теперь мы можем определить *силу*, действующую на частицу, как производную по времени от ее импульса:

$$\mathbf{F} \equiv d\mathbf{p}/dt. \tag{1.7}$$

Сила также является вектором по определению, так как она представляет собой производную от вектора по скаляру. Если масса m не зависит от времени (как это имеет место в большинстве обычных случаев), то

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d(m\mathbf{v})}{dt} = m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = m\mathbf{a},$$

так что уравнение (1.7) сводится к более обычной форме:

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}. \tag{1.8}$$

Согласно уравнению (1.7) или (1.8) вектор силы, действующей на частицу, в любой момент времени может быть измерен по кинематическому поведению частицы (ее ускорению) при условии, что известна ее масса. Это определение силы называется также *вторым законом Ньютона*. Почему же это простое определение рассматривается как одно из глубочайших прозрений и величайших достижений человека? Ответ состоит в том, что так введенное опреде-

ление силы является исключительно действенным, поскольку мы увидим, что при таком определении силы, действующие на частицу, в любой конкретной ситуации могут быть очень просто описаны. При каком-либо другом определении силы мы могли бы получить, что сила, действующая на частицу, зависит от времени дня, погоды, настроения наблюдателя и т. д. А с таким определением мы можем абстрагироваться от всех подобных «внешних» факторов и записывать требуемую силу, если нам известно несколько простых фактов относительно физического окружения частицы. Мы приведем несколько примеров в § 1.5, а в последующих главах изучим некоторые из них более детально.

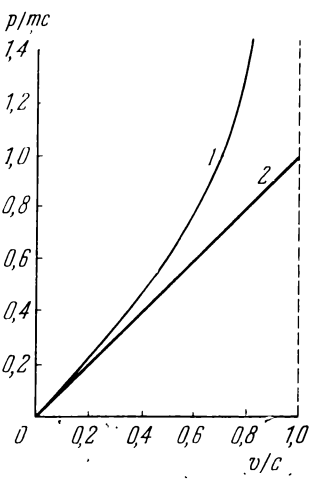


Рис. 1.6.

Первая форма (1.7) закона Ньютона является более фундаментальной, чем форма (1.8), так как уравнение (1.7) справедливо, даже когда масса m не является постоянной. Примером является реактивный полет *ракеты*, масса которой непрерывно уменьшается по мере выгорания топлива. Еще более ярким примером превосходства формулировки $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt$, постулированной уравнением (1.7), примером, который не мог быть предусмотрен Ньютоном, является движение какой-либо частицы с очень большой скоростью. Под словом «большая» здесь подразумевается скорость, сравнимая со скоростью света c. По причинам, которые будут объяснены ниже, такой случай называется *релятивистским*. В релятивистском случае соотношение

$$\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt \tag{1.7}$$

остается справедливым, но из экспериментальных соображений оказывается необходимым определить релятивистский импульс посредством соотношения

$$\mathbf{p} \equiv \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \tag{1.9}$$

(рис. 1.6, кривая *1*) вместо уравнения (1.6) (кривая *2*). Даваемая же уравнением (1.8) зависимость $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, оказывается теперь совершенно неправильной, так как знаменатель выражения (1.9) должен наравне с $\mathbf{v}$ участвовать в дифференцировании по времени. Действительно, векторы $\mathbf{F}$ и $\mathbf{a}$ в общем случае даже направлены по-разному.

Стоит пояснить более тщательно, что мы подразумеваем, говоря, что релятивистский импульс из *экспериментальных соображений* надо определять уравнением (1.9), а не (1.6). Мы не предписывали никакого операционного метода для прямого измерения импульса частицы, имеющей массу m и скорость $\mathbf{v}$. В действительности здесь подразумевается, что если принять определение (1.9) и (1.7), то теоретические вычисления будут согласовываться с экспериментальными результатами. При этом, в частности, можно использовать одни и те же законы сил (которые будут описаны в § 1.5) независимо от того, с какой скоростью, большой или малой, движется частица, на которую действует сила. Так что простое выражение данной силы через физическое окружение будет оставаться справедливым, независимо от того, какой скоростью обладает частица, движущаяся под действием этой силы. С другой стороны, можно сохранить и определение силы (1.8) и модифицировать эмпирический закон действия сил, сделав их зависящими от скорости частицы. Однако такой подход приводит к гораздо более громоздкой теории. Наш подход, что еще более важно, естественным образом согласуется с теорией относительности Эйнштейна, приводящей, как это будет описано в гл. 2, к фундаментальному пересмотру понятий пространства и времени. Именно этой связью обусловлен термин «релятивистский».

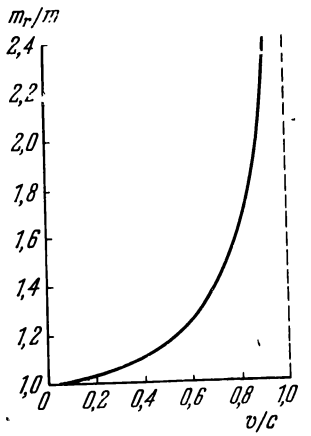


Рис. 1.7.

Формально можно в несколько большей мере спасти нерелятивистскую теорию, определив «*релятивистскую массу*» m_r соотношением

$$m_r = \frac{m}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \tag{1.10}$$

(рис. 1.7). Релятивистская масса зависит от абсолютной величины скорости v (точнее от ее отношения к скорости света c) таким образом, что мы можем записать правильное выражение для релятивистского импульса

$$\mathbf{p} = m_r\mathbf{v} \tag{1.11}$$

в форме, аналогичной (1.6). Определение (1.11) имеет обманчивое сходство с (1.6); на самом деле релятивистский импульс является более сложной функцией скорости для частиц, движущихся с высокими скоростями (рис. 1.6). Заметим, что релятивистская масса

m_r сводится к ранее определенной массе m, когда $v = 0$. В противоположность релятивистской массе масса m называется *массой покоя* частицы. Масса покоя представляет собой то, что может быть измерено на рычажных весах и является инвариантным свойством частицы. Когда физик говорит о «массе», он почти всегда подразумевает массу покоя, что мы и будем делать в дальнейшем, если не будет оговорено противное. Так как

$$c = 3 \cdot 10^{10} \text{ см/сек} = 3 \cdot 10^{5} \text{ км/сек},$$

то m_r незначительно отличается от m даже при скоростях, которые обычно рассматриваются как высокие. Вероятно наибольшая скорость, когда-либо приданная объекту, сделанному человеком, есть скорость запуска межпланетной ракеты. Но и в этом случае v^2/c^2 имеет порядок лишь 10^{-9}. С другой стороны, когда v приближается вплотную к c, то m_r стремится к бесконечности (рис. 1.7) и поправка к массе покоя становится очень важной. Такие скорости обычно встречаются в случаях, когда частицы вроде электронов, протонов и т. д. ускоряются до высоких энергий.

§ 1.5. Законы сил

Мы теперь рассмотрим задачу написания выражения для силы **F**, входящей в уравнение (1.7), в любой конкретной физической ситуации. После того как это будет сделано, нахождение результирующего движения частицы станет чисто математической задачей.

Наиболее фундаментальные законы сил очень просты. Например, *гравитационная сила* может быть записана в векторной форме как

$$\mathbf{F} = -Gm'm\,\mathbf{e}_r/r^2, \qquad (1.12)$$

где $\mathbf{e}_r = \mathbf{r}/r$ есть *единичный вектор, направленный по* $\mathbf{r}$ (рис. 1.8). Вектор $\mathbf{r}$ является радиусом-вектором частицы массы m, на которую действует сила **F**. Начало отсчета выбрано в точке, где находится притягивающая частица массы m'; как правило, мы будем рассматривать эту частицу фиксированной в пространстве. (Условие того, что это является хорошим приближением, имеет вид $m' \gg m$.) Величина *гравитационной постоянной* G равна

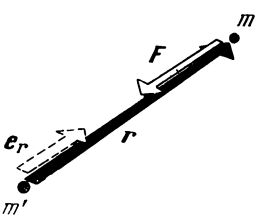


Рис. 1.8.

$$G = 6{,}67 \cdot 10^{-8} \text{ дн} \cdot \text{см}^2/\text{г}^2 = 6{,}67 \cdot 10^{-11} \text{н} \cdot \text{м}^2/\text{кг}^2.$$

Приведенное выше выражение описывает силу, всегда направленную к началу отсчета и пропорциональную $1/r^2$. Для каждой

точки пространства выражение (1.12) задает силу, которая действовала бы на частицу массы m в этой точке, если бы частица оказалась здесь, независимо от того, имеется ли она здесь на самом деле. Такое выражение представляет собой нечто большее, чем просто отдельный вектор силы. Оно называется *силовым полем*. Силовое поле является примером *векторной функции от вектора*. Векторами здесь являются как функция, так и ее аргумент, что мы можем записать в виде

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{r}).$$

Записав эту векторную функцию полностью в декартовых компонентах, мы увидим, насколько полезно сокращение за счет векторных обозначений:

$$\begin{aligned} F_x(x, y, z) &= -Gm'mx/(x^2+y^2+z^2)^{3/2}, \\ F_y(x, y, z) &= -Gm'my/(x^2+y^2+z^2)^{3/2}, \\ F_z(x, y, z) &= -Gm'mz/(x^2+y^2+z^2)^{3/2}. \end{aligned} \tag{1.12'}$$

Кулоновская сила имеет точно такую же функциональную зависимость, как и сила тяготения. Иным является лишь коэффициент пропорциональности. Эта сила имеет вид

$$\mathbf{F} = q'q\mathbf{e}_r/r^2, \tag{1.13}$$

где q' и q — заряды взаимодействующих частиц. Эта сила может быть направлена как к началу координат, так и от него, в зависимости от того, отличаются или совпадают знаки q' и q. (В системе МКСА надо добавить коэффициент пропорциональности $1/4\pi\varepsilon_0$.)

Существует также *магнитная сила*, действующая на заряженную частицу:

$$\mathbf{F} = q\left[\frac{\mathbf{v}}{c}\mathbf{B}\right], \tag{1.14}$$

где через c обозначена скорость света, через $[\mathbf{vB}]$ обозначен вектор, величина которого равна $vB\sin\theta$, а θ — угол между скоростью $\mathbf{v}$ и магнитным полем $\mathbf{B}$. Сила $\mathbf{F}$ перпендикулярна векторам $\mathbf{v}$ и $\mathbf{B}$ и образует с ними правовинтовую тройку (см. рис. 1.4). Эта сила отличается от двух предыдущих тем, что она зависит не только от координаты частицы, но и от ее скорости. С зависящими от скорости силами не так просто обращаться, но магнитная сила не столь уж сложна, поскольку она всегда перпендикулярна скорости и тем самым не совершает никакой работы (см. ниже гл. 3). Фактически, согласно теории относительности, магнитная сила представляет собой другое проявление кулоновской силы для случая, когда частица движется. Именно поэтому в выражение для силы

входит отношение v/c *). (В системе МКСА c в выражение силы не входит.)

Связь между магнитной силой и кулоновской становится более ясной, если в уравнение (1.13) ввести электрическое поле $\mathbf{E}$, являющееся аналогом магнитного поля $\mathbf{B}$. Введя обозначение

$$\mathbf{E} = q'\mathbf{e}_r/r^2,$$

кулоновскую силу можно записать в виде

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E}.$$

Это выражение можно скомбинировать с уравнением (1.14) в единый закон электромагнитной силы:

$$\mathbf{F} = q\left(\mathbf{E} + \left[\frac{\mathbf{v}}{c}\mathbf{B}\right]\right).$$

Этот закон силы, называемой *силой Лоренца*, объединяет законы электрической и магнитной силы в более общий закон силы.

Кроме уже перечисленных, фундаментальными взаимодействиями являются только *ядерные силы*. Проявления ядерных сил очень разнообразны. Эти силы разделяются на два общих класса, называемых сильными взаимодействиями и слабыми взаимодействиями. Они не могут быть записаны в элементарной форме (вид некоторых из них даже неизвестен), и поэтому здесь мы не будем их рассматривать. Приближенно они будут описаны в гл. 28.

Теоретически этот перечень сил дает нам все те законы, которые необходимы для того, чтобы получить из них все бесконечное разнообразие возможных природных явлений, но практически такая программа не может быть выполнена буквально. Особенно это сказывается, когда мы имеем дело с «макроскопическими частицами» (т. е. не с атомами, а с телами обычных размеров, внутренними движениями в которых мы совершенно не интересуемся). В этом случае удобно ввести другие приближенные законы сил. По крайней мере в принципе такие законы могут быть получены из приведенных выше фундаментальных, но не каждый раз возникает желание это делать. Даже в случае атомов часто бывает выгоднее использовать приближенный закон силы, для того чтобы упростить задачу математически настолько, чтобы ее можно было практически решить.

Приведем несколько примеров, иллюстрирующих эту мысль.

Имеются *постоянные силы*, т. е. силы, не зависящие от координат, например однородная *гравитационная сила*

$$\mathbf{F} = -K\mathbf{e}_z, \quad K = mg, \tag{1.15}$$

*) Это утверждение не совсем точно. Магнитное поле сводится к электрическому преобразованием Лоренца не во всех случаях, а только в некоторой области значений инвариантов электромагнитного поля. (*Прим. ред.*)

силы упругости

$$\mathbf{F} = -K\mathbf{r} \text{ или } F = -Kx \text{ (в одномерном случае)} \quad (1.16)$$

(такой силой обладает сжатая или растянутая пружина) и зависящие от скорости *силы трения*

$$\mathbf{F} = -K\mathbf{v}/v \text{ (скольжение)}, \quad (1.17)$$

$$\mathbf{F} = -K\mathbf{v} \text{ (сопротивление воздуха)}. \quad (1.18)$$

Эти силы всегда направлены против скорости $\mathbf{v}$. Кроме того, существуют еще *контактные силы*, для которых нельзя написать общего выражения, так как они зависят от напряжений внутри тела, а исследование этих напряжений лежит вне рамок рассмотрения этого тела, как «частицы». Такого рода силы будут использоваться в последующем тексте, причем в конечном счете нас будет интересовать их связь с фундаментальными законами сил. В отношении однородной силы тяжести, описываемой уравнением (1.15), интуитивно ясно, что она является приближением к силе (1.12), причем это приближение справедливо на малых расстояниях, например на высотах над земной поверхностью, малых по сравнению с радиусом Земли. В гл. 14 мы подробно рассмотрим, как сила упругости (уравнение (1.16)) возникает за счет сил, действующих между атомами вещества. Эти межатомные силы в свою очередь обусловлены кулоновскими силами между электронами и ядрами, из которых состоят атомы. Силы трения (уравнения (1.17) и (1.18)) не так легко поддаются анализу. Ясно, однако, что они также обязаны своим происхождением межатомным силам на поверхности тела и тем самым также сводятся к кулоновским силам. Главная цель этой книги показать, как обычные макроскопические явления могут быть поняты с точки зрения микроскопических систем, поведение которых обусловлено фундаментальными законами сил.

Задачи

1.1. Даны два вектора: $\mathbf{a} = 3\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y + 4\mathbf{e}_z$ и $\mathbf{b} = 2\mathbf{e}_x + 6\mathbf{e}_y + 4\mathbf{e}_z$. Вычислить их сумму, разность, скалярное и векторное произведения. Чему равен косинус угла между ними? Какой из них длиннее?

1.2. Показать, что $\mathbf{a}[\mathbf{bc}] = [\mathbf{ab}]\,\mathbf{c}$ (т. е. что можно переставлять порядок скалярного и векторного произведений).

1.3. Используя правило скалярного произведения векторов, доказать, что диагонали ромба перпендикулярны.

1.4. Используя правило скалярного произведения векторов, доказать теорему косинусов для треугольника.

1.5. Найти угол между диагональю куба и одним из его ребер. *Указание*: рассмотреть диагональ в качестве вектора, который образует равные углы с тремя координатными осями.

1.6. Доказать теорему синусов для треугольника, используя понятие векторного произведения.

1.7. Доказать, что скалярное и векторное произведения дистрибутивны:

$$\mathbf{a}(\mathbf{b}+\mathbf{c}) = \mathbf{ab} + \mathbf{ac},$$

$$[\mathbf{a}(\mathbf{b}+\mathbf{c})] = [\mathbf{ab}] + [\mathbf{ac}].$$

1.8. Показать, что $[\mathbf{ab}]$ может быть представлено детерминантом:

$$[\mathbf{ab}] = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \\ \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \end{vmatrix}.$$

1.9. Показать, что $[\mathbf{ab}]\,\mathbf{c}$ может быть представлено детерминантом:

$$[\mathbf{ab}]\,\mathbf{c} = \begin{vmatrix} a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \\ c_x & c_y & c_z \end{vmatrix}.$$

1.10. Доказать, что $[\mathbf{ab}]$ ортогонально к $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$. *Указание*: образовать скалярные произведения $[\mathbf{ab}]$ с $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$.

1.11. Доказать, что $\mathbf{ab} = ab\cos\theta$.

1.12. Доказать, что $|\,[\mathbf{ab}]\,| = ab\sin\theta$. *Указание*: выбрать координатные оси так, чтобы $\mathbf{a} = a_x\mathbf{e}_x$, $\mathbf{b} = b_x\mathbf{e}_x + b_y\mathbf{e}_y$.

1.13. Полагая, что радиус-вектор частицы равен

$$\mathbf{r} = at^3\mathbf{e}_x + bt\mathbf{e}_y - ct^2\mathbf{e}_z,$$

найти скорость и ускорение частицы как функции времени.

1.14. Имеет ли место равенство $|\dot{\mathbf{r}}| = \dot{r}$?

1.15. Полагая, что $f(x, y, z) = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, вычислить $\partial f/\partial y$ и $\partial f/\partial z$.

1.16. Вычислить $\partial f/\partial x$, $\partial f/\partial y$ и $\partial f/\partial z$, если

$$f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2.$$

1.17. Допустим, $f(\mathbf{r}) = r$. Показать, что $\nabla f = \mathbf{e}_r$.

1.18. Найти $\nabla\mathbf{f}$ при условии, что $f(\mathbf{r}) = \mathbf{r}$.

1.19. Зависимость координаты частицы от времени дана соотношением

$$x = \frac{m^2g}{b^2}\left(1 - \frac{bt}{m} - e^{-\frac{bt}{m}}\right).$$

Вычислить скорость и ускорение частицы, а также действующую на нее силу. Выразить силу как функцию модуля скорости.

1.20. Радиус-вектор частицы равен

$$\mathbf{r} = A\mathbf{e}_x\sin\omega t + B\mathbf{e}_y\cos\omega t.$$

Найти ее скорость, ускорение и действующую на нее силу. Выразить эту силу как функцию радиуса-вектора $\mathbf{r}$.

1.21. Пусть расход массы (топлива) ракеты в единицу времени является постоянным: $m = m_0 - bt$. Показать, что при прямолинейном движении ракеты $ma = F + bv$, где v — скорость истечения газа относительно ракеты.

1.22. Допустим, электрон имеет скорость, равную 94,99% от скорости света. Чему равно отношение релятивистской массы к массе покоя?

1.23. При релятивистских скоростях $\mathbf{F} \neq m_r \mathbf{a}$. Найти поправочный член, используя уравнение (1.9).

1.24. Пусть два протона находятся на расстоянии друг от друга 1 Å. Вычислить электростатическую и гравитационную силы, действующие между ними, и отношение этих сил.

1.25. Какая ошибка в процентном отношении будет допущена, если вместо уравнения (1.12) для гравитационной силы используется уравнение (1.15)? Частица находится на расстоянии 10 *км* от поверхности Земли.

Литература для справок

1. Кочин Н. Е., Векторное исчисление и начала тензорного исчисления, Гостехиздат, 1951.
2. Хайкин С. Э., Физические основы механики, Физматгиз, 1962.
3. Голдстейн Г., Классическая механика, Гостехиздат, 1957.

Глава 2

Преобразования Лоренца

В гл. 1 мы рассматривали радиус-вектор частицы как векторную функцию времени, заданную в подходящей координатной системе, не углубляясь в вопрос о том, что понимать под временем и подходящей координатной системой. В данной главе мы исследуем эти понятия более глубоко.

Пересмотр понятий пространства и времени основывается в первую очередь на труде одного человека — Альберта Эйнштейна (1905 г.) и носит название «специальной теории относительности». (Основания для такого термина станут понятными ниже.) Специальная теория относительности оказалась очень плодотворной для формулировки задач, связанных с электромагнитными полями. Она также важна для проблем астронавтики и для ряда задач физики высоких энергий. Значительно более важными, однако, являются выводы из теории относительности, касающиеся фундаментальнейших понятий длины и промежутков времени. Поэтому мы изложим основные идеи специальной теории относительности, даже несмотря на то, что в дальнейшем изложении нам почти не придется пользоваться результатами этих идей.

Изложение теории относительности мы начнем с операционных определений длин и промежутков времени — величин, которые подобно «массе» являются «первичными понятиями» и могут быть определены только операционным образом (см. § 1.4). Как это подсказывается ролью скорости в релятивистских выражениях типа, например, (1.9), движение является центральной идеей в теории относительности. Теория относительности выросла из попытки операционных определений длины движущегося тела и измерения промежутков времени движущимся наблюдателем. Уже сама постановка проблемы подчеркнуто показывает революционную природу теории относительности, поскольку каждому представляется очевидным, что длина движущегося предмета та же, что и у покоящегося, и что течение времени не зависит от движения наблюдателя. Но эти интуитивные представления оказались в противоречии с результатами эпохального опыта 1887 г. Майкельсона и Морлея (§ 2.3). Это противоречие было разрешено на основе новых идей Эйнштейна.

Решение сводится к установлению для длин и промежутков времени преобразований, которые появляются, когда наблюдатели, проводящие измерения, движутся друг относительно друга. Формулы преобразований фактически были написаны Лоренцем в ранних попытках понять результаты опыта Майкельсона — Морлея. Но Лоренц интерпретировал эти формулы по-другому. Вклад Эйнштейна состоит в простоте, присущей признанию относительной природы («относительность») измерений длин и промежутков времени. В этой главе мы увидим, что преобразования Лоренца могут быть выведены из операционных определений длин и промежутков времени и находятся в полном соответствии с результатами опыта Майкельсона — Морлея.

§ 2.1. Измерения длин и промежутков времени и принцип относительности

Все имеют интуитивное представление о том, что такое время. Все происходящее вокруг нас представляет собой упорядоченный ряд *событий*, причем порядок двух событий определяется тем, которое из них совершается «раньше», а которое — «позже». Более позднему событию принято приписывать большое значение временно́й координаты. Это условие фиксирует для каждого из нас направление «течения времени». Для того чтобы приписать временны́м координатам событий какие-то определенные числа, необходимо иметь прибор для измерения времени, т. е. *часы*.

С точки зрения операционного определения время есть то, что измеряют часами. При этом «часы» определяются как некое повторяющееся явление, а равные интервалы времени даются последовательными повторениями (периодами) этого явления. С 1957 г. наиболее точными являются часы, основанные на использовании периода электромагнитных волн, испускаемых атомами определенного сорта. Атомные колебания этих «атомных часов» с помощью специальной сложной аппаратуры могут быть сосчитаны с относительной точностью до 10^{-11}! Естественная единица времени атомных часов (т. е. их период колебания) очень мала по сравнению с обычными стандартами и имеет порядок 10^{-10} *сек*. Поэтому такие часы не очень удобны для измерения больших промежутков времени. Наиболее точные из ныне работающих стандартов времени основаны на колебаниях кварцевого кристалла при тщательно поддерживаемых неизменными внешних условиях. Период таких часов имеет порядок 10^{-6} *сек*. Ход старомодных механических часов определяется колебаниями физического маятника с периодом колебаний порядка одной секунды. Все эти типы

часов пригодны для измерения промежутков времени, поскольку они могут быть созданы в любой части мира по достаточно точному описанию их конструкции. Можно ожидать, что измерения с такими часами сравнимы друг с другом, даже если эти измерения произведены в различных частях мира.

Хотя все перечисленные выше типы часов приспособлены для измерения *промежутков* времени, они практически не очень удобны для установления единого *начала отсчета* времени. Для этой цели обычно используются периодические движения астрономических тел, поскольку в этом случае одно и то же событие может наблюдаться всеми людьми. Например, сутки (около 10^5 *сек*) определяются как один оборот Земли вокруг ее оси, а год (около $3 \cdot 10^7$ *сек*) — как одно обращение Земли вокруг Солнца. К сожалению, повторение такого рода событий не является точно периодическим, если время измерять по атомным часам. Эти отклонения от периодичности происходят из-за эксцентричности земной орбиты и других эффектов подобного рода. Конечно, если сутки *определить* как единицу времени, то все сутки будут одинаковыми по определению и придется считать, что колебательные частоты атомов меняются в зависимости от времени года. Для того чтобы избежать такого нежелательного осложнения физических законов, за астрономическую единицу времени принимают продолжительность *средних* солнечных суток. Реальное определение этих суток представляет собой исключительно сложную задачу, решение которой доверяется специальным государственным лабораториям. Эти лаборатории имеют стандартные атомные и кварцевые часы, синхронизированные с солнечным временем; остальные часы синхронизируются по стандартным, в большинстве случаев косвенно.

Имея часы, мы уже можем определять время операционно, как числа, даваемые нашими часами. Если я, например, скажу, что гол был забит в 2 часа, то я подразумеваю под этим, что забитие гола и положение стрелки часов против цифры 2 были *одновременными событиями*, так что ни одно из них не произошло раньше или позднее другого. До 1900 г. всегда предполагалось, что упорядоченность во времени и одновременность событий могут быть согласованы для всех наблюдателей, так что если все часы однажды идеально синхронизировать, то все наблюдатели будут приписывать одно и то же значение времени любому заданному событию. Следовательно, если наблюдается данное событие точно через 1000 *сек* после некоторого другого события, то это не есть какое-то ваше персональное время, но время, согласованное со всеми. Мы увидим дальше, что это предположение ложно и что наблюдатели, движущиеся друг относительно друга, с необходимостью должны приписывать промежуткам времени между одними и теми же событиями различные значения.

Понятия *длины* и *трехмерного пространства* для нас столь же привычны, как и понятие времени. Длину легко определить операционно. Длина есть то, что измеряется линейным или метровым масштабом. Стандартный метр — расстояние между двумя штрихами на платино-иридиевом стержне, который хранится в Международной палате мер и весов во Франции. Расстояние между двумя какими-либо другими точками (например, между концами какого-то предмета) равно 1 *м*, если эти две точки могут быть *одновременно совмещены* с обоими штрихами эталона.

Длины других объектов (или расстояние между двумя другими точками) измеряются посредством совмещения их с долей метра или с кратным числом метров. Наиболее точной единицей длины, меньшей метра, используемой сейчас в качестве стандарта, является длина волны красной линии, испущенной атомами криптона, имеющими атомный вес 86. Для сравнения этой длины волны с эталоном метра требуется высоко прецизионный прибор (интерферометр Майкельсона), поскольку эта длина волны меньше 10^{-6} *м*. Различные государства имеют копии стандарта длины, которые были выверены по первичному стандарту. Обычные метровые линейки калибруются по этим стандартам, как правило, косвенно.

Расстояние между двумя точками на покоящемся теле может быть измерено посредством прикладывания к нему метровой линейки, также находящейся в покое, и считывания чисел, оказывающихся против этих двух точек. Расстояние между точками определяется как абсолютное значение разности этих двух чисел. Все наблюдатели с одинаковыми метровыми линейками получают одно и то же значение для этого расстояния. (Если расстояние очень велико или очень мало, то измерение будет менее прямым, но пока будем предполагать, что мы производим его так, как сказано выше.) Если же обе точки движутся относительно масштаба, то нам придется потребовать, чтобы считывание обоих чисел было произведено *одновременно* при определенном значении общего времени t, для того чтобы измерить расстояние в этот момент времени.

Если, как мы это увидим в дальнейшем, наблюдатели, движущиеся друг относительно друга, расходятся в том, являются два события одновременными или нет, то можно ожидать, что они не придут к соглашению также и относительно измерения длины.

Измерения времен и расстояний всегда производятся в определенной *координатной системе*, а именно в системе, в которой часы и масштабы находятся в покое. Особое значение имеют так называемые инерциальные системы отсчета. Инерциальная система определяется как такая, в которой соблюдается первый закон Ньютона. Таким образом, в *инерциальной* системе тело при отсутствии внешних сил движется с постоянной скоростью. Примером неинерциальной системы отсчета может служить система координат, вра-

щающаяся по отношению к инерциальной: частица, на которую не действуют никакие силы и которая покоится в инерциальной системе, во вращающейся системе будет выглядеть вращающейся по кругу. С другой стороны, частица может оставаться в покое во вращающейся системе отсчета только при действии на нее центростремительной силы, поскольку в инерциальной системе отсчета эта частица будет двигаться по кругу. Тем самым первый закон Ньютона во вращающейся системе отсчета не соблюдается.

Принцип *относительности* определяет форму законов физики в инерциальных системах отсчета. Он играет фундаментальную роль как для старой механики Ньютона, так и для новой механики Эйнштейна, т. е. для «специальной теории относительности». Принцип относительности может быть сформулирован очень просто: *во всех инерциальных системах отсчета законы физики имеют одинаковую математическую форму*. Сначала мы рассмотрим этот принцип в применении к классической механике.

§ 2.2. Преобразования Галилея

Перейдем теперь к уравнениям, связывающим пространственные и временные координаты тела в двух координатных системах, равномерно движущихся друг относительно друга. В ньютоновской механике эти уравнения называются галилеевскими. Вид преобразования Галилея можно непосредственно усмотреть из рис. 2.1. Здесь через S_1 обозначена одна координатная система, а через S_2 — другая, начало которой движется по отношению к системе S_1 с постоянной скоростью v в направлении оси x. Допустим, что начала отсчета времени на часах, покоящихся, соответственно, в системах S_1 и S_2, выбраны в момент, когда начала отсчета пространственных координат S_1 и S_2 совпадали. Допустим также, что шкала расстояний вдоль координатных осей каждой системы установлена с помощью стандартных метровых линеек.

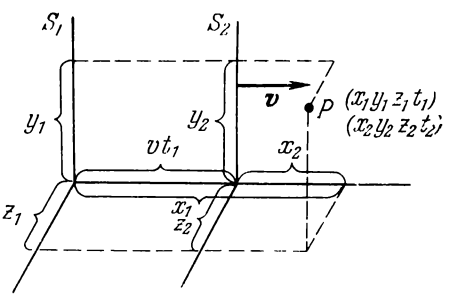


Рис. 2.1.

Наблюдатель, покоящийся относительно системы S_1, будет видеть, что в последующий момент времени t_1 начало координат системы S_2 окажется в точке $(vt_1, 0, 0)$. Пусть точка P имеет пространственные координаты (x_1, y_1, z_1) в системе S_1 и (x_2, y_2, z_2) в системе S_2. Координаты в системах S_1 и S_2 (рис. 2.1) связаны между собой

соотношениями

$$x_2 = x_1 - vt_1, \quad y_2 = y_1, \quad z_2 = z_1. \tag{2.1}$$

(Явная асимметрия этих уравнений связана с тем, что оси x выбраны в направлении движения.) Далее предполагается, что если часы в системах S_1 и S_2 синхронизированы в начальный момент, то они в дальнейшем будут идти одинаково, так что оба наблюдателя всегда будут получать одно и то же значение для временно́й координаты:

$$t_2 = t_1. \tag{2.2}$$

Уравнение (2.2) выражает классическую концепцию *абсолютного времени*. Аналогично из уравнений (2.1) вытекает существование *абсолютной длины* между точками P и P' в момент t_1 $(= t_2)$, так как длина L_2 в системе S_2 равна

$$\begin{aligned} L_2 \equiv \sqrt{(x_2' - x_2)^2 + (y_2' - y_2)^2 + (z_2' - z_2)^2} = \\ = \sqrt{[(x_1' - vt_1) - (x_1 - vt_1)]^2 + (y_1' - y_1)^2 + (z_1' - z_1)^2} = \\ = \sqrt{(x_1' - x_1)^2 + (y_1' - y_1)^2 + (z_1' - z_1)^2} \equiv L_1, \end{aligned}$$

где L_1 — длина в системе S_1. Уравнения (2.1) и (2.2) составляют преобразования Галилея, которые вплоть до Эйнштейна считались самоочевидными. Приняв преобразования Галилея, легко показать, что уравнения движения Ньютона удовлетворяют принципу относительности. Дифференцируя правые части (2.1) по t_1, а левые — по t_2 и учитывая, что $dt_1 = dt_2$ (уравнение (2.2)), мы придем к следующему преобразованию скоростей:

$$\dot{x}_2 = \dot{x}_1 - v, \quad \dot{y}_2 = \dot{y}_1, \quad \dot{z}_2 = \dot{z}_1 \tag{2.3}$$

или

$$\dot{\mathbf{r}}_2 = \dot{\mathbf{r}}_1 - \mathbf{v}.$$

Ясно, что тело, движущееся с постоянной скоростью в системе S_1, будет также иметь постоянную скорость в S_2 (т. е. постоянство $\dot{x}_1$, $\dot{y}_1$ и $\dot{z}_1$ содержит в себе постоянство $\dot{x}_2$, $\dot{y}_2$ и $\dot{z}_2$). Так как S_1 — инерциальная система, то инерциальна и система S_2. Это заключение справедливо для любой системы, равномерно движущейся относительно S_1, но ни для какой другой. Система, движущаяся ускоренно по отношению к S_1 ($\mathbf{v}$ не постоянно) не будет инерциальной.

Дифференцируя (2.3) еще раз, мы найдем преобразования для ускорений:

$$\ddot{x}_2 = \ddot{x}_1, \quad \ddot{y}_2 = \ddot{y}_1, \quad \ddot{z}_2 = \ddot{z}_1 \tag{2.4}$$

или

$$\ddot{\mathbf{r}}_2 = \ddot{\mathbf{r}}_1.$$

Ускорение *одинаково* в обеих системах.

Допустим, что на тело массы m, находящееся в точке P, действует сила $\mathbf{F}$. Второй закон Ньютона в нерелятивистской форме (уравнение (1.8)) выражается в системе S_1 в следующей форме:

$$\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}_1.$$

Посредством уравнений (2.4) это уравнение можно столь же хорошо переписать в координатах системы S_2:

$$\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}_2.$$

Важным следствием является то, что математическая форма уравнения движения одинакова в инерциальных системах S_1 и S_2. Второй закон Ньютона в рамках преобразований Галилея удовлетворяет принципу относительности. Иначе говоря, нерелятивистская форма закона Ньютона инвариантна относительно преобразований Галилея.

Так как второй закон Ньютона инвариантен, то ясно, что нерелятивистские законы сохранения импульса и энергии, которые следуют из этого закона, также должны быть инвариантны относительно преобразований Галилея. Действительно, все законы ньютоновской (нерелятивистской) механики имеют одну и ту же форму во всех инерциальных системах отсчета (все системы, равномерно движущиеся по отношению к системе S_1), т. е. они удовлетворяют принципу относительности.

В отличие от уравнений Ньютона, уравнения Максвелла для *электромагнитного поля*, которые успешно описывают свет как электромагнитные волны, не инвариантны по отношению к преобразованиям Галилея. Так как уравнения Максвелла считаются столь же фундаментальными, как и ньютоновские, то это различие представляет собой очень сложную проблему. Эта дилемма поставила физиков перед выбором между тремя возможностями: а) уравнения Максвелла неправильны, б) принцип относительности должен быть отброшен или в) преобразования Галилея некорректны. Приемлемой оказалась именно третья возможность. Новые уравнения преобразований (§ 2.3) оставляют неприкосновенными как электромагнитную теорию, так и принцип относительности.

Требование инвариантности законов механики относительно новых уравнений преобразований должно, таким образом, привести к изменению ньютоновской механики.

Необходимые изменения обсуждались в § 1.4 и будут рассмотрены более подробно в гл. 3. Эти изменения в механике, которые

требуются, чтобы сделать ее инвариантной, проявляются только при очень больших (относительных) скоростях, сравнимых со скоростью света. Уравнения (1.8) не инвариантны относительно корректных преобразований Лоренца (2.5).

§ 2.3. Преобразования Лоренца

Преобразования Лоренца могут быть выведены из принципа относительности совместно со вторым постулатом: *скорость света в пустоте одинакова во всех инерциальных системах отсчета.* Постоянство скорости света будет следовать из инвариантности уравнений Максвелла, если мы перейдем к движущейся системе отсчета, так как эти уравнения описывают распространение электромагнитной световой волны со скоростью c. Действительно, если эти уравнения справедливы в той и другой системе, то скорость света должна равняться c в обеих системах. Следовательно, этот постулат простейшим способом выражает справедливость и инвариантность уравнений Максвелла.

Постулированное выше постоянство скорости света явно не согласуется с преобразованиями Галилея: если скорость света равна $\mathbf{c}$ в системе S_1 (см. рис. 2.1), то она должна равняться $\mathbf{c} - \mathbf{v}$ в системе S_2 (уравнение (2.3)). Постоянство скорости света было твердо установлено в целом ряде экспериментов, в противоречии с этими обычными интуитивными представлениями. Наиболее известными из них являются опыты, проведенные Майкельсоном и Морлеем в 1887 г.

Во времена опыта Майкельсона и Морлея считалось, что свет (электромагнитные волны) распространяется через среду, называемую эфиром, покоящуюся относительно некоторой избранной инерциальной системы, называемой *системой эфира.* Если в этой системе эфира свет распространяется с постоянной скоростью c, то в соответствии с уравнением (2.3) скорость света в любой другой инерциальной системе отсчета, вообще говоря, должна отличаться от c. Если принять, что лаборатория Майкельсона — Морлея движется со скоростью $\mathbf{v}$ относительно системы эфира, то времена, требуемые для прохождения световыми волнами одинаковых путей соответственно параллельно и перпендикулярно $\mathbf{v}$, должны быть различными.

Нас не будут интересовать детали опыта Майкельсона — Морлея. Достаточно сказать, что в их лаборатории скорость света оказалась одинаковой ($= c$) во всех направлениях. Согласно преобразованиям Галилея это может иметь место только для лаборатории, покоящейся относительно эфира. Однако полгода спустя, когда скорость Земли относительно Солнца изменила знак и лаборатория оказалась в совершенно другой инерциальной системе, опыт

был повторен с тем же самым результатом. Единственно разумный, хотя и революционный вывод, который можно отсюда сделать, состоит в том, что *скорость света одинакова* ($= c$) *во всех направлениях в любой инерциальной системе.*

Примем принцип относительности и инвариантность скорости света. Попытаемся теперь найти удовлетворяющие этим двум постулатам преобразования, связывающие две движущиеся друг относительно друга инерциальные системы отсчета S_1 и S_2 (рис. 2.2). Пусть система S_2 движется относительно системы S_1 со скоростью v в направлении оси x. При отсутствии относительного движения этих систем в направлениях y и z мы можем снова ожидать, что (соотношения (2.1))

$$y_2 = y_1, \quad z_2 = z_1.$$

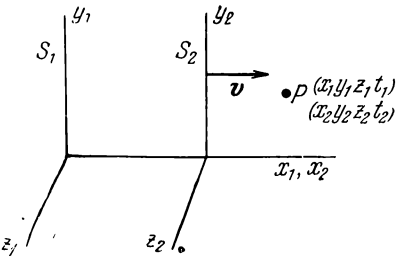


Рис. 2.2.

Преобразование координаты x должно отличаться от галилеевского преобразования, иначе скорость света не будет одной и той же в обеих системах. Каким же будет это преобразование?

Прежде всего, мы должны потребовать, чтобы при малых скоростях преобразование сводилось к уравнению (2.1), когда преобразования Галилея согласуются с опытом. Мы должны также потребовать, чтобы преобразование было *линейным* (а, скажем, не квадратичным), для того чтобы событие в S_1, (x_1, y_1, z_1, t_1) было связано с одним событием в S_2 (квадратичное соотношение имело бы два решения). Попытаемся ввести такое линейное преобразование координаты x, которое не содержало бы y и z:

$$x_2 = \gamma\,(x_1 - vt_1),$$

где γ — множитель, зависящий от v таким образом, что он стремится к единице, когда v стремится к нулю (соотношения (2.1)). Аналогично мы попытаемся ввести следующее преобразование для временно́й координаты:

$$ct_2 = \alpha\,(ct_1 - \beta x_1),$$

где (соотношения (2.1)) $\alpha \to 1$, $\beta \to 0$, когда $v \to 0$.

Если мы предположим, что сферический световой импульс выходит из общего начала отсчета в общий начальный момент времени $t_1 = t_2 = 0$, то постоянство скорости света c в обеих системах требует, чтобы в любой последующий момент времени было

$$c = \sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}\,/\,t_1 = \sqrt{x_2^2 + y_2^2 + z_2^2}\,/\,t_2.$$

Это означает, что уравнение для сферического волнового фронта импульса должно быть одним и тем же в обеих системах. Возводя это уравнение в квадрат, получим

$$0 = x_1^2 + y_1^2 + z_1^2 - c^2t_1^2 = x_2^2 + y_2^2 + z_2^2 - c^2t_2^2.$$

Теперь, используя новые уравнения преобразований, мы найдем, что

$$x_1^2 - c^2t_1^2 = \gamma^2 (x_1 - vt_1)^2 - \alpha^2 (ct_1 - \beta x_1)^2$$

или

$$x_1^2 (1 - \gamma^2 + \alpha^2\beta^2) - t_1^2 (c^2 + v^2\gamma^2 - c^2\alpha^2) - \\ - 2x_1t_1 (c\alpha^2\beta - v\gamma^2) = 0.$$

Для того чтобы это уравнение удовлетворялось в общем случае, мы должны потребовать равенства нулю коэффициентов при x_1^2, t_1^2 и x_1t_1:

$$1 - \gamma^2 + \alpha^2\beta^2 = 0,$$
$$c^2 + v^2\gamma^2 - c^2\alpha^2 = 0,$$
$$c\alpha^2\beta - v\gamma^2 = 0.$$

Эта система трех уравнений с тремя неизвестными легко решается. Подставляя эти величины обратно в предполагаемые уравнения преобразований, мы получим так называемые *преобразования Лоренца*:

$$x_2 = \frac{x_1 - vt_1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}},$$
$$y_2 = y_1, \qquad (2.5)$$
$$z_2 = z_1,$$

$$t_2 = \frac{t_1 - vx_1/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}.$$

Заметим, что если положить v/c равным нулю, то преобразования Лоренца сводятся к преобразованиям Галилея. Поддающееся измерениям количественное различие между этими двумя преобразованиями возникает только при заметных значениях v/c.

Однако принципиальное различие между преобразованиями Галилея и Лоренца колоссально. В первом случае мы видим, что расстояния и промежутки времени абсолютны (согласованы для всех наблюдателей в инерциальных системах), в то время как в последнем случае расстояния и промежутки времени являются относительными, т. е. связанными с координатными системами,

в которых они измеряются (наблюдатели в системах отсчета, движущихся друг относительно друга, приписывают этим величинам различные значения). Эти идеи будут развиты в последующих параграфах.

§ 2.4. Сокращение длины и замедление времени

Предположим, что предмет покоится в системе отсчета S_2 (см. рис. 2.2) и что наблюдатель, измеряющий его длину в системе S_2, получает значение L_2. Какова будет эта длина с точки зрения наблюдателя, находящегося в системе S_1, для которого предмет движется со скоростью v?

Обозначим концевые точки предмета через x_2' и x_2 в системе S_2 и через x_1' и x_1 в системе отсчета S_1. Тогда $x_2' - x_2 \equiv L_2$ есть длина предмета в системе S_2. Согласно преобразованиям Лоренца (2.5) можно связать эти координаты с соответствующими координатами в системе S_1:

$$L_2 \equiv x_2' - x_2 = \frac{(x_1' - vt_1') - (x_1 - vt_1)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}},$$

где t_1' и t_1 — моменты времени, в которые наблюдатель в S_1 измеряет координаты концевых точек. Для того чтобы измерение длины $L_1 \equiv x_1' - x_1$ в системе S_1 было корректным, существенно, чтобы эти координаты концевых точек измерялись в S_1 *одновременно*: $t_1' = t_1$. Тогда приведенное выше уравнение сводится к

$$L_2 = \frac{x_1' - x_1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{L_1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

или

$$L_1 = L_2\sqrt{1 - v^2/c^2}. \tag{2.6}$$

Наблюдатель в S_1 находит движущийся предмет *короче* в $\sqrt{1 - v^2/c^2}$ раз по сравнению с длиной L_2, измеренной в S_2, где этот предмет покоится. Длина предмета *не* абсолютна, а зависит от относительной скорости предмета и наблюдателя. Наибольшее значение длины («длина покоя») зарегистрирует наблюдатель, который покоится относительно этого предмета. Все наблюдатели, движущиеся относительно предмета (или по отношению к которым движется предмет), найдут, что его длина короче длины покоя. Этот эффект обычно называют *сокращением масштабов* или *сокращением Лоренца — Фитцджеральда.*

Перейдем теперь к измерениям времени. Допустим, что двое часов были синхронизированы между собой, когда они находились в покое друг относительно друга. Пусть часы, покоящиеся в S_2,

движутся относительно S_1 в направлении оси x с постоянной скоростью v (см. рис. 2.2). Другие часы, покоящиеся в S_1, находятся в фиксированной точке x_1. Пусть $T_1 \equiv t_1' - t_1$ — промежуток времени между двумя событиями, измеренный наблюдателем в системе S_1, пользующимся часами, которые в S_1 покоятся. Наблюдатель в S_2 зарегистрирует промежуток времени между теми же двумя событиями по его часам, покоящимся в S_2, как (см. (2.5))

$$T_2 \equiv t_2' - t_2 = \frac{(t_1' - t_1) - \frac{v}{c^2}(x_1' - x_1)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}},$$

где x_1 и x_1' — координаты точек в S_1, в которых произошли два события. Допустим, что в S_1 события произошли в одной и той же точке («в покое»), так что $x_1' = x_1$. Тогда

$$T_2 = \frac{T_1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \tag{2.7}$$

Промежуток времени, зарегистрированный наблюдателем в S_2 между двумя «движущимися» событиями в S_1, *больше*, чем промежуток времени, зарегистрированный наблюдателем с часами, покоящимися в системе S_1, в которой оба события произошли в одном и том же месте. Наименьшая величина промежутка времени («собственное время») между двумя событиями будет измерено в системе, в которой они происходят в одном и том же месте. Все наблюдатели, движущиеся по отношению к этой системе, будут измерять более длительные промежутки времени, чем промежуток собственного времени между событиями. Этот релятивистский эффект известен как *замедление времени*. Если наблюдатель в S_1 утверждает, что событие длилось 1 *мин*, то наблюдатель в S_2 будет утверждать, что оно длилось 2 *мин*, если к примеру $1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ равен 2. (Наблюдатель в S_2, если он не знает теории относительности, будет утверждать, что часы наблюдателя в S_1 идут в 2 раза медленнее.)

§ 2.5. Относительность расстояний и промежутков времени

В предыдущем параграфе мы формально установили, что преобразования Лоренца, связывающие пространственные и временные координаты, измеренные в системах отсчета, равномерно движущихся друг относительно друга, приводят к заключениям, которые прямо противоречат интуитивным результатам преобразований Галилея (§ 2.2). Так как эти выводы столь противоречат интуиции, стоит остановиться на них подробнее. Переход от преобразований Галилея к преобразованиям Лоренца вынуждается принципом относительности совместно с требованием сохранения справедливости уравнений Максвелла во всех инерциальных системах (или, что то

же самое, с требованием сохранения наблюдаемого постоянства скорости света). Мы не только оказываемся обязанными отказаться от ньютоновской механики в ее простой форме, но и приходим к ряду очень странных выводов об относительной природе длин и промежутков времени.

При выводе уравнений (2.6) и (2.7) по соображениям формального удобства мы в одном случае предполагаем, что «движущейся» системой является S_1, а в другом S_2, т. е. в первом случае мы предполагали, что измеряемый объект находится в S_2, а во втором случае, что измеряемые во времени события «покоятся» (происходят в одной и той же точке) в S_1. Для того чтобы исключить это различие в обозначениях для покоящихся систем, перепишем уравнения (2.6) и (2.7) в более нейтральной форме и попытаемся в дальнейшем уяснить их смысл.

Для того чтобы получить выражение для сокращения длин, допустим, что L_0 — длина предмета (длина покоя), измеренная в системе, в которой предмет покоится (системе покоя). Тогда, если L — длина предмета, измеренная в другой координатной системе, движущейся со скоростью v относительно системы покоя, то

$$L = L_0\sqrt{1 - v^2/c^2} \tag{2.6'}$$

согласно уравнению (2.6). Аналогично, чтобы получить выражение для замедления времени, обозначим через T_0 промежуток времени между двумя событиями (собственное время), измеренный в системе отсчета, в которой оба события происходят в одной и той же точке. (Например, если два события представляют собой включение и выключение электрического выключателя, то это будет система, в которой выключатель покоится.) Тогда согласно уравнению (2.7) промежуток времени T между двумя событиями, измеренный в других системах отсчета, движущихся со скоростью v относительно системы покоя, равен

$$T = \frac{T_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\,. \tag{2.7'}$$

Эти два уравнения подытоживают львиную долю содержания теории относительности касательно пространства и времени и не плохо бы запомнить, что они означают.

В некотором смысле данный предмет или последовательность двух событий выделяют преимущественную систему отсчета, а именно их систему покоя. В этой системе длина предмета максимальна, а промежуток времени между событиями минимален. В любой иной системе отсчета измеренная длина будет короче, а промежуток времени, напротив, больше (относительность тут может показаться парадоксальной, но нарушения логики здесь нет: если одна вещь больше другой, то вторая меньше первой). Даже хотя

избранный предмет или последовательность событий дают возможность выбрать систему отсчета, особо приспособленную для их описания (система покоя), все же физика пространства и времени полностью согласуется с принципом относительности. Это означает, что сами преобразования Лоренца симметричны в том смысле, что если найти преобразования, обратные уравнениям (2.5), выражающим координаты (x_1, y_1, z_1, t_1) через координаты (x_2, y_2, z_2, t_2), то они будут иметь ту же форму, что и (2.5), с заменой v на $-v$ (задача 2.1).

Это имеет следующий смысл. Допустим, что предмет покоится в системе S_2. Тогда наблюдатель, покоящийся в движущейся (относительно) системе S_1, получил бы меньшее значение для длины предмета, чем наблюдатель, покоящийся в S_2. Другими словами, наблюдатель в S_2 измерил бы большую длину предмета, чем наблюдатель в S_1. Длина, измеренная наблюдателем в S_2, абсолютно (не относительно) больше, чем длина, измеренная наблюдателем в S_1. *Однако* если тот же предмет покоится уже в системе S_1 (другая физическая ситуация), то наблюдатель, покоящийся в движущейся системе S_2, получил бы меньшее значение для длины предмета, чем наблюдатель, покоящийся в системе S_1. В этом и состоит симметрия двух физических ситуаций. В обоих случаях наблюдатель, оказавшийся в системе покоя предмета, получает большее значение для его длины, но в обоих случаях оба наблюдателя в состоянии согласовать вопрос о том, кто из них наблюдает бóльшую длину. В обоих случаях наблюдатель, для которого предмет движется, измеряет меньшую (сокращение) длину, чем наблюдатель, для которого предмет покоится; и в обоих случаях наблюдатели находятся в согласии друг с другом. Совершенно аналогичные утверждения могут быть сделаны относительно замедления времени. Кратчайший промежуток времени между двумя событиями будет измерен в системе отсчета, в которой события происходят в одной и той же точке (система покоя). Если то же явление происходит в другой системе, то время, измеренное в той системе, и будет собственным. Ни в каком случае между наблюдателями не возникнет спора о том, кто из них зарегистрировал меньший промежуток времени.

Для того чтобы избежать недоразумений при обсуждении релятивистских проблем, в которых обычная интуиция и здравый смысл оказываются столь мало полезными, исключительно важно точно оговаривать систему отсчета, в которой делаются наблюдения, и систему покоя измеряемого предмета или последовательности происходящих событий. Релятивистские эффекты иногда выражаются и по-другому. Например, в конце предыдущего параграфа мы отметили вскользь, что наблюдатель в S_2 мог бы предположить, что часы в движущейся (по отношению к нему) системе S_1 замедлили свой ход. Утверждения такого рода по поводу того,

что думает наблюдатель о часах и масштабах другого наблюдателя, делаются часто. Но эти утверждения не очень-то полезны и могут привести к недоразумениям. Каждый наблюдатель использует инструменты, которые являются хорошими в его собственной системе отсчета (в той, которая для него естественна, т. е. в той, в которой он покоится). Эти наблюдатели приходят к различным ответам просто из-за непривычной природы пространства и времени. Поэтому мы предпочитаем избегать таких объяснений и еще раз подчеркиваем содержание уравнений (2.6) и (2.7).

При выводе выражений для длины предмета, которую измеряли бы наблюдатели в его системе покоя и движущейся системе, мы отмечали, что с точки зрения наблюдателя в «движущейся» системе отсчета движется *предмет* и существенно, что наблюдатель измеряет положение концов движущегося предмета *одновременно*. Наблюдатель в системе покоя предмета, конечно, тоже должен делать измерения концов одновременно, но так как эти концы в его системе отсчета фиксированы, то эти ограничения ни к чему не приводят. Далее, согласно нашему изложению в § 2.4, наблюдатель в системе, по отношению к которой предмет движется, проделает свои измерения одновременно (в один и тот же момент по его времени) и получит иной ответ, чем наблюдатель в покоящейся системе. Наблюдатель в покоящейся системе припишет это различие в конечном счете тому, что, согласно его времени, другой наблюдатель производил свои измерения не одновременно. Причина появления относительности измерений длины может тем самым быть сведена к операционному определению одновременности, которая оказывается зависящей от системы отсчета. Это связано с результатами опыта Майкельсона — Морлея, так как суждение об одновременности двух удаленных событий зависит от передачи светового сигнала между двумя удаленными точками. Никто не объяснил эту связь лучше, чем сам Эйнштейн. Каждому стоит прочесть эйнштейновское объяснение, и мы отсылаем вас к нему (см. литературу в конце главы).

Представления о сокращении длины и замедлении времени, может быть, станут яснее, если мы рассмотрим частный пример. Замедление времени поразительно подтверждается при распаде нестабильных ядерных частиц высокой энергии, таких как π-мезоны (гл. 31).

Покоящийся (или медленно движущийся со скоростью $v \ll c$) заряженный π-мезон, как известно, имеет среднее время жизни $\tau_0 = 2{,}6 \cdot 10^{-8}$ *сек*. Согласно нерелятивистской физике π-мезон высокой энергии со скоростью $v \approx c$ прошел бы расстояние порядка $c\tau_0 = 3 \cdot 10^8$ *м/сек* $\cdot 2{,}6 \cdot 10^{-8}$ *сек* $= 7{,}8$ *м*.

Представим себе сначала траекторию мезона с точки зрения наблюдателя в системе отсчета, покоящейся относительно лабора-

тории. По отношению к этой системе мезон движется с большой скоростью, близкой к c. Пройденное им расстояние, измеренное в лабораторной системе, равно его скорости $v \approx c$, умноженной на время жизни τ, также измеренное в лабораторной системе. Время жизни τ представляет собой промежуток между двумя событиями: рождением мезона и его распадом. В системе покоя мезона эти два события происходят в одной и той же точке и отделены промежутком времени $\tau_0 = 2{,}6 \cdot 10^{-8}$ *сек*, являющимся собственным временем. При измерении в лабораторной системе, однако, время жизни равно

$$\tau = \frac{\tau_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

в соответствии с уравнением (2.7) для замедления времени. Пройденное в лабораторной системе за это время расстояние

$$v\tau \approx \frac{c\tau_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}.$$

Так как $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ часто имеет порядок 10, то путь π-мезонного пучка относительно лабораторной системы может быть равным 78 *м* вместо 7,8 *м*.

Мы рассмотрели этот пример с распадом π-мезона в лабораторной системе, но тот же физический результат получился бы и в системе покоя, движущейся вместе с мезоном. Если лаборатория имеет длину 78 *м* в лабораторной системе, то с точки зрения мезона длина лаборатории сократится: $78 \cdot \sqrt{1 - v^2/c^2} \approx 7{,}8$ *м* — расстояние, которое мезон может пройти за время $\tau_0 = 2{,}6 \cdot 10^{-8}$ *сек*. Таким образом, в каждой системе мы приходим к выводу, что π-мезонный пучок будет проходить всю длину лаборатории, а не 1/10 часть этого расстояния, как этого следовало бы ожидать в ньютоновской физике. Релятивистский результат полностью согласуется с экспериментом.

§ 2.6. Преобразование скорости и релятивистский импульс

С помощью преобразований Лоренца (2.5) мы можем получить следующие соотношения между дифференциалами пространственных и временных координат в двух системах S_1 и S_2, движущихся друг относительно друга:

$$dx_2 = \frac{dx_1 - v\,dt_1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}},$$
$$dy_2 = dy_1,$$
$$dz_2 = dz_1,$$
$$dt_2 = \frac{dt_1 - v\,dx_1/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}.$$

Скорость в системе S_1 есть $\dot{\mathbf{r}}_1 = d\mathbf{r}_1/dt_1$ (т. е. $\dot{x}_1 = dx_1/dt_1$ и т. д.), в то время как скорость в системе S_2 есть $\dot{\mathbf{r}}_2 = d\mathbf{r}_2/dt_2$. После некоторых алгебраических преобразований (задача 2.9) приведенные выше уравнения для дифференциалов координат могут быть записаны в следующей форме:

$$\begin{aligned} \dot{x}_2 &= \frac{\dot{x}_1 - v}{1 - v\dot{x}_1/c^2}, \\ \dot{y}_2 &= \dot{y}_1 \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2}}{1 - v\dot{x}_1/c^2}, \\ \dot{z}_2 &= \dot{z}_1 \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2}}{1 - v\dot{x}_1/c^2}. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Нетривиальные преобразования для $\dot{y}$ и $\dot{z}$ возникают за счет нетривиальности преобразования времени.

Мы видим, что если v/c положить равным нулю, то это преобразование скорости сводится к преобразованию Галилея (уравнение (2.3)). При больших скоростях преобразование Лоренца скорости (уравнения (2.8)) сильно отличается от соотношений (2.2). В частности, как вытекает из уравнений (2.8), скорость предмета никогда не может превысить постоянную скорость c. Чтобы уяснить этот результат, рассмотрим следующий простой пример: пусть в системе S_1 частица движется в направлении $-x_1$ со скоростью $\dot{x}_1 = -kc$, где k — произвольная положительная постоянная. Предположим, далее, что система S_2 перемещается в направлении x_1 со скоростью v, которая также равна kc (рис. 2.3).

В соответствии с согласующимися со «здравым смыслом» преобразованиями Галилея (уравнения (2.3)) скорость $\dot{x}_2$ частицы в системе S_2 была бы равна $-2kc$, т. е. $|\dot{x}_2|$ превышал бы c при $k > 1/2$. Согласно релятивистскому преобразованию скорости (уравнения (2.8)) мы получим, однако, для $\dot{x}_2$ выражение

$$\dot{x}_2 = \frac{-kc - kc}{1 - \dfrac{kc(-kc)}{c^2}} = -\frac{2k}{1 + k^2}c. \tag{2.9}$$

Так как максимальное значение величины $2k/(1 + k^2)$ равно единице (при $k = 1$), то, следовательно, $|\dot{x}_2|$ не может превзойти c ни при каком значении k.

В гл. 1 (уравнение (1.9)) мы упоминали, что релятивистское выражение для импульса отличается от ньютоновского выражения $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}}$ (уравнение (1.6)). Теперь мы покажем, что при релятивистских уравнениях преобразований (2.8) нерелятивистский импульс (1.6) не сохраняется при столкновении, в то время как релятивистский сохраняется. Поэтому мы оказываемся перед выбором:

либо модифицировать наше старое ньютоновское выражение для импульса, либо вообще отказаться от сохранения импульса. Поскольку в физике важны сохраняющиеся величины (гл. 3), мы выберем первую возможность.

Рассмотрим следующий простой эксперимент: два шара с одинаковыми массами покоя m, имеющие в системе S_1 (см. рис. 2.2) скорости $\dot{x}_1 = u$ и $\dot{x}_1' = -u$, а в системе S_2 скорости $\dot{x}_2$ и $\dot{x}_2'$, сталкиваются и далее движутся вместе. В системе S_1 импульсы равны

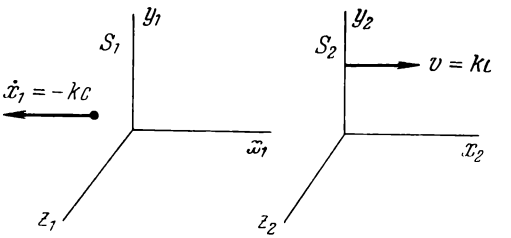


Рис. 2.3.

и противоположны друг другу, независимо от того, используем мы для импульса нерелятивистское выражение (1.6) или релятивистское (1.9). Если полный импульс в S_1 до столкновения равен нулю, то, для того чтобы импульс сохранялся, два шара должны после столкновения покоиться в S_1. Поэтому в системе S_2 они будут двигаться со скоростью $\dot{x}_2 = -v$ (рис. 2.2). Приняв, что в соответствии с (2.8) скорости шаров до столкновения равны

$$\dot{x}_2 = \frac{u - v}{1 - vu/c^2}, \qquad \dot{x}_2' = \frac{-u - v}{1 + vu/c^2}, \tag{2.10}$$

мы получим, что полный нерелятивистский импульс (в системе S_2) до столкновения $m(\dot{x}_2 + \dot{x}_2')$, очевидно, не равен его значению $2m(-v)$ после столкновения. Лишь в пределе $v/c \to 0$, когда $\dot{x}_2 = -v$ и $\dot{x}_2' = -u - v$, нерелятивистский импульс сохраняется в S_2.

Пусть релятивистские массы (уравнение (1.10)) двух шаров в S_2 будут равны m_r и m' соответственно. Тогда релятивистский импульс (уравнение (2.11)) двух шаров в S_2 до столкновения будет равен

$$m_r \dot{x}_2 + m_2' \dot{x}_2'. \tag{2.11}$$

Полная релятивистская масса изолированной системы также сохраняется, так как она равна полной энергии системы, деленной на

c^2, как мы увидим в дальнейшем (уравнение (3.18)). Таким образом в S_2' релятивистский импульс после столкновения равен

$$(m_r + m_r')\ (-v). \tag{2.12}$$

Используя уравнение (2.10) (задача 2.10), можно показать, что выражения (2.11) и (2.12) равны друг другу. Это и доказывает сохранение релятивистского импульса в рассмотренном нами неупругом столкновении как в системе S_1, так и в системе S_2. Общие законы сохранения в механике, как релятивистской, так и нерелятивистской, мы обсудим с большей полнотой в следующей главе.

Резюмируя содержание этой главы, мы можем определить инерциальную систему как такую, в которой справедливы обычные законы физики, в частности первый закон Ньютона, согласно которому импульс частицы (или скорость) постоянен, когда на частицу не действует сила. Любая координатная система, которая движется равномерно по отношению к инерциальной, сама является инерциальной согласно данному определению. Принцип относительности постулирует, что все фундаментальные физические законы должны иметь одну и ту же форму в любой инерциальной системе координат. Этот принцип навеян выводом из опыта Майкельсона — Морлея о том, что скорость света всегда имеет одну и ту же величину в любой координатной системе (распространение света со скоростью c описывается уравнениями Максвелла, и поэтому они не должны меняться при переходе к другой инерциальной системе). Для того чтобы сделать скорость света инвариантной, мы были вынуждены при описании координат точки в одной системе через ее координаты в другой системе принять преобразования Лоренца вместо интуитивных преобразований Галилея. В высшей степени поразительной чертой преобразований Лоренца является то, что и временна́я переменная также преобразуется к новому значению. Замечательным следствием преобразований Лоренца является то, что измеренные значения длины и времени не абсолютны, а относительны, т. е. связаны с координатной системой, в которой они проведены. Длина предмета максимальна, когда она измерена в системе покоя. При измерении в движущейся системе (или, другими словами, в системе, в которой движется предмет) она сокращается. Аналогично промежуток времени между двумя событиями является минимальным, когда он измерен в их системе покоя. При измерении в движущейся системе (система, в которой события происходят в разных местах) промежуток увеличивается. Для того чтобы второй закон Ньютона ($\mathbf{F} = \dot{\mathbf{p}}$) был инвариантен по отношению к преобразованиям Лоренца, необходимо для быстро движущейся частицы видоизменить определение $\mathbf{p}$ как функции $\mathbf{v}$; это видоизменение подтверждается экспериментом.

Теория, которая описана здесь, называется *специальной* теорией относительности, так как принцип относительности устанавливает лишь, что физические законы имеют одну и ту же форму в частном классе координатных систем, а именно в инерциальных системах. Позднее (1916 г.), отказавшись от этого ограничения, Эйнштейн сформулировал теорию, названную *общей* теорией относительности, в которой эквивалентны все координатные системы (не только одни инерциальные). Специальная теория относительности находит обширные применения в современной трактовке многих областей физики, особенно в тех случаях, когда величины выражаются через «4-векторы», ведущие себя как векторы по отношению к преобразованиям Лоренца. В этой книге мы не станем пытаться развивать 4-векторный формализм, но будем иметь много случаев использовать новое релятивистское соотношение между импульсом и скоростью.

Задачи

2.1. Решить уравнения (2.5) относительно x_1, y_1, z_1 и t_1.

2.2. Космический корабль проносится мимо наблюдателя со скоростью 0,9 c. Измеренная этим наблюдателем длина ракеты равна 10 $м$. Какова длина ракеты, измеренная ее пилотом?

2.3. В задаче 2.2. пилот одновременно произвел две вспышки света на расстоянии 5 $м$ друг от друга (в направлении движения). Наблюдателю (с относительной скоростью 0,9 c) не кажется, что эти две световые вспышки произошли в один и тот же момент. Какой промежуток времени между вспышками будет он наблюдать?

2.4. Электронный пучок проходит сквозь вертикальный цилиндр трехкилометровой длины. Как быстро движется электрон, если с его точки зрения цилиндр имеет длину всего лишь 0,3 $м$? Чему равен импульс электрона?

2.5. Как велико время, проведенное электроном в цилиндре (задача 2.4) согласно часам а) цилиндра и б) электрона?

2.6. Наблюдатель видит две ракеты, приближающиеся к нему с противоположных сторон со скоростями 0,8 c каждая. Какова относительная скорость ракет?

2.7. Скрывающийся со скоростью v автомобиль преследуется полицейской машиной, имеющей скорость $2v$. Какова относительная скорость автомобилей? Найти поправку порядка v/c к результату ньютоновской механики, предполагая, что это отношение очень мало.

2.8. Используя уравнение (2.8), показать, что если $\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2 + \dot{z}_2^2 = c^2$, то тому же будет равно $\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{z}_1^2$.

2.9. Проверить, что уравнения (2.8) вытекают из соотношений, приведенных в начале § 2.6.

2.10. Проверить, что выражения для релятивистского импульса до столкновения (уравнение (2.11)) и после столкновения (уравнение (2.12)) идентичны. (Обратить внимание на выражения для $\dot{x}_2$ и $\dot{x}_2'$ в уравнении (2.10) и для m_r в уравнении (1.10).)

Литература для справок

1. Эйнштейн А., К электродинамике движущихся тел, Соб. научных статей, т. 1, «Знание», 1965, стр. 7.
2. Бергман П. Г., Введение в теорию относительности, ИЛ, 1947.
3. Мандельштам Л. И., Лекции по теории относительности, Полн. собр. трудов, т. 5, Изд-во АН СССР, 1950.

Глава 3

Законы сохранения в механике

Если частица движется в известном силовом поле $\mathbf{F}(\mathbf{r})$, *то уравнение движения* (*1.7*) *всегда может быть в принципе проинтегрировано, что позволяет найти траекторию частицы* $\mathbf{r}(t)$ *в зависимости от ее начального положения и скорости. Практически, однако, решение этой задачи может быть чрезвычайно затруднено, если силовое поле очень сложно. Конечно, с современными быстродействующими вычислительными машинами многие задачи, выглядевшие когда-то неразрешимыми, теперь могут быть успешно атакованы. Несмотря на это, сталкиваясь с трудной механической задачей, всегда полезно распознать те физические величины, которые остаются неизменными, т. е. сохраняются в процессе движения. Зачастую требуемая информация может быть получена из одних только уравнений сохранения без явного нахождения траекторий. Таким образом, эти сохраняющиеся величины играют весьма специальную роль при изучении физики. В механике наиболее важными сохраняющимися величинами являются импульс, момент импульса и энергия.*

§ 3.1. Сохранение импульса

Для одной частицы закон сохранения импульса прямо следует из второго закона движения Ньютона (уравнение (1.7)). Если отсутствуют силы, действующие на частицу ($\mathbf{F} = 0$), то, следовательно,

$$d\mathbf{p}/dt = 0$$

или

$$\mathbf{p} = \text{const}. \tag{3.1}$$

Этот результат может показаться почти очевидным, хотя лишь человек, подобный Ньютону, смог распознать, что сила является «причиной» не движения, а *изменения* движения.

Это называется первым законом Ньютона. С помощью третьего закона Ньютона данный закон сохранения может быть распространен на любую систему из нескольких частиц при отсутствии *внешних сил*, действующих на эту систему. Под внешней силой мы понимаем такую силу, которая действует на частицы со стороны внешних

агентов, не входящих в систему. Силы, с которыми частицы действуют друг на друга, называются *внутренними*.

Докажем теорему о сохранении импульса для системы из двух частиц. Обобщение на произвольное число частиц оставляется читателю в качестве упражнения. При отсутствии внешних сил единственной силой, действующей на частицу *1*, будет обозначенная через $\mathbf{F}_{12}$ сила, действующая со стороны частицы *2*. Уравнение движения для частицы *1* с импульсом $\mathbf{p}_1$ должно, следовательно, иметь вид

$$\mathbf{F}_{12} = d\mathbf{p}_1/dt.$$

Аналогично для частицы *2*

$$\mathbf{F}_{21} = d\mathbf{p}_2/dt,$$

где $\mathbf{F}_{21}$ сила, с которой частица *1* действует на частицу *2*. Согласно третьему закону Ньютона эти две силы равны по величине и противоположны по направлению (одна является равной и противоположно направленной реакцией по отношению к другой). Таким образом, сумма $\mathbf{F}_{12}$ и $\mathbf{F}_{21}$ исчезает:

$$\mathbf{F}_{12} + \mathbf{F}_{21} = d\,(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)/dt = 0$$

или

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \text{const}. \tag{3.2}$$

При взаимодействии двух частиц третий закон Ньютона говорит нам, что изменения импульсов частиц равны и противоположно направлены, оставляя полный импульс неизменным. Позднее мы увидим (гл. 6), что знание этого факта играет решающую роль в изучении столкновений частиц.

Доказательство закона сохранения полного импульса может быть распространено на произвольное число частиц (задача 3.1). Мы можем сформулировать этот закон следующим образом: *в отсутствие внешних сил полный импульс системы из N частиц остается неизменным*:

$$\sum_{i=1}^{N} \mathbf{p}_i = \text{const}. \tag{3.3}$$

Здесь $\mathbf{p}_i$ — импульс i-й частицы.

§ 3.2. Работа и кинетическая энергия

Допустим, что сила $\mathbf{F}$ действует на частицу в точке $\mathbf{r}$; $\mathbf{F}$ может изменяться от точки к точке, так что $\mathbf{F}$ есть векторная функция радиуса-вектора $\mathbf{r}$:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{r}).$$

Мы не будем предполагать, что знаем положение частицы в каждый момент времени (фактически это означало бы полное решение задачи). Но мы знаем, что если бы частица была в точке $\mathbf{r}$, то на нее действовала бы сила $\mathbf{F}(\mathbf{r})$.

Теперь определим *работу* dW, которую производит сила $\mathbf{F}$ над частицей при ее смещении на $d\mathbf{r}$, как произведение компоненты $F\cos\theta$ силы вдоль $d\mathbf{r}$ на абсолютное значение $|d\mathbf{r}|$ (рис. 3.1)

$$dW = F\cos\theta\,|d\mathbf{r}| = \mathbf{F}\,d\mathbf{r} = F_x\,dx + F_y\,dy + F_z\,dz.$$

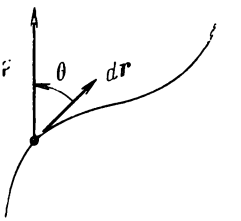


Рис. 3.1.

При этом важно отметить, что $|d\mathbf{r}|$ нельзя записать в виде dr:

$$|d\mathbf{r}| \neq dr.$$

Например, пусть смещение происходит вдоль окружности с центром в начале координат: $|\mathbf{r}| \equiv r = \text{const}$, так что $dr = 0$; с другой стороны, при том же самом смещении $\mathbf{r}$ изменяется, $d\mathbf{r}$ отлично от нуля и, следовательно, $|d\mathbf{r}| \neq 0$. Действительно,

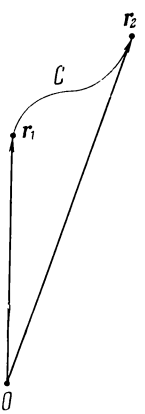


Рис. 3.2.

$$|d\mathbf{r}| = \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2} = \sqrt{d\mathbf{r}\,d\mathbf{r}},$$

в то время как

$$dr = \frac{\partial r}{\partial x}dx + \frac{\partial r}{\partial y}dy + \frac{\partial r}{\partial z}dz = \frac{x\,dx + y\,dy + z\,dz}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{\mathbf{r}\,d\mathbf{r}}{r}.$$

(При движении по окружности $\mathbf{r}$ и $d\mathbf{r}$ перпендикулярны друг к другу, так что $\mathbf{r}d\mathbf{r} = 0$). Хотя этот факт и очень важен для понимания определения работы, он не приведет нас к каким-либо недоразумениям, поскольку мы всегда будем использовать в наших выкладках только вторую и третью формы приведенных выше определений. (Можно отметить также, что отсюда вытекает, что $v \equiv |\mathbf{v}| \equiv |d\mathbf{r}/dt| \neq dr/dt \equiv \dot{r}$.)

Полная работа, произведенная силой при перемещении от $\mathbf{r}_1$ до $\mathbf{r}_2$, получается интегрированием (рис. 3.2):

$$W_{12} = \int dW = \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} \mathbf{F}\,d\mathbf{r} = \int_C (F_x dx + F_y dy + F_z dz). \qquad (3.4)$$

Этот интеграл есть *криволинейный интеграл*, и его величина зависит от формы кривой C, вдоль которой движется частица. Если кривая C задана, например, функциями $y = y(x)$ и $z = z(x)$, то F_x, F_y, F_z

могут быть выражены как функции от x. Именно, $dy = (dy/dx)dx$, $dz = (dz/dx)dx$ и интегрирование может быть произведено обычным образом. То, что работа может зависеть от пути, физически очевидно, например, в случае сил трения. Если вы толкаете ящик по полу, производя работу по преодолению сил трения, то работа, которую вы произведете при передвижении ящика из одной точки в другую, будет зависеть от того, сколь искривленный путь вы выберете.

С помощью уравнений движения может быть доказана важная теорема о работе, произведенной полной силой. Мы проведем доказательство прежде всего для нерелятивистского случая. Подставим в уравнение (3.4), определяющее работу, выражение для силы (1.7)

$$W_{12} = \int_1^2 \mathbf{F}d\mathbf{r} = \int_1^2 \frac{d\mathbf{p}}{dt} d\mathbf{r} = \int_1^2 d\mathbf{p}\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \int_1^2 \mathbf{v}d\mathbf{p}.$$

Это выражение зависит лишь от общей формы закона Ньютона и, следовательно, всегда справедливо. В нерелятивистском случае соотношение между $\mathbf{p}$ и $\mathbf{v}$ имеет вид $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, так что $d\mathbf{p} = m d\mathbf{v}$ и $\mathbf{v}d\mathbf{p} = m\mathbf{v}d\mathbf{v} = \frac{1}{2} md(v^2)$. Отсюда получаем

$$W_{12} = \int_1^2 \mathbf{v}d\mathbf{p} = \int_1^2 \frac{1}{2} md(v^2) = \frac{1}{2} mv_2^2 - \frac{1}{2} mv_1^2 = T_2 - T_1,$$

где

$$T \equiv \frac{1}{2} mv^2 = \frac{p^2}{2m}. \tag{3.5}$$

Величина T является нерелятивистской *кинетической энергией*. Таким образом, мы показали, что для любых сил работа W_{12}, производимая полной силой над частицей, движущейся вдоль некоторой кривой между точками *1* и *2* равна разности значений кинетической энергии в двух точках:

$$W_{12} = T_2 - T_1 = \Delta T. \tag{3.6}$$

Эта теорема устанавливает в интегральной форме, каким образом сила изменяет импульс частицы, так как W определяется интегралом от силы (по пути) и T есть функция импульса. Закон движения устанавливает то же самое в дифференциальной форме. (Другим путем установления этого закона в интегральной форме является теорема импульсов $\int \mathbf{F}\,dt = \Delta\mathbf{p}$.)

Приведенная выше теорема (3.6) не образует полного решения уравнения движения. Она просто говорит о том, как изменится скорость, если путь частицы известен полностью. Важно заметить, что работа W_{12} должна быть работой, произведенной *полной* силой, дейст-

вующей на частицу, так как в законе Ньютона должна стоять полная сила. Если я толкаю ящик по полу с постоянной скоростью, то я совершаю над ним работу. Тем не менее его скорость не изменяется, потому что сила трения совершает такую же работу с отрицательным знаком, так что полная работа равна нулю и кинетическая энергия остается постоянной.

Полезность кинетической энергии $T=mv^2/2$ в нерелятивистской механике основана главным образом на том факте, что уравнение (3.6) считается справедливым. Частный вид функции T не является существенным. Теорема, подобная (3.6), могла бы равным образом существовать и в релятивистской механике, и если мы изменим выражение для кинетической энергии, так чтобы сделать уравнение (3.6) справедливым и при релятивистских скоростях, то теорема (3.6) опять станет справедливой. Для доказательства аналогичной релятивистской теоремы опять начнем с выражения

$$W_{12} = \int_1^2 \mathbf{F}\, d\mathbf{r} = \int_1^2 \mathbf{v}\, d\mathbf{p}.$$

Для того чтобы выполнить интегрирование, мы должны на этот раз использовать релятивистское соотношение между $\mathbf{p}$ и $\mathbf{v}$ (уравнение (1.9)), из которого по вычислении дифференциала следует

$$d\mathbf{p} = \frac{m d\mathbf{v}}{\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}} + \frac{m\mathbf{v}\, d(v^2)}{2c^2\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{3/2}}.$$

Умножив обе стороны уравнения скалярно на $\mathbf{v}$, после несложных выкладок (задача 3.3) получим

$$\mathbf{v}\, d\mathbf{p} = \frac{\frac{1}{2} m d(v^2)}{\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{3/2}}.$$

Тогда

$$W_{12} = \int_1^2 \frac{\frac{1}{2} m d(v^2)}{\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{3/2}} = \left.\frac{mc^2}{\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}}\right|_1^2 = \Delta(m_r c^2). \qquad (3.7)$$

Ясно, что мы можем опять получить уравнение (3.6) в релятивистской механике, если определим кинетическую энергию так:

$$\frac{mc^2}{\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}} = m_r c^2,$$

где m_r — релятивистская масса, определяемая уравнением (1.10). Это определение, однако, не согласуется с нерелятивистским выражением (уравнение (3.5)) в предельном случае малых скоростей. Мы видим, что для того, чтобы согласовать эти уравнения, нужно вычесть из релятивистской кинетической энергии постоянный член

$$T \equiv m_r c^2 - mc^2 = mc^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right]. \tag{3.8}$$

Постоянный член не изменяет разность $T_2 - T_1$, и, следовательно, уравнение (3.6) остается справедливым, если T определяется уравнением (3.8). При таком определении уравнение (3.5) имеет правильный нерелятивистский предел. Разлагая T в ряд Тейлора по v^2/c^2, мы получим

$$T = mc^2 \left[\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2} - 1 \right] = mc^2 \left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{v^2}{c^2}\right) + \frac{3}{8}\left(\frac{v^2}{c^2}\right)^2 + \ldots - 1 \right]$$

или

$$T = \frac{1}{2} mv^2 \left[1 + \frac{3}{4}\frac{v^2}{c^2} + \ldots \right]. \tag{3.9}$$

Уравнение (3.9) совпадает с уравнением (3.5) при v^2/c^2 малом по сравнению с единицей. На рис. 3.3 приведены кривые зависимости кинетической энергии от скорости для нерелятивистского (кривая *1*) случая (3.5), первого релятивистского (кривая *2*) приближения (3.9) и для точной (кривая *3*) релятивистской формулы (3.8).

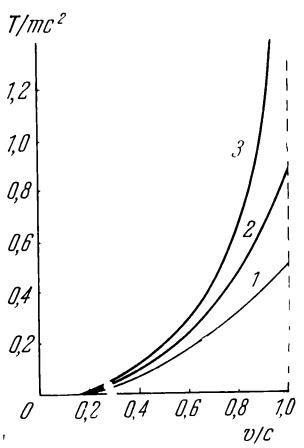


Рис. 3.3.

Вернемся к «постоянной» mc^2, которую мы вычли из $m_r c^2$ при определении T. Этот член mc^2, известный как *энергия покоя*, имеет важное физическое значение. Экспериментально найдено, что эта энергия покоя может быть превращена в другие формы энергии, такие как энергия излучения или кинетическая энергия с соответствующим уменьшением массы покоя. Это превращение может быть полным, как при аннигиляции частицы с античастицей (гл. 17), или частичным, как в случаях ядерного синтеза и деления (гл. 30). Если масса покоя не постоянна, мы должны, конечно, использовать полное соотношение (3.7):

$$W_{12} = \Delta (m\ c^2) = \Delta (T + mc^2). \tag{3.7'}$$

Этот результат, являющийся совершенно общим, может быть сформулирован следующим образом: *работа, произведенная полной силой, действующей на частицу, равна увеличению суммы кинетической энергии и энергии покоя частицы.* Если масса покоя частицы не изменяется, это утверждение сводится к ранее установленному уравнению (3.6).

Используя релятивистские определения импульса $\mathbf{p}$ (уравнение (1.9)) и кинетической энергии T (уравнение (3.8)), можно проверить следующее тождество:

$$p^2c^2 = T\,(T + 2mc^2). \tag{3.10}$$

Это соотношение между импульсом и кинетической энергией широко используется в релятивистской механике. Уравнение (3.10), после того как его разделить на $2mc^2$, принимает форму

$$\frac{p^2}{2m} = T\left(1 + \frac{T}{2mc^2}\right),$$

иллюстрируя, что нерелятивистское приближение $T = p^2/2m$ справедливо при малых $T/2mc^2$, т. е. когда кинетическая энергия мала по сравнению с энергией покоя.

§ 3.3. Потенциальная энергия

В отличие от массы, которая является свойством самой частицы, сила описывает эффект действия посторонних материальных предметов на частицу. Постановка физической задачи состоит, прежде всего, в установлении этих действующих сил (а решение этой задачи состоит в вычислении получающихся в результате движений). Часто, однако, бывает удобнее описывать внешние воздействия через потенциальную энергию. Такое описание полностью эквивалентно описанию с помощью сил, но вычислительная задача может быть при этом упрощена. В этом параграфе мы разовьем дальше понятие потенциальной энергии и увидим, каким образом сохранение полной энергии может продвинуть решение задачи.

Если действующая на частицу сила может быть выражена через ее потенциальную энергию, то можно заметно продвинуться в понимании движения частицы путем качественного рассмотрения потенциальной энергии. В дополнение к этому потенциальная энергия дает возможность сделать шаг в направлении фактического количественного решения уравнений движения. Конечно, не любая сила может быть выражена через потенциальную энергию, в частности сила трения. Однако мы будем в основном касаться микроскопических задач движения атомов и электронов. В этих задачах силы трения отсутствуют, так что эти задачи удобно формулировать с помощью потенциальной энергии (в квантовой механике так делать не только удобно, но и необходимо).

Если потенциальная энергия $V(\mathbf{r})$ существует, то она по определению является такой функцией, отрицательный градиент которой равен силе

$$\mathbf{F} = -\nabla V, \tag{3.11}$$

т. е.

$$F_x = -\partial V/\partial x,\ F_y = -\partial V/\partial y,\ F_z = -\partial V/\partial z.$$

Очевидно, что к $V(\mathbf{r})$ всегда можно прибавить постоянную, не нарушая уравнения (3.11), так как градиент постоянной величины равен нулю. Потенциальные функции, которые отличаются только на постоянную, должны поэтому описывать одно и то же поле сил. На этом основании мы можем свободно прибавлять постоянные к потенциальной энергии без какого-либо изменения физической ситуации.

Примером силы, получаемой из потенциала, является однородная гравитационная сила (уравнение (1.15)):

$$\mathbf{F} = -mg\mathbf{e}_z.$$

Как легко проверить, эта сила получается из потенциальной энергии

$$V = mgz$$

по правилам, данным уравнением (3.11).

Итак, если потенциальная энергия существует, то

$$W_{12} = \int_1^2 \mathbf{F}\,d\mathbf{r} = \int_1^2 (-\nabla V)\,d\mathbf{r} = -\int_1^2 \left(\frac{\partial V}{\partial x}dx + \frac{\partial V}{\partial y}dy + \frac{\partial V}{\partial z}dz\right) = -\int_1^2 dV$$

или

$$W_{12} = -(V_2 - V_1) = -\Delta V, \tag{3.12}$$

где $V_2 \equiv V(\mathbf{r}_2)$ и $V_1 \equiv V(\mathbf{r}_1)$. Работа W_{12}, которую совершает сила $\mathbf{F} = -\nabla V$ над частицей, движущейся вдоль какого-либо пути между точками $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, равна уменьшению потенциальной энергии. Мы не делали нерелятивистских приближений при доказательстве уравнения (3.12), так что этот результат справедлив как в релятивистском, так и в нерелятивистском случаях.

Мы видим, что работа W_{12} зависит лишь от значения потенциальной энергии V в концевых точках пути $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$; она не зависит от формы пути между концевыми точками. В этом отношении такие силы отличаются от сил вообще, работа которых может очень сильно зависеть от пути, как было отмечено в связи с уравнением (3.4). Фактически эта *независимость от пути*, как можно показать, является необходимым и достаточным условием для существования потенциала V, определяемого уравнением (3.11). Действительно, вывод урав-

нения (3.12) показывает, что это условие необходимо; доказательство достаточности требует использования теорем, знание которых мы не предполагаем.

Условие независимости от пути получено в интегральной форме. Эквивалентное необходимое и достаточное условие существования $V(\mathbf{r})$ в *дифференциальной* форме состоит в том, что ротор силы всюду равен нулю $[\nabla \mathbf{F}] = 0$, или согласно уравнению (1.5)

$$\frac{\partial F_y}{\partial z} = \frac{\partial F_z}{\partial y}, \quad \frac{\partial F_z}{\partial x} = \frac{\partial F_x}{\partial z}, \quad \frac{\partial F_x}{\partial y} = \frac{\partial F_y}{\partial x}.$$

Это условие позволяет легко увидеть, является ли сила потенциальной. Нетрудно показать необходимость этого условия (задача 3.5), в то время как доказательство достаточности опять выше наших возможностей.

§ 3.4. Сохранение энергии

Если существует потенциальная энергия, то две теоремы (3.7) и (3.12), которые устанавливают, что произведенная силой работа равна увеличению кинетической энергии и энергии покоя, с одной стороны, и равна уменьшению потенциальной энергии, с другой стороны, могут быть скомбинированы в теорему о *сохранении полной энергии*. Так как $W_{12} = \Delta(T + mc^2)$ и $W_{12} = -\Delta V$, то $\Delta(T + V + mc^2) = 0$, или

$$T + V + mc^2 = \text{const}. \tag{3.13}$$

Этот результат является совершенно общим, при условии, конечно, что потенциальная энергия V существует. *Полная энергия* E, которая является постоянной при движении частицы, определяется как

$$E \equiv T + V + mc^2. \tag{3.14}$$

Каждый раз, когда масса покоя частицы (или системы частиц) остается постоянной, как в случае большинства обычных задач, мы можем также включить постоянную mc^2 в V, которая так или иначе определяется лишь с точностью до постоянной. Тогда мы можем записать энергию в виде

$$E = T + V, \tag{3.15}$$

который для вас, быть может, более привычен. Однако если масса покоя изменяется, то надо изменить соответствующим образом и величину $T + V$, т. е. пользоваться уравнением (3.14).

В отсутствие сил $V = 0$ и частица движется с постоянной энергией

$$E = T + mc^2. \tag{3.16}$$

Подставляя T из уравнения (3.16) в уравнение (3.10), мы получим следующее соотношение между полной энергией и импульсом p *свободной частицы* (т. е. при $V = 0$):

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4. \tag{3.17}$$

Мы найдем этот результат полезным при обсуждении столкновений релятивистских частиц (гл. 6), поскольку он включает две величины — импульс и полную энергию, которые сохраняются при таких столкновениях. Другое выражение для полной энергии свободной частицы, в котором E выражается не через импульс, а через скорость частицы, также полезно для дальнейшего. Это соотношение получается непосредственно подстановкой релятивистски определенной кинетической энергии (уравнение (3.8)) в уравнение (3.16)

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = m_r c^2. \tag{3.18}$$

Так как факт существования потенциальной энергии содержит в себе сохранение полной энергии, то силы, получаемые из потенциала с помощью уравнения (3.11), называются *консервативными*. Такие обсуждавшиеся в первой главе фундаментальные силы, как гравитационная или кулоновская, консервативны в этом смысле. Силы трения не консервативны.

Рассмотрим *нерелятивистское* движение частицы с постоянной массой покоя. Теорема о сохранении полной энергии (уравнение (3.15)) может быть теперь использована следующим образом для получения качественной информации о движении частицы: полная энергия E постоянна и функция V предполагается известной в каждой точке. (Это как раз и есть задание потенциальной энергии V, т. е. сил, действующих на частицу, что соответствует описанию физической ситуации, в которой находится частица.) Тогда, используя закон сохранения энергии, мы можем найти абсолютную величину скорости частицы в каждой точке ее траектории. В нерелятивистском случае $T = \frac{1}{2}mv^2$ и уравнение (3.15) легко решается относительно v:

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}\,[E - V(\mathbf{r})]}. \tag{3.19}$$

Это соотношение не дает полной информации о движении частицы, так как сама траектория неизвестна. Но, как мы увидим, оно часто оказывается полезным.

Такой подход особенно плодотворен, если задача *одномерна*, так как в этом случае закон сохранения энергии ведет к полному решению задачи. Одномерный случай показывает, какого рода сведения могут быть получены из формы потенциальной энергии.

В этом случае потенциальная энергия является функцией лишь от одной пространственной переменной, скажем от x, так что уравнение (3.19) упрощается:

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}[E - V(x)]}. \tag{3.20}$$

Заметим, что скорость частицы зависит от $\sqrt{E - V}$. Таким образом, если полная энергия постоянна и равна E_1 и частица находится вблизи начала координат (рис. 3.4), то она должна оставаться в области $V < E_1$, так как при $V > E_1$ скорость стала бы мнимой. Фактически скорость обращается в нуль в точках $V = E_1$ (где линии пересекаются), а между этими точками кинетическая энергия равна разности величин $E_1 - V$, так что частица должна колебаться вперед и назад в «чаше» под E_1, обращая направление движения ($v = 0$) в точках поворота. Иной тип движения имел бы место, если бы частица начала свое движение на значительном расстоянии вправо от начала координат. Тогда частица двигалась бы налево, теряя скорость с уменьшением $E_1 - V$, затем остановилась бы в точке поворота, после чего начала бы двигаться под действием сил отталкивания вправо, снова удаляясь от начала координат. В чашу частица бы не попала. Вы можете попытаться сами описать, какие движения частицы были бы возможны при полной энергии E_2.

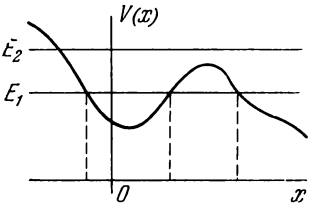


Рис. 3.4.

Такого сорта качественное описание движения напоминает движение игрушечных автомобильчиков, свободно катящихся по искусственной дорожке, имеющей профиль потенциальной кривой. Фактически эта аналогия совершенно точна, так как потенциальная энергия силы тяжести, действующей на автомобильчик (mgz), имеет ту же самую форму, что и дорожка. Таким образом, совершенно законно представлять себе наглядно движение шара, скользящего (без трения) в чаше, имеющей форму потенциальной кривой.

В одномерном случае наш подход ведет также к количественному решению уравнений движения. Так как $v = dx/dt$, то, пользуясь уравнением (3.20), можно записать

$$\int \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}[E - V(x)]}} = \int dt = t. \tag{3.21}$$

Мы свели задачу интегрирования уравнения движения к «квадратуре». Квадратура означает определенный или неопределенный интеграл, который надо взять, а это значительно более простая

задача, чем нахождение решения дифференциального уравнения. (Термин «квадратура» вводится вместо интеграла, потому что решение дифференциального уравнения также называется «интегралом» уравнения, даже если оно не может быть выражено в квадратурах.) Конечно, если интеграл нельзя представить в аналитической форме $t = t(x)$, используя известные функции, и даже если эта операция окажется возможной, вы, быть может, не сумеете решить уравнение $t(x) = t$ относительно $x = x(t)$. Но в любом случае решение имеет форму, в которой конкретное решение легко получить численным методом. При большем же числе измерений задача не всегда может быть приведена к такой простой форме.

Интересно отметить, что ньютоновские уравнения движения являются дифференциальными уравнениями второго порядка (т. е. уравнениями, содержащими производные не выше второй). Такие уравнения должны интегрироваться дважды, для того чтобы получить описание движения в недифференциальной форме. Закон сохранения энергии дает возможность провести одно из интегрирований этих уравнений в самой общей форме (т. е. для любой потенциальной силы). После этого остается проинтегрировать уравнения второй раз. Как мы только что видели, для одномерной нерелятивистской задачи это интегрирование всегда возможно в квадратурах.

§ 3.5. Сохранение момента импульса

Мы видели, что импульс сохраняется в отсутствие внешних сил и что полная энергия сохраняется в потенциальном силовом поле. Теперь мы докажем, что сохраняется момент импульса*) относительно данной точки при условии, что суммарный вращательный момент относительно этой точки равен нулю. Прежде всего мы должны определить момент импульса не твердого тела, а отдельной частицы.

Момент импульса $\mathbf{L}$ относительно точки $\mathbf{r}_0$ частицы, которая находится в точке $\mathbf{r}$ и имеет импульс $\mathbf{p}$, определяется как

$$\mathbf{L} \equiv [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\mathbf{p}]. \tag{3.22}$$

Абсолютная величина $\mathbf{L}$ равна $L = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|\, p \sin\theta = p\rho$, где θ — угол между $\mathbf{r} - \mathbf{r}_0$ и $\mathbf{p}$ (рис. 3.5). Момент импульса равен импульсу p, умноженному на «плечо» $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| \sin\theta$ — расстояние по перпендикуляру от точки $\mathbf{r}_0$ до направления вектора импульса. Аналогично вращательный момент $\mathbf{N}$ относительно точки $\mathbf{r}_0$ определяется как *момент силы* относительно этой точки:

$$\mathbf{N} \equiv [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\mathbf{F}]. \tag{3.23}$$

---

* Иначе называется моментом количества движения. За рубежом принят термин угловой момент. (*Прим. ред.*)

Здесь **F** есть сила, действующая на частицу в точке **r**. Определение вращательного момента, даваемое уравнением (3.23), очевидно, то же самое, что и элементарное определение момента силы, действующей на твердое тело относительно некоторой оси. Сокращенно момент силы выражается через векторное произведение, причем направление этого вектора указывает направление оси, вокруг которой вращательный момент стремится произвести вращение. Связь определения момента импульса (3.22) с определением этой величины через момент инерции и угловую скорость твердого тела не является очевидной. Тем не менее можно показать, что если каждая частица твердого тела обладает моментом импульса согласно вышеприведенному определению и если эти моменты импульса просуммировать по всем частицам тела, то как следствие получится полный момент импульса твердого тела, выраженный обычным образом через его момент инерции. Таким образом, момент импульса отдельной частицы является более фундаментальным понятием. Точно так же как и в случае твердого тела, скорость изменения момента импульса частицы равна действующему на нее моменту силы, что мы сейчас и докажем на основе приведенных выше определений.

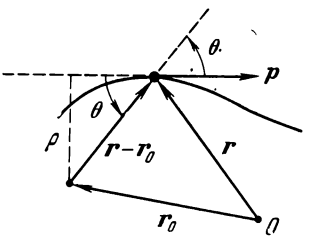


Рис. 3.5.

Нас интересует изменение **L** со временем:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \frac{d}{dt}[(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\,\mathbf{p}] = [\mathbf{vp}] + [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\,\dot{\mathbf{p}}] = [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\,\mathbf{F}] = \mathbf{N}.$$

В этом выводе мы использовали тот факт, что $d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)/dt = \mathbf{v}$, поскольку $\mathbf{r}_0$ постоянно, и что $[\mathbf{vp}]$ исчезает, так как векторы **v** и **p** параллельны даже в релятивистском случае. Мы доказали, используя лишь уравнения движения, что для любых сил скорость изменения со временем момента импульса относительно некоторой точки равна моменту силы относительно этой же точки:

$$\mathbf{N} = \dot{\mathbf{L}}. \tag{3.24}$$

Эта теорема вполне аналогична соотношению между скоростью изменения импульса и силой $\mathbf{F} = \dot{\mathbf{p}}$.

Ясно, что, если момент силы **N** равен нулю, момент импульса **L** является константой движения. В частности, как мы сейчас покажем, частица, движущаяся в любом из силовых полей, называемых *центральными силовыми полями*, сохраняет свой момент импульса относительно силового центра. Силовое поле называется центральным, если для всех **r** вектор силы **F**(**r**) направлен вдоль прямой, проходящей через одну фиксированную точку — силовой центр. Грави-

тационные и кулоновские силы (создаваемые отдельной точечной массой или отдельным точечным зарядом) представляют собой важнейшие примеры центральных силовых полей. Если силовой центр выбран в качестве начала координат, то все центральные силы можно записать следующим образом:

$$\mathbf{F} = F(\mathbf{r})\mathbf{e}_r. \tag{3.25}$$

Здесь $F(\mathbf{r})$ — произвольная скалярная функция $\mathbf{r}$, а $\mathbf{e}_r = \mathbf{r}/r$ — единичный вектор в направлении $\mathbf{r}$. Ясно, что $\mathbf{F}$ проходит через начало отсчета при всех $\mathbf{r}$ (см. рис. 1.8), так что момент силы относительно начала отсчета (силового центра) должен исчезать. Положив в уравнении (3.23) $\mathbf{r}_0 = 0$, получим

$$\mathbf{N} = [\mathbf{r}\mathbf{F}] = rF(\mathbf{r})[\mathbf{e}_r\mathbf{e}_r] = 0.$$

Следовательно, момент импульса относительно начала отсчета сохраняется для всех центральных сил:

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r}\mathbf{p}] = \text{const}. \tag{3.26}$$

Так как $\mathbf{L}$ перпендикулярен $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ (рис. 3.6), то векторы $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ определяют собой плоскость, перпендикулярную $\mathbf{L}$ (если только $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ не параллельны; в этом случае $\mathbf{L}$ равен нулю). Если $\mathbf{L}$ постоянен, как в случае центральных сил, то эта плоскость все время остается фиксированной. Так как вектор $\mathbf{r}$, указывающий положение частицы, всегда лежит в этой плоскости, движение должно быть не трехмерным, а двумерным. Движение в центральном силовом поле, другими словами, *ограничено плоскостью*, содержащей силовой центр и перпендикулярной постоянному вектору момента импульса.

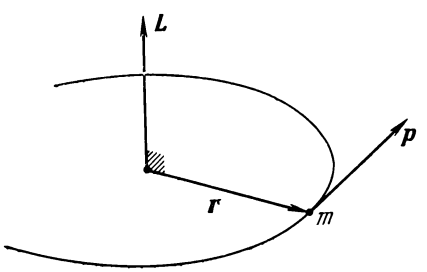


Рис. 3.6.

Для того чтобы лучше почувствовать, что представляет собой момент импульса $\mathbf{L}$ частицы, давайте разложим вектор импульса $\mathbf{p}$ в специально выбранной координатной системе. В некоторый момент времени пусть фиксированы два из трех взаимно перпендикулярных единичных вектора $\mathbf{e}_r$ и $\mathbf{e}_\perp$, лежащих в плоскости $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Один из них, $\mathbf{e}_r$, направлен вдоль $\mathbf{r}$ — вектора, идущего от силового центра к частице. Тогда мы можем записать

$$\mathbf{p} = p_r\mathbf{e}_r + p_\perp\mathbf{e}_\perp.$$

Радиальная компонента не дает вклада в момент импульса: $\mathbf{L} = [\mathbf{r}\mathbf{p}] = rp_\perp[\mathbf{e}_r\mathbf{e}_\perp]$. Так как $[\mathbf{e}_r\mathbf{e}_\perp]$ равно единице, мы имеем $L^2 = r^2p_\perp^2$ или $p_\perp^2 = L^2/r^2$.

В нерелятивистском случае *кинетическая энергия*, следовательно, равна

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_r^2 + p_\perp^2) = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}\right). \qquad (3.27)$$

результат, который окажется полезным в дальнейшем, а именно, мы увидим, что $L^2/2mr^2$ есть кинетическая энергия, связанная с движением, перпендикулярным $\mathbf{r}$. Так как $p_r = mv_r = m\dot{r}$, уравнение (3.27) можно также записать в форме

$$T = m\dot{r}^2/2 + L^2/(2mr^2). \qquad (3.28)$$

До сих пор в этой главе мы ограничивались обсуждением момента импульса отдельной частицы. Теперь мы обратим ваше внимание на *систему* из двух и более частиц. Рассмотрим частицу массы m_1 и импульса $\mathbf{p}_1$ в точке $\mathbf{r}_1$ и вторую частицу массы m_2 и импульса $\mathbf{p}_2$ в точке $\mathbf{r}_2$. Мы уже установили, что в отсутствие внешних сил полный импульс сохраняется: $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \text{const}$ (уравнение (3.2)). Полный момент импульса двухчастичной системы относительно любой точки, которую мы можем произвольно выбрать в качестве начала отсчета, определяется как $\mathbf{L} = [\mathbf{r}_1\mathbf{p}_1] + [\mathbf{r}_2\mathbf{p}_2]$. Скорость изменения $\mathbf{L}$ со временем равна

$$\dot{\mathbf{L}} = [\dot{\mathbf{r}}_1\mathbf{p}_1] + [\mathbf{r}_1\dot{\mathbf{p}}_1] + [\dot{\mathbf{r}}_2\mathbf{p}_2] + [\mathbf{r}_2\dot{\mathbf{p}}_2] = [\mathbf{r}_1\dot{\mathbf{p}}_1] + [\mathbf{r}_2\dot{\mathbf{p}}_2].$$

Здесь мы использовали тот факт, что векторное произведение параллельных векторов равно нулю. При отсутствии внешних сил производная $\dot{\mathbf{p}}_1$, равная силе $\mathbf{F}_{12}$, действующей на частицу *1* со стороны частицы *2*, должна быть равна и противоположно направлена $\dot{\mathbf{p}}_2$, т. е. силе $\mathbf{F}_{21}$, действующей на частицу *2* со стороны частицы *1*. Отсюда

$$\dot{\mathbf{L}} = [(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\mathbf{F}_{12}].$$

Если мы примем во внимание, что сила $\mathbf{F}_{12}$ действует вдоль вектора $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, соединяющего две частицы, как это обычно имеет место, то, следовательно, $\dot{\mathbf{L}} = 0$, или полный момент импульса сохраняется:

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 = \text{const}. \qquad (3.29)$$

Этот результат можно распространить на систему из любого числа частиц при условии, что внутренние силы между парами частиц действуют вдоль соединяющей их линии. Закон сохранения может быть сформулирован в совершенно общем виде (включающем релятивистский случай) следующим образом: *полный момент импульса*

системы N частиц сохраняется при отсутствии внешних моментов сил:

$$\sum_{i=1}^{N} \mathbf{L}_i = \text{const}. \tag{3.30}$$

Возвращаясь к системе из двух частиц в отсутствие внешних сил, мы можем предположить, что полный импульс не только сохраняется, но и равен нулю, т. е. мы будем работать в так называемой *системе покоя* двух частиц:

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = 0. \tag{3.31}$$

Тогда момент импульса относительно точки $\mathbf{r}_0$ равен

$$\mathbf{L} = [(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0)\mathbf{p}_1] + [(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_0)\mathbf{p}_2] = [\mathbf{r}_1\mathbf{p}_1] + [\mathbf{r}_2\mathbf{p}_2] = [(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\mathbf{p}_1]. \tag{3.32}$$

Мы имеем здесь к тому же интересный результат: момент импульса не зависит от точки $\mathbf{r}_0$, т. е. в системе покоя он будет одним и тем же относительно любой точки. В частности, он равен моменту импульса частицы *1* относительно мгновенного положения частицы *2* (и, очевидно, наоборот).

Суммируя результаты этого параграфа, мы видим, прежде всего, что если единичная частица движется в данном силовом поле, то момент импульса (относительно определенной точки) является постоянным, если момент силы (относительно той же точки) равен нулю. Этот результат аналогичен постоянству импульса частицы, когда сила равна нулю. В частности, для всех центральных сил момент импульса относительно силового центра является постоянным. Во-вторых, мы убедились, что полный момент импульса системы частиц является постоянным, если моменты внешних сил не действуют на систему, при условии, что внутренние силы между любой парой частиц действуют вдоль линии, соединяющей частицы. Этот результат аналогичен постоянству полного импульса системы частиц в отсутствие внешних сил.

§ 3.6. Приведенная масса

Мы закончим эту главу введением понятия приведенной массы, которое очень удобно для применения при анализе движения любой системы из *двух* взаимодействующих частиц, т. е. для так называемой *задачи двух тел*. Эффект перехода к приведенной массе состоит в сведении задачи двух тел к эквивалентной одночастичной задаче или, что то же самое, к задаче одного тела. Таким образом, любая задача двух тел с заданной силой взаимодействия может быть решена, если может быть решена соответствующая задача для од-

ной частицы, движущейся вокруг фиксированного силового центра под влиянием той же силы. (С другой стороны, можно показать, что проблема трех тел не может быть решена до конца.) Этот результат послужит оправданием сделанному в связи с уравнением (1.12) утверждению о том, что если одна из двух частиц много массивнее другой, то массивная частица остается почти неподвижной. Нам осталось лишь сделать допущение, что движение является нерелятивистским и что мы находимся в системе покоя нашей физической системы, где полный импульс равен нулю. Тогда уравнение (3.31) примет вид

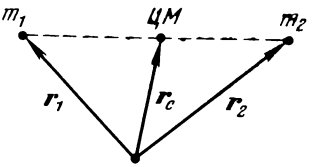


Рис. 3.7.

$$m_1\dot{\mathbf{r}}_1 + m_2\dot{\mathbf{r}}_2 = 0.$$

Проинтегрировав это уравнение, мы придем к заключению, что $m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2 = \text{const}$. Постоянная интегрирования (вектор) обычно записывается как $(m_1 + m_2)\mathbf{r}_c$, где вектор $\mathbf{r}_c$ дает положение *центра масс* (*ЦМ*, рис. 3.7), так что

$$m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2 = (m_1 + m_2)\mathbf{r}_c. \tag{3.33}$$

Так как $\mathbf{r}_c$ постоянно, мы можем также выбрать центр масс в качестве начала отсчета ($\mathbf{r}_c = 0$). В этом случае $\mathbf{r}_2$ прямо пропорционально $\mathbf{r}_1$:

$$\mathbf{r}_2 = -\frac{m_1}{m_2}\mathbf{r}_1. \tag{3.34}$$

Смысл этого результата состоит в том, что если мы знаем $\mathbf{r}_1$, как функцию времени, то мы также имеем решение и для движения частицы *2*. И наоборот, если мы знаем относительное расстояние между двумя частицами ($\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$), как функцию времени, то мы можем найти решения в отдельности для $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, используя уравнение (3.34). Кроме того, мы знаем, что центр масс двух частиц остается в покое (в системе покоя). Нам остается теперь показать, как вычисляется относительное расстояние $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ между двумя частицами.

Решение для относительного движения фактически эквивалентно решению для движения одной (фиктивной) частицы в центральном силовом поле. Это становится очевидным, если переписать уравнение (3.34) в форме, разрешенной относительно вектора $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$:

$$\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \frac{m_1}{m_2}\mathbf{r}_1 = \frac{m_1 + m_2}{m_2}\mathbf{r}_1$$

или

$$\mathbf{r}_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

Теперь мы можем подставить это значение $\mathbf{r}_1$ в уравнение движения для частицы *1*:

$$\mathbf{F}_{12} = m_1\ddot{\mathbf{r}}_1.$$

В результате получим

$$\mathbf{F}_{12} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}(\ddot{\mathbf{r}}_1 - \ddot{\mathbf{r}}_2).$$

Если мы определим *приведенную массу* как

$$m \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{3.35}$$

и запишем относительное расстояние как $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \mathbf{r}_{12}$, то уравнение движения примет вид

$$\mathbf{F}_{12} = m\ddot{\mathbf{r}}_{12}. \tag{3.36}$$

Обычно сила $\mathbf{F}_{12}$ направлена по $\mathbf{r}_{12}$ (и является функцией $\mathbf{r}_{12}$). Мы видим, следовательно, что задача двух тел при силах взаимодействия, направленных вдоль линии, соединяющей две частицы, эквивалентна задаче об одной фиктивной частице, движущейся с приведенной массой в центральном силовом поле.

Если масса m_1 одной из частиц много меньше массы m_2 другой частицы, то приведенная масса приблизительно равна меньшей из двух масс:

$$m = m_1 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \approx m_1, \qquad m_1 \ll m_2.$$

В этих случаях (например, движения малой планеты вокруг Солнца или электрона вокруг ядра) приближенно можно принять, что тяжелая частица покоится, а легкая движется вокруг нее, так как согласно уравнению (3.34)

$$|\dot{\mathbf{r}}_2| = \frac{m_1}{m_2}|\dot{\mathbf{r}}_1| \ll |\dot{\mathbf{r}}_1|.$$

Однако, если обе массы равны ($m_1 = m_2$), приведенная масса равна половине любой из масс (например, для двухнуклонного ядра — дейтрона) и ясно, что мы не можем считать любую из частиц покоящейся. Задача от этого не становится сложнее, но использование приведенной массы в наших уравнениях становится необходимым.

Возможно, стоит подчеркнуть, что полный момент импульса $\mathbf{L}$ системы двух частиц также выражается через приведенную массу и расстояние $\mathbf{r}_{12}$ между частицами

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r}_{12} m\dot{\mathbf{r}}_{12}]. \tag{3.37}$$

Момент импульса тем самым будет таким же, как для фиктивной частицы с приведенной массой m, если бы она двигалась вокруг фиксированного начала отсчета на расстоянии $\mathbf{r}_{12}$. Этот результат просто получается из уравнений (3.32) и (3.34), что мы оставляем в качестве упражнения (см. задачи 3.11 и 3.13).

Задачи

3.1. Получить уравнение (3.3) для произвольного числа частиц.

3.2. Допустим, частица входит в вязкую среду, где действуют только силы, определяемые уравнением (1.17). Какую форму примет траектория частицы? Вычислить длину пути с помощью теоремы о кинетической энергии (уравнение (3.6)), если частица в начале имеет скорость v_0; выразить v_0 через путь R. (Аналогичная ситуация иногда используется для нахождения скорости ядерной частицы по ее «пробегу» R в определенной среде. В этом случае сила не определяется уравнением (1.17).)

3.3. Проделать полный вывод уравнения (3.7).

3.4. а) Пусть электрон имеет скорость, равную 1/10 скорости света. Сравнить его настоящую кинетическую энергию с кинетической энергией в нерелятивистском приближении.

б) Чему равна кинетическая энергия электрона, движущегося со скоростью, составляющей 99,99% от скорости света?

3.5. Показать, что соотношение $[\Delta \mathbf{F}] = 0$ является необходимым условием существования потенциальной функции V такой, что $\mathbf{F} = -\Delta V$.

3.6. Существует ли потенциал V для следующих сил:

$$\text{а) } F_x = y, \quad F_y = x, \quad F_z = 0,$$

$$\text{б) } F_x = y, \quad F_y = y, \quad F_z = 0?$$

Если да, то найти его.

3.7. Потенциальная энергия электрона в поле молекулы водорода H_2^+ равна

$$V = -\frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2},$$

где r_1 и r_2 — расстояния электрона от двух ядер, находящихся в точках $(-d/2, 0, 0)$ и $(d/2, 0, 0)$ соответственно. Вычислить силу, действующую на электрон.

3.8. Пусть потенциальная энергия одномерного движения частицы вдоль оси x равна

$$V = -\frac{1}{x} + \frac{1}{x^2}.$$

Начертить кривую потенциальной энергии и дать качественное заключение о типах движения, которые могут здесь реализоваться.

3.9. Решить задачу о движении в постоянном гравитационном поле, используя первый интеграл, даваемый законом сохранения энергии. Другими словами, для силы $\mathbf{F} = -mg\mathbf{e}_z$, используя потенциальную энергию, провести интегрирование и разрешить получившуюся функцию относительно $z(t)$.

3.10. Пусть частица массы m движется по окружности радиуса r вокруг начала отсчета. Чему равны величина и направление ее момента импульса относительно начала отсчета?

3.11. Вывести уравнение (3.37).

3.12. Показать, что в системе покоя (где центр масс покоится) кинетическая энергия системы двух частиц равна $T = \frac{1}{2} m v_{12}^2$, где m — приведенная масса, v_{12} — относительная скорость.

3.13. Рассмотреть равномерное круговое движение двух частиц с массами m_1 и $m_2 = 2m_1$ вокруг их центра масс, который выбран в качестве начала отсчета. Чему равна приведенная масса? Если окружность, описываемая массой m_1, имеет радиус r_1, то каков радиус окружности, описываемой массой m_2? Период одного оборота массы m_1 равен P_1. Чему равен период обращения массы m_2? Описать движение «фиктивной частицы» с приведенной массой. Если это окружность, то каков ее радиус? Если движение периодическое, то чему равен этот период? Проверить, что момент импульса двух частиц равен моменту импульса фиктивной частицы с приведенной массой.

Литература для справок

1. Голдстейн Г., Классическая механика, Гостехиздат, 1957.
2. Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М., Механика, «Наука», 1965.

Глава 4

Гармонический осциллятор

Развитая в предыдущих параграфах теория, базирующаяся на потенциальности сил и сохранении энергии, будет теперь применена к двум задачам, которые окажутся очень важными для обсуждения механики движения атомов. Более легкой является задача о гармоническом осцилляторе, которая существенно одномерна и будет обсуждена в первую очередь. Далее будет разобрана задача о движении частицы в поле силы, обратно пропорциональной квадрату расстояния. Последняя часто называется задачей о планетарных движениях, поскольку самые первые исследования движений такого рода относились к изучению движения планет по их орбитам вокруг Солнца. Движение планет, как мы увидим, является существенно двумерной задачей. (Существенно трехмерная задача часто не имеет точного решения.)

Трехмерная гармоническая сила (уравнение (1.16)) *определяется, как* $\mathbf{F} = -K\mathbf{r} = -Kr\mathbf{e}_r$, $\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z$, *где* $\mathbf{e}_r$ *— единичный вектор в направлении* $\mathbf{r}$, *а* r *— длина* $\mathbf{r}$. *Эта сила пропорциональна расстоянию частицы от начала координат и всегда притягивает частицу к началу. Очевидно, что такой осциллятор является обобщением обычного одномерного. Трехмерный осциллятор не так легко продемонстрировать на модели, как одномерный осциллятор, который может быть представлен массой на пружинке. Но это неудобство не столь большая беда, ибо, как мы увидим, трехмерный осциллятор в действительности представляет собой не что иное, как три одномерных осциллятора. (Маятник, способный двигаться во всех направлениях, при малых амплитудах ведет себя как двумерный гармонический осциллятор.)*

§ 4.1. Одномерный осциллятор

Если векторное уравнение движения

$$\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}} = -K\mathbf{r}$$

расписать в компонентах, то получатся три скалярных уравнения:

$$F_x = m\ddot{x} = -Kx,$$
$$F_y = m\ddot{y} = -Ky,$$
$$F_z = m\ddot{z} = -Kz.$$

Каждая координата поэтому изменяется сама по себе, так же как и в случае одномерного гармонического осциллятора (как говорят, уравнения являются разделяющимися), и чтобы получить трехмерное движение, нам надо образовать вектор с компонентами $x(t)$, $y(t)$, $z(t)$. Этот метод мы используем в дальнейшем, а сначала решим одномерную задачу на основе представлений о потенциальной энергии.

Одномерная линейная сила получается из потенциальной энергии (как фактически все одномерные силы, которые зависят лишь от положения).

Очевидно,

$$F_x = -Kx = -dV/dx,$$

причем $V = \frac{1}{2} Kx^2$. Вы проверите потом (задача 4.1), что трехмерная сила получается из потенциальной энергии

$$V = \frac{1}{2} Kx^2 + \frac{1}{2} Ky^2 + \frac{1}{2} Kz^2 .$$

согласно выражению

$$\mathbf{F} = -\nabla V.$$

Одномерная потенциальная кривая (рис. 4.1) является параболой, симметричной относительно $x = 0$, которая определяется уравнением

$$V(x) = \frac{1}{2} Kx^2. \tag{4.1}$$

Вершину параболы можно поместить в начало координат, поскольку к потенциальной энергии можно добавить любую постоянную. Так как сила является производной от потенциальной энергии, то любая постоянная может быть прибавлена к потенциальной энергии без изменения получаемой из нее силы. Так что потенциальная энергия (и, следовательно, также полная энергия) определяется лишь с точностью до *произвольной аддитивной постоянной.*

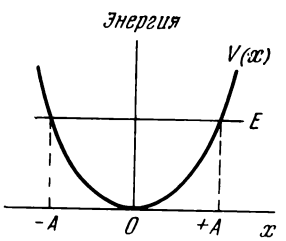


Рис. 4.1.

Если полная энергия частицы равна постоянной E, мы видим качественно (рис. 4.1), что ее движение представляет собой колебания вперед и назад между точками $x = +A$ и $x = -A$. Величина A определяется тем фактом, что линии E и V пересекаются при $x = \pm A$, так что $E = V(A)$. Следовательно,

$$E = \frac{1}{2} KA^2. \tag{4.2}$$

Чем больше величина A, тем выше полная энергия E.

Частица приближается к точке $x = +A$ с абсолютной скоростью, которая уменьшается как $\sqrt{E - V}$; когда $V = E$, скорость обращается в нуль, частица поворачивает назад и ускоряется по направлению к началу отсчета, где скорость и кинетическая энергия максимальны. Затем она снова замедляется, останавливается и поворачивает назад при $x = -A$ и т. д. Максимальная скорость в начале отсчета может быть найдена очень просто из уравнения (3.20):

$$v = \sqrt{2(E - V)/m},$$

так как $V = 0$ при $x = 0$. Следовательно, $v(0) = v_{\max} = \sqrt{2E/m}$. При подстановке зависимости величины E от A из уравнения (4.2) это выражение принимает вид $v_{\max} = A\sqrt{K/m}$. Мы можем поэтому также записать

$$v_{\max} = A\omega_0, \tag{4.3}$$

где

$$\omega_0 = \sqrt{K/m}. \tag{4.4}$$

(Заметим, что новая постоянная ω_0 должна иметь размерность, обратную времени, так как A имеет размерность длины, а v — длины на время; как мы увидим ниже, ω_0 действительно связана с частотой колебательного движения частицы).

Используя энергетический подход, мы можем выяснить кое-какие свойства движения из уравнений (4.2) и (4.3), не производя вообще никакого интегрирования. Движение является *периодическим*. Максимальное отклонение от начала отсчета (в любом направлении, так как потенциальная энергия симметрична) равно *амплитуде* A. Полная энергия E пропорциональна A^2. Она также пропорциональна постоянной K, определяющей *величину* возвращающей силы. Для заданной амплитуды максимальная скорость велика при большой силе (большие K), но мала для тяжелой частицы (большие m). Очевидно, движение является периодическим, как бы ни была велика его амплитуда, так как параболическая кривая возрастает до бесконечности.

Интересно также узнать время, требуемое для одного полного колебания, т. е. период движения. Такого рода информация не может быть получена без фактического решения задачи о движении частицы, т. е. без определения ее координаты как функции времени $x = x(t)$. Это значит, что необходимо провести второе интегрирование уравнения движения, для того чтобы получить *полное решение*. Мы найдем квадратуру методом, объясненным в общем виде в § 3.4. Используя уравнение (3.2), получим

$$v = dx/dt = \sqrt{(2E - Kx^2)/m}$$

или

$$t = \int dt = \int \frac{dx}{\sqrt{(2E - Kx^2)/m}}. \tag{4.5}$$

Интегрирование может быть проведено с помощью замены переменных, в результате которой из-под радикала исчезают все константы:

$$\frac{\sqrt{\frac{2E}{K}}\, d\left(\sqrt{\frac{K}{2E}}\, x\right)}{\sqrt{\frac{2E}{m}}\sqrt{1 - \frac{K}{2E}\, x^2}} = \frac{1}{\omega_0} \frac{d\xi}{\sqrt{1 - \xi^2}},$$

где $\xi \equiv \sqrt{\frac{K}{2E}}\, x = \frac{x}{A}$. Если мы теперь произведем тригонометрическую подстановку $\sin\theta \equiv \xi$, то

$$\frac{1}{\omega_0} \frac{d\xi}{\sqrt{1 - \xi^2}} = \frac{1}{\omega_0} d\theta,$$

так как $d\xi = \cos\theta\, d\theta$ и $1 - \xi^2 = 1 - \sin^2\theta = \cos^2\theta$.

Теперь уравнение (4.5) преобразуется в уравнение

$$t = \int \frac{1}{\omega_0} d\theta.$$

Это преобразованное уравнение имеет тривиальный интеграл

$$\theta = \omega_0 t + \varphi,$$

где φ — произвольная постоянная интегрирования. Возвращаясь к первоначальным переменным, с помощью двух преобразований переменных получим

$$x = A \sin(\omega_0 t + \varphi). \tag{4.6}$$

Уравнение (4.6) дает искомое полное решение $x = x(t)$ задачи об одномерном гармоническом осцилляторе.

Из уравнения (4.6) сразу можно увидеть, что *период* движения равен

$$P = 2\pi/\omega_0,$$

так как x принимает снова те же значения, когда t увеличится на $2\pi/\omega_0$. Это значит, что $x(t') = x(t)$, если $t' = t + 2\pi/\omega_0$, что можно увидеть, подставив t' в уравнение (4.6). *Частота* колебаний $\nu = 1/P$, так что

$$\nu = \omega_0/(2\pi). \tag{4.7}$$

Параметр ω_0 называется *циклической частотой*. Произвольная постоянная φ определяет фазу движения (рис. 4.2). Ее смысл сво-

дится всего лишь к выбору начала отсчета времени. (Для многомерного движения эта фаза имеет несколько большее значение.) Однако вторая из двух произвольных постоянных, возникающая в процессе интегрирования уравнения второго порядка, имеет более важное физическое значение. Этой произвольной постоянной является полная энергия E частицы. Решение, выраженное через эти две произвольные постоянные, получается подстановкой выражений (4.2) и (4.4) в уравнение (4.6):

$$x(t) = \sqrt{\frac{2E}{K}} \sin\left(\sqrt{\frac{K}{m}}\, t + \varphi\right).$$

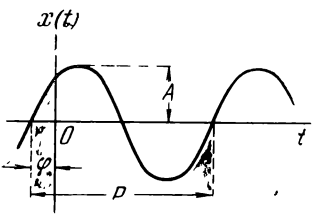


Рис. 4.2.

Резюмируя, отметим, что E и φ — произвольные постоянные интегрирования (которые имеют физический смысл), K описывает окружение частицы — действующую на нее упругую силу, и m — свойства самой частицы, ее массу.

Решение, даваемое уравнением (4.6), может быть представлено в другой форме, которая часто оказывается полезной. Разлагая синус по формуле для синуса суммы двух углов, получим

$$x = A \sin(\omega_0 t + \varphi) = A \cos\varphi \sin\omega_0 t + A \sin\varphi \cos\omega_0 t.$$

Таким образом, то же решение может быть записано в форме

$$x = a \sin\omega_0 t + b \cos\omega_0 t, \tag{4.8}$$

где

$$a \equiv A\cos\varphi, \quad b \equiv A\sin\varphi.$$

Это — одна из форм общего решения с двумя произвольными постоянными a и b, которые связаны с постоянными A и φ. И обратно, любое решение в форме уравнения (4.8) может быть выражено в форме уравнения (4.6), где

$$\varphi \equiv \operatorname{arctg}\frac{b}{a}, \quad A \equiv \sqrt{a^2 + b^2}.$$

Отсюда мы видим, что функции синус и косинус имеют то интересное свойство, что сумма любых двух из них (с одинаковыми частотами) равна синусу (или косинусу) с различными амплитудой и фазой. Этот факт означает, что синусоидальное и косинусоидальное решения могут по выбору использоваться в любой комбинации, а их амплитуды и фазы будут связаны соотношениями, приведенными выше. Эти соотношения отражают гибкость математической формы решения, так что мы можем выбирать ту из этих форм, которая более удобна для наших непосредственных целей. Эта гибкость математической формы решения будет использована в гл. 16.

§ 4.2. Двумерный осциллятор

Теперь мы рассмотрим задачу объединения синусоидального движения трех одномерных колебаний, с тем чтобы получить решение для общего случая трехмерного гармонического осциллятора. Прежде всего, отметим, что гармоническая сила осциллятора

$$\mathbf{F} = -K\mathbf{r}\mathbf{e}_r.$$

в соответствии с определением (3.25) является центральной, так что момент импульса частицы, движущейся в этом поле, сохраняет свою величину. Факт сохранения момента импульса означает, что, хотя

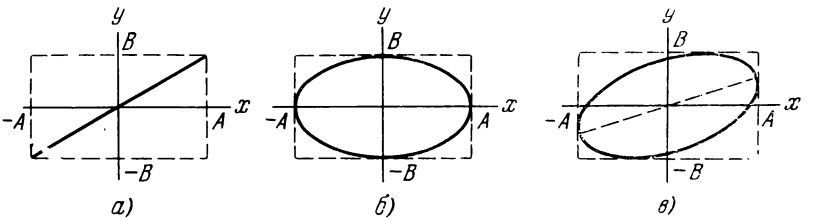


Рис. 4.3.

частица и имеет возможность двигаться в трех измерениях, ее движение в действительности ограничено одной плоскостью. (Эта плоскость определяется начальными условиями движения). Так как эта плоскость может быть выбрана в качестве координатной плоскости xy, то достаточно рассмотреть объединение только двух осцилляторов вместо трех.

Пусть решения $x = x(t)$ и $y = y(t)$ имеют вид

$$x = A \sin(\omega_0 t + \varphi),$$
$$y = B \sin(\omega_0 t + \psi).$$

Предположим сначала, что оба движения имеют *одну и ту же фазу*. Тогда $\varphi = \psi$ и, разделив первое уравнение на второе, для того чтобы исключить t мы получим *уравнение траектории*

$$y/x = B/A.$$

Эта траектория является прямой линией, проходящей через начало координат с наклоном B/A (рис. 4.3, *а*). Теперь предположим, что фазы движений различаются на 90°, так что $\psi = \varphi + \pi/2$. Тогда

$$y = B \cos(\omega_0 t + \varphi)$$

и, возведя в квадрат и складывая оба уравнения, мы получим для траектории уравнение

$$(x/A)^2 + (y/B)^2 = 1.$$

Эта траектория представляет собой эллипс, у которого горизонтальная полуось равна A, а вертикальная B (рис. 4.3, *б*). (При $A = B$ траектория становится окружностью.) Все остальные промежуточные случаи представляют собой наклоненные эллипсы (рис. 4.3, *в*), что интуитивно чувствуется на основе двух приведенных предельных случаев, хотя фактический геометрический анализ довольно громоздок. Так как все эти результаты в последующем нам не понадобятся, то мы опустим дальнейший анализ задачи и подчеркнем лишь еще раз, что в любом случае движение может быть разложено на два одномерных гармонических движения с одной и той же частотой. Очень важным практическим применением этой теории является анализ синусоидальных электрических сигналов, появляющихся в осциллографе. Относительные амплитуды и фазы двух сигналов могут быть измерены по виду эллипса. (В осциллографе оба сигнала могут иметь также различные частоты; в этом случае возникают более сложные фигуры Лиссажу типа восьмерок. Такого рода «траектории» не могут возникнуть при центральных силах.)

§ 4.3. Затухающее гармоническое движение

В порядке отступления рассмотрим здесь другой математический подход к задаче об одномерном гармоническом осцилляторе, поскольку этот подход применим и при наличии затухания. Примем в качестве первого приближения, что вызывающая затухание сила линейно зависит от скорости (т. е. пропорциональна ей), точно так же как гармоническая возвращающая сила линейно зависит от смещения относительно начала координат. Это означает, что мы добавляем силу $-R\dot{r}$, которая всегда противоположна движению частицы. Такого рода закон силы применим, например, для простого маятника, движение которого затухает за счет сопротивления воздуха в соответствии с уравнением (1.18). Переменные остаются разделяющимися, так что достаточно рассмотреть одномерное движение:

$$F_x = -Kx - R\dot{x} = m\ddot{x}.$$

Эта сила, очевидно, не может быть производной по x ни от какой функции x, так как она зависит как от $\dot{x}$, так и от x. Следовательно, мы не можем использовать метод потенциальной энергии. Но, переписав это уравнение движения в форме

$$\ddot{x} + 2b\dot{x} + \omega_0^2 x = 0, \quad b \equiv R/(2m), \quad \omega_0^2 \equiv K/m,$$

мы видим, что по-прежнему имеется линейное однородное дифференциальное уравнение с постоянными коэффициентами («линейное» означает уравнение, которое не содержит степени функции $x(t)$ или ее производных выше, чем первая; «однородное» означает,

что оно не содержит членов со степенями ниже, чем первая, т. е. не имеет постоянных членов). Мы можем поэтому применить прием, который дает решение любого такого уравнения произвольного порядка (он одновременно справедлив для любой системы линейных однородных уравнений любого порядка с постоянными коэффициентами), который состоит в поиске решения в форме $\exp \lambda t$. Поступив так, мы получим алгебраическое уравнение

$$\lambda^2 + 2b\lambda + \omega_0^2 = 0.$$

Очевидно, что эта подстановка всегда будет давать алгебраическое уравнение, которому должно удовлетворять λ. Это — реальное достижение, так как алгебраическое уравнение, независимо от того, насколько трудно оно решается, всегда легче, чем аналогичное дифференциальное уравнение. Эта подстановка сводит задачу к нахождению такого λ (решению алгебраического уравнения), которое делает предположенное решение $x = \exp \lambda t$ действительно удовлетворяющим дифференциальному уравнению.

Так как алгебраическое уравнение квадратное, то решение будет простым:

$$\lambda = -b \pm \sqrt{b^2 - \omega_0^2}.$$

Мы сосредоточим внимание на случае, когда затухание мало, т. е. будем считать, что $b^2 \ll \omega_0^2$. Поскольку корень $\sqrt{b^2 - \omega_0^2}$ — мнимая величина, то мы можем записать

$$\lambda = -b \pm i\omega, \text{ где } i \equiv \sqrt{-1}, \quad \text{а} \quad \omega \equiv \sqrt{\omega_0^2 - b^2}.$$

Знаки $\pm$ показывают, что мы имеем два решения, соответствующие двум значениям λ, так что решение можно записать в форме

$$x = e^{-bt}(A_1 e^{i\omega t} + A_2 e^{-i\omega t}),$$

где A_1 и A_2 — две произвольные постоянные общего решения уравнения второго порядка. Вы можете проверить, что для любого линейного однородного уравнения решение, умноженное на постоянную, также является решением (т. е. любая линейная комбинация решений является решением).

Применяя это к только что полученному нами решению, положим, что $A_1 = Ae^{i\varphi}$, $A_2 = 0$. (Так как мы допускаем комплексные числа в нашем рассмотрении, то мы можем также считать комплексными постоянные A_1 и A_2. Можно выбрать A_1 и A_2 и по-другому; результат будет всегда один и тот же.)

Тогда, используя теорему Муавра, получим

$$x = Ae^{i\varphi}e^{-bt}e^{i\omega t} = Ae^{-bt}[\cos(\omega t + \varphi) + i \sin(\omega t + \varphi)].$$

Если комплексная функция удовлетворяет линейному однородному дифференциальному уравнению, то уравнению должны удовлетворять по отдельности действительная и мнимая части комплексной функции (см. задачу 4.9). Мы можем записать действительное решение уравнения (единственное решение, которое имеет какой-либо физический смысл) как действительную или мнимую части комплексного решения, т. е.

$$x = Ae^{-bt}\sin(\omega t + \varphi). \tag{4.9}$$

Это решение содержит две произвольные постоянные (A, φ), как это и должно быть. Если $b = 0$ (затухание отсутствует), оно сводится к нашему предыдущему решению. Когда $b \neq 0$, частица все еще осциллирует синусоидально со временем, но амплитуда движения экспоненциально уменьшается с постоянной времени b (рис. 4.4): чем больше b, тем быстрее амплитуда движения затухает до нуля. (В данном идеализированном описании она никогда в действительности не достигнет нуля.) Кроме того, частота ω движения несколько меньше, чем собственная частота ($\omega_0 = \sqrt{K/m}$) без затухания. По мере того как амплитуда уменьшается, уменьшается и энергия согласно уравнению (4.2).

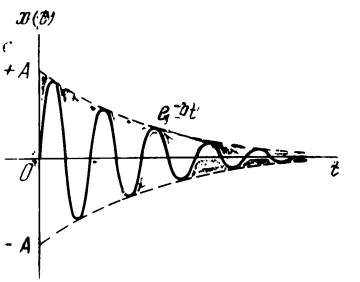


Рис. 4.4.

Затухающий гармонический осциллятор является задачей, которая исключительно важна в практических применениях. Кроме того, даже если мы допустим, что в атомных движениях трение отсутствует, то все же встречаются микроскопические задачи, в которых потери энергии имеют место, что может быть представлено так затухание движения. Проделанный выше анализ применим к этим ситуациям. В этом случае использование графика потенциальной энергии хотя и не может привести к полному и точному решению задачи, но все же может быть полезным для качественного анализа движения.

Наглядное представление о предмете, скользящем вдоль потенциальной кривой, все еще остается законным, но предмет надо себе представлять скользящим с трением. Например, движение предмета, скользящего в параболической потенциальной яме гармонического осциллятора, будет постепенно замирать из-за потерь на трение до тех пор, пока он не остановится в нижней части ямы (в начале отсчета).

§ 4.4. Колебания молекул

В качестве количественного примера одномерного гармонического движения мы можем теперь рассмотреть колебания двухатомной молекулы. Мы увидим в гл. 14, что сила между двумя атомами в молекуле приближенно равна гармонической, подобно силе, создаваемой пружиной:

$$F_x = -Kx.$$

Здесь x представляет собой увеличение расстояния между атомами при отклонении их от равновесия (т. е. величину, на которую растянута «пружина»). Это не полное расстояние между атомами, которое больше нуля даже в состоянии равновесия (рис. 4.5). Несмотря на то, что ни один из атомов не находится в покое, понятие приведенной массы (уравнение (3.35)) может быть использовано:

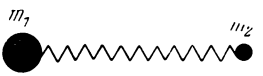


Рис. 4.5.

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Тогда частота колебаний согласно уравнениям (4.7) и (4.4) равна

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{m}}. \tag{4.10}$$

Приведенная масса вычисляется по атомным весам атомов, образующих молекулу. С другой стороны, частоту колебаний можно определить из экспериментальных оптических спектров поглощения газа, состоящего из рассматриваемых молекул. Используя эти данные, вычислим силовую константу K.

Например, для молекулы NaCl атомный вес Na равен 23 и Cl 35,5, так что приведенная масса в «атомных единицах массы» (а. е. м.) равна

$$m = \frac{23 \cdot 35{,}5}{23 + 35{,}5} = 14 \text{ а. е. м.} = 14 \cdot 1{,}67 \cdot 10^{-24} = 2{,}33 \cdot 10^{-23} \text{ г}.$$

Наблюдаемая частота колебания для NaCl равна

$$\nu = 1{,}14 \cdot 10^{13} \text{ сек}^{-1}$$

(это — частота поглощения в инфракрасной области оптического спектра). Тогда с помощью уравнения (4.10) мы найдем

$$K = 1{,}2 \cdot 10^5 \text{ дн/см}.$$

Интересно отметить, что эта постоянная внутриатомной силы, равная примерно 100 $г/см$, имеет тот же порядок, что и силовая постоянная пружины из довольно мягкой стали. Этот факт, хотя он и не имеет глубокого значения, все же дает интуитивное представление о величине межатомных сил.

Мы можем также вычислить энергию этих колебаний. Эта энергия зависит от амплитуды колебаний, которая, очевидно, должна быть меньше равновесного расстояния между атомами (т. е. длины «пружины» в нерастянутом состоянии). Действительно, приближение гармоничности силы справедливо лишь пока амплитуда мала по сравнению с этим расстоянием. Равновесное расстояние может быть измерено (по спектрам или по дифракции электронов), и для NaCl его экспериментальное значение равно 2,5 Å. Мы допустим, что амплитуда A колебаний составляет около 5% от этой величины; скажем, $A = 0{,}14$Å. Тогда из уравнения (4.2) следует, что

$$E = 1/2 \cdot KA^2 = 1/2 \cdot 1{,}2 \cdot 10^5 \times \times 0{,}14^2 \cdot 10^{-16} = 1{,}2 \cdot 10^{-13}\ эрг = = 1{,}2 \cdot 10^{-13} \cdot (1{,}6 \cdot 10^{-12})^{-1} = = 0{,}07\ эв.$$

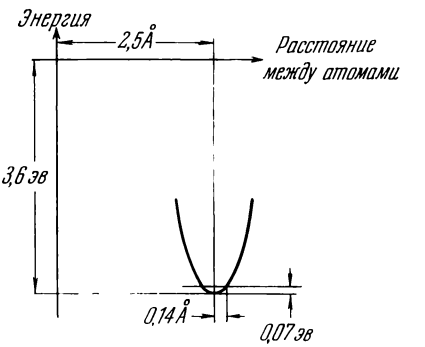


Рис. 4.6.

Это не очень большая энергия в атомных мас штабах. Она составляет лишь около 2% от химической энергии связи (3,6 *эв*) молекулы NaCl. Эти соотношения иллюстрированы на рис. 4.6).

Молекула NaCl может не только поглощать свет, но также и излучать, когда она колеблется. Излучение световой энергии происходит за счет уменьшения энергии колебаний молекулы, так что амплитуда колебаний уменьшается согласно уравнению (4.9).

Постоянная затухания b для этого случая может считаться равной примерно $10^3\ сек^{-1}$, так что возбужденные колебания продолжают существовать лишь около 10^{-3} *сек*. Этот короткий промежуток времени тем не менее огромен по атомным масштабам, так как за это время атом совершит 10^{10} колебаний.

В конце концов, однако, эти колебания затухнут и молекула возвратится в свое низшее энергетическое состояние. То, что в обычном газе молекулы все время находятся в состоянии колебательного движения, происходит из-за того, что они непрерывно возбуждаются за счет тепловой энергии, как мы увидим в гл. 9.

Задачи

4.1. Показать, что сила $\mathbf{F} = -K\mathbf{r}$ может быть выведена из потенциальной энергии

$$V = \frac{1}{2}Kx^2 + \frac{1}{2}Ky^2 + \frac{1}{2}Kz^2.$$

4.2. Показать, что потенциальная энергия $V = {}^1/_2 Kx^2$, усредненная по периоду движения, равна

$$V = {}^1/_4 KA^2.$$

Указание: показать, что $\overline{x^2} = \frac{1}{P}\int_0^P [x(t)]^2\,dt = \frac{1}{2}A^2$

Какова средняя кинетическая энергия?

4.3. Допустим, частица движется в одном измерении с потенциалом

$$V = {}^1/_2 Kx^2 + D/x^2.$$

Построить потенциальную кривую и провести качественное рассмотрение движения. При заданной полной энергии вычислить положение точки поворота.

4.4. Вычислить частоту колебаний тела, массой в 1 *кг*, подвешенного на пружине, имеющей силовую постоянную $K = 10^5$ *дн/см*.

4.5. Найти уравнение траектории двух связанных, перпендикулярных друг другу гармонических колебаний с разностью фаз 45°.

4.6. Показать, что полная энергия E для двумерного осциллятора с амплитудами A и B в направлениях, соответственно, x и y равна

$$E = {}^1/_2 K(A^2 + B^2).$$

Указание: подставить в выражение для энергии решения

$$x = A\sin(\omega_0 t + \varphi),\quad y = B\sin(\omega_0 t + \psi).$$

4.7. Показать, что если для любого линейного однородного уравнения с постоянными коэффициентами $x(t)$ удовлетворяет этому уравнению, то $Ax(t)$ также будет решением, где A — произвольная константа. Показать, также, что если $x_1(t)$ и $x_2(t)$ — два решения того же уравнения, то их сумма $x_1(t) + x_2(t)$ также является решением.

4.8. Показать, что для нелинейного уравнения, например, для уравнения

$$\ddot{x} + cx^2 = 0,$$

утверждения задачи (4.7) не выполняются.

4.9. Предположим, что комплексная функция $z = x + iy$ удовлетворяет дифференциальному уравнению $\ddot{z} + a\dot{z} + bz = 0$, где a и b — действительные постоянные. Показать, что x и y удовлетворяют тому же дифференциальному уравнению. *Указание*: комплексное число равно нулю лишь в том случае, если равны нулю его действительная и мнимая части.

4.10. *Логарифмический декремент затухания* δ гармонического осциллятора определяется как натуральный логарифм двух последовательных смещений, разделенных периодом $P = 2\pi/\omega$:

$$\delta = \ln\frac{x(t)}{x(t+P)}.$$

Показать с помощью уравнения (4.9), что декремент δ постоянен, и найти его величину. (В частности, он равен отношению двух последовательных максимумов.)

4.11. Получить действительное решение для затухающего гармонического осциллятора с большим затуханием и обсудить его движение.

4.12. Интересно сравнить силовые константы для некоторых других щелочно-галоидных молекул с константой для NaCl, вычисленной в § 4.4. Для молекул NaBr, KCl и KBr наблюдаемые частоты колебаний равны 0,94, 0,84 и 0,69 $\cdot 10^{13}$ *сек*$^{-1}$ соответственно. Вычислить приведенные массы для этих молекул и их силовые константы. Имеется ли какая-либо регулярность в изменении силовых констант в зависимости от положения атомов в периодической системе?

4.13. Согласно классической электронной теории интенсивность, с которой заряженная частица излучает энергию (т. е. радиационная мощность), равна

$$\frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\ddot{x}^2,$$

где e — величина заряда электрона.

а) Найти среднюю мощность излучения, используя уравнение (4.6) и выражение $\overline{x^2} = {}^1/_2A^2$ (задача 4.2).

б) Показать, что если затухание мало, скорость, с которой уменьшается энергия осциллятора, определяемая уравнением (4.2), приближенно равна KA^2b. *Указание*: как подсказывает уравнение (4.9), амплитуду следует положить изменяющейся по закону $A = A_0e^{-bt}$.

в) Приравнивая друг другу результаты а) и б), показать, что

$$b \approx \frac{1}{6}\frac{e^2\omega^2}{c^3m}.$$

Литература для справок

1. Голдстейн Г., Классическая механика, Гостехиздат, 1957.
2. Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М., Механика, «Наука», 1965.

Глава 5

Силы, обратно пропорциональные квадрату расстояния

Сила, обратно пропорциональная квадрату расстояния, как и осцилляторная сила, все время направлена к (или все время от) началу координат. Но, вместо того чтобы быть пропорциональной по величине расстоянию от начала координат, она обратно пропорциональна квадрату расстояния, так что

$$\mathbf{F} = -(K/r^2)\mathbf{e}_r, \quad \mathbf{e}_r \equiv \mathbf{r}/r.$$

Здесь $\mathbf{e}_r$ *— единичный вектор в направлении* $\mathbf{r}$, *а* r *— абсолютная величина* $\mathbf{r}$. *Величина* K *является константой, которая может быть положительной или отрицательной. Сначала мы будем считать ее положительной. Например, если сила является гравитационным притяжением (уравнение (1.12)), то*

$$K = GmM,$$

где G *— гравитационная постоянная,* m *— масса частицы и* M *— масса притягивающего тела. Если сила является кулоновским притяжением (уравнение (1.13)), то*

$$K = -q_1 q_2,$$

где q_1 *и* q_2 *— заряды взаимодействующих частиц. В случае гравитации* K *всегда положительна, а в электростатике она может быть и отрицательной (отталкивание), когда два заряда имеют одинаковые знаки.*

В этой главе многие примеры будут взяты из гравитации: обсуждение движения планет, спутников, космических кораблей и т. д. (§5.4). В настоящее время в небесной механике ведутся новые исследования, особенно в связи с практическим интересом к вопросам космической навигации. Эти макроскопические задачи с первого взгляда представляются отступлением от нашей главной линии исследования микроскопической физики. Тем не менее включение таких задач нам кажется оправданным не только потому, что они интересны сами по себе, но и потому, что они могут послужить аналогом для микроскопических систем, в которых силы являются не гравитационными, а электрическими. Так как эти две силы с точностью до численного коэффициента одинаковы, то все результаты, которые мы получим, будут применимы и :

микроскопическим заряженным частицам, по крайней мере в тех не редко встречающихся случаях, когда применима классическая (не квантовая) механика. Таким образом, спутники и планеты дают возможность более привычным и наглядным образом приступить к анализу орбит в поле сил, обратно пропорциональных квадрату расстояния. В последующих главах мы рассмотрим и дополнительные микроскопические примеры.

§ 5.1. Потенциал 1/r

Если записать уравнение движения в декартовых координатах (ср. уравнение (1.12)), то все переменные x, y, z вошли бы в каждое из трех уравнений, что означает, что эти переменные не являются *разделяющимися*. Если уравнение записать в полярных координатах, то переменные станут разделяющимися и уравнение без особых

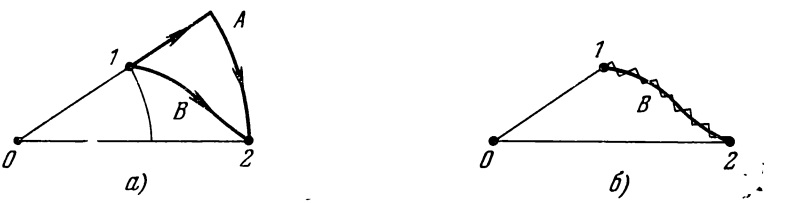


Рис. 5.1.

трудностей решается в замкнутой форме. Однако, этот метод мы не используем. Используя общий признак ($[\nabla \mathbf{F}] = 0$), покажем, что существует потенциальная функция V, из которой может быть получена сила. Найдем потенциальную энергию V и извлечем из нее как можно больше информации.

Покажем, что в действительности $V = -K/r$. Содержащаяся в V произвольная постоянная выбрана так, чтобы при $r = \infty$ было $V = 0$, в соответствии с общепринятым соглашением для сил, обратно пропорциональных квадрату расстояния. Для того чтобы найти V, заметим сначала, что

$$2\mathbf{r}\,d\mathbf{r} = d(\mathbf{r}\mathbf{r}) = d(r^2) = 2r\,dr.$$

Тогда

$$-V(r) = W = \int \mathbf{F}\,d\mathbf{r} = -\int_{-\infty}^{r} \frac{K}{r^2}\frac{\mathbf{r}\,d\mathbf{r}}{r} = -\int_{-\infty}^{r} \frac{K\,dr}{r^2} = \frac{K}{r}.$$

Если существует потенциальная энергия, то, как всегда, работа, произведенная при движении из точки *1* в точку *2*, не зависит от пути. Почему это так — в нашем случае можно увидеть, рассматривая два пути A и B (рис. 5.1, *а*). Сила всегда направлена к точке O,

так что на пути A работа совершается при движении вдоль радиальной части пути и не совершается при движении по окружности (так как в последнем случае сила перпендикулярна смещению). Любой другой путь может сколь угодно близко аппроксимироваться последовательностью малых смещений по радиусам и окружностям (рис. 5.1, *б*). Работа будет равна полной работе, совершенной на радиальных участках, так как при движении на участках по окружностям работа не совершается. (Круги, в действительности сферы, с центрами в точке 0, являются эквипотенциальными поверхностями.)

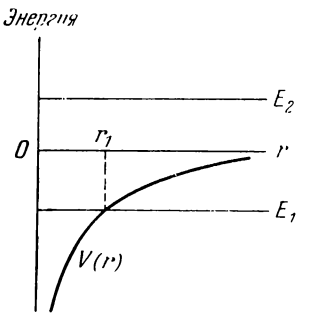


Рис. 5.2.

Так как потенциальная энергия равна $-K/r$, полная энергия есть

$$E = {}^1/_2 mv^2 - K/r = \text{const}. \qquad (5.1)$$

Мы можем сначала рассмотреть случай, когда движение является *одномерным*. Движение не обязано быть одномерным, но было бы таковым, если бы частица начала двигаться с начальной скоростью, направленной к центру или от центра. Так как сила направлена к центру, то так же направлено и ускорение и, следовательно, частица никогда не приобретет скорости в направлении, перпендикулярном ее первоначальному направлению движения. В этом случае скорость v частицы равна быстроте изменения длины вектора $\mathbf{r}$, т. е.

$$v = \dot{r}.$$

Тогда уравнение (5.1) примет вид

$$E = {}^1/_2 m\dot{r}^2 - K/r, \qquad (5.2)$$

в котором оно может быть проинтегрировано еще раз (ср. уравнение (3.21)), причем результат может быть представлен в явном виде. Это интегрирование мы оставили в качестве упражнения и рассмотрим движение качественно, используя рис. 5.2.

Заметим, что если $E < 0$ (скажем, $E = E_1$), частица может уходить от центра только до некоторого фиксированного расстояния r_1, останавливаться, поворачивать назад и возвращаться к центру. С другой стороны, если $E > 0$ ($E = E_2$), то частица может уходить на бесконечность, т. е. выходить из поля действия притягивающей силы. Интересный частный случай возникает при $E = 0$. Этот случай дает наименьшую скорость, при которой частица, скажем, в точке $r = R$ все еще может уйти от притягивающего центра. Такая скорость называется *критической скоростью*. Она может быть

найдена подстановкой в уравнение (5.2) $\dot{r}$ и r в тех двух положениях, в которых они известны: $\dot{r} = v_{кр}$ и $r = R$ в начальной точке (по определению), а также $r = 0$ и $r = \infty$, когда частица находится бесконечно далеко от центра. Скорость на бесконечности должна равняться нулю, поскольку частица, которая бы на бесконечности все еще двигалась, имела бы некоторую кинетическую энергию и тем самым ее энергия не была бы минимально необходимой для ухода на бесконечность. Таким образом,

$$E = {}^1/_2 m v_{кр}^2 - K/R = {}^1/_2 m 0^2 - K/\infty = 0,$$

и решение для $v_{кр}$ будет иметь вид

$$v_{кр} = \sqrt{\frac{2K}{mR}}. \tag{5.3}$$

Интересным является случай гравитационных сил, так как здесь критической является скорость, которую должна приобрести ракета, для того чтобы выйти из гравитационного поля Земли или другого тела. В этом случае мы должны подставить $K = GmM$, где m — масса ракеты, а M — масса Земли, и интерпретировать R как то расстояние от силового центра, на котором частица начинает свой путь со скоростью $v_{кр}$. Этим расстоянием является радиус Земли. Тогда

$$v_{кр} = \sqrt{2GM/R}. \tag{5.3'}$$

Критическая скорость *не зависит от массы ракеты* и определяется лишь массой и радиусом Земли (M и R). Так как $G = 6{,}67 \cdot 10^{-8}$ *дн·см²/г²*, $M = 6 \cdot 10^{27}$ *г* и $R = 6{,}4 \cdot 10^8$ *см*, то критическая скорость, называемая в этом случае *второй космической скоростью* для Земли, равна

$$v_{кр} = 11 \text{ км/сек}.$$

То, что мы обсуждали вторую космическую скорость в рамках одномерной задачи, не является существенным, так как эта скорость имеет одну и ту же величину, независимо от того, в каком направлении частица начинает движение: когда $E = 0$, скорость v будет равна нулю при $r = \infty$, независимо от того, как направлена скорость при $r = R$ — прямо от силового центра или в каком-либо ином направлении.

§ 5.2. Эффективная потенциальная энергия

При переходе к общему случаю трехмерного движения соотношение $v = \dot{r}$ уже перестает быть справедливым. Например, если частица движется по окружности вокруг начала отсчета, то $\dot{r} = 0$ ($r = \text{const}$), но абсолютная величина v скорости отлична от нуля.

Мы не можем больше пользоваться уравнением $E = {}^1/_2 m\dot{r}^2 - K/r$, но уравнение $E = {}^1/_2 mv^2 - K/r$ остается справедливым. Это уравнение сохранения энергии опять дает полезный метод анализа движения, в особенности, когда используется в связи со вторым уравнением, которое выражает *сохранение момента импульса*. Силы, обратно пропорциональные квадрату расстояния, являются центральными, так как они пропорциональны $\mathbf{e}_r$, и поэтому вектор момента импульса остается постоянным в течение всего движения. Точно так же как и в случае гармонической силы, постоянство момента импульса означает, что движение происходит целиком в некоторой плоскости, определяемой начальными условиями, и мы всегда можем выбрать координатную плоскость xy совпадающей с плоскостью, в которой движется частица. Настоящий случай, в отличие от случая гармонического осциллятора, остается, однако, существенно двумерным, так что уравнение сохранения энергии не поддается непосредственному интегрированию. Для того чтобы получить еще один необходимый интеграл уравнения движения, мы должны теперь использовать уравнение, устанавливающее постоянство *величины* момента импульса: $L = \text{const}$. Эта информация будет особенно полезной, если ее связать с уравнением (3.28) для кинетической энергии T:

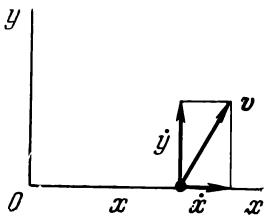


Рис. 5.3.

$$T = {}^1/_2 m\dot{r}^2 + L^2/2mr^2.$$

При $L = \text{const}$ единственной производной по времени остается $\dot{r}$. Из-за важности этого результата давайте выведем его здесь еще раз.

При движении, происходящем в плоскости xy, вектор $\mathbf{L}$ параллелен оси z, и, следовательно, его величина равна

$$L = L_z.$$

Мы уже объясняли в общем случае (§ 3.5), что величина L момента импульса относительно точки (являющейся силовым центром, если L постоянно) в декартовой системе координат равна

$$L_z = [\mathbf{rp}]_z = xm\dot{y} - ym\dot{x} = L.$$

Ориентируем теперь нашу координатную систему так, чтобы в некоторый момент частица находилась на оси x. Тогда $L = xm\dot{y}$, так как $y = 0$. При этом $r = x$ и $\dot{r} = \dot{x}$ (рис. 5.3), так что $\dot{y} = L/mr$. Следовательно, в этот момент

$$v^2 = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 = \dot{r}^2 + L^2/m^2r^2.$$

Так как этот выбранный момент совершенно произволен, то

это соотношение между v^2 и L^2 справедливо на протяжении всего движения. Это соотношение, выведенное из постоянства момента импульса, может быть объединено с независимым соотношением между v^2 и E, которое выражает сохранение энергии (уравнение (5.1)) и приводит к следующему результату:

$$E = \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{K}{r}. \tag{5.4}$$

Мы установили тем самым связь r и ее временной производной с двумя константами E и L.

Уравнение (5.4) интересно тем, что оно дает возможность рассмотреть изменение r со временем. (Фактически оно также дает нам возможность найти $r(t)$ в квадратурах, которые могут быть вычислены в явном виде, чего мы делать не будем). Мы имеем выражение для E, как функции единственной переменной r и ее производной. Поэтому, когда речь идет о r, мы можем рассматривать задачу, как если бы она была одномерной, и тем самым получить качественную информацию о том, как изменяется r при движении. Единственным фактом, который надо помнить и который не выражен уравнением (5.4), является то, что при изменении r частица также движется вокруг начала отсчета в направлении, перпендикулярном $\mathbf{r}$ (рис. 5.4). (Действительно, мы знаем значение v^2 и мы знаем $\dot{r}^2$, так что мы можем вычислить и другую компоненту скорости). Однако когда мы трактуем задачу как одномерную и рассматриваем только координату r, то мы замечаем, что эффективно «потенциальной энергией» является не просто $-\frac{K}{r}$, но *эффективная потенциальная энергия*

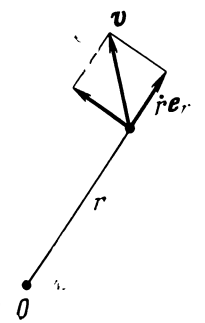


Рис. 5.4.

$$V' = -K/r + L^2/2mr^2. \tag{5.5}$$

Мы впоследствии увидим, что можно дать довольно полный анализ движения на основе уравнения

$$E = {}^1/_2 m\dot{r}^2 + V'(r), \tag{5.6}$$

полученного из уравнений (5.4) и (5.5).

§ 5.3. Замкнутые орбиты

В этом параграфе мы ограничимся случаем, когда силовая постоянная K (сила притяжения) положительна. Тогда $V'(r)$ изменяется, как представлено на рис. 5.5. На больших расстояниях эффективная потенциальная энергия похожа на потенциал $-1/r$, поскольку $1/r^2$

стремится к нулю много быстрее, чем $1/r$, когда r стремится к бесконечности. На малых расстояниях, с другой стороны, вид V' подобен $1/r^2$, поскольку $1/r^2$ стремится к бесконечности быстрее, чем $1/r$, когда r стремится к нулю. Общая форма кривой имеет изображенный на рис. 5.5 вид при любых значениях L (за исключением $L = 0$), но масштаб зависит от величины L: минимум кривой имеет место, когда $dV'/dr = 0$ или когда (дифференцируя уравнение (5.5))

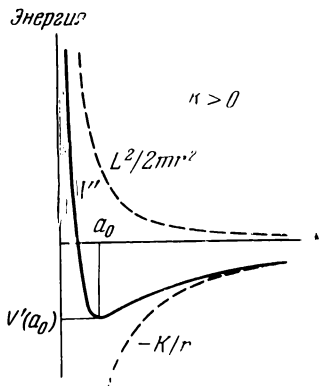


Рис. 5.5.

$$r = L^2/Km \equiv a_0. \qquad (5.7)$$

Соответствующее значение величины V', получаемое при подстановке этого значения r в уравнение (5.5), равно

$$V'(a_0) = -K^2m/2L^2 = -K/2a_0. \qquad (5.8)$$

Если L мало́, то минимум соответствует малому радиусу a_0 и очень глубок. При $L = 0$, то V' сводится к $-K/r$, как на рис. 5.2.

Простейший тип движения, который может происходить при эффективной потенциальной энергии V' (рис. 5.5), будет иметь место, когда частица «покоится» на дне ямы, т. е. когда все время $r = a_0$. В действительности частица не покоится: несмотря на то, что $r = 0$ — расстояние от начала отсчета (a_0) постоянно, частица движется *вокруг* начала отсчета с моментом импульса

$$L = \sqrt{Kma_0},$$

получаемым при решении уравнения (5.7) для L. Так как расстояние постоянно, частица движется по *круговой орбите*. Полная энергия E равна для этой орбиты V', поскольку $r = 0$, так что из уравнений (5.6) и (5.8) следует

$$E = -K/2a_0 = E_0.$$

Абсолютная величина скорости v может быть найдена из выражения $E = {}^1/_2\, mv^2 + V$, так как $V = -K/a_0$, где $r = a_0$. Таким образом, для круговой орбиты

$$v = \sqrt{\frac{K}{ma_0}} \equiv v_0.$$

(Это, конечно, тот самый результат, который получается элементарно приравниванием силы притяжения центростремительному уско-

рению, умноженному на массу. Он также вытекает из выражения $L = mva_0 = \sqrt{Kma_0}$.) Заметим, что критическая скорость ($E = 0$) на том же расстоянии равна согласно уравнению (5.3) просто $\sqrt{2}$, умноженному на абсолютную скорость на круговой орбите ($E = E_0$):

$$v_{кр} = \sqrt{2}\, v_0.$$

Если энергия E несколько больше E_0, а момент импульса тот же, частица движется по орбите, на которой r изменяется между максимальным значением a_1 и минимальным значением a_2 (рис. 5.6). Так как r принимает эти экстремальные значения при $\dot{r} = 0$, то мы можем вычислить a_1 и a_2, записав выражение

$$E = -K/r + L^2/2mr^2$$

и разрешив его относительно r. Для r получается квадратное уравнение, имеющее два решения:

$$r = -\frac{K}{2E}\left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{mK^2}}\right).$$

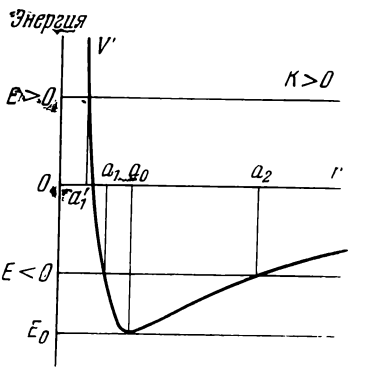


Рис. 5.6.

Вспоминая, что полная энергия E отрицательна, запишем эти два решения в форме

$$a_1 = -\frac{K}{2E}(1 - e), \quad a_2 = -\frac{K}{2E}(1 + e). \tag{5.9}$$

Здесь мы использовали сокращенную запись:

$$e = \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{mK^2}}. \tag{5.10}$$

Прежде всего отметим, что только для рассмотренной круговой орбиты полная энергия и момент импульса равны соответственно $E = -K/2a_0$ и $L^2 = Kma_0$, так что $e = 0$ и $a_1 = a_2 = -K/2E = a_0$ в согласии с нашим предыдущим результатом. Для орбит с более высокой энергией $e > 0$, и мы можем получить интересный результат, сложив a_1 и a_2, определяемые уравнением (5.9):

$$a_1 + a_2 = -K/E. \tag{5.11}$$

Все орбиты с $E < 0$ могут быть названы *связанными орбитами*: расстояние частицы от начала отсчета изменяется в пределах от a_1 до a_2, никогда не превышая a_2.

Для того чтобы представить себе наглядно эти орбиты в двух измерениях, существенно помнить, что частица движется *вокруг* на-

чала отсчета и в то же время ее расстояние от начала отсчета изменяется от a_1 до a_2. Получив полное решение этой задачи, мы увидели бы что орбита представляет собой эллипс, один из фокусов которого находится в начале отсчета (рис. 5.7). Величина $a_1 + a_2$ является большой осью эллипса, которую мы можем обозначить через $2a$. Согласно уравнению (5.11) для всех эллиптических орбит

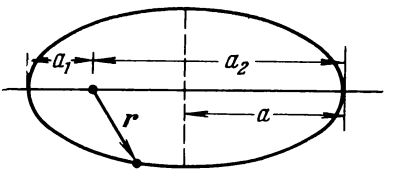


Рис. 5.7.

$$E = -K/2a, \qquad (5.12)$$

где a — *большая полуось* эллипса. Этот результат обобщает соотношение для круговых орбит, так как окружность является предельным случаем эллипса с равными большой и малой полуосями (равными радиусу окружности). Величина e, определяемая уравнением (5.10), называется *эксцентриситетом* эллипса. Круговая орбита имеет нулевой эксцентриситет. Для всех возможных эллиптических орбит

$$0 \leqslant e < 1.$$

Если $E \geqslant 0$, $e \geqslant 1$, то эти орбиты не являются замкнутыми. Они будут рассмотрены в § 5.5.

Вместо того чтобы систематизировать орбиты с данным моментом импульса L, как функции полной энергии, поучительно представить себе орбиты с данной энергией E и изменяющейся величиной L. Согласно уравнению (5.12) все такие орбиты имеют одну и ту же большую полуось, потому что полная энергия зависит только от большой полуоси эллипса.

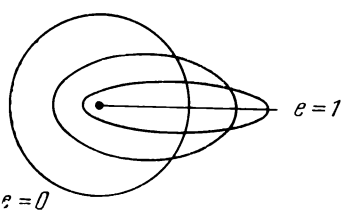


Рис. 5.8.

Эксцентриситет эллипса e связан с моментом импульса L и изменяется от 0 для круговой орбиты до 1 при $L = 0$ (уравнение (5.10), рис. 5.8). Круговая орбита при заданной энергии имеет наибольший момент импульса из всех орбит с той же энергией, а чем больше эксцентриситет эллипса, тем меньше момент импульса. В предельном случае $L = 0$ ($e = 1$) орбита представляет собой линию длины $2a$ (рис. 5.8). Частица будет двигаться по этой орбите, если ее скорость равна $v = 0$ при $r = 2a$. (Тогда $E = {}^1/_2 m \cdot 0 - K/2a$.)

Прямолинейная орбита представляет собой в какой-то мере идеализацию, потому что, когда движущаяся вдоль нее частица подходит к началу отсчета, ее скорость становится бесконечной;

однако остальные части этой орбиты часто представляют определенный интерес.

Между прочим, напомним, что гармоническая сила также приводит к эллиптической орбите для частицы. Различие состоит в том, что в этом случае силовым центром является *центр* эллипса, в то время как при силах, обратно пропорциональных квадрату расстояния, силовым центром является *фокус* эллипса. Не следует делать вывода, что *все* центральные силы приводят к эллиптическим орбитам. Просто случайно оказалось, что мы рассмотрели как раз те два случая, которые *только* и приводят к эллиптическим орбитам.

Точно так же как в случае гармонического осциллятра, для того чтобы найти *период* движения, необходимо решить задачу полностью, проинтегрировав уравнения движения еще раз. Для случая сил, обратно пропорциональных квадрату расстояния, эта интеграция может быть проведена полностью, но мы не будем этого делать и просто приведем сам результат. В частном случае круговой орбиты период может быть найден элементарными средствами. Он просто равен радиусу окружности, деленной на скорость:

$$P = 2\pi a_0/v_0 .$$

Подставляя сюда величину v_0 для круговой орбиты, получим

$$P = 2\pi \sqrt{\frac{a_0^3 m}{K}} .$$

Оказывается, что такой же результат будет справедлив и для эллиптических орбит, если a_0 заменить на a:

$$P = 2\pi \sqrt{\frac{a^3 m}{K}} . \qquad (5.13)$$

Резюмируя наиболее важные результаты только что проведенного несколько длинного обсуждения, подчеркнем еще раз, что все они являются прямым обобщением результатов для круговой орбиты. Последние могут быть получены приравниванием силы $F = -K^2/a_0^2$, обратно пропорциональной квадрату расстояния, центростремительной силе — mv^2/a_0. Величина $v = K/ma_0$ подставляется затем в уравнение (5.1) для E или для P, что и дает наши главные результаты, выражаемые уравнениями (5.12) и (5.13). Эти уравнения для круговой орбиты так легко вывести, что их нет необходимости запоминать; нужно лишь помнить, что радиус a_0 окружности надо заменить на большую полуось a эллипса. Тогда абсолютная величина скорости v может быть вычислена в любой точке орбиты путем подстановки выражений для E и V в уравнение (3.19): $v = \sqrt{2(E - V)/m}$ (см. уравнение (5.15)). Наконец, максимальное и минимальное расстояния от начала отсчета получают с помощью комбинации уравнений

(5.9) и (5.12). Трудно запомнить лишь выражение для эксцентриситета e (уравнение (5.10)), но его можно вычислить с помощью остальных уравнений с умеренным применением алгебры (задача 5.11). Соберем вместе эти важные уравнения:

$$a = -K/2E, \quad a = 1/2\,(a_1 + a_2), \tag{5.12}$$

$$e = \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{mK^2}}, \tag{5.10}$$

$$a_1 = a\,(1 - e), \quad a_2 = a\,(1 + e), \tag{5.14}$$

$$v = \sqrt{\frac{K}{m}}\sqrt{\frac{2}{r} - \frac{1}{a}}, \tag{5.15}$$

$$P = 2\pi\sqrt{\frac{a^3 m}{K}}. \tag{5.13}$$

Эти соотношения нам потребуются при обсуждении приложений в последующих параграфах. Первые три из них определяют геометрию орбиты в зависимости от энергии E и момента импульса L или наоборот.

Последние два определяют скорость в любой точке и период; заметим, что обе эти величины зависят только от a (или от E), но не от e (или не от L).

§ 5.4. Движение планет

В этом параграфе мы рассмотрим некоторые практические приложения к задачам о естественных и искусственных спутниках Солнца. Так как Солнце примерно в 1000 раз массивнее, чем самая большая планета (Юпитер), то приведенная масса (уравнение (3.35)), по существу, равна массе спутника и Солнце все время остается очень близко к центру масс Солнечной системы, так что его положение можно считать фиксированным. Вычисление орбит искусственных спутников или космических кораблей возродило обширные исследования по небесной механике, почти было прекратившиеся с конца девятнадцатого столетия. Естественные спутники Земли и Солнца обеспечили исходный стимул для понимания планетных движений и, конечно, самой механики. В этом случае силой является гравитационная сила, так что $K = GmM$, где m — масса частицы (спутника), а M — масса притягивающего тела. Тогда уравнения (5.15) и (5.13) принимают вид

$$v = \sqrt{GM}\sqrt{\frac{2}{r} - \frac{1}{a}}, \qquad P = 2\pi\sqrt{a^3/GM}.$$

Заметим, что оба эти соотношения *не зависят от* m — массы орбитального тела — по той же самой причине, по которой все объекты

падают на Землю с одним и тем же ускорением g. Второе соотношение представляет собой *третий закон Кеплера*. Если M — масса Солнца, то очень удобно использовать специальную систему единиц (не МКС и не CGS), в которой расстояние Земля — Солнце (астрономическая единица, сокращенно а. е.) принимается за единицу длины, а период обращения Земли (год) за единицу времени. Переводные множители равны

$$1 \text{ а. е.} = 93 \cdot 10^6 \text{ миль} = 1{,}49 \cdot 10^8 \text{ км} = 500 \text{ св} \cdot \text{сек} = 1{,}6 \cdot 10^{-5} \text{ св. лет},$$

$$1 \text{ год} = 3{,}15 \cdot 10^7 \text{ сек},$$

$$1 \text{ а. е./год} = 4{,}75 \text{ км/сек}.$$

В этой системе единиц $P = 1$ году, если $a = 1$ а. е. Тогда из закона Кеплера следует, что в этих единицах должно быть справедливо равенство $\sqrt{GM} = 2\pi$. Уравнения теперь упрощаются:

$$P = a^{3/2}, \tag{5.13'}$$

$$v = 2\pi \sqrt{\frac{2}{r} - \frac{1}{a}}, \tag{5.15'}$$

и это, конечно, служит оправданием использования таких единиц.

В качестве первого примера мы рассмотрим задачу о движении *комет*. Во-первых, они имеют сильно эксцентричные орбиты, и мы здесь существенно выходим за рамки элементарной теории круговых орбит. Во-вторых, о них не так уж много известно и они в настоящее время являются интересным естественным зондом космического пространства. Некоторые из них, называемые «короткопериодными», имеют орбиты, которые целиком лежат внутри орбиты Плутона с главной полуосью около 40 а. е. Так как они проходят близко к Солнцу, то большая ось ($2a$) орбит этих комет менее, чем 40 а. е. Их период согласно уравнению (5.13′) имеет порядок

$$P < 20^{3/2} \approx 90 \text{ лет}.$$

Многие из этих короткопериодных комет наблюдаются регулярно. Однако большинство комет имеют орбиты с очень большим a и эксцентриситетом e, очень близким к 1. Допустим, к примеру, что

$$a = 10^4 \text{ а. е.}$$

Тогда из уравнения (5.13′) будем иметь

$$P = 10^6 \text{ лет}.$$

На протяжении истории Солнечной системы (около 10^{10} лет) такая комета могла бы сделать несколько тысяч визитов в наши края, хотя, как мы увидим ниже, на самом деле это, вероятно, не имело места.

Далее предположим, что наибольшее приближение кометы к Солнцу составляет 1 а. е. Ближайшая и удаленная точки, называемые соответственно *перигелием* и *афелием*, даются уравнением (5.14). Эксцентриситет орбиты e может быть вычислен из уравнения для перигелия:

$$a_1 = a(1-e) = 1 \text{ а. е.},$$
$$e = 1 - a_1/a = 1 - 10^{-4} = 0{,}9999.$$

Эксцентриситет, следовательно, оказывается очень близким к единице; если бы он был точно равен 1, орбита не была бы замкнутой и комета не принадлежала бы к Солнечной системе, а была бы пришельцем из межзвездного пространства. Другое из соотношений (5.14) дает для афелия расстояние

$$a_2 = a(1+e) = 1{,}9999a \approx 2 \cdot 10^4 \text{ а. е.}$$

Интересно также вычислить с помощью уравнения (5.15′) скорость в афелии и перигелии. В перигелии ($r = a_1$)

$$v_1 = 2\pi \sqrt{2 - \frac{1}{10^4}} \approx 2\sqrt{2}\pi \text{ а. е./год} = 42 \text{ км/сек}.$$

Скорость орбитального движения Земли равна

$$v_0 = 2\pi \text{ а. е./год} = 30 \text{ км/сек}.$$

Комета имеет несколько бóльшую скорость на том же расстоянии от Солнца, поскольку она имеет бóльшую полную энергию на единицу массы. (Полная энергия сама по себе много меньше, так как кометы имеют довольно малую массу). В афелии ($r = r_2$)

$$v_2 = 2\pi \sqrt{\frac{2}{a(1+e)} - \frac{1}{a}} \approx 2\pi \sqrt{\frac{1-e}{2a}} = \frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{a_1}{2}} =$$
$$= \sqrt{2}\pi \cdot 10^{-4} \text{ а. е./год} = 2{,}1 \text{ м/сек}.$$

Комета, следовательно, в афелии едва движется: со скоростью быстро идущего пешехода.

Поучительно вычислить скорость, которую имела бы комета на расстоянии, равном ее афелию, если бы она находилась на круговой орбите (пунктирная линия на рис. 5.9), а не на ее действительной эксцентричной орбите. Эта круговая орбита имела бы радиус $a' = 2a$. Подставляя это значение в уравнение (5.15′), получим

$$v = 2\pi \sqrt{\frac{2}{a'} - \frac{1}{a'}} = \frac{2\pi}{\sqrt{2a}} = \sqrt{2\pi} \cdot 10^2 \text{ а. е./год} = 210 \text{ м/сек}.$$

Эта скорость довольно мала, меньше скорости реактивного самолета. Согласно современным представлениям существует большой запас малых тел, дрейфующих по почти круговым орбитам на рас-

стоянии около 10^5 а. е. от Солнца. Они находятся настолько далеко от Солнца (около 1 св. года), что на их движение может повлиять другая звезда. Если одно из этих тел будет почти остановлено этим взаимодействием, то это тело станет приближаться по эллиптической орбите прямо к Солнцу. По своему происхождению кометы должны принадлежать к Солнечной системе, поскольку ни одна из них не наблюдалась на орбите с эксцентриситетом e, заметно превышающим 1 (т. е. на незамкнутой орбите). С другой стороны, во время прохождения вблизи Солнца орбита кометы может быть легко превращена в незамкнутую за счет возмущения ее движения планетами (особенно Юпитером, масса которого составляет 1/1000 массы Солнца). Такого рода возмущения возможны из-за того, что эксцентриситет e орбиты очень близок к 1. Это наводит на мысль, что большинство комет, вероятно, не может периодически возвращаться в окрестности Солнца.

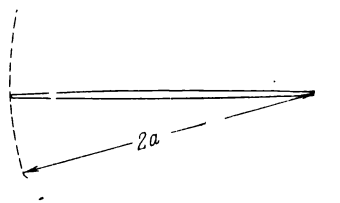


Рис. 5.9.

В качестве второго примера исследуем задачу о *межпланетных путешествиях* на искусственных спутниках Солнца. Рассмотрим задачу о посылке космического корабля с Земли на Марс. Земля движется по (почти) круговой орбите радиуса a_1, а Марс по (почти) круговой орбите радиуса a_2. Мы хотим вывести с Земли тело на орбиту вокруг Солнца так, чтобы эта орбита пересекалась с орбитой Марса. (Мы выберем время запуска так, чтобы Марс оказался в точке пересечения орбиты *в один и тот же момент* с космическим кораблем). Это означает, что мы хотим послать корабль с Земли на Марс по баллистической (неуправляемой) траектории и, кроме того, сделать это по возможности более экономным способом. Из всех орбит, которые пересекают как орбиту Земли, так и орбиту Марса, наименьшей полной энергией обладает та, у которой минимальна большая полуось, т. е. «прямолинейная» орбита с большой осью a_2. Это был бы наиболее прямой полет наименьшей протяженности. Но, хотя на этой орбите корабль имеет наименьшую возможную энергию, такой полет не является самым экономичным, если вспомнить, что еще до запуска корабль вообще без всяких затрат уже движется вместе с

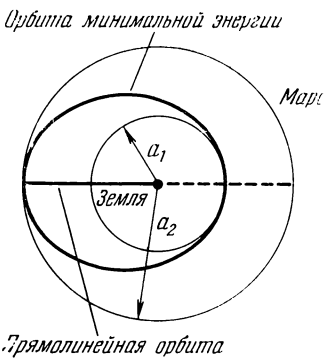


Рис. 5.10.

Землей с ее орбитальной скоростью. Если мы также хотим, чтобы корабль достиг Марса с почти нулевой скоростью, то мы увидим, что наименьшие начальные и конечные импульсы требуются для корабля на эллиптической траектории, касательной к обеим круговым орбитам. И действительно, можно показать, что такая эллиптическая орбита является «*энергетически минимальной*» в том смысле, что для вывода на нее и для ухода с нее требуются минимальные импульсы. В процессе вычислений мы пренебрежем притяжением Земли (и Марса), поскольку вторая космическая скорость, необходимая для выхода из сферы земного притяжения, может быть в хорошем приближении принята во внимание отдельно.

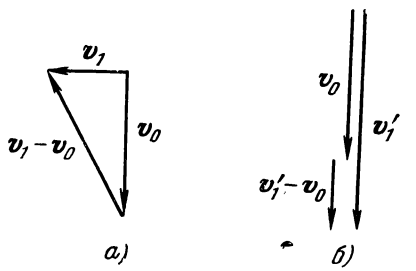


Рис. 5.11.

Во-первых, заметим (рис.5.10), что для прямолинейной орбиты $2a = a_2$, а для эллиптической орбиты $2a = a_1 + a_2$. Далее, из уравнения (5.15′) мы вычислим скорость корабля в точке вылета ($r = a_1 = 1$):

$$v_1 = v_0 \sqrt{2\,(1 - a_1/a_2)} \text{ — для линии}$$

и

$$v_1' = v_0 \sqrt{2\,(1 + a_1/a_2)} \text{ — для эллипса,}$$

где

$$v_0 = 2\pi/\sqrt{a_1} = 2\pi$$

есть скорость Земли на ее (круговой) орбите. Заметим, что $v_1' > v_1$ (если только a_2 не равно бесконечности, когда обе скорости становятся равными третьей космической скорости $\sqrt{2}v_0$, т. е. скорости, необходимой для выхода из поля солнечного притяжения). Однако если мы вычислим скорость относительно Земли, то увидим преимущество эллиптической орбиты корабля. Для линейной орбиты (рис. 5.11, *а*)

$$|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0| = \sqrt{v_1^2 + v_2^2} = v_0 \sqrt{3 - 2a_1/a_2} > v_0,$$

а для эллиптической орбиты (рис. 5.11, *б*)

$$v'_1 - v_0 = v_0 \left[\sqrt{\frac{2}{1 + a_1/a_2}} - 1\right] < v_0.$$

Фактически, так как радиус орбиты Марса примерно в 1,5 раза больше радиуса земной орбиты, требуемые относительные скорости равны 1,3 v_0 и 0,1 v_0, соответственно, для прямой орбиты и для

орбиты с минимальной энергией. Так как $v_0 = 30$ *км/сек*, то эти скорости равны 39 *км/сек* и 3 *км/сек*. Экономия требуемого топлива для орбиты с минимальной энергией значительна. Важно принять во внимание выход из земного гравитационного поля (вторую космическую скорость 11 *км/сек*), но это в хорошем приближении может быть сделано независимо. (Имеет смысл также использовать при запуске вращение Земли, но это значительно менее важно: скорость поверхности Земли составляет лишь 0,5 *км/сек*.) Аналогично экономия топлива получается для орбиты с минимальной энергией при замедлении в конце пути, что может быть рассчитано точно так же. Требуемое для путешествия время с орбитой минимальной энергии определяется величиной $^1/_2P'$. Эта величина может быть получена из закона Кеплера (5.13′) при $a = {}^1/_2 (a_1 + a_2)$

$$P' = [{}^1/_2 (a_1 + a_2)]^{3/2} = 1{,}4 \text{ года}.$$

Так что время, требуемое на путешествие, равно 0,7 года, или около 8 месяцев.

Множество других аналогичных задач может быть хотя бы частично решено на основе только что развитой техники. Некоторые из них будут приведены в качестве задач. Для исследования орбит спутников вблизи поверхности Земли следует иметь в виду теорему, согласно которой сферически симметрично распределенная масса (т. е. Земля) создает такую же силу, как если бы вся масса была сконцентрирована в центре, до тех пор, пока вы остаетесь снаружи. (Эта теорема непосредственно вытекает из теоремы Гаусса.) Так что Земля может рассматриваться как источник силы, обратно пропорциональной квадрату расстояния (если только орбита спутника не пересекает ее поверхность; в последнем случае нужно принимать во внимание контактные силы). Несмотря на интерес современной практики к таким задачам, признаемся, что наши истинные мотивы столь детального рассмотрения сил, обратно пропорциональных квадрату расстояния, вызваны приложением их (кулоновские силы) к рассмотрению движения микроскопических частиц: электронов, протонов и т. д., что является нашей главной задачей (см. гл. 18).

§ 5.5. Незамкнутые орбиты

Если сила является силой притяжения ($K > 0$) и $E > 0$, то частица может уйти на бесконечность и орбита будет незамкнутой (см. рис. 5.6). Обозначим через a_1' расстояние наибольшего приближения к началу отсчета (силовому центру). Эта величина может быть вычислена с помощью таких же рассуждений, которые привели нас к уравнению (5.9). Так как теперь E положительна, то

$$a_1' = \frac{K}{2E}(e - 1), \qquad (5.9')$$

где e определяется уравнением (5.10). Для незамкнутых орбит $e > 1$. Другое решение квадратного уравнения отрицательно и потому не имеет смысла; на незамкнутой орбите имеется лишь одна точка, где $\dot{r} = 0$.

Вспоминая опять, что частица движется вокруг начала отсчета с моментом импульса L и в то же время r уменьшается от бесконечности до a'_1 и затем снова возрастает до бесконечности, мы видим, что орбита будет иметь форму, изображенную на рис. 5.12.

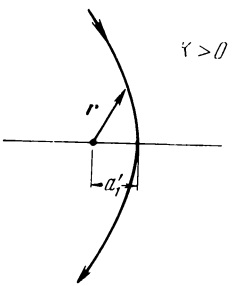


Рис. 5.12.

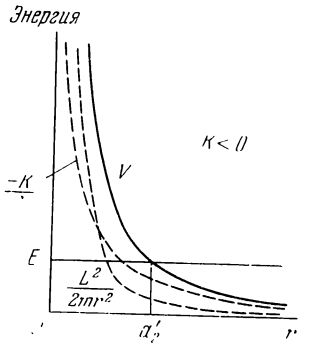


Рис. 5.13.

Второе решение уравнения (5.9) имеет тем не менее смысл. Оно дает расстояние наибольшего приближения к силовому центру для случая *сил отталкивания*, для которых $K < 0$. Тогда единственно возможными орбитами являются такие, для которых $E > 0$ (рис. 5.13). Подстановка $\dot{r} = 0$ в выражение для энергии, как и раньше, ведет к уравнениям (5.9). Теперь второе решение положительно:

$$a_2' = \frac{-K}{2E}(e + 1). \qquad (5.9'')$$

Для $K < 0$ первое решение представляет собой отрицательную величину и должно быть отброшено. Снова мы можем изобразить орбиту, по которой частица приходит из бесконечности в точку a'_2 и затем снова удаляется в бесконечность (рис. 5.14). Заметим, что $a'_1 < a'_2$, для одних и тех же значений E и L, так как частица притягивается по направлению к началу отсчета в одном случае и отталкивается в другом.

При полном решении задачи было бы видно, что эти две орбиты в действительности являются двумя ветвями гиперболы. С геометрической точки зрения представляет интерес скомбинировать их в единый график (рис. 5.15), хотя нужно помнить, что эти две ветви возникают за счет совершенно различных сил: одна за счет притя-

гивающих, а другая — отталкивающих. Определенная частица может двигаться лишь вдоль одной из этих ветвей. Если на этот раз мы определим (опустив штрихи) величину a как

$$2a = a_2 - a_1,$$

то полная энергия опять будет зависеть лишь от a. Резюмируя, приведем сводку уравнений, которые применяются для незамкнутых орбит ($E > 0$):

$$a = |K|/2E, \quad a = {}^1/_2 (a_2 - a_1), \tag{5.16}$$

$$e = \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{mK^2}}, \tag{5.10}$$

$$a_1 = a(e - 1), \quad a_2 = a(e + 1) \tag{5.17}$$

$$v = \sqrt{\frac{|K|}{m}} \sqrt{\frac{1}{a} \pm \frac{2}{r}}. \tag{5.18}$$

Для незамкнутых орбит период P бесконечен, так как частица не возвращается назад (верхний знак в уравнении (5.18) относится к силам притяжения, а нижний — к силам отталкивания).

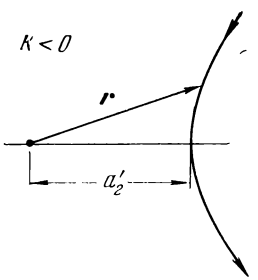


Рис. 5.14.

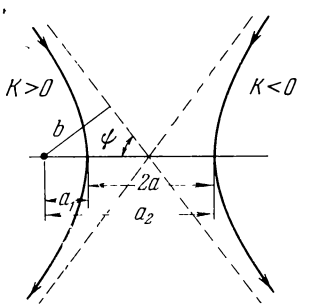


Рис. 5.15.

Имеет смысл проанализировать геометрию гиперболических орбит более детально. Если бы никакая сила не действовала, то частица двигалась бы вдоль одной из пунктирных линий (асимптот гипербол) и ее наибольшее приближение к началу отсчета равнялось расстоянию b (рис. 5.15). Расстояние b называется *прицельным расстоянием*. От величины b зависит форма орбиты. Например, угол ψ определяется соотношением

$$\sin\psi = b/(a_1 + a) = b/ea. \tag{5.19}$$

Величины e и a зависят от энергии E и момента импульса L (уравнения (5.16) и (5.10)), и мы теперь покажем, что b также связано с E и L. Пусть частица, находящаяся на бесконечном расстоянии от

центра, движется вдоль одной из пунктирных линий со скоростью v_∞. Так как на бесконечности потенциальная энергия равна нулю, то с помощью уравнения (3.19) получим

$$v_\infty = \sqrt{2E/m}.$$

(Это также следует из уравнений (5.18) и (5.16).) Далее, величина b является *плечом момента скорости* относительно этой точки, так что момент импульса равен

$$L = mv_\infty b$$

или

$$L^2 = m^2 v_\infty^2 b^2 = 2mEb^2.$$

Это уравнение устанавливает связь между b и механическими параметрами E и L: при данной энергии b пропорционально L. Подставив приведенное выше значение L^2 в уравнение (5.10) и разрешив его относительно b, получим (используя уравнение (5.16)) соотношение, которое окажется полезным в дальнейшем:

$$b = \frac{|K|}{2E}\sqrt{e^2 - 1} = a\sqrt{e^2 - 1}. \tag{5.20}$$

Это соотношение также дает нам возможность закончить обсуждение геометрии движения. Подставив выражение (5.20) в уравнение (5.19), получим

$$\sin\psi = \sqrt{e^2 - 1}/e.$$

Согласно рис. (5.16) этому выражению можно придать более простой вид:

$$\cos\psi = 1/e. \tag{5.21}$$

Если ψ велико, частица очень мало отклоняется под действием силы уравнение (5.21) показывает, что это будет в случае, когда e велико т. е. при больших E или L, а также при малом K (уравнение (5.10)). Этот результат интуитивно понятен, так как большие L (большие b) означают прохождение вдали от силового центра, а малые K означают слабую силу. Важно заметить, что при заданных E и L величина b одна и та же как для притягивающей, так и для отталкивающей силы.

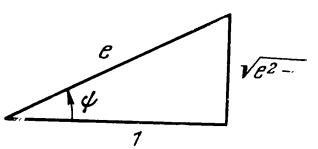


Рис. 5.16.

Этот факт оправдывает то, что мы изобразили на рис. 5.15 обе ветви гиперболы как принадлежащие одним и тем же асимптотам.

§ 5.6. Резерфордовское рассеяние

В качестве примера движения по гиперболической орбите мы рассмотрим отклонение α-частицы атомным ядром. Эта задача сыграла большую историческую роль, потому что такого рода эксперименты были использованы Резерфордом (1911 г.) для того, чтобы показать, что положительный заряд атома сконцентрирован в очень малом *ядре*, диаметр которого составляет лишь около 10^{-12} *см* или примерно 10^{-4} диаметра всего атома. Как α-частица, так и атомное ядро заряжены положительно, так что между ними действуют кулоновские силы отталкивания. Силовая константа K отрицательна:

$$K = -q_1q_2 = -Z_1Z_2e^2, \tag{5.22}$$

где $Z_1 = 2$ — атомный номер α-частицы (ядро He), Z_2 — атомный номер ядра мишени и e — абсолютная величина заряда электрона. Анализ упрощается, если мишень состоит из атомов тяжелого элемента, поскольку тогда приведенная масса практически равна массе α-частицы (4 а.е.м.). Например, в случае мишени из золота одной из тех, которые использовал Резерфорд, атомный вес равен 197. Приведенная масса лишь на 2% меньше, чем масса α-частицы, и ядро Au практически остается в покое.

Полезно начать с рассмотрения простого случая, когда прицельное расстояние b (и момент импульса L) равно нулю, т. е. когда α-частица претерпевает лобовое столкновение с ядром Au ($Z = 79$), так как уже этот случай ясно показывает, каким образом данный эксперимент позволяет выявить структуру атома Au. Если $L = 0$, то $e = 1$ (уравнение (5.10)) и $a_2 = 2a$ (уравнение (5.17)) $= |K|/E$ (уравнение (5.16)) $= Z_1Z_2e^2/E$. (Это уравнение также получается элементарным путем подстановкой $\dot{r} = 0$ и $r = a_2$ в уравнение (5.2), выражающее закон сохранения энергии в одномерном случае.) Резерфорд использовал α-частицы с энергией порядка 5 *Мэв* из естественных радиоактивных источников. В этом случае расстояние наибольшего сближения равно

$$a_2 = \frac{2 \cdot 79\,(4{,}8 \cdot 10^{-10}\ \text{CGSE})^2}{5 \cdot 10^6\ \text{эв} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-12}\ \text{эрг/эв}} = 5 \cdot 10^{-12}\ \text{см}.$$

(Необходимо помнить, что если эта формула используется в системе СИ, то в уравнение (5.22) необходимо вставить множитель $1/4\pi\varepsilon_0$.)

Наблюдение α-частиц, отброшенных атомами золота прямо назад, показало бы, что закон $1/r^2$ для силы соблюдается вплоть до очень малых расстояний и что тем самым положительный заряд должен быть заключен в очень малом объеме. Наоборот, если предположить, что положительный заряд распределен более или менее равномерно по всему объему атома, то сила взаимодействия никогда не достигла бы достаточно больших значений, для того чтобы откло-

нить α-частицу назад, и эта частица продолжала бы двигаться сквозь золото в первоначальном направлении. (Такая модель атома была сначала предложена Томсоном (см. задачу 5.22).)

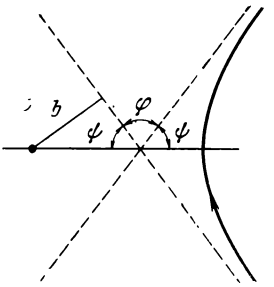


Рис. 5.17.

Более детальное подтверждение закона силы (уравнение (5.22)) было получено наблюдением угла рассеяния α-частицы при прицельном расстоянии, отличном от нуля. Пусть угол между исходным и конечным направлениями траектории α-частицы равен φ (рис. 5.17).

Мы хотим получить связь между φ и b. Соотношение между b и углом ψ уже содержится в уравнении (5.20):

$$b = \frac{|K|}{2E}\sqrt{e^2 - 1} = \frac{|K|}{2E}\operatorname{tg}\psi$$

(ср. рис. 5.16). Остается лишь связать ψ и φ. Очевидно, что имеют место равенства:

$$\varphi = 2\psi + \pi,$$

$$\psi = \frac{\pi}{2} - \frac{\varphi}{2},$$

$$\operatorname{tg}\psi = \operatorname{ctg}\frac{\varphi}{2},$$

так что

$$b = \frac{|K|}{2E}\operatorname{ctg}\frac{\varphi}{2} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E}\operatorname{ctg}\frac{\varphi}{2}. \qquad (5.23)$$

Для данной энергии α-частицы E уравнение (5.23) дает требуемую связь между φ и b (рис. 5.18).

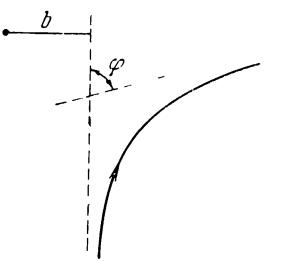


Рис. 5.18.

Эксперимент состоял в пропускании пучка α-частиц через золотую фольгу и измерении углов, на которые эти частицы отклонялись. Конечно, невозможно контролировать макроскопически прицельное расстояние, т. е. расстояние между силовым центром и начальным направлением движения определенной частицы. Можно получить лишь распределение по углам φ, связанное уравнением (5.23) с распределением по случайным значениям прицельных расстояний. Реально наблюдаются доли частиц, отклоняющихся на различные углы φ. Анализ такого рода экспериментов по *рассеянию* будет завершен в гл. 6.

Задачи

5.1. Записать силу, обратно пропорциональную квадрату расстояния, в декартовой системе координат и показать, что ее компоненты удовлетворяют общим условиям существования потенциальной энергии.

5.2. Проинтегрировать уравнение

$$E = {}^1/_2 m\dot{r}^2 - K/r$$

и найти r как функцию t. Предполагается, что $E < 0$, $K > 0$.

5.3. Вычислить вторую космическую скорость для различных планет и Луны *).

5.4. Пусть ракета запущена прямо с поверхности Земли (радиус R) на высоту H. Не учитывая вращения Земли, показать, что начальная баллистическая скорость ракеты равна

$$v_H = \sqrt{\frac{H}{R+H}}\, v_{\text{вт. лок.}}$$

Как велика v_H для $H = 500$ км?

5.5. Рассмотрим сферическую галактику радиусом 10^{21} см, содержащую 10^{10} звезд, массой 10^{33} г каждая. Найти скорость, необходимую для ухода звезды из галактики, если звезда находится на краю галактики. Распределение звезд предполагается сферически симметричным. (Для нашего Солнца, являющегося типичной звездой, скорость очень близка к этому значению, но Солнце не находится на краю нашей Галактики.)

5.6. Пусть ракета запущена прямо вверх с поверхности Земли (вращение Земли не учитывается) с баллистической скоростью v_L, так что когда ракета выходит из поля земного тяготения, то ее скорость будет равна v_F. Выразить v_L через v_F и вторую космическую скорость.

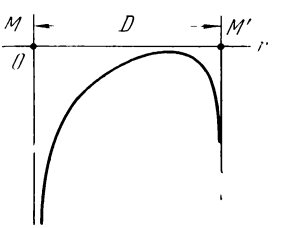


Рис. 5.19.

5.7. Рассмотреть потенциальную энергию ракеты на линии, соединяющей Землю (масса M) и Луну (масса M'), с учетом притяжения Луны (рис. 5.19). (Сила, действующая на ракету, не является центральной, но нами рассматривается только одномерное движение.) Показать, что потенциальная энергия минимальна на расстоянии от Земли, определяемом соотношением

$$\frac{r}{D} = \frac{1}{1+\sqrt{\frac{M'}{M}}},$$

где D — расстояние от Земли до Луны. Доказать, что скорость в точке $r = R$ должна составлять 99% второй космической скорости, для того чтобы тело могло достигнуть точки, где энергия минимальна. Известно, что $M/M_1 = 80$ и $D/R = 60$.

5.8. Записав потенциальную энергию осциллятора в форме $V = {}^1/_2 Kr^2$, изобразить эффективную потенциальную энергию V' и рассмотреть возможные движения.

5.9. Найти скорость и период спутника на круговой орбите непосредственно над поверхностью Земли. На сколько будут отличаться скорость, момент

*) Данные о планетах см. в кн. Дж. Кэя и Т. Лэби «Таблицы физических и химических постоянных», Физматгиз, 1962.

импульса и период для эллиптической орбиты с перигеем непосредственно над поверхностью Земли.

5.10. Расстояние от Луны до Земли 384 000 *км*. Вычислить массу Земли.

5.11. Дано, что на расстоянии a_1 наибольшего приближения к началу отсчета момент импульса $L = mva_1$ (рис. 5.20). Использовать это соотношение совместно с уравнениями (5.12), (5.14) и (5.15), для того чтобы вывести уравнение (5.10).

5.12. Найти скорость в произвольной точке и расстояние наибольшего приближения к началу отсчета для орбиты с $E = 0, L \neq 0$. (Эта орбита представляет собой параболу.)

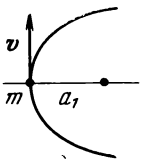


Рис. 5.20.

5.13. Показать, что для гармонического осциллятора (см. рис. 5.21) момент импульса L равен

$$L = \sqrt{Km}\, AB.$$

5.14. Пренебрегая земным тяготением, найти минимальную скорость (относительно Земли), с которой надо запустить солнечную станцию, для того чтобы она подошла вплотную к Солнцу. Найти время, требуемое для полета к Солнцу. Сравнить возникающие здесь технические трудности с теми, которые встретятся при посылке станции с Земли в пространство вне Солнечной системы.

5.15. Комета Галлея имеет период около 75 лет и эксцентриситет орбиты $e = 0{,}967$. Вычислить перигелий и афелий в астрономических единицах (а.е.).

5.16. Пусть комета, имеющая орбиту с энергией E, близкой к нулю, испытывает абсолютно неупругое лобовое столкновение с Землей. Предполагая, что диаметр кометы около 1 *км*, а ее плотность около 0,1 *г/см*^{3}, вычислить выделившуюся энергию. Выразить результат в мегатоннах тринитротолуола (1 мегатонна $= 4 \cdot 10^{15}$ *дж*).

5.17. Сравнить (относительно) скорость космического корабля при подходе к Марсу по прямой и энергетически минимальной орбитах.

5.18. Вычислить начальную скорость, требуемую для запуска ракеты по орбите с минимальной энергией на: а) Юпитер и б) Венеру. Притяжением Земли можно пренебречь.

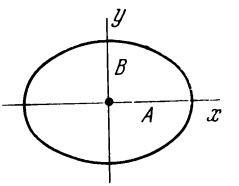


Рис. 5.21.

5.19. Планета Плутон имеет орбиту с большой полуосью $a = 40$ а.е. и эксцентриситетом $e = 0{,}25$. Найти его период, перигелий и афелий.

5.20. Допустим, что опыт Резерфорда по рассеянию проводится с протонами вместо α-частиц с энергией 5 *Мэв*. Какой энергией должны были бы обладать протоны, для того чтобы иметь те же самые траектории, что и α-частицы с энергией 5 *Мэв*? (Прежде всего, доказать, что при заданном прицельном расстоянии траектории зависят лишь от E/K.)

5.21. В модели атома Томсона положительный заряд распределен с постоянной плотностью по сфере, занимающей объем атома (около 10^{-8} *см* в диаметре), а не сконцентрирован в центре (в сфере, примерно в 10^4 раз меньшей). Вычислить потенциальную энергию заряженной частицы (т. е. α-частицы) для модели Томсона. *Указание*: вспомните из электростатики, что когда вы находитесь вне заряженной сферы, то сила оказывается такой же, как если бы заряд был сконцентрирован в центре; но когда вы находитесь внутри заряженной сферы, то заряды, находящиеся на большом расстоянии от центра, уже не дают вклада в силу. Интегрируя силу, показать, что потенциальная энергия внутри атомной сферы радиуса r_0 равна

$$V = -\frac{3}{2}\frac{K}{r_0} + \frac{1}{2}\frac{K}{r_0^3} r^2, \quad r \leqslant r_0.$$

5.22. Изобразить потенциальную энергию α-частицы для томсоновской модели атома внутри и снаружи атома (см. задачу 5.21). На том же рисунке изобразить потенциальную энергию для ядерной модели. Указать на графике масштаб энергии и расстояния. Указать также полную энергию 5 *Мэв* α-частицы.

5.23. Выписать потенциальную энергию электрона внутри томсоновского атома и изобразить ее на рисунке (см. задачу 5.21). Пусть другие электроны в атоме нейтрализуют весь положительный заряд кроме $+e$, так что эффективно $Z_2 = 1$. Вычислить частоту колебаний электрона в этом потенциальном поле.

Литература для справок

1. Голдстейн Г., Классическая механика, Гостехиздат, 1957.
2. Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М., Механика, «Наука», 1965.

Глава 6

Столкновения и рассеяние

В этой главе мы рассмотрим взаимодействие двух частиц, обладающих положительной полной энергией $E > 0$, подразумевая, что потенциальная энергия обращается в нуль при бесконечном удалении частиц друг от друга. Такого рода взаимодействия называются столкновениями. Так как полная энергия положительна, то система является несвязанной в том смысле, как это определялось в § 5.5, где мы обсуждали взаимодействие двух частиц за счет силы, пропорциональной $1/r^2$. Другие силы, такие как силы, возникающие при столкновении двух нейтральных атомов или двух бильярдных шаров, имеют очень короткий радиус действия, т. е. спадают с расстоянием гораздо быстрее, чем $1/r^2$. Такие взаимодействия происходят за очень короткий промежуток времени, но являются обычно достаточно интенсивными, для того чтобы заметно изменить импульсы частиц в течение этого короткого промежутка времени. Из-за большой интенсивности таких взаимодействий внешние силы, даже если они и присутствуют, можно игнорировать, по крайней мере в течение короткого промежутка самого столкновения.

Так как мы часто не знаем точно природы силового поля, то для экономии будем рассматривать процессы столкновения для любых консервативных сил между частицами. Поскольку внешние силы предполагаются пренебрежимо малыми по сравнению с силами между частицами, то импульс и момент импульса должны сохраняться в процессе столкновения наряду с полной энергией (см. гл. 3). До сих пор мы рассматривали такие задачи механики, в которых уже один закон сохранения энергии давал полезные результаты . В задачах столкновений, однако, существенно полностью использовать и закон сохранения импульса. Мы, во-первых, увидим, что можно получить довольно детальную информацию о движении, даже если ничего не известно о природе сил взаимодействия. Далее мы увидим (§ 6.3), что если точный закон сил известен, то может быть получено еще более детальное (фактически полное) описание движения; и обратно, если движение прослежено во всех деталях, то отсюда можно вывести неизвестный закон сил.

Рассмотрим частицу с массой m_1 и импульсом $\mathbf{p}_1$, налетающую на покоящуюся частицу с массой покоя m_2. (В экспериментах по столкновениям мишень обычно покоится.) После столкновения первая частица будет иметь импульс $\mathbf{p}_1'$, а вторая — импульс $\mathbf{p}_2'$. Угол θ_1 между направлениями $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_1'$ называется у г л о м р а с с е я н и я. Угол θ_2 называется углом о т д а ч и. Иногда говорят, что частица m_1 «рассеивается на угол θ_1» (рис. 6.1).

О многих частицах, которые нам предстоит изучать, известно, что они имеют внутреннюю структуру. Такие частицы в

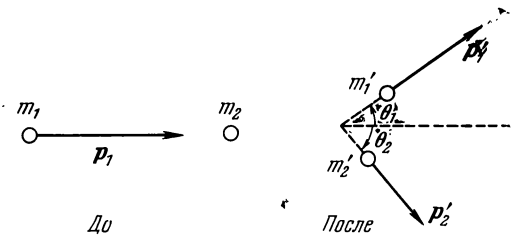


Рис. 6.1.

процессе столкновения могут изменять свою энергию покоя или даже быть расщеплены на две частицы. Стоит поэтому для общности предположить, что после столкновения обе частицы могут иметь другие массы m_1' и m_2'. (В этом случае не имеет смысла вводить различие между углом рассеяния и углом отдачи.) Эти соотношения изображены на рис. 6.1. Так как условия сохранения энергии и импульса предполагаются выполненными, то мы можем сразу же написать, что

$$E_1 + E_2 = E_1' + E_2', \tag{6.1}$$

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2', \tag{6.2}$$

приравнивая полные энергию и импульс до столкновения к значениям этих величин после столкновения. (В этой главе $\mathbf{p}_2 = 0$.) Так как потенциальная энергия V равна нулю как до, так и после столкновения, то энергии E_i в наиболее общем случае даются уравнением (3.17)

$$E_i = \sqrt{p_i^2c^2 + m_i^2c^4}. \tag{6.3}$$

Начальное обсуждение будет основываться на одних только уравнениях (6.1) и (6.2), и мы не будем учитывать какой-либо информации, которую можно получить из закона сохранения момента импульса. Позднее (§ 6.4, 6.5) будет также рассмотрен начальный момент импульса, выраженный через прицельное

расстояние (т. е. через расстояние, на котором прошли бы друг мимо друга частицы, если бы они двигались как свободные). В § 5.6 мы уже имели возможность видеть, какую роль играет прицельное расстояние для одного частного случая закона сил.

§ 6.1. Упругие столкновения

Наша цель теперь состоит в том, чтобы попытаться получить как можно больше информации из одних только уравнений (6.1) и (6.2). Уравнение (6.2) является векторным, сводящимся к трем скалярным уравнениям для компонент импульса частиц. Если полную энергию в форме (6.3) подставить в уравнение (6.1), получится еще одно уравнение для компонент импульса. Эти четыре уравнения не позволяют, конечно, полностью, определить конечные импульсы по известным начальным, поскольку ни закон силы, ни прицельное расстояние не заданы. В отдельных частных случаях, однако, они дают поразительно большую информацию.

Рассмотрим сначала случаи, в которых массы частиц остаются неизменными:

$$m_1' = m_1,\ m_2' = m_2.$$

Такие столкновения называются *упругими*. В этом случае уравнения (6.1) и (6.3) дают следующее:

$$\sqrt{p_1^2c^2 + m_1^2c^4} + m_2c^2 = \sqrt{p_1'^2c^2 + m_1^2c^4} + \sqrt{p_2'^2c^2 + m_2^2c^4}, \quad (6.4)$$

так как $\mathbf{p}_2 = 0$. С другой стороны, используя уравнение (3.16), мы можем написать, что при столкновении сохраняется *кинетическая энергия*, так как энергия покоя не изменяется:

$$T_1 = T_1' + T_2'.$$

В нерелятивистском пределе мы тогда имеем простое соотношение

$$p_1^2/2m_1 = p_1'^2/2m_1 + p_2'^2/2m_2. \quad (6.5)$$

Однако для частиц, движущихся с релятивистскими скоростями, сравнимыми со скоростью света c, мы должны позаботиться о том, чтобы использовалось уравнение (6.4) вместо (6.5).

Хорошо известным нерелятивистским примером такого столкновения является упругое столкновение двух бильярдных шаров. Наше определение очевидно согласуется с элементарным, согласно которому кинетическая энергия постоянна (уравнение (6.5)). Менее очевидно, что и противоположный случай неупругих столкновений согласуется с нашим определением. Примером хорошо известного неупругого столкновения является столкновение двух свинцовых шаров, при котором некоторое количество кинетической энергии превращается в тепло, даже несмотря на то, что массы шаров видимо не

изменяются. Однако это несоответствие только кажущееся. Фактически дополнительная тепловая энергия эквивалентна реальному увеличению массы согласно формуле $E = mc^2$, так что масса изменяется в соответствии с нашим определением. Изменение массы, конечно, неизмеримо мало в этом случае, так как потеря кинетической энергии ничтожна по сравнению с энергией покоя шаров, но это изменение как раз достаточно для соблюдения баланса энергии и массы. Неупругие столкновения будут рассматриваться более детально в следующем параграфе.

Покончив с рассмотрением закона сохранения энергии (уравнение (6.1)) для случая упругих столкновений, перейдем теперь к соотношению (6.2) для сохранения импульса. Полагая в нем $\mathbf{p}_2 = 0$, получим

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2'. \tag{6.2'}$$

Заметим, во-первых, что векторы $\mathbf{p}_1'$ и $\mathbf{p}_2'$ определяют некоторую плоскость и $\mathbf{p}_1$ должен также лежать в этой плоскости, т. е. три вектора импульса *компланарны*. Так как в правой части уравнения (6.2) нет компонент, перпендикулярных этой плоскости, их также не может быть в левой части, так что $\mathbf{p}_1$ лежит в этой плоскости. Данное заключение следует из одного лишь закона сохранения импульса и не зависит от того, является ли столкновение упругим, так что любое столкновение, при котором одна частица вначале покоится, является плоским.

Во многих экспериментах можно контролировать начальный импульс частиц до столкновения. Допустим поэтому, что $\mathbf{p}_1$ известен наряду с массами m_1 и m_2. Мы хотели бы знать, какую информацию это дает нам относительно конечных импульсов $\mathbf{p}_1'$ и $\mathbf{p}_2'$. Два вектора имеют всего шесть неизвестных компонент, для которых мы имеем четыре уравнения: уравнение (6.2) для трех компонент импульса и соотношение для энергии (уравнение (6.4) или (6.5)). Этот результат не является для нас неожиданным, так как мы не знаем природы силы. Если, однако, две из шести компонент $\mathbf{p}_1'$ и $\mathbf{p}_2'$ будут определены, мы можем найти четыре остальные неизвестные, так как мы имеем четыре связывающих их уравнения. Мы уже отмечали, что векторы $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{p}_1'$ и $\mathbf{p}_2'$ лежат в одной плоскости. Ориентация этой плоскости относительно $\mathbf{p}_1$ как оси обычно не представляет большого интереса, так как она не влияет на движение частиц в этой плоскости. Если мы будем считать эту плоскость заданной, то каждый из векторов $\mathbf{p}_1'$ и $\mathbf{p}_2'$ будет иметь только по две компоненты, так что останутся всего четыре неизвестных компоненты. Для связи этих компонент между собой у нас теперь имеется три уравнения: два из уравнений (6.2) для компонент импульса в заданной плоскости плюс уравнение для энергии. Движение после столкновения будет полностью определено, если мы зададим одно из четырех неизвестных или же связы-

вающий их параметр, такой как угол θ_1, на который рассеивается частица *1*. Остальные три параметра, т. е. p_1', p_2' и θ_2, могут быть тогда найдены. Арифметику, возникающую при вычислении p_1', p_2' и θ_2 в зависимости от θ_1, мы оставляем в качестве упражнения (задача 6.1).

В частном случае равных масс $m_1 = m_2 = m$ мы можем получить любопытный результат для случая нерелятивистского движения. Возводя в квадрат уравнение (6.2′), мы найдем

$$p_1^2 = p_1'^2 + p_1'^2 + 2\mathbf{p}_1' \mathbf{p}_2',$$

в то время как уравнение (6.5) сводится к

$$p_1^2 = p_1'^2 + p_2'^2,$$

если массы равны. Следовательно, $\mathbf{p}_1' \mathbf{p}_2' = 0$, т. е. $\mathbf{p}_1'$ и $\mathbf{p}_2'$ перпендикулярны. Если вы когда-либо играли в бильярд, вы могли наблюдать, что шары после столкновения движутся под прямым углом. Эта ситуация изображена на рис. 6.2, где углы имеют тот же смысл, что и на рис. 6.1. Это построение, очевидно, соответствует уравнению (6.2), и мы видим, что $p_1' = p_1 \cos\theta_1$ и $p_2' = p_1 \sin\theta_1$.

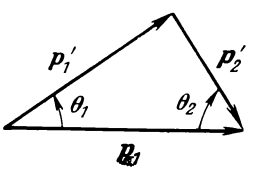


Рис. 6.2.

Другим интересным частным случаем является такой, когда масса одного тела много меньше массы другого, например $m_1 \ll m_2$. Из этого следует (снова предполагаем движение нерелятивистским), что кинетическая энергия первоначально покоящейся тяжелой частицы (последний член в уравнении (6.5)) должна быть много меньше кинетической энергии налетающей частицы. Действительно, уравнение (6.5) после умножения его на $2m_1$, примет вид

$$p_1^2 = p_1'^2 + (m_1/m_2)\, p_2'^2.$$

Если мы в качестве низшего приближения положим m_1/m_2 равным нулю, то получим

$$p_1' \approx p_1. \tag{6.6}$$

(Эта процедура была бы чревата опасностью, если бы $p_2'^2$ было много больше, чем p_1^2 и $p_2'^2$, но в нашем случае этого нет, так как $\mathbf{p}_2'$ равно $\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1'$, согласно уравнению (6.2).) Используя уравнения (6.6) и (6.2), мы получим для p_2' следующее выражение:

$$(p_2')^2 = (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1')^2 = p_1^2 + p_1'^2 - 2p_1p_2 \cos\theta_1 \approx 2p_1^2(1 - \cos\theta_1)$$

или

$$p_2' \approx p_1 \sqrt{2(1-\cos\theta_1)}. \tag{6.7}$$

Наконец, получим θ_2, проектируя уравнение (6.2) на направление, перпендикулярное $\mathbf{p}_1$:

$$p_1' \sin\theta_1 = p_2' \sin\theta_2$$

или

$$\sin\theta_2 = \frac{p_1'}{p_2'} \sin\theta_1 \approx \frac{\sin\theta_1}{\sqrt{2(1-\cos\theta_1)}}. \qquad (6.8)$$

Здесь мы использовали выражения для p_1' и p_2' из уравнений (6.6) и (6.7).

Соотношения, даваемые уравнениями (6.6), (6.7) и (6.8), изображены на рис. 6.3, как функции от угла рассеяния θ_1. Мы видим, что при $\theta_1 \approx 0$ (скользящее столкновение) $p_2' \approx 0$; с другой стороны, при $\theta_1 = \pi$ (лобовое столкновение) $p_2' = 2p_1$ и $\theta_2 = 0$. Эти результаты очевидны интуитивно, но не очевидно, что при скользящем столкновении $\theta_2 = \pi/2$ или что если $\theta_1 = \pi/2$, то $\theta_2 = \pi/4$. Эти уравнения дают также результаты для всех промежуточных значений угла рассеяния θ_1.

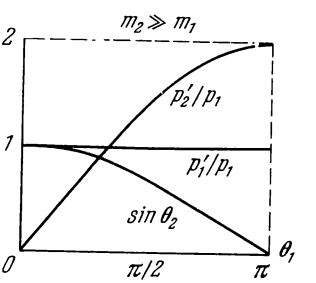


Рис. 6.3.

Отмеченные выше результаты, конечно, справедливы лишь приближенно. При желании приближение может быть улучшено следующим образом. Мы можем подставить приближенное выражение для p_2', даваемое уравнением (6.7), обратно в уравнение (6.5), для того чтобы получить более точный результат для p_1':

$$p_1'^2 = p_1^2 - \frac{m_1}{m_2} p_2'^2 \approx p_1^2 \left[1 - \frac{m_1}{m_2} 2(1-\cos\theta_1)\right],$$

или, извлекая квадратный корень и разлагая его в степенной ряд:

$$p_1' \approx p_1 \left[1 - (1-\cos\theta_1)\frac{m_1}{m_2}\right].$$

Если мы используем это выражение для p_1' вместо уравнения (6.6) в нашем выводе p_2', то получим аналогичное уточнение и для уравнения (6.7). Точно так же могут быть получены более точные значения для величины $\sin\theta_2$. Во всех этих выражениях поправка мала и имеет порядок $m_1/m_2 \ll 1$. Эту процедуру можно повторять снова и снова, получая все лучшие и лучшие приближения.

Такого рода вычисления представляют собой подход, который часто используется в теоретической физике — метод *последовательных приближений*. Мы сначала делаем для p_1' грубое приближение и получаем соответствующее значение p_2'. В этом «нулевом при-

ближении» малая величина m_1/m_2 не появляется (т. е. полагается равной нулю). Дальше мы используем нулевой порядок величины p_2' для вычисления первого порядка величины p_1', а из нее — первого порядка величины p_2'. В это первое приближение отношение m_1/m_2 входит в первой степени. Процесс может быть повторен путем использования первого порядка величины p_2' для вычисления второго порядка величины p_1', а затем и p_2'. Во втором приближении появляется $(m_1/m_2)^2$ и т. д. Этот важный метод родствен разложению в степенной ряд и находит очень широкое применение. (Здесь, конечно, задача может быть решена точно, так что приближенный метод не стоит развивать чересчур далеко.)

§ 6.2. Неупругие столкновения

Если массы частиц при столкновении изменяются, то столкновение называется *неупругим*. Уравнения (6.1) и (6.2) остаются применимыми, но мы не можем более полагать, что $m_1 = m_1'$, $m_2 = m_2'$. Рассмотрим сначала саму форму закона сохранения энергии для нерелятивистских столкновений, при которых все кинетические энергии частиц малы по сравнению с их энергиями покоя. Примером такого столкновения было бы столкновение двух свинцовых шаров. Возможно, более интересными примерами являются реакции в ядерной физике, в которых два сталкивающихся ядра, взаимодействуя друг с другом, образуют в результате два совершенно других ядра. Механизм таких процессов будет детально изложен позднее (гл. 30). Здесь нам достаточно лишь допустить, что такие реакции могут происходить.

В нерелятивистском случае опять удобно рассматривать кинетические энергии, так как они простым образом связаны с импульсами. В этом случае из уравнений

$$E_1 = E_1' + E_2'$$

и

$$E_i = T_i + m_i c^2$$

мы получим

$$T_1 = T_1' + T_2' + Q, \tag{6.9}$$

где

$$Q \equiv (m_1' + m_2' - m_1 - m_2)c^2.$$

Если Q положительно, то кинетические энергии после столкновения меньше, чем до столкновения. Макроскопические примеры такого рода имеют место тогда, когда часть кинетической энергии переходит в тепло (с соответствующим возрастанием массы покоя сталкивающихся объектов, даже если это увеличение неизмеримо мало). Такие случаи имеют место также в ядерных столкновениях,

когда некоторая часть кинетической энергии превращается во внутреннюю энергию конечных ядер. В ядерных столкновениях эти внутренние энергии часто очень велики, так что изменение массы покоя может быть заметным.

Если величина Q положительна, то столкновение называется *эндотермическим*. В ядерных столкновениях величина Q бывает и отрицательной, причем столь же часто, как и положительной. Это означает, что внутренняя энергия в реакции освобождается и проявляется как кинетическая. (Таковы случаи реакций деления и термоядерных реакций слияния.) Если Q отрицательно, реакция называется *экзотермической*. Макроскопические столкновения также могут быть экзотермическими, но такие столкновения необычны; они должны быть специальным образом подготовлены, так чтобы они приводили к высвобождению запасенной заранее химической или механической энергии. Если $Q = 0$, столкновение будет *упругим* (ср. уравнение (6.5)).

Установив форму самого закона сохранения, удобную для использования в исследуемом нами случае, мы можем теперь перейти к комбинированию этого закона с законом сохранения импульса (уравнение (6.2)), который остается справедливым без каких-либо изменений. Если Q известно, мы можем опять найти p_1', p_2' и θ_2 в зависимости от θ_1 и p_1. Вместо того чтобы выводить заново все формулы предыдущего параграфа для случая $Q \neq 0$, мы рассмотрим типичный пример нерелятивистской ядерной реакции.

Одна из наиболее важных термоядерных реакций состоит в том, что два тяжелых изотопа водорода, называемых дейтронами, превращаются в нейтрон и изотоп гелия:

$$_1H^2 + {}_1H^2 \rightarrow {}_0n^1 + {}_2He^3.$$

Значение в природе этой реакции будет обсуждаться в гл. 30. Все, что нам сейчас нужно знать, это то, что возрастание энергии покоя равно

$$Q = (m_1' + m_2' - m_1 - m_2)c^2 \approx -3{,}3 \text{ Мэв},$$

что означает 3,3 миллиона электрон-вольт. Один электрон-вольт — это энергия, приобретаемая частицей с зарядом, равным одному электронному заряду $4{,}8 \cdot 10^{-10}$ CGSE, при прохождении разности потенциалов в 1 *в* (= 1/300 CGSE); 1 *эв* $= 4{,}8 \cdot 10^{-10}$ 1/300 *эрг* $= 1{,}6 \cdot 10^{-12}$ *эрг*. Реакция будет идти с наибольшей легкостью (гл. 30), когда налетающий дейтрон имеет кинетическую энергию T около 0,1 *Мэв*.

Так как энергия покоя этих частиц имеет порядок 10^3 *Мэв*, то для кинетических энергий законно пользоваться нерелятивистскими выражениями. Кроме того, допустим для простоты, что векторы $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{p}_1'$ и $\mathbf{p}_2'$ коллинеарны, а векторы $\mathbf{p}_1'$ и $\mathbf{p}_2'$ направлены в противо-

положные стороны. Тогда, возводя уравнение (6.2) в квадрат, получим

$$p_1^2 = p_1'^2 + p_2'^2 - 2p_1'p_2'.$$

Если $m_1' = m_n$ есть масса нейтрона, то масса дейтрона приблизительно равна $2m_n$, а масса m_2' $_2\mathrm{He}^3$ очень близка к $3m_n$. Разделив предыдущее уравнение на $2m_n$ можно поэтому написать

$$2T_1 = T_1' + 3T_2' - 2\sqrt{3T_1'T_2'}$$

или, подставляя выражение для T_2' из уравнения (6.9), будем иметь

$$2T_1 = T_1' + 3(T_1 - T_1' - Q) - 2\sqrt{3T_1'(T_1 - T_1' - Q)}.$$

После возведения этого выражения в квадрат мы получим квадратное уравнение для T_1', решение которого дается выражением

$$T_1' = -\frac{3}{4}Q + \frac{1}{2}T_1 \pm \sqrt{\frac{1}{2}T_1\left(-\frac{3}{4}Q + \frac{3}{8}T_1\right)}.$$

В случае, когда $Q = -3{,}3$ *Мэв* и $T_1 = 0{,}1$ *Мэв*, эти два решения для энергии нейтрона дают значения: $T_1' \approx 2{,}85$ *Мэв* и $T_1' \approx 2{,}15$ *Мэв*.

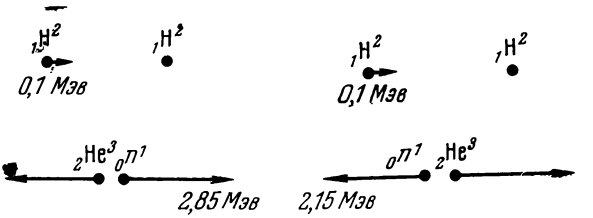


Рис. 6.4.

Так как мы считаем $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_1'$ коллинеарными, то θ_1 равно 0 или 180° (рис. 6.4).

Более высокой энергии соответствует $\theta_1 = 0$, т. е. случай, когда нейтроны вылетают «вперед» в направлении налетающего дейтрона. Для углов θ, лежащих между 0 и 180°, энергия нейтронов оказывается лежащей между двумя нашими решениями 2,85 *Мэв* и 2,15 *Мэв*. На этой реакции работают наиболее употребительные лабораторные источники нейтронов. (Ядрами мишени чаще являются ядра другого изотопа водорода — трития. Эта реакция экзотермична, и даже с большим выходом энергии получаемых нейтронов: приблизительно 14 *Мэв*.) Эта разновидность нейтронного источника дает моноэнергетический пучок под любым определенным углом, т. е. все нейтроны в пучке имеют одну и ту же энергию — удобное свойство для не-

которых типов лабораторных экспериментов. Действительно, энергия этого пучка может варьироваться (в довольно узких пределах) путем выделения пучка нейтронов, вылетающих под определенным углом к налетающему дейтронному пучку.

§ 6.3. Распад нестабильных частиц

Более экзотическим примером «неупругого столкновения» является распад отдельной нестабильной частицы на две другие частицы. Такого рода события часто регистрируются в физике высоких энергий. Поначалу может показаться терминологической натяжкой называть такое событие «неупругим» и вообще «столкновением», так как здесь вовсе нет частицы мишени (m_2). Отдельная частица просто раздробляется спонтанно на две другие частицы.

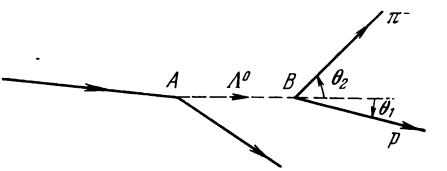


Рис. 6.5.

Тем не менее даже в этом случае энергия и импульс должны сохраняться, так что это есть столкновение в том смысле, что его можно анализировать посредством уравнений (6.1) и (6.2). Кроме того согласно нашему определению оно является неупругим, поскольку массы покоя частиц различны до и после столкновения. Этот вид распада будет, как правило, релятивистским, равно как и неупругим, так что мы должны вернуться к более общему соотношению (6.3) для энергии — импульса.

Мы рассмотрим типичный пример распада нестабильной частицы, а именно так называемый *лямбда-нуль распад*. Событие такого рода может наблюдаться в одном из многих придуманных физиками-ядерщиками регистрирующих устройств, таких как «камера Вильсона», «ядерная эмульсия» или «пузырьковая камера». Все они делают треки отдельных заряженных частиц видимыми. Во многих случаях импульсы частиц могут быть определены, например, по измерению их отклонения в магнитном поле. Допустим, что фотография в пузырьковой камере выглядит так, как показано на рис. 6.5, на котором жирные линии представляют видимые треки заряженных частиц, а пунктирная линия проведена просто для наглядности.

Предполагается, что нейтральная частица, называемая Λ^0-частицей, рождается в точке A и доходит до точки B, где распадается на две частицы. Эти две частицы затем идентифицируются как положительно заряженный протон с известной массой покоя, равной 1836 m_e (m_e — масса электрона) и отрицательно заряженный π-мезон с массой покоя 273 m_e.

Допустим теперь, что наши измерения дали $\theta_1 = 12°$ и $\theta_2 = 44°$, p_1' (протона) $= 448$ *Мэв/с* и p_2' (π-мезона) $= 136$ *Мэв/с*. Импульсы частиц часто измеряются в единицах *Мэв/с*, где c — скорость света. Так как pc имеет размерность энергии, это совершенно законно; но важно помнить, что частица с импульсом, равным X *Мэв/с*, не имеет энергии, равной X *Мэв*, исключая случай массы покоя, равной нулю. Это можно видеть из уравнения (6.3). Какие заключения можем мы теперь вывести относительно свойств нейтральной Λ^0-частицы? Особенно полезно знать ее массу покоя, для того чтобы увидеть, является ли она известной частицей или же вновь открытой.

Сохранение импульса при распаде Λ^0-частицы в направлении ее движения выражается (после умножения на c) следующим образом:

$$cp_1 = cp_1' \cos\theta_1 + cp_2' \cos\theta_2 = 448\ \textit{Мэв} \cos 12° + 136\ \textit{Мэв} \cos 44° = 536\ \textit{Мэв}.$$

Далее мы используем сохранение энергии. Так как

$$m_e c^2 = 9{,}11 \cdot 10^{-28}\,г\ (3 \cdot 10^{10}\ см/сек)^2 = 8{,}2 \cdot 10^{-7}\ эрг = \frac{8{,}2 \cdot 10^{-7}\ эрг}{1{,}602 \cdot 10^{-12}\ эрг/эв} = 0{,}511\ \textit{Мэв},$$

то, следовательно, $m_1' c^2 = 1836 \cdot 0{,}511\ \textit{Мэв} = 938\ \textit{Мэв}$ и $m_2' c^2 = 273 \cdot 0{,}511\ \textit{Мэв} = 140\ \textit{Мэв}$. Подставляя эти значения в уравнение для энергии, мы придем к выражению, которое определяет m_1— массу Λ^0-частицы:

$$E_1 = \sqrt{(p_1 c)^2 + (m_1 c^2)^2} = \sqrt{(p_1' c)^2 + (m_1' c^2)^2} + \sqrt{(p_2' c)^2 + (m_2' c^2)^2},$$

$$E_1 = \sqrt{(536)^2 + (m_1 c^2)^2} = \sqrt{448^2 + 938^2} + \sqrt{136^2 + 140^2};$$

$$E_1 = \sqrt{(536)^2 + (m_1 c^2)^2} = 1235\ \textit{Мэв}.$$

Отсюда

$$m_1 c^2 = \sqrt{1235^2 - 536^2} = 1114\ \textit{Мэв},$$

так что

$$m_1 = \frac{1114}{0{,}511} m_e = 2180 m_e.$$

Эта масса действительно с точностью до одной десятой процента равна принятой величине массы Λ^0-частицы (гл. 31). Фактически это и есть тот эксперимент, в котором Λ^0-частица была открыта.

На этом здесь мы закончим рассмотрение столкновений типа распада. Несколько другие примеры будут обсуждены в гл. 17 и 31.

§ 6.4. Поперечное сечение рассеяния

Если пучок частиц направлен на мишень, то некоторые частицы будут отклоняться от своих начальных траекторий в результате столкновений с частицами мишени. Изучение этого процесса *рассеяния* является в высшей степени важным в физике. Из тщательных экспериментов и детального анализа числа рассеянных частиц можно изучить природу сил, действующих между частицами. Большая часть наших знаний о ядерных силах была достигнута как раз на этом пути. Именно ранние опыты Резерфорда по рассеянию (гл. 5) показали существование малого, но массивного ядра, заряженного положительно.

Многие из параметров, полезные для обсуждения рассеяния, могут быть лучше поняты на примере конкретной модели межчастичных сил. Особенно проста модель *твердой сферы*, при которой частицы предполагаются сферическими по форме, абсолютно упругими и несжимаемыми. Потенциальная энергия в зависимости от расстояния между твердыми сферами радиусов a_1 и a_2 изображена на рис. 6.6. Если расстояние между частицами больше, чем $a_1 + a_2$, то между ними силы не действуют. При r равном $a_1 + a_2$ сферы касаются и возникает бесконечная сила отталкивания. На практике сферы никогда не являются абсолютно твердыми, но, например, стальные шары и, в микроскопических масштабах, атомы инертного газа имеют потенциалы взаимодействия, приближающиеся к изображенным на рис. 6.6.

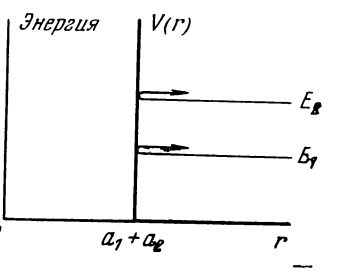


Рис. 6.6.

Если твердый шар радиуса a_1 падает со скоростью $\mathbf{v}$ на мишень, состоящую из покоящихся твердых шаров с радиусами a_2, то столкновение будет происходить всякий раз, когда налетающая частица проходит на расстоянии от центра одной из частиц мишени, не превышающем $a_1 + a_2$. Поэтому каждая частица мишени представляется падающей частице как мишень с эффективной площадью

$$\sigma = \pi (a_1 + a_2)^2, \tag{6.10}$$

называемой *поперечным сечением рассеяния* или, более точно, *полным* или *интегральным* поперечным сечением рассеяния, отличающимся от дифференциального поперечного сечения рассеяния, которое будет определено позднее. Рассмотрим цилиндр с площадью основания, равной поперечному сечению рассеяния $\sigma = \pi (a_1 + a_2)^2$, и длиной, равной расстоянию $dx = vdt$, проходимому падающей частицей за время dt, с осью вдоль направления движения (рис. 6.7).

Если центр одной из частиц мишени лежит в этом цилиндре, то в течение времени dt будет иметь место столкновение. Поэтому вероятность $d\Pi$ столкновения как раз равна вероятности того, что центр частицы мишени находится внутри цилиндра. Тем самым эта вероятность равна плотности частиц мишени n [*частиц*/*см*^{3}], умноженной на объем σdx цилиндра:

$$d\Pi = n\sigma dx = n\sigma v dt. \tag{6.11}$$

Это уравнение дает соотношение между поперечным сечением рассеяния и вероятностью столкновения на единицу длины $d\Pi/dx$ или единицу времени $d\Pi/dt$:

$$d\Pi/dx = n\sigma, \quad d\Pi/dt = n\sigma v.$$

До сих пор мы не рассматривали, на какой угол рассеивается налетающая частица. Для изучения этой задачи сделаем упрощающее предположение, что рассеиваемая частица много легче, чем рассеивающая, так что последнюю можно считать остающейся в покое на протяжении процесса столкновения.

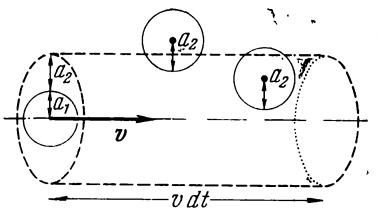


Рис. 6.7.

Как мы уже видели (уравнение (6.6)), импульс налетающей частицы может изменяться по направлению, но его абсолютная величина при столкновении остается неизменной. Угловое отклонение рассеиваемой частицы в общем случае зависит от *прицельного расстояния* b, т. е. расстояния по перпендикуляру от центра рассеивающей частицы до линии, вдоль которой движется налетающая частица (рис. 6.8, *а*)). Мы уже видели, какой является эта зависимость для случая сил между частицами, обратно пропорциональных квадрату расстояния (уравнение (5.23)).

Для того чтобы получить аналогичное соотношение для твердых сфер, рассмотрим рис. 6.8. В момент столкновения сила, действующая на налетающую частицу, направлена вдоль линии, соединяющей центры двух сфер, или вдоль оси y координатной системы, изображенной на рис. 6.8. Так как вдоль x сила отсутствует, то импульс налетающей частицы в направлении x не изменяется. Мы также знаем, что абсолютная величина вектора полного импульса налетающей частицы является неизменной (уравнением (6.6)), так что абсолютная величина y-компоненты также остается неизменной. Поэтому y-компонента импульса при столкновении просто меняет знак. Другими словами, налетающая частица будет «отражена» осью x, причем угол падения будет равен углу отражения, или $\alpha_1 = \alpha_2$ (рис. 6.8). Из простых геометрических соображений следует, что все углы

α_1, α_2, α_3 и α_4 на рис. 6.8 равны друг другу. Так как угол рассеяния θ равен $\alpha_2 + \alpha_3$ или равен $2\alpha_4$, то отсюда следует, что

$$\theta = 2\alpha_4 = 2\arccos\frac{b}{a_1+a_2}, \qquad b \leqslant a_1 + a_2. \tag{6.12}$$

Если частица с прицельным расстоянием b рассеивается на угол θ, который определяется уравнением (6.12) (для твердых сфер),

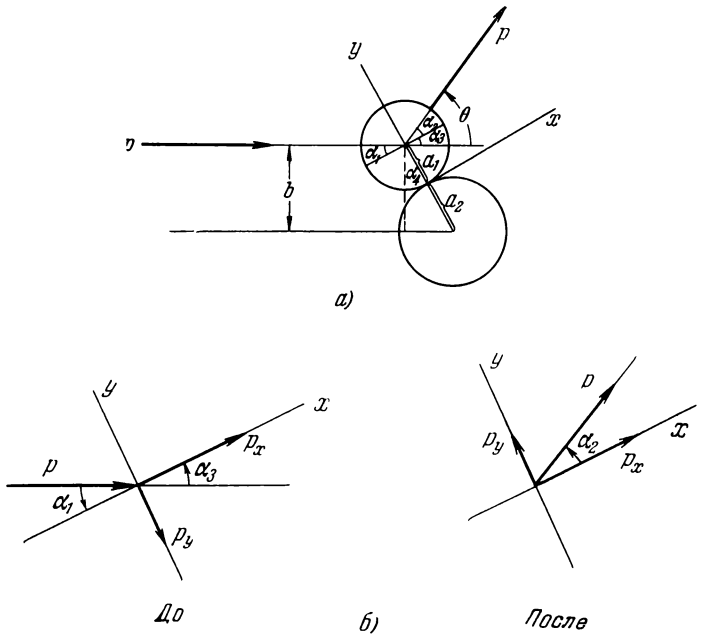


Рис. 6.8.

то все частицы в цилиндрическом слое на рис. 6.9 с прицельными расстояниями между b и $b + db$ будут рассеиваться на углы от θ до $\theta + d\theta$, причем соотношение между $d\theta$ и db получается дифференцированием уравнения (6.12). Поперечное сечение рассеяния цилиндрическим слоем $2\pi b db$ является поэтому *поперечным сечением рассеяния на углы между* θ и $\theta + d\theta$.

Это сечение обозначается через $(d\sigma/d\theta)d\theta$ или в общем случае

$$\left|\frac{d\sigma}{d\theta}\right| = 2\pi b\left|\frac{db}{d\theta}\right|. \tag{6.13}$$

Согласно уравнению (6.12) для твердых сфер

$$b = (a_1 + a_2)\cos\frac{\theta}{2}$$

и

$$\frac{db}{d\theta} = -\frac{1}{2}(a_1 + a_2)\sin\frac{\theta}{2},$$

так что поперечное сечение рассеяния на угол от θ до $\theta + d\theta$ дается в случае твердых сфер выражением

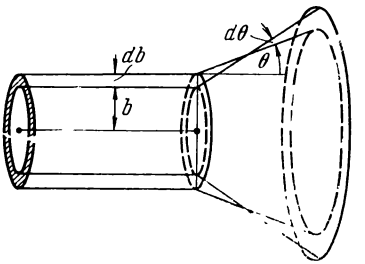


Рис. 6.9.

$$\left|\frac{d\sigma}{d\theta}\right| = 2\pi(a_1 + a_2)\cos\frac{\theta}{2}\cdot\frac{1}{2}\times$$

$$\times(a_1+a_2)\sin\frac{\theta}{2} = \frac{\pi}{2}(a_1 + a_2)^2\sin\theta. \quad (6.14)$$

Более широко используемое *дифференциальное поперечное сечение* является поперечным сечением рассеяния в малый телесный угол $d\Omega$ и обозначается как $\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega$. Элемент телесного угла в сферических координатах (рис. 6.10) равен $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ и $\left|\frac{d\sigma}{d\theta}\right|d\theta$ может быть получено интегрированием $\left|\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|d\Omega$ по всем углам φ:

$$\left|\frac{d\sigma}{d\theta}\right|d\theta = \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\varphi\left|\frac{d\sigma}{d\Omega}\right| =$$

$$= 2\pi\sin\theta d\theta\left|\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|.$$

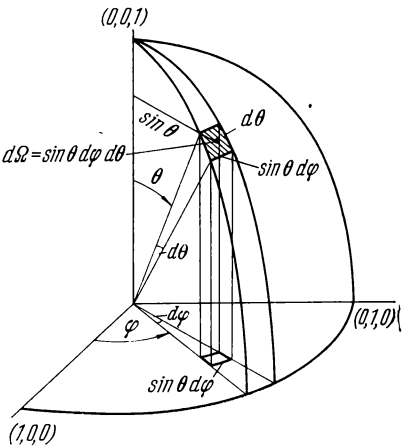


Рис. 6.10.

Здесь мы использовали тот факт, что для центрального потенциала величина $\left|\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|$ не зависит от φ. Наш наиболее общий результат поэтому состоит в следующем:

$$\left|\frac{d\sigma}{d\Omega}\right| = \frac{1}{2\pi\sin\theta}\left|\frac{d\sigma}{d\theta}\right|. \quad (6.15)$$

Из уравнений (6.14) и (6.15) следует, что поперечное сечение рассеяния на единичный угол для твердых сфер равно

$$\left|\frac{d\sigma}{d\Omega}\right| = \frac{1}{4}(a_1 + a_2)^2. \quad (6.16)$$

Мы видим, что $\left|\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|$ не зависит от угла рассеяния, т. е. что вероятность одинакова для рассеяния в любой элемент телесного угла

(рис. 6.11). Этот результат специфичен для взаимодействия твердых сфер. Для кулоновского взаимодействия мы найдем, что $\left|\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|$ зависит от θ.

В заключение отметим, что если мы проинтегрируем дифференциальное поперечное сечение, даваемое уравнением (6.14)

$$\int_0^{\pi} \left|\frac{d\sigma}{d\theta}\right| d\theta$$

или уравнением (6.16)

$$\int_0^{4\pi} \left|\frac{d\sigma}{d\Omega}\right| d\Omega,$$

то опять получим интегральное поперечное сечение, определяемое уравнением (6.10).

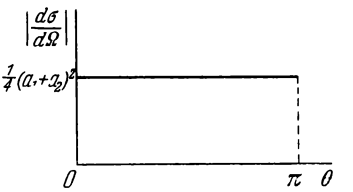


Рис. 6.11.

§ 6.5. Кулоновское рассеяние

Дифференциальное поперечное сечение для кулоновского рассеяния можно получить из уравнения (5.23) и производной от него:

$$b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}, \quad db = \frac{-Z_1 Z_2 e^2}{4E^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} d\theta.$$

Тогда дифференциальное поперечное сечение на угол между θ и $\theta + d\theta$ согласно уравнению (6.13) оказывается равным

$$\left|\frac{d\sigma}{d\theta}\right| = \pi \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E}\right)^2 \frac{\cos \frac{\theta}{2}}{\sin^3 \frac{\theta}{2}}. \tag{6.17}$$

Аналогично получим дифференциальное поперечное сечение на единицу телесного угла (уравнение (6.15))

$$\left|\frac{d\sigma}{d\Omega}\right| = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E \sin^2 \frac{\theta}{2}}\right)^2 \tag{6.18}$$

Это есть хорошо известное *резерфордовское поперечное сечение*. В отличие от результата для твердых сфер, поперечное сечение для кулоновского поля сильно зависит от угла θ (рис. 6.12), а также от энергии E налетающей частицы. Качественно эта угловая зависимость может быть понята из дальнодействующего характера кулоновских

сил. Даже частицы с очень большим прицельным расстоянием будут чуть-чуть отклоняться. Поэтому поперечное сечение $2\pi b db$ рассеяния на малый угол θ будет очень велико и стремится к бесконечности, когда θ приближается к нулю. Однако для больших углов рассеяния частицы должны проходить близко друг от друга, чтобы сила была достаточно велика для такого большого изменения импульса. Это означает, что прицельное расстояние и, соответственно, поперечное сечение должны быть малы.

Согласие между экспериментами по резерфордовскому рассеянию и теоретическим соотношением (уравнение (6.18)), в частности для угловой зависимости, показанной на рис. 6.12, дало наиболее убедительное доказательство того, что закон силы $1/r^2$ справедлив вплоть до очень малых расстояний внутри атома. Насколько мало это расстояние при заданном угле рассеяния, точно определяется уравнением (5.23). Отклонения от теоретического закона, конечно, следует ожидать для очень малых углов, так как теоретическая кривая имеет сингулярность при $\theta = 0$ (см. ниже). Должны также ожидаться отклонения для достаточно больших θ и E (или малых Z_1Z_2), когда прицельное расстояние становится настолько малым, что достигает величины радиуса ядра. Тогда частицы взаимодействуют и через характерные ядерные силы, а не только через кулоновские, и уравнение (5.23) больше не может оставаться справедливым*). Эти отклонения могут дать некоторую информацию о радиусе действия ядерных сил.

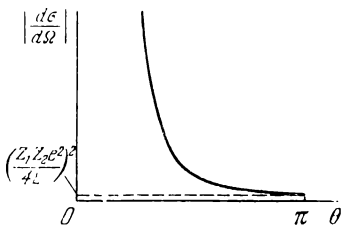


Рис. 6.12.

Полное или интегральное поперечное сечение рассеяния

$$\sigma = \int_0^{\pi} \left|\frac{d\sigma}{d\theta}\right| d\theta \sim \int_0^{\pi} \frac{\cos\frac{\theta}{2}}{\sin^3\frac{\theta}{2}}\, d\theta,$$

очевидно, бесконечно, так как вблизи $\theta = 0$ подынтегральная функция ведет себя как $1/\theta^3$. Поэтому заряженная частица является по отношению к другой заряженной частице бесконечно большой мишенью. Это просто выражает тот факт, что, как бы ни было велико

*) Отклонение от резерфордовской формулы при прицельных расстояниях, сравнимых с размерами ядра, происходит не только за счет ядерных сил, но и за счет того, что заряд ядра не является точечным, а распределен по объему ядра. Поэтому отклонения от резерфордовской формулы наблюдаются и для рассеяния электронов на ядрах, хотя электроны не подвержены действию ядерных сил. (*Прим. ред.*)

расстояние r, на которое разделены частицы, они все же взаимодействуют с силой $Z_1Z_2e^2/r^2$. Практически, однако, заряды эффективно экранируются другими зарядами. Так, в опытах Резерфорда положительно заряженные ядра экранируются отрицательными электронами. В газе из положительно и отрицательно заряженных частиц, называемом плазмой (гл. 11), также было обнаружено, что потенциал заряженной частицы описывается потенциалом вида

$$Ze\left[\exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right)\right]\frac{1}{r},$$

где λ_D — характерное плазменное расстояние. Полное поперечное сечение с таким потенциалом взаимодействия вполне конечно.

До сих пор мы предполагали, что закон сил известен, и из него мы вычисляли различные поперечные сечения. Обычно в физике встречаются с более трудной задачей: используя экспериментальные данные о поперечном сечении, исследовать неизвестный закон силы.

Наиболее обычный путь подхода к этой задаче состоит в том, чтобы предположить для потенциала какую-то простую форму, скажем

$$V = \alpha r^{-\beta}e^{-\gamma r},$$

и смотреть, можно ли подобрать параметры α, β и γ так, чтобы получить согласие с экспериментальными данными. В гл. 28 мы попробуем проанализировать таким образом нейтрон-протонный потенциал, а здесь заниматься этим вопросом больше не будем. Важно подчеркнуть, однако, что данные эксперименты по рассеянию могут зондировать потенциал лишь до определенного предела. Например, если сила является кулоновской, то частица с энергией E может подойти к силовому центру лишь на расстояние r, такое, что $E = Z_1Z_2e^2/r$ или $r = Z_1Z_2e^2/E$. Причем это возможно лишь в случае, когда прицельное расстояние равно нулю. Такую зависимость прицельного расстояния от энергии легко усмотреть из рис. 6.13.

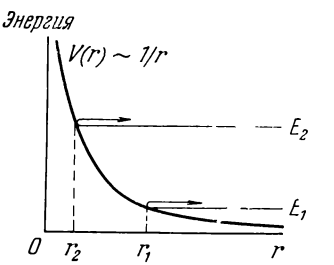


Рис. 6.13.

Рассмотрим две налетающие частицы с энергиями E_1 и E_2 соответственно.

Кинетическая энергия частицы с низшей энергией E_1 полностью превратится в потенциальную в момент, когда она достигнет точки r_1, в которой ее радиальное движение должно измениться на обратное. Частица с высшей энергией, с другой стороны, подойдет на меньшее расстояние r_2. По мере возрастания энергии мы проникаем все ближе и ближе к центру потенциала. В этом смысле кулонов-

ский потенциал является «мягкой сферой», в противоположность потенциалу твердой сферы, изображенному на рис. 6.6, при котором частицы независимо от их энергии не могут сблизиться на расстояние, меньшее суммы $a_1 + a_2$ их радиусов. Так как все физические потенциалы являются до некоторой степени «мягкими», физики стремятся ускорить частицы до все более и более высоких энергий, чтобы исследовать природу сил на очень малых расстояниях. Еще большая необходимость высоких энергий станет очевидной, когда мы ознакомимся с квантовой механикой (ч. III). Мы увидим, что все частицы имеют волновые свойства и длина волны обратно пропорциональна импульсу частицы. Так как налетающая частица не может видеть структуры меньшей, чем ее длина волны, то ясно, что мы должны перейти к большим импульсам, для того чтобы зондировать детально вид потенциала. Эксперименты по рассеянию выполняются теперь с частицами, имеющими столь высокую энергию, как $3 \cdot 10^{20}$ *эв* $= 30$ *Гэв* (гигаэлектрон-вольт), и планируется создание ускорителей, способных давать энергии даже большие, чем эта*).

Задачи

6.1. Из уравнений (6.2′) и (6.5) найти p_1', p_2' и θ_2 в зависимости от p_1 и θ_1. Показать, что при $m_1/m_2 \ll 1$ этот результат согласуется с уравнениями (6.6), (6.7) и (6.8).

6.2. Найти наибольший угол, на который частица с массой m_1 может быть упруго рассеяна частицей с массой m_2, если $m_1 > m_2$; решить уравнение относительно $\cos\theta_1$ в зависимости от p_1'/p_1 (с m_1/m_2 в качестве параметра) и продифференцировать результат по (p_1'/p_1).

6.3. Движущийся шарик сталкивается с шариком-мишенью вдвое меньшей массы. Угол рассеяния и угол отдачи равны 30°. Вычислить импульсы и скорости шаров после разлета и направления движения налетевшего шара. Было ли столкновение упругим?

6.4. Два шара различных неизвестных масс сталкиваются упруго. До столкновения шар 2 покоился, а шар 1 двигался со скоростью v_1. После столкновения шар 1 начал двигаться в направлении, составляющем прямой угол с направлением его первоначального движения, и получил скорость $v_1/2$. В каком направлении начал двигаться после столкновения шар 2? Можно ли найти абсолютную величину скорости шара 2 из приведенных данных? Если вы ответите да, то найдите эту скорость. Если нет, объясните почему.

6.5. Нейтрон массы m движется со скоростью v_0, проникая в кристалл, состоящий из атомов массы M. Нейтрон налетает на один из атомов кристалла. Столкновение может рассматриваться просто как удар упругих шаров (нейтрон не имеет электрического заряда). Для случая лобового столкновения с покоящимся атомом показать, какая доля начального импульса нейтрона и какая часть его энергии передаются атому в зависимости от отношения масс M/m. Показать, что при $M/m = 100$ атому передается около 4% энергии нейтрона.

6.6. Свинцовый шар массы 1 *кг*, двигающийся со скоростью 1 *м/сек*, испытывает фронтальное соударение с таким же шаром, который покоится. После соударения шары слипаются. Вычислить величину Q для этого соударения, выражая ее как долю кинетической энергии падающего шара. Чему равно увеличение массы покоя двух шаров?

---

*) В новом ускорителе в Серпухове протоны разгоняются до энергии 76 *Гэв*.

6.7.В реакции $D + D$, когда дейтроны бомбардируют атомы дейтерия, находящиеся в покое, производятся нейтроны. Считая, что падающие дейтроны имеют энергию 0,01 *Мэв*, найти энергию нейтронов, которые вылетают под углом в 90° к направлению пучка падающих дейтронов.

6.8. Протон массы M_p с кинетической энергией T_p сталкивается с покоящимся ядром Li^7 (рис. 6.14). При реакции высвобождается энергия Q и вылетают две

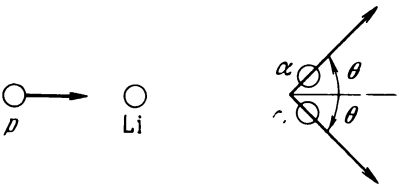


Рис. 6.14.

α-частицы симметрично под углом θ по отношению к первоначальному направлению движения протона, причем модули их скоростей одинаковы и равны v_α.Считая, что все скорости малы по сравнению со скоростью света, найти зависимости: а) v_α от Q, T_p, M_α. б) cos θ от Q, T_p, M_α, M_p. Что можно сказать о величине угла θ, если Q много больше T_p?

6.9. Масса 1 *г* испытывает лобовое столкновение с массой 3 *г*, которая первоначально покоилась, причем после столкновения масса 1 *г* отскакивает строго назад с тем же самым значением модуля скорости, который она имела до столкновения. Найти для такого «рассеяния назад» величину Q как функцию первоначальной кинетической энергии массы 1 *г*.

6.10. π-мезон m_π останавливается и распадается на μ-мезон массы m_μ и нейтрино с нулевой массой. Показать, что кинетическая энергия μ-мезона равна

$$T_\mu = \frac{(m_\pi - m_\mu)^2}{2m_\pi} c^2.$$

6.11. Гипотетическая частица с массой покоя M_0 распадается в покое на два нейтрино с нулевой массой. Каков угол между направлениями движения двух нейтрино? Каковы их скорости? Каковы их энергии (как функции M_0)?

6.12. Пусть нейтральный π-мезон распадается на два фотона (масса покоя которых равна нулю) и эти фотоны вылетают под одинаковыми углами θ к направлению первоначального движения π-мезона. Показать, что

$$\sin\theta = \frac{m_\pi c^2}{T_\pi + m_\pi c^2}.$$

6.13. Формула Резерфорда для дифференциального сечения рассеяния α частиц (с энергией E) на угол θ имеет вид

$$d\sigma = A \frac{\cos\frac{\theta}{2}\, d\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sin^3\frac{\theta}{2}},$$

где $A = 2\pi\,(Ze^2/E)^2$. Чему равно интегральное сечение рассеяния для рассеяния назад, т. е. в области, где $\theta \geqslant \pi/2$?

6.14. Чему равняется минимальная кинетическая энергия (в *Мэв*), которую должна иметь α-частица для того, чтобы в опытах по рассеянию α-частиц на ядрах можно было определить размеры самого ядра, т. е. получить отклонения от формулы Резерфорда? Дайте ответ для ядер бора ($Z = 5$) и ртути ($Z = 80$).

6.15. Предположим, что в опытах по рассеянию α-частица сталкивается с одним из электронов, находящихся в среде мишени (это неизбежно происходит вследствие кулоновского притяжения). Для того чтобы оценить максимальную энергию, которую теряет α-частица при таком процессе, получить величину кинетической энергии, приобретаемой электроном, если на него «в лоб» налетает α-частица с энергией в 5 *Мэв*.

Литература для справок

1. Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М., Механика, «Наука», 1965.
2. Бом Д., Квантовая теория, «Наука», 1965.

Часть вторая

Кинетическая теория вещества

До сих пор мы изучали физику частиц, единственной характеристикой которых была их масса и единственным возможным способом поведения которых было движение с определенной скоростью вдоль определенной траектории. Ясно, что только очень малая часть нашего опыта в мире физики может быть описана непосредственно таким образом. Течение жидкостей, прочность твердых тел, действие различных машин, производство тепла и света, не говоря уже о работе более тонко задуманных устройств типа электронных приборов и транзисторов,— все эти явления для своего описания требуют более сложных представлений. Однако триумф физики, как и ее основная и постоянная цель, заключается в попытке свести все эти сложные явления к механике частиц: атомов и электронов, которые движутся, подчиняясь простым законам.

Именно этот смысл мы и вкладываем в слова «объяснить» и «понять». В следующих главах мы увидим, что целый ряд явлений может быть объяснен с помощью принципов механики, рассмотренных нами ранее. Однако, в конце концов, мы, к своему удивлению, обнаружим (или, по крайней мере, физики пятьдесят лет тому назад с удивлением обнаружили), что некоторые явления не могут быть объяснены таким образом и что сами принципы механики должны быть переформулированы в некоторую новую, квантовую механику. И, наконец, по-видимому, мы не будем столь удивлены, когда узнаем, что некоторые проблемы физики частиц высоких энергий не поддаются объяснению даже и на языке квантовой механики.

Когда-нибудь в ближайшие пятьдесят лет вы, вероятно, узнаете о переформулировке самой квантовой механики или, возможно, даже сами внесете вклад в это дело. Однако в ч. II мы попытаемся объяснить некоторые свойства веществ больших объемов, применяя принципы классической механики, изученные в ч. I, к атомам и молекулам, которые и составляют этот объем вещества.

Вещества обычно подразделяют на твердые тела, жидкости и газы. Различия между этими состояниями вещества могут быть установлены весьма точно, однако большей частью понятие

состояния, используемое в физике, совпадает с употребляемым повседневно, и мы не будем здесь на этом останавливаться. Сильно ионизованные газы, т. е. газы, состоящие из заряженных частиц (обычно электронов и тяжелых положительно заряженных ионов), называются п л а з м о й. Иногда плазму рассматривают как четвертое состояние вещества, так как наличие кулоновских сил взаимодействия между частицами ведет к существенным и своеобразным эффектам. Из всех упомянутых состояний газовое оказывается простейшим для анализа с помощью атомистической модели и в настоящее время, по существу, полностью «понято». Плазменное и твердое состояния сравнительно более сложны (каждое по-своему), но на пути их понимания уже достигнут большой прогресс. Как следствие, а также и как причина этого, они имеют чрезвычайный технический интерес, наиболее драматично сосредоточенный на термоядерных реакторах в первом случае и на электронных приборах во втором. Структура жидкого состояния является наиболее сложной и при попытках ее анализа к настоящему времени получены весьма ограниченные результаты. Поэтому мы лишь затронем вопрос о жидкостях и будем вести изложение в следующем порядке: теория газов. плазмы, твердых тел.

Глава 7

Уравнение состояния газа

Намеченный нами путь изучения свойств больших масс вещества легче всего начать с рассмотрения газов, которые мы и выберем в качестве первого примера. Нашей целью является построение такой атомистической модели, которая способна правильно объяснить наблюдаемые свойства газов. Мы начнем с простейших механических свойств газов. Прежде чем пытаться объяснять эти свойства, перечислим их. Данное количество газа имеет определенную массу, но эта масса не сосредоточена в некоторой точке — действительно, газ обладает свойством заполнять весь объем, который ему предоставлен. Поэтому мы будем считать объем V одной из переменных, которые описывают состояние газа. Пусть V есть объем одного моля газа. Моль, или грамм-молекула, газа содержит N_0 молекул, где N_0 есть число Авогадро,

$$N_0 = 6{,}02 \cdot 10^{23} \text{ молекул/моль}.$$

В качестве соответствующей величины в системе МКС иногда выбирают килограмм-моль, так что

$$N_0 = 6{,}02 \cdot 10^{26} \text{ молекул/кмоль}.$$

(В последующих параграфах, если это специально не оговорено, величина V будет относиться к одному молю или одному килограмм-молю. Разумеется, все формулы легко пересчитать для других количеств газа, так как n молей занимают объем nV, т. е. объем является аддитивной или, иначе говоря, «экстенсивной» величиной.) Так как газ склонен вытекать из сосуда, который он занимает, то стенки сосуда должны оказывать на газ давление P (сила, действующая на единицу площади), и по третьему закону Ньютона газ оказывает на стенку сосуда то же самое давление P. Наконец, газ будет иметь некоторую определенную температуру T. Кроме этого, газ может иметь и другие свойства, такие как цвет, запах, электропроводность и т. д., но мы не будем ими сейчас заниматься.

§ 7.1. Уравнение состояния идеального газа

Экспериментально установлено, что три переменные P, V, T, которые описывают состояние газа, не могут быть выбраны независимо, т. е. они связаны уравнением

$$P = P(V, T).$$

Это уравнение называется *уравнением состояния* газа. Для многих газов, находящихся при обычных условиях, уравнение состояния может быть представлено приближенно в виде

$$P = RT/V$$

или

$$PV = RT, \tag{7.1}$$

где R — постоянная. Это уравнение называется *уравнением состояния идеального газа.*

Кажется почти невероятным, что для всех этих газов R имеет одно и то же значение: если V измеряется в *см*^{3}/*моль*, P — в *дин*/*см*^{2}, T — в °К, тогда $R = 8{,}31 \cdot 10^7$ *эрг*/(*моль*·*град*). В системе СИ V измеряется в *м*^{3}/*кмоль*, P — в *н*/*м*^{2} и $R = 8{,}31 \cdot 10^3$*дж*/(*кмоль*·*град*). Более обычной единицей для измерения высоких давлений является *атмосфера*, 1 *атм* $= 1{,}013 \cdot 10^6$ *дин*/*см*^{2}, обычная единица для измерения низких давлений есть *миллиметр ртутного столба* (или торричелли), причем 1 *атм* = 760 *мм рт. ст.* или 1 *мм рт. ст.* $= 1{,}333 \cdot 10^6$ *дин*/*см*^{2}. Проще всего запомнить значение R в других единицах: так как 1 *кал* $= 4{,}19 \cdot 10^7$ *эрг*, то

$$R \approx 2 \text{ кал}/(\text{моль} \cdot \text{град}).$$

(Точное значение примерно на 1% меньше: 1,986 *кал*/(*моль*·*град*), однако значение 2 практически достаточно точно.) Уравнение состояния идеального газа дает *макроскопическое* описание различных состояний газа. Для любого реального газа это уравнение справедливо лишь приближенно; гипотетический газ, к которому оно точно применимо, и называется *идеальным газом*. Нашей целью является объяснение свойств газа на языке *микроскопических* понятий. Мы увидим, что уравнение состояния идеального газа можно вывести, сделав некоторые очень простые предположения о свойствах атомов или молекул этого газа.

Интересующее нас объяснение было впервые дано Даниилом Бернулли в 18-м веке и, вероятно, уже известно читателю. Однако мы приведем его здесь ввиду его фундаментального значения. Идея состоит в том, что газ, который состоит из молекул, летающих в сосуде, оказывает давление на стенки сосуда вследствие непрерывных соударений отдельных молекул со стенками. Молекула,

падающая на стенку, перпендикулярную оси x, с x-компонентой импульса v_x, после упругого соударения со стенкой изменит знак x-компоненты своей скорости. После соударения x-компонента импульса будет равна $-mv_x$, так что изменение импульса при соударении равно

$$2mv_x.$$

В соответствии со вторым законом Ньютона сила, с которой стенка действует на молекулы, равна изменению импульса в единицу времени, и эта величина равна изменению импульса при соударении ($2mv_x$), умноженному на число соударений в секунду. Отнесенное к единице площади стенки давление P (сила на единицу площади) равно

$$P = 2mv_xF, \tag{7.2}$$

где F — число ударов о единицу площади стенки в единицу времени.

Таким образом, мы должны вычислить число ударов молекул о стенку. Рассмотрим несколько более общий случай и найдем число молекул, пересекающих воображаемую плоскость внутри газа, перпендикулярную оси x. Если эта воображаемая плоскость совпадает со стенкой, это число и будет искомым числом ударов о стенку. Предположим для простоты, что все молекулы имеют одну и ту же скорость $\mathbf{v}$ или, лучше, что половина молекул имеет скорость $\mathbf{v}$, а другая половина—скорость— $\mathbf{v}$ (так как полная скорость газа должна равняться нулю, если газ не течет, а находится в покое). Рассмотрим теперь газ, находящийся в параллелепипеде (рис. 7.1), основание которого расположено на нашей воображаемой плоскости, перпендикулярной x-оси, и имеет единичную площадь, и ребра которого образованы векторами скорости $\mathbf{v}$, т. е. эти ребра имеют длину, равную модулю вектора $\mathbf{v}$, и их направление совпадает с направлением вектора $\mathbf{v}$. Каждая молекула со скоростью $\mathbf{v}$, которая в некоторый момент времени находится в этом параллелепипеде, за единицу времени пройдет расстояние $|\mathbf{v}|$ и пересечет основание нашей призмы. Поэтому *поток* молекул через единицу площади (т. е. число молекул, проходящих через единицу площади за единицу времени) равен плотности числа молекул (числу молекул в единице объема), имеющих скорость $\mathbf{v}$, или половине полной плотности числа молекул n, умноженной на объем

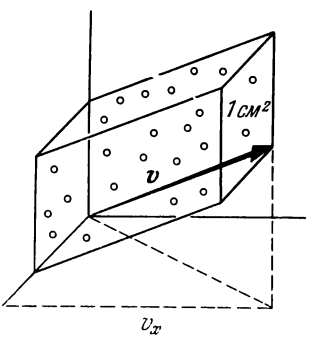


Рис. 7.1.

призмы, который равен v_x. Таким образом,

$$F = {}^1/_2\, nv_x. \tag{7.3}$$

В дальнейшем мы будем часто использовать эту формулу, теперь же с ее помощью мы найдем давление P из уравнения (7.2). Из уравнений (7.2) и (7.3) получаем

$$P = nmv_x^2.$$

Мы можем подозревать, что не все молекулы имеют одну и ту же скорость **v**, как это было предположено ранее. В гл. 9 мы будем подробно изучать, как варьируются скорости молекул, но сейчас нам достаточно будет учесть это обстоятельство, просто заменив величину v_x^2 на некоторое среднее ее значение $\overline{v_x^2}$. Более того, так как

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2,$$

то

$$\overline{v^2} = \overline{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} = \overline{v_x^2} + \overline{v_y^2} + \overline{v_z^2}$$

(т. е. операции усреднения и сложения коммутируют, или, иначе говоря, операции усреднения и сложения можно производить в любом порядке). Далее, так как направление x-оси выбрано нами полностью произвольно, то должно быть

$$\overline{v_x^2} = \overline{v_y^2} = \overline{v_z^2}.$$

Таким образом,

$$\overline{v^2} = 3\overline{v_x^2} \quad \text{и} \quad P = \frac{1}{3} nm\overline{v^2}.$$

И, наконец, нетрудно заметить, что N_0 есть число молекул в моле вещества и V есть объем этого моля, так что плотность числа молекул n равна

$$n = N_0/V.$$

Следовательно,

$$PV = {}^1/_3 N_0 m\overline{v^2}. \tag{7.4}$$

Это соотношение показывает, что обратная пропорциональность величин P и V, которая выражена в уравнении состояния идеального газа, получена нами здесь как результат чисто механических представлений о движении молекул, составляющих газ.

Уравнение состояния идеального газа (7.1) содержит еще так называемую абсолютную температуру T, величину, которая не встречалась в механике частиц. В гл. 9 мы увидим, как температура связана со средней скоростью молекул газа, состоящего из некоторого очень большого числа молекул, здесь же мы только отметим, что для того, чтобы согласовать уравнения (7.1) и (7.4),

надо предположить, что

$$^1/_3 N_0 m\overline{v^2} = RT.$$

Это соотношение можно также записать в виде

$$^1/_2\, m\overline{v^2} = {}^3/_2\, kT, \tag{7.5}$$

где величина

$$k \equiv R/N_0 = 1{,}38\cdot 10^{-16}\ эрг/град = 1{,}38\cdot 10^{-23}\ дж/град$$

называется *постоянной Больцмана*. В такой форме наше предположение означает, что средняя кинетическая энергия молекул пропорциональна температуре T. Константа пропорциональности включает универсальную постоянную k, которую можно назвать «газовой постоянной на одну молекулу» (газовая постоянная для моля вещества, деленная на число молекул в моле). Позднее мы увидим, что пропорциональность между средней кинетической энергией и абсолютной температурой имеет существенное значение и мы сможем выяснить смысл коэффициента 3/2. Эта связь между средней кинетической энергией и температурой будет получена в гл. 9 более строгим путем.

Здесь еще следует отметить некоторые полезные соотношения для *плотности* газа ρ и молекулярного веса M. *Молекулярным весом* называют массу одного моля газа

$$M = N_0 m.$$

(В системе СИ N_0 относится к *кмолю* и молекулярный вес M имеет обычное числовое значение.) Плотность газа есть масса всех молекул, находящихся в единице объема,

$$\rho = nm,$$

поэтому

$$\rho = M/V.$$

Используя эти величины, можно записать уравнение состояния идеального газа в следующем виде:

$$\rho = MP/RT. \tag{7.6}$$

При постоянной температуре плотность газа пропорциональна давлению.

В заключение надо явно подчеркнуть наиболее важное предположение, которое мы молчаливо использовали при изложении данного параграфа. Мы предполагали в нашей механической модели, что молекулы газа сталкиваются со стенками содержащего их сосуда (и таким образом оказывают давление на стенки), но что они *никогда* не сталкиваются друг с другом. Другими словами,

мы предполагали, что молекулы представляют собой *точечные массы*, между которыми *не действуют никакие силы*. Именно это предположение и приводит уравнение состояния к особому виду, известному как уравнение состояния идеального газа. Если бы между молекулами *имелись* силы взаимодействия, мы получили бы для уравнения состояния другое выражение. Но в действительности силы взаимодействия *существуют*, и уравнение состояния идеального газа не описывает точно ни один реальный газ. Наблюдаемые отклонения от уравнения состояния идеального газа могут быть поэтому чрезвычайно интересны, так как они дают ключ к изучению сил взаимодействия между молекулами.

§ 7.2. Межмолекулярные силы

Мы только что вывели макроскопическое уравнение состояния идеального газа, исходя из некоторых очень простых микроскопических предположений о свойствах молекул, составляющих газ. Однако общеизвестно, что уравнение состояния идеального газа является лишь приближенным и при определенных условиях становится неприемлемым — например, когда кислород конденсируется в жидкость. Все газы, даже гелий, конденсируются в жидкости при достаточно низких температурах. Более того, теоретические предположения, сделанные нами ранее о том, что молекулы представляют собой точечные массы, не взаимодействующие друг с другом, сами по себе весьма сомнительны. Гораздо более реальное уравнение состояния газа мы получим, если признаем, что молекулы должны иметь некоторые конечные размеры (так как нельзя сжимать газ неограниченно) и должны притягивать друг друга (так как газ может конденсироваться в связную систему — жидкость). В § 7.3 мы уточним уравнение состояния идеального газа, учитывая приближенно эти взаимодействия между молекулами.

Вид взаимодействия можно установить, по крайней мере качественно, если мы заметим, что при очень малых межатомных расстояниях, когда атомы действительно соприкасаются друг с другом или, точнее говоря, когда они взаимно проникают друг в друга, имеют место силы отталкивания. С другой стороны, при больших межатомных расстояниях атомы должны притягивать друг друга, так как газ никогда бы не конденсировался, если бы между атомами не было сил притяжения. Следовательно, мы можем нарисовать гладкую кривую потенциальной энергии взаимодействия между атомами (рис. 7.2), которая дает притяжение на больших расстояниях и отталкивание на малых расстояниях, и можем быть до некоторой степени уверены в том, что эта кривая в общем правильно передает вид взаимодействия для любого сорта атомов

(хотя, разумеется, она будет отличаться в деталях для атомов или молекул различных сортов). Если бы атомы представляли собой твердые шарики (*твердые сферы*), то сила отталкивания была бы бесконечной при соприкосновении, как показано пунктиром. Эту последнюю кривую следует признать менее реалистичной, чем сплошная кривая для «*мягких сфер*», хотя иногда приближение твердых сфер и оказывается полезным.

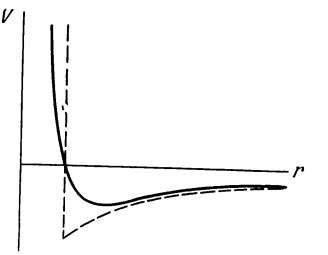


Рис. 7.2.

Так как мы рассматриваем газ, в котором силы взаимодействия не очень важны (мы знаем это, так как уравнение состояния идеального газа все же приближенно справедливо), полезно начертить ту же самую кривую потенциальной энергии в меньшем масштабе (рис. 7.3). Видно, при каких условиях силы взаимодействия оказываются не очень важными: если атомы находятся в среднем далеко друг от друга, тогда большую часть времени расстояния между ними настолько велики, что силами взаимодействия можно пренебречь. Только иногда, во время «соударений», атомы настолько сближаются друг с другом, что взаимодействие становится сильным. Таким образом, чем дальше друг от друга в среднем находятся атомы, т. е. чем больший объем занимают молекулы, тем более точным, можно ожидать, будет уравнение состояния идеального газа. В противоположном предельном случае, когда атомы очень близки друг к другу и взаимодействие между ними очень сильно, вещество может перестать быть только газом и начать конденсироваться в жидкое или твердое состояние.

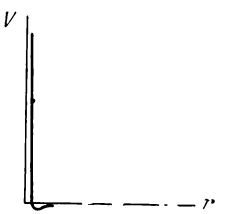


Рис. 7.3.

§ 7.3. Уравнение Ван-дер-Ваальса

Теперь мы должны установить, какое влияние будет оказывать учет этих сил взаимодействия на уравнение состояния. Можно исходить из уравнения состояния идеального газа и попытаться установить, какие изменения должны быть внесены в него. Прежде всего, *силы отталкивания* проще всего учесть в приближении взаимодействия твердых сфер. В этом приближении каждая молекула имеет определенный объем, так что если V есть объем сосуда, который содержит один моль (N_0 молекул) газа, то объем, который не занят самими молекулами и который доступен для их движения,

равен $V - b$, где b приближенно равняется N_0-кратному объему одной молекулы. При этом давление увеличивается, так что вместо $P = RT/V$ следует писать

$$P = RT/(V - b). \tag{7.7}$$

Это уравнение состояния называется *уравнением Клаузиуса*. Согласно этому уравнению давление P увеличивается до бесконечности, когда V приближается к b, как это и должно быть, так как сами по себе твердые сферы несжимаемы.

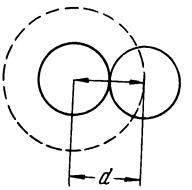


Рис. 7.4.

Для того чтобы связать более точно величину b с диаметром молекул, заметим, что центры всех прочих молекул не могут попадать внутрь сферы, описанной вокруг центра данной молекулы (рис. 7.4). Радиус этой «сферы недоступности» равен диаметру d молекулы, а ее объем равен 8-кратному объему самой молекулы. Каждая пара молекул «не допускает» друг друга в такой объем. Для того чтобы не учитывать этот объем дважды для каждой из молекул, входящих в данную пару, мы должны умножить его на $N_0/2$ (число пар), и мы получим в результате полный «объем недоступности» в одном моле

$$b = \frac{N_0}{2}\,\frac{4\pi}{3}\,d^3. \tag{7.8}$$

Этот результат будет справедлив для разреженных газов, где в среднем частицы находятся далеко друг от друга. Однако если мы приближаемся к плотной жидкой фазе (т. е. когда V приближается к b), то становится все более и более вероятным, что расстояние между двумя данными молекулами будет меньше $2d$. В этом случае сферы недоступности этих двух молекул перекрываются (рис. 7.5) и эти две молекулы будут иметь объем недоступности для некоторой третьей молекулы меньше, чем в случае, когда нет перекрытия сфер недоступности. Следовательно, полный объем недоступности в газе будет уменьшаться, когда мы приближаемся к жидкой фазе.

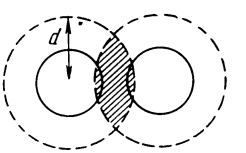


Рис. 7.5.

Таким образом, мы учли в уравнении состояния действие сил отталкивания. Но мы еще не рассматривали *силы притяжения* между молекулами. Их влияние состоит в том, что молекулы стремятся собираться вместе, уменьшая тем самым давление, которое они оказывают на стенки сосуда, содержащего газ. На молекулу, которая приближается к стенке сосуда, действует сила притяже-

ния по направлению внутрь сосуда. Поэтому она соударяется со стенкой не столь сильно, как это было бы в случае отсутствия сил притяжения, и давление будет меньше, чем для идеального газа. Число молекул, которые приближаются к стенке и испытывают притяжение внутрь сосуда, пропорционально n (числу молекул в единице объема). Число молекул, которые притягивают изнутри сосуда падающие на стенку молекулы, также пропорционально n. Поэтому уменьшение давления P должно быть пропорционально n^2, т. е. пропорционально $1/V^2$ (напомним, что $n = N_0/V$). Поэтому вместо $P = RT/(V - b)$ можно написать

$$P = RT/(V - b) - a/V^2, \tag{7.9}$$

где a — постоянная. Это уравнение состояния и называется *уравнением Ван-дер-Ваальса* по имени физика, который вывел его в 1873 г. на основании рассуждений, аналогичных приведенным выше. Эти рассуждения, по общему мнению, несколько туманны, и были предприняты различные попытки улучшить вывод этого уравнения. Они приводили обычно к математическим усложнениям, которые не пропорциональны достигаемому этими улучшениями согласию с экспериментом. Поэтому мы будем рассматривать только уравнение Ван-дер-Ваальса.

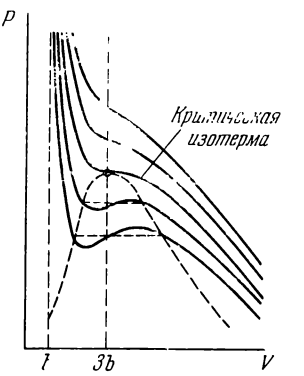


Рис. 7.6.

Уравнение Ван-дер-Ваальса описывает ожидаемые нами отклонения от уравнения состояния идеального газа. Весьма удивительно, что оно описывает также нечто похожее на фазовый переход газа в жидкость, хотя предполагалось, что оно должно быть незначительной модификацией уравнения состояния идеального газа. Если мы нарисуем графики изотерм (кривые, соответствующие постоянной температуре) на плоскости координат V и P, то увидим, что при высоких температурах эти изотермы Ван-дер-Ваальса являются незначительно искаженными аналогами гиперболических изотерм идеального газа (рис. 7.6). Однако при более низких температурах эти изотермы имеют изгиб, который представляет область неустойчивых состояний. При уменьшении объема газа состояние его меняется вдоль горизонтальных пунктирных линий внутри нестабильной области. Это уменьшение объема при постоянном давлении соответствует постепенному сжижению все большей доли данного моля газа. После того как весь моль газа перейдет в жидкое состояние, давление при дальнейшем уменьше-

нии объема возрастает очень резко, что соответствует почти полной несжимаемости жидкости. При температурах выше тех, при которых изотермы имеют изгиб, не наблюдается явления конденсации. Температура, при которой изгиб исчезает, называется *критической температурой*, а соответствующая этой температуре изотерма имеет точку перегиба, которая называется *критической точкой*. Давление и объем, соответствующие критической точке, называются *критическим давлением* и *критическим объемом*.

Легко показать, что для уравнения Ван-дер-Ваальса критический объем равен (см. задачу 7.4)

$$V_c = 3b.$$

Из этого соотношения следует, что, измеряя критический объем, можно оценить объем N_0 молекул,а деля последний на N_0, получить оценку для собственного объема отдельной молекулы.

Уравнение Ван-дер-Ваальса

$$(P + a/V^2)\ (V - b) = RT$$

не дает количественной теории конденсации газа в жидкое состояние, хотя оно качественно правильно описывает явления в области высокой плотности и низких температур. Однако от уравнения Ван-дер-Ваальса и нельзя ожидать большего, так как мы получили его, производя лишь самые незначительные изменения в тех предположениях, которые приводят к уравнению состояния идеального газа. Тем не менее оно неплохо описывает отклонения от уравнения состояния идеального газа даже в области вблизи критической точки. Критические параметры равны (см. задачу 7.4)

$$V_c = 3b,\ P_c = a/27b^2,\ T_c = 8a/27bR. \tag{7.10}$$

Критический коэффициент RT_c/P_cV_c, который равняется единице в случае идеального газа, имеет для уравнения Ван-дер-Ваальса значение

$$RT_c/P_cV_c = {}^8/_3 = 2{,}67 \tag{7.11}$$

и не зависит от значений постоянных a и b. Если бы уравнение Ван-дер-Ваальса было точным уравнением состояния неидеальных газов, то критический коэффициент имел бы универсальное значение 2,67.

Для многих газов были измерены критические значения объема, давления и температуры. Выше мы определили критическую точку теоретически с помощью изотерм, предсказуемых уравнением Ван-дер-Ваальса. Наблюдаемые на опыте изотермы имеют аналогичную форму, а критическая точка определяется экспериментально как точка перегиба соответствующей изотермы. Например, для

газообразного азота N_2 экспериментальные значения равны

$$V_c = 90 \text{ см}^3/\text{моль} = 0{,}09 \text{ л/моль},$$
$$P_c = 3{,}4 \cdot 10^7 \text{ дин/см}^2 = 33{,}5 \text{ атм},$$
$$T_c = 126^\circ \text{ K} = -147^\circ \text{ C}.$$

Вспоминая, что один моль идеального газа при нормальных условиях занимает объем в 22,4 *л*, мы видим, что газ очень плотен уже в критической точке. Действительно, его плотность равна 0,31 *г/см*^{3} и близка к плотности жидкости при давлении в 1 *атм*. С помощью приведенных выше экспериментальных значений можно получить, что критический коэффициент равен

$$RT_c/P_cV_c = 3{,}43$$

в случае азота. Таким образом, значение критического коэффициента (7.11), предсказанное уравнением Ван-дер-Ваальса, имеет правильный порядок величины, хотя и является несколько заниженным. Все другие газы дают аналогичные результаты для критического коэффициента со значениями в интервале от 3 до 5, т. е. все значения имеют тот же порядок величины, что и значение Ван-дер-Ваальса, но немного больше его.

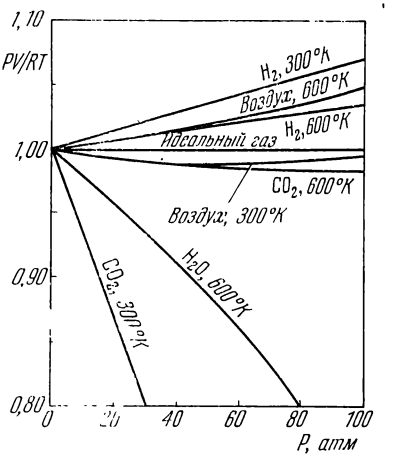


Рис. 7.7.

Применение уравнения Ван-дер-Ваальса к описанию состояния реального газа в области выше критической точки ведет к умеренному успеху. Если предположить, что «постоянные» *a* и *b* зависят от температуры, то можно добиться более удовлетворительного согласия с экспериментом, хотя такое предположение несколько компрометирует идеи наших первоначальных рассуждений. Мы видели, что следует ожидать уменьшения *b* при увеличении плотности. Были предложены многие другие уравнения, но ни одно из них не является точным. По-видимому, наилучшим приближением является просто использование разложения в ряд для уравнения состояния.

Разложение по степеням $1/V$ вида

$$\frac{PV}{RT} = 1 + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2} + \frac{D}{V^3} + \ldots$$

называется *вириальным разложением уравнения состояния* и может давать неплохие практические результаты, согласующиеся с экспериментальными данными, если считать коэффициенты B, C,... функциями температуры. Отклонения от уравнения состояния идеального газа при умеренных давлениях не велики. Некоторые опытные данные представлены на рис. 7.7.

Основной для наших целей вывод состоит в том, что, используя теоретические соображения классической механики и измеренные экспериментально макроскопические характеристики газа, мы можем делать некоторые заключения о микроскопических характеристиках атомов, составляющих этот газ. Используя наблюдаемые на опыте значения критического объема V_c и уравнение (7.8), мы получаем, что диаметр d молекулы будет величиной порядка нескольких ангстремов (1 Å $= 10^{-8}$ *см*) (см. задачу 7.5).

В следующей главе мы увидим, что, рассматривая более сложные явления, мы можем получить более детальную и точную информацию о размерах молекул.

Задачи

7.1. Пусть газообразный гелий находится в сосуде при нормальных условиях. а) Вычислить среднеквадратичную скорость атома He. б) Найти среднее расстояние между атомами He. в) Сколько атомов падает за одну секунду на 1 *см*^{2} стенки? г) Рассчитать плотность газа.

7.2. Вакуумная система имеет объем 30 *л*, находится при комнатной температуре и имеет давление 10^{-8} *мм рт. ст.* а) Сколько молекул находится в системе? б) Сколько молекул бомбардируют 1 *см*^{2} стенки за 1 *сек*, если остаточный газ в системе — воздух?

7.3. Рассчитать среднюю кинетическую энергию молекул для следующих температур: 78°K (точка кипения N_2), 300°K, 3000°K, 10^{6}°K. Результаты выразить в эргах и электрон-вольтах (1 *эв* $= 1{,}6 \cdot 10^{-12}$ *эрг*).

7.4. Показать, что для уравнения Ван-дер-Ваальса в критической точке будет

$$V_c = 3b;\ T_c = 8a/27bR,\ P_c = a/27b^2.$$

Указание: Продифференцировать дважды уравнение (7.9).

7.5. Найти V_c для газа He. Используя это значение, рассчитать b, а также приближенные объем и диаметр атома He.

7.6. Уравнение состояния можно представить в следующей практически важной форме:

$$\frac{PV}{RT} = 1 + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2} + \frac{D}{V^3} + \dots,$$

которая называется *вириальным разложением уравнения состояния*. Показать, что уравнение Ван-дер-Ваальса можно представить в виде вириального разложения с коэффициентами:

$$B = b - \frac{a}{RT},\quad C = b^2,\quad D = b^3,\ \dots$$

Указание:

$$\frac{V}{V-b} = 1 + \frac{b}{V} + \frac{b^2}{V^2} + \frac{b^3}{V^3} + \dots$$

7.7. Имеются следующие опытные данные для аргона:
для $T = 300°$ К: $B = -15{,}2$ *см*^{3}/*моль*, $C = 990$ (*см*^{3}/*моль*)^2;
для $T = 500°$К: $B = 8{,}4$ *см*^{3}/*моль*, $C = 710$ (*см*^{3}/*моль*)^2.
Вычислить постоянные Ван-дер-Ваальса a и b для каждой температуры (ср. с задачей 7.6).

7.8. *Уравнение состояния Дитеричи* имеет вид

$$P(V - b) = RT \cdot \exp(-a/RTV),$$

где a, b — постоянные (значения этих параметров, согласующиеся с опытными данными, не совпадают со значениями постоянных Ван-дер-Ваальса). Показать, что для уравнения Дитеричи в критической точке будет

$$V_c = 2b, \quad RT_c/P_cV_c = e^2/2 = 3{,}69.$$

7.9. Вычислить температуру, при которой среднеквадратичная скорость (см. уравнение (7.5)) молекулы азота равна второй космической скорости для Земли. Проделать то же самое в случае Луны. Масса Луны составляет около 1/80 массы Земли, а ее объем равен 1/50 объема Земли.

7.10. Найти данные по критической температуре, объему и давлению в физическом справочнике и построить таблицу величины P_cV_c/RT_c для наиболее часто встречающихся газов.

Литература для справок

1. Кикоин И. К., Кикоин А. К., Молекулярная физика, Физматгиз, 1963.
2. Левич В. Г., Введение в статистическую физику, Гостехиздат, 1954.
4. Леонтович М. А., Введение в термодинамику, Гостехиздат, 1952.
3. Эпштейн П. С., Курс термодинамики, Гостехиздат, 1948.

Глава 8

Явления переноса в газах

До сих пор нам сопутствовал успех в выводе уравнения состояния газа, исходя из предполагаемых свойств молекул этого газа. Если, однако, мы обратим нашу задачу и попытаемся выяснить что-либо о свойствах невидимых молекул, исходя из наблюдаемых свойств газов, то наши попытки будут не столь успешны. Силы взаимодействия между молекулами довольно незначительно влияют на уравнение состояния просто потому, что бóльшую часть времени молекулы не взаимодействуют друг с другом (когда они находятся далеко друг от друга). Для того чтобы получить более определенную информацию о взаимодействии молекул, мы должны отыскать и рассмотреть явления, которые более чувствительны к нашей предполагаемой модели сил взаимодействия. Эти явления должны существенно зависеть от тех моментов, когда молекулы или атомы сближаются, т. е. от соударений молекул. Известны многие такие явления, как, например, теплопроводность, вязкость и диффузия. Их объединяют общим названием «явления переноса», так как в каждом случае в газе переносится некоторая физическая величина: энергия, импульс и масса, соответственно, для трех упомянутых выше процессов. Мы увидим, что коэффициенты переноса (которые можно измерить) существенно зависят от соударений между атомами, так как соударения затрудняют и замедляют процесс переноса данной величины внутри среды. В то время как учет диаметра молекулы вносит только некоторую очень малую поправку в уравнение состояния, мы увидим, что коэффициенты переноса обратно пропорциональны квадрату диаметра молекулы, так как частота соударений между молекулами зависит от площади поперечного сечения молекул, соударяющихся друг с другом.

§ 8.1. Средняя длина свободного пробега

Прежде чем устанавливать зависимость известных из опыта свойств явлений переноса от частоты соударений молекул газа, рассмотрим сначала зависимость самой частоты соударений от размеров молекул. Формулируя нашу задачу точнее, мы хотим

узнать зависимость этой частоты от сил взаимодействия между парой молекул. Как мы уже видели, можно ожидать, что эти силы обусловливают притяжение на больших и отталкивание на малых расстояниях между молекулами. Так называемый случай «твердых сфер», когда каждой молекуле приписываются некоторые конечные размеры, означает просто, что мы предполагаем притяжение равным нулю вообще, а отталкивание — равным бесконечности, когда молекулы соприкасаются. Некоторые подобные задачи мы уже рассматривали в § 6.4 и видели, каким образом *опыты по рассеянию* дают информацию о законе взаимодействия между частицами. Например, в опытах Резерфорда по рассеянию измерения дифференциального сечения рассеяния альфа-частицы на атомах золота подтвердили, что кулоновский закон справедлив вплоть до очень малых расстояний. В принципе подобные эксперименты можно использовать для определения закона взаимодействия между *нейтральными* атомами и молекулами, а не только между заряженными частицами. На этом пути, однако, в эксперименте возникают весьма значительные препятствия, так как очень трудно получать и регистрировать пучки нейтральных частиц. Поэтому вместо дифференциальных сечений рассеяния мы будем рассматривать *полные сечения*. Если молекулы представляют собой твердые сферы, то полное сечение просто выражается через их диаметр (уравнение (6.10)); но даже и в случае более сложного закона взаимодействия мы будем предполагать, что полное сечение конечно, и приписывать ему определенное значение σ.

Рассмотрим теперь вопрос о том, как частота соударений связана с полным сечением молекул. Пусть плотность числа молекул (число молекул в 1 $см^3$) есть n, а полное сечение рассеяния одной молекулы на другой равно σ. Если некоторая молекула, имеющая скорость v, пролетает сквозь облако таких же молекул, находящихся в состоянии покоя, то за 1 *сек* она пролетит сквозь параллелепипед с основанием в 1 $см^2$ и с объемом в v $см^3$ (рис. 8.1). При своем движении молекула может испытать за одну секунду соударения с nv другими молекулами, а суммарная площадь всех этих молекул, представляющих препятствие на ее пути, будет равна $nv\sigma$. Отношение этой площади к 1 $см^2$ дает вероятность того, что летящая молекула за 1 *сек* испытает соударение и будет рассеяна некоторой другой молекулой. Определим τ — *среднее время свободного пробега* — как среднее время между двумя последовательными соударениями, так что величина $1/\tau$ будет вероятностью соударения за 1 *сек*:

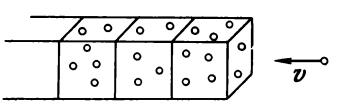


Рис. 8.1.

$$1/\tau = nv\sigma. \tag{8.1}$$

Это важное соотношение определяет среднее время свободного пробега через размеры молекулы, ее скорость и плотность числа молекул. Другим весьма полезным понятием является среднее расстояние, которое проходит молекула между двумя последовательными соударениями, или *средняя длина свободного пробега* L. Так как

$$L = v\tau, \tag{8.2}$$

то

$$L = 1/n\sigma. \tag{8.3}$$

Теперь мы должны разъяснить нашу интерпретацию величины $1/\tau$ как *вероятности* соударения за единицу времени, так как тогда вероятность испытать соударение за время t должна, казалось бы, равняться t/τ, а величина t/τ может быть и больше единицы, что невозможно для настоящей вероятности. Действительный смысл величины $1/\tau$ состоит в следующем. Предположим, что на покоящиеся молекулы газа (см. рис. 8.1) налетает не одна молекула, а большое число N молекул. Тогда за некоторый малый интервал времени dt определенная относительная доля dN/N налетающих молекул испытает соударения с покоящимися молекулами газа, и эта доля должна быть пропорциональна величине рассматриваемого малого интервала dt

$$\frac{dN}{N} = -\frac{1}{\tau}dt. \tag{8.4}$$

Константа пропорциональности $1/\tau$ определяет относительную долю числа молекул, испытывающих соударения за 1 *сек*, а знак минус в правой части возникает вследствие того, что N обозначает число молекул, *еще не испытавших* соударения. Если теперь мы отождествим вероятность соударения $d\Pi$ с относительной долей $-dN/N$ молекул, испытавших соударения, и используем определение (8.1) для $1/\tau$, то получим в точности соотношение (6.11):

$$d\Pi = n\sigma v dt.$$

Теперь, для того чтобы найти полную долю числа молекул, которые не испытали соударений до момента времени t, надо проинтегрировать уравнение (8.4), и мы получим $N = N(t)$:

$$N/N_t = e^{-t/\tau},$$

где постоянная интегрирования N_t представляет собой число молекул, налетающих на газ в начальный момент времени. Поэтому относительная доля молекул, *испытавших* соударения к моменту времени t, будет равна

$$1 - N/N_t = 1 - e^{-t/\tau}.$$

Именно эта функция (рис. 8.2) и представляет собой истинную вероятность соударения. Она приближается к единице асимптотически с возрастанием времени. Для малых временных интервалов, однако, экспоненту можно разложить в ряд Тейлора:

$$1 - e^{-t/\tau} = \frac{t}{\tau} + \ldots,$$

т. е. $1/\tau$ есть начальная вероятность соударения за единицу времени в полном соответствии с уравнением (8.4). Аналогичное рассмотрение показывает, что величина $1/L$ будет начальной вероятностью соударения на пути, равном единице длины.

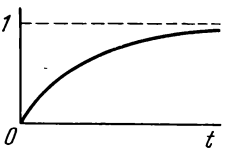


Рис. 8.2.

До сих пор мы предполагали, что налетающая молекула имеет скорость v и что все молекулы газа покоятся. Это предположение подошло бы для описания рассеяния моноэнергетического пучка молекул, имеющих скорость v, на твердой мишени, но не для описания того случая, которым мы здесь интересуемся. Для того чтобы найти частоту соударений молекул газа, надо учесть, что «молекулы-мишени» также движутся, так как на деле они полностью неотличимы от той молекулы, которую мы выделили в нашем рассмотрении и считали налетающей. Кроме того, различные молекулы не будут иметь одну и ту же скорость, как это будет показано в гл. 9. Учет всех этих уточнений, однако, сводится просто к введению числового множителя $\sqrt{2}$ и замене v на среднее значение $\bar{v}$. Таким образом, точные формулы имеют вид

$$1/\tau = \sqrt{2}\, n\bar{v}\sigma, \tag{8.5}$$

$$L = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma}. \tag{8.6}$$

Соотношение (8.2), конечно, остается в силе

$$L = \bar{v}\tau. \tag{8.2'}$$

Следует подчеркнуть, что в соответствии с определением (8.6), средняя длина свободного пробега L обратно пропорциональна плотности числа молекул, но не зависит от их скорости. Среднее *время* свободного пробега, с другой стороны, зависит от скорости. Можно проиллюстрировать это различие, если представить себе мысленно киноленту полета некоторой молекулы, которая на своем пути испытывает соударения с другими молекулами (рис. 8.3). Если теперь мы будем проецировать мысленно нашу киноленту с повышенной скоростью, то соударения будут происходить чаще во времени, но расстояние, проходимое молекулой между двумя

любыми последовательными соударениями должно остаться неизменным. Это обстоятельство очень важно, потому что в соответствии с соотношением (7.5) средняя скорость молекулы связана с температурой T газа. Следовательно, средняя длина свободного пробега *не зависит* от температуры газа при условии, что плотность газа постоянна, как это и должно быть в случае, когда некоторое фиксированное количество газа заключено в сосуд с жесткими стенками. Если, однако, объем газа не постоянен, то формула

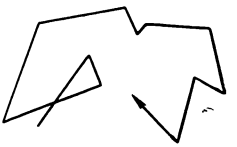


Рис. 8.3.

$$n = N_0/V$$

дает зависимость n от молярного объема. В случае идеального газа мы имеем $V = RT/P$, так что

$$n = \frac{N_0}{RT} P, \tag{8.7}$$

т. е. для идеального газа при заданной температуре величина L *обратно пропорциональна давлению.*

В заключение установим связь полного сечения рассеяния с размерами молекулы в случае взаимодействия молекул по закону твердых сфер. Из уравнений (6.7) и (7.4) видно, что соударение будет иметь место только в том случае, когда прицельное расстояние меньше диаметра d молекулы. Поэтому (ср. с уравнением (6.10))

$$\sigma = \pi d^2. \tag{8.8}$$

Измеряемые на опыте коэффициенты переноса можно связать с средней длиной свободного пробега, которая в свою очередь связана соотношением (8.6) с полным сечением рассеяния. Это позволяет получить с помощью уравнения (8.8) значения диаметров молекул. Даже в том случае, когда закон взаимодействия молекул более сложен, чем закон взаимодействия твердых сфер, измеренное полное сечение рассеяния с помощью уравнения (8.8) определяет *эффективный диаметр* молекулы.

§ 8.2. Теплопроводность

В качестве примера явления, которое зависит от полного сечения рассеяния или от средней длины свободного пробега молекул, рассмотрим теплопроводность газа. Теория диффузии в газе или вязкости газа будет, по существу, аналогичной, но теплопроводность является, пожалуй, более привычным явлением. Это явление состоит в том, что, когда соединяются две порции газа, которые имеют различные температуры, тепло переходит от более

нагретых к более холодным областям. Почему это происходит — сразу становится ясным, если вспомнить, что, как уже отмечалось в предыдущей главе, кинетическая энергия (средняя) любой молекулы пропорциональна температуре T. Рассмотрим некоторую воображаемую плоскость внутри газа. Если газ горячее с одной стороны этой плоскости и холоднее — с другой, то молекулы, которые пересекают эту плоскость, двигаясь с «горячей» стороны на «холодную», несут с собой кинетическую энергию бо́льшую, чем те молекулы, которые пересекают эту плоскость, двигаясь в противоположном направлении. В итоге, таким образом, получается некоторый перенос энергии от горячей стороны к холодной. Если бы «горячие» молекулы никогда не сталкивались с другими молекулами, они улетали бы бесконечно далеко (или до стенки сосуда), неся с собой свой «груз» высокой кинетической энергии, так что теплопроводность была бы бесконечной. Только за счет того, что молекулы замедляются при соударениях, теплопроводность оказывается конечной. В действительности теплопроводность в газах сравнительно невелика, что нам уже известно из того факта, что воздух является хорошим теплоизолятором.

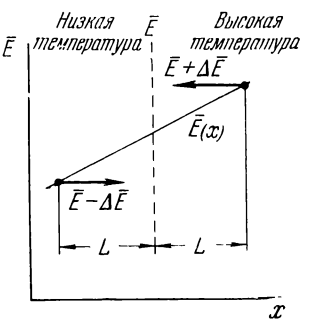


Рис. 8.4.

Для того чтобы рассчитать коэффициент теплопроводности, рассмотрим поток энергии, проходящей через некоторую воображаемую плоскость в газе. Число молекул, пересекающих единицу площади этой плоскости за единицу времени, представляет собой поток числа частиц через единицу площади и дается соотношением (7.3): $F = {}^1/_2 n v_x$. Так как в действительности молекулы в газе имеют разные скорости, то мы можем заменить v_x на среднее значение $\bar{v}_x$. Более того, как мы увидим в гл. 9, $\bar{v}_x$ не очень сильно отличается от среднего значения модуля скорости $\bar{v}$. (Величина, которая в действительности нам нужна, есть $\overline{|v_x|}$; само значение $\bar{v}_x$ равно нулю, так как одинаковое число молекул движется как слева направо, так и справа налево.) Поэтому мы удовлетворимся очень грубой оценкой и опустим все числовые коэффициенты, которые не слишком сильно отличаются от единицы. Тогда поток молекул, движущихся слева направо, приближенно будет равен

$$F \approx {}^1/_2 n\bar{v}, \tag{8.9}$$

причем такой же поток идет справа налево.

Предположим, что средняя кинетическая энергия любой молекулы, находящейся на плоскости, равна $\bar{E}$ (рис. 8.4). Газ холоднее слева и каждая молекула, которая пересекает плоскость, двигаясь

слева направо, несет с собой (в среднем) кинетическую энергию $\overline{E} - \Delta\overline{E}$. Молекулы, которые пересекают плоскость, двигаясь в противоположном направлении, справа налево, несут с собой немного большую среднюю кинетическую энергию $\overline{E} + \Delta\overline{E}$. Поэтому *суммарный* поток энергии через 1 $см^2$ за 1 *сек* будет равен

$$H \approx {}^1/_2 n\bar{v}\,(\overline{E} - \Delta\overline{E}) - {}^1/_2 n\bar{v}\,(\overline{E} + \Delta\overline{E}) = -n\bar{v}\Delta\overline{E}. \qquad (8.10)$$

Теперь мы можем предположить, что, когда молекулы, двигающиеся слева направо, испытывают последнее соударение перед тем, как пересечь плоскость, они приобретают значение кинетической энергии, характеризующее именно эту точку в газе. Аналогичное предположение мы будем считать справедливым и для молекул, двигающихся справа налево. Так как в среднем любая молекула испытывает последнее соударение перед пересечением плоскости на расстоянии L от этой плоскости (в соответствии со смыслом понятия средней длины свободного пробега L), то мы получаем

$$\Delta\overline{E} = L d\overline{E}/dx. \qquad (8.11)$$

Причиной того, что средняя кинетическая энергия зависит от положения молекулы, является то, что, как мы предположили, температура меняется с изменением расстояния от плоскости, а поэтому мы можем написать соотношение

$$\frac{d\overline{E}}{dx} = \frac{d\overline{E}}{dT}\frac{dT}{dx}.$$

Подставив его в формулу для потока (8.10), мы получаем

$$H = -n\bar{v}L\frac{d\overline{E}}{dT}\frac{dT}{dx}.$$

Величина dT/dx представляет собой измеряемый на опыте градиент температуры; нам остается только выяснить смысл величины $d\overline{E}/dT$.

Средняя энергия одноатомного идеального газа частиц, представляющих материальные точки, задается как функция температуры соотношением (7.5), так как в этом случае полная энергия частицы в точности равна кинетической энергии поступательного движения ${}^1/_2 m\overline{v^2}$. Таким образом,

$$\overline{E} = {}^1/_2 m\overline{v^2} = {}^3/_2 kT \qquad (7.5')$$

и

$$d\overline{E}/dT = {}^3/_2 k. \qquad (8.12)$$

Для того чтобы пределы применимости наших формул не были ограничены только случаем идеального одноатомного газа, мы в

наиболее общем виде свяжем величину $d\bar{E}/dT$ с величинами, которые могут быть измерены экспериментально. Прежде всего, заметим, что величина $n\bar{E}$ является полной энергией молекул в единице объема газа. Тогда величина $n\,(d\bar{E}/dT)$ представляет собой увеличение энергии в единице объема газа при нагревании его на один градус, т. е. *теплоемкость* единицы объема газа. Более удобно, однако, относить теплоемкость к единице массы газа. Так как

$$\frac{\text{теплоемкость}}{\text{объем}} = \frac{\text{теплоемкость}}{\text{масса}} \cdot \frac{\text{масса}}{\text{объем}} = C\rho,$$

где ρ — плотность газа, то

$$n\,(\overline{dE/dT}) = \rho C. \tag{8.13}$$

Используя это соотношение, мы находим окончательное выражение для потока тепла:

$$H \approx -\rho C\bar{v}L\,dT/dx.$$

Таким образом, мы установили, что поток тепла H пропорционален градиенту температуры dT/dx. Постоянная пропорциональности по определению называется *коэффициентом теплопроводности* $\varkappa$:

$$H = -\varkappa\,dT/dx. \tag{8.14}$$

Наш результат состоит в том, что коэффициент теплопроводности равен

$$\varkappa \approx \rho C\bar{v}L, \tag{8.15}$$

где C — теплоемкость единицы массы газа (измеряемая при постоянном объеме).

Способ рассуждений, с помощью которого мы получили это выражение для $\varkappa$, безусловно, груб, однако более аккуратное (и более длинное) вычисление дает тот же самый результат,за исключением числового множителя $25\pi/64 = 1{,}23$. Соотношение (8.15) связывает измеряемые на опыте макроскопические величины $\varkappa$, ρ и C с микроскопическими характеристиками молекул $\bar{v}$ и L. В предыдущих параграфах мы видели,каким образом можно с помощью теории оценить $\bar{v}$ и L, исходя из измеряемых на опыте величин. Если проделать это, мы получим довольно удовлетворительное согласие с формулой (8.15). Однако мы уже отмечали, что величина средней длины свободного пробега не очень точно определяется с помощью уравнения состояния, и поэтому основное значение формулы (8.15) для коэффициента теплопроводности заключается в возможности более точного определения средней длины свободного пробега L и, следовательно, диаметра молекул.

Зависимость от давления коэффициента теплопроводности газа можно получить, если рассмотреть зависимость от давления каждого из сомножителей в формуле (8.15). В соответствии с уравнением (7.6) при постоянной температуре

$$\rho \sim P,$$

а соотношение (8.6) показывает, что

$$L \sim 1/P.$$

Так как величины C и $\bar{v}$ почти не зависят от P, то наша теория предсказывает, что коэффициент теплопроводности газа *не зависит от давления*. Этот удивительный с интуитивной точки зрения результат в действительности подтверждается для довольно широкого интервала давлений. Однако это заключение должно быть неверным при очень низких давлениях, когда средняя длина свободного пробега L будет настолько большой, что станет сравнимой с размерами сосуда, содержащего газ. В этом случае в объеме сосуда, содержащего газ, происходит мало соударений между молекулами, величина L становится постоянной и коэффициент теплопроводности уменьшается при уменьшении P, так как плотность ρ пропорциональна P. Это явление также наблюдается экспериментально и даже используется в устройстве приборов, измеряющих давление (так называемый термомолекулярный манометр) (см. задачу 8.4).

Для того чтобы выяснить ожидаемую *температурную зависимость* коэффициента теплопроводности, подставим значения, соответствующие газу твердых сфер. Как следует из соотношений (8.12 и (8.13), $\rho c = n(d\bar{E}/dT) = {}^3/_2 nk$, а из соотношения (8.6) имеем $L = 1/\sqrt{2}\, n\sigma$. Полное сечение рассеяния $\sigma = \pi d^2$, так как две одинаковые молекулы (твердые сферы) сталкиваются, когда расстояние между их центрами равно сумме их радиусов, т. е. их диаметру d. Среднее значение модуля скорости $\bar{v}$ можно приближенно оценить из равенства ${}^1/_2 m\overline{v^2} = {}^3/_2 kT$, что дает значение $\sqrt{3kT/m}$. Как мы увидим в следующей главе, правильное среднее значение модуля скорости в действительности на 8% меньше среднеквадратичной скорости $\bar{v} = \sqrt{8kT/\pi m}$. Используя все приведенные выше значения, мы получаем

$$\varkappa = \frac{75}{64\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{k^3}{m}} \cdot \frac{1}{d^2} \sqrt{T}. \tag{8.16}$$

Наша теория предсказывает, что коэффициент теплопроводности пропорционален квадратному корню от температуры (так как $\bar{v} \sim T^{1/2}$). Поэтому, построив график логарифма полученных экс-

периментально значений коэффициента теплопроводности как функции логарифма абсолютной температуры, мы должны получить прямую линию с тангенсом угла наклона к оси абсцисс, равным 0,5. Экспериментальные данные для всех газов дают приблизительно прямые линии с тангенсами углов наклона около 0,5, так что наша теория еще раз подтверждается. Однако наши заключения не совсем точны, и в следующем параграфе мы увидим, что изучение отклонений от полученных нами зависимостей может позволить еще глубже проникнуть в природу межмолекулярных сил.

§ 8.3. Силы отталкивания

Экспериментально мы получаем, что тангенс угла наклона графика $\lg \varkappa$ как функции $\lg T$ заметно превышает 0,5. Не будем обескураживаться этим обстоятельством, а воспользуемся им как поводом еще раз пересмотреть исходные положения построенной нами теории и выяснить вопрос о том, не приведут ли другие предположения к другой температурной зависимости. Если это так, то мы получим возможность экспериментально решать вопрос о том, какие предположения о микроскопических свойствах молекул являются правильными. Наиболее уязвимым из наших прежних предположений является допущение о том, что молекулы газа представляют собой *твердые* сферы. Если молекулы не представляют собой совершенно «твердые сферы», то при соударениях с большой энергией, которые происходят чаще при более высоких температурах, молекулы не так сильно отклоняются от первоначального направления движения. Это явление «сохранения первоначального направления движения» при высоких температурах приводит к бóльшим значениям коэффициента теплопроводности, так что тангенсы углов наклона наших графиков станут несколько больше 0,5. Так как экспериментально получаемые кривые также отклоняются в эту сторону, мы постараемся использовать это обстоятельство.

Проделаем это с помощью метода, известного под названием *метода размерностей*. Этот метод может показаться одним королевской дорогой к сокровенным секретам природы, а другим — грязной лужей на пути к этим секретам, однако в действительности, аргументация этого метода полностью обоснована, хотя и не всегда приводит к полезным результатам. В некоторых случаях (как, например, в нашем), когда у нас есть предварительное понимание поставленной задачи, этот метод дает, по существу, полное решение задачи. Метод размерностей основан на том, что размерности левой и правой частей любого равенства должны быть одинаковы, для того чтобы это равенство не зависело от избираемых нами единиц измерения физических величин (например, дюймы

или сантиметры). Читателю, по-видимому, уже знакома привычка «проверять размерности» при различных вычислениях для отыскания ошибок в вычислениях. Метод размерностей представляет собой в некотором смысле теоретизированное обобщение этого привычного приема.

Формула (8.16), полученная в предположении взаимодействия типа твердых сфер между молекулами, показывает, что $\varkappa$ зависит от постоянной Больцмана k, массы молекулы m, температуры T и диаметра молекулы d. То, что мы сейчас хотим сделать (рис. 8.5), — это заменить взаимодействие «твердых» сфер диаметра d более реалистичным законом взаимодействия $V(r) = B/r^n$. Наши предыдущие вычисления давали результаты, которые можно записать в виде

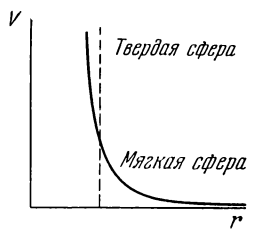


Рис. 8.5.

$$\varkappa = m^\alpha k^\beta d^\gamma T^\delta \tag{8.17}$$

со следующими значениями показателей степеней:

$$\alpha = -1/2,\ \beta = 3/2,\ \gamma = -2,\ \delta = 1/2. \tag{8.18}$$

Кроме того, имелась еще безразмерная постоянная $75/64\sqrt{\pi}$.

Проверим, прежде всего, что эта формула является «размерно однородной», т. е. что обе части равенства имеют одинаковые размерности. В качестве единиц размерности мы используем единицы массы M, длины L, времени T и, кроме того, температуры Θ. Будем обозначать размерность физической величины, заключая самую физическую величину в квадратные скобки

$$[m] = M,\ [d] = L,\ [t] = T, [T] = \Theta. \tag{8.19}$$

Единицы измерения k уже известны — это *эрг/градус* (так как kT есть энергия). Эрг есть единица работы, т. е. произведение силы на перемещение (L), а сила в свою очередь есть произведение массы (M) на ускорение (LT^{-2}). Поэтому эрг имеет размерность (ML^2T^{-2}) и

$$[k] = ML^2T^{-2}\Theta^{-1}. \tag{8.20}$$

Коэффициент теплопроводности $\varkappa$ должен иметь размерность, которая делает размерно однородной определяющую H формулу (8.14):

$$H = -\varkappa \frac{dT}{dx}.$$

Поток тепла H через единицу площади измеряется в единицах *эрг/(см²·сек)*, а градиент температуры dT/dx измеряется в единицах

град/см, и поэтому

$$[\varkappa] = (ML^2T^{-2})\ (L^{-2}T^{-1})\ (L\Theta^{-1}) = MLT^{-3}\ \Theta^{-1}. \qquad (8.21)$$

Мы видим теперь, что размерности верны — подстановка соотношений (8.18) — (8.21) в уравнение (8.17) превращает его в тождество:

$$(M)^{-1/2}\ (ML^2T^{-2}\ \Theta^{-1})^{3/2}(L^{-2})\ (\Theta)^{1/2} = MLT^{-3}\Theta^{-1}.$$

Если теперь мы предположим, что потенциал отталкивания имеет вид B/r^n, вместо того чтобы сразу становиться бесконечным при $r = d$, то нам остается только считать, что $\varkappa$ зависит от параметра B, а не от параметра d. По аналогии с уравнением (8.17) запишем

$$\varkappa = m^\alpha k^\beta B^\gamma T^\delta. \qquad (8.22)$$

Наша задача теперь состоит в том, чтобы определить α, β, γ, δ таким образом, чтобы эта формула была размерно однородной. Так как B/r^n измеряется в эргах, то

$$[B] = (ML^2T^{-2})L^n = ML^{2+n}T^{-2}. \qquad (8.23)$$

Тогда, подставляя соотношения (8.19), (8.20), (8.21) и (8.23) в формулу (8.22), мы получим

$$MLT^{-3}\ \Theta^{-1} = M^\alpha\ (ML^2T^{-2}\ \Theta^{-1})^\beta\ (ML^2T^{-2})^\gamma\ \Theta^\delta,$$

или, приравнивая степени M, L, T и Θ в левой и правой частях этого уравнения, имеем

$$1 = \alpha + \beta + \gamma, \qquad 1 = 2\beta + (2 + n)\gamma,$$
$$-3 = -2\beta - 2\gamma, \qquad -1 = -\beta + \delta.$$

Нам остается легкая математическая задача — решить эту однородную систему линейных алгебраических уравнений. Решение этой системы таково:

$$\alpha = -1/2,\ \beta = 3/2 + 2/n,$$
$$\gamma = -2/n,\ \delta = 1/2 + 2/n.$$

Подставляя найденные значения показателей в предполагаемую формулу для $\varkappa$, мы и получим искомый результат

$$\varkappa = \text{const}\ \sqrt{k^n/m}\,(k/B)^{2/n}T^{1/2+2/n}. \qquad (8.24)$$

Таким образом,мы получили формулу для $\varkappa$ только с помощью соображений размерности. Для того чтобы проделать это, мы должны были заранее знать, от каких величин зависит $\varkappa$, и затем просто выписать размерности всех этих величин. Правда, мы не получили безразмерный числовой множитель типа $75/64\sqrt{\pi}$,

который, возможно, входит в правильную формулу, но обычно этот множитель можно найти, приводя полученную формулу к более простому случаю (8.16). Более интересно для нас сейчас то, что мы получили иную зависимость $\varkappa$ от температуры, так как показатель степени T равен $^1/_2 + {}^2/_n$. В случае твердых сфер ($n = \infty$) этот показатель равен 0,5 — результат, уже известный нам ранее. Однако в случае «более мягких» сфер показатель будет больше 0,5. Например, для He экспериментально измеренное значение показателя равно 0,64. Используя это значение, мы находим, что в случае He будет $n = 14$. Аналогично в случае Ne мы находим, что $n = 12$.

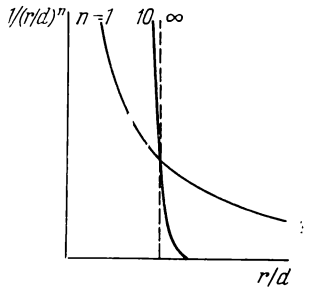


Рис. 8.6.

Таким образом, анализ температурной зависимости коэффициента теплопроводности газов действительно дает лучшее представление о взаимодействиях между молекулами. Мы не только определяем грубые «размеры» молекул, но и узнаем кое-что о зависимости сил взаимодействия от расстояния между молекулами. Эта сила зависит от сравнительно высокой степени расстояния r ($n > 10$), так что молекулы являются довольно «твердыми» (по сравнению, например, с силами кулоновского отталкивания, где $n = 1$). В дальнейшем мы выясним, что это заключение подтверждается и еще более усиливается при анализе твердого состояния вещества. На рис. 8.6 мы проиллюстрировали это сравнение потенциала $1/r^{10}$ и кулоновского потенциала $1/r$, нарисовав соответствующие графики функции $1/r^n$ для $n = 1$ и $n = 10$. Для удобства построения графика потенциал можно записать в виде $V(r) = B/r^n = B'/(r/d)^n$. В этом случае d есть «эффективный диаметр» молекулы, так как кривая начинает быстро возрастать до бесконечности примерно при $r/d = 1$, т. е. при $r = d$. Видно, что случай $n = 10$ не слишком отличается от случая твердых сфер ($n = \infty$), который изображен пунктирной линией.

§ 8.4. Вязкость

Явление вязкости газа (или жидкости) обусловливает тормозящее трение, или силу вязкости, с которой один слой газа (или жидкости) действует на соседний прилегающий слой, если эти два слоя движутся друг относительно друга. Это явление вообще не обнаруживается в покоящемся газе (или жидкости), но приводит к важным эффектам, когда газ (или жидкость) движется. Предположим, что газ течет в направлении оси y и что его скорость течения

u увеличивается в направлении оси x (рис. 8.7). Рассмотрим два слоя, находящихся на расстояниях Δx от слоя, где скорость течения газа равна **u**. Правый слой, который течет несколько быстрее, действует с некоторой силой на левый слой, который в свою очередь стремится затормозить правый слой. Мы увидим, что сила, которая действует на единицу площади плоскости, разделяющей два слоя, и которая называется *напряжением сдвига* S, пропорциональна $\Delta u/\Delta x$, или в пределе du/dx. Постоянная пропорциональности называется *коэффициентом вязкости* η

$$S = -\eta du/dx. \tag{8.25}$$

Размерность напряжения сдвига S совпадает с размерностью давления P; различие между ними состоит в том, что давление есть сила, действующая на единицу площади в направлении, перпендикулярном этой площадке, в то время как напряжение сдвига S действует параллельно этой площадке. (Можно подумать, что S и P следует считать векторами. Мы вернемся к обсуждению этого вопроса в гл. 12, а здесь будем просто рассматривать их как модули некоторых векторов.) Нашей целью является объяснение коэффициента η с молекулярной точки зрения, подобно тому как мы объясняли смысл коэффициента теплопроводности $\varkappa$ в аналогичном уравнении (8.14).

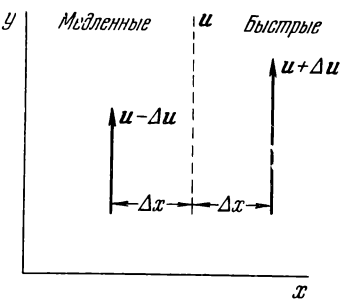


Рис. 8.7.

Молекулы газа движутся со средней скоростью $\bar{v}$, которая намного больше скорости течения u. Как мы уже видели в гл. 7, при комнатной температуре скорости молекул будут порядка 10^5 *см/сек*, что много больше скорости звука. Таким образом, для течений с дозвуковыми скоростями можно считать **u** малой величиной и просто добавить ее к хаотической скорости молекулы **v**. Когда молекула пересекает плоскость, показанную пунктирной линией на рис. 8.7, она переносит с собой и скорость течения **u** или импульс течения $m\mathbf{u}$. Молекулы, которые идут с «быстрой» стороны на «медленную», несут с собой бóльший импульс, чем те молекулы, которые движутся в противоположном направлении. Таким образом, в итоге через плоскость переносится некоторый импульс. В соответствии со вторым законом Ньютона производная по времени от этого импульса равна силе, действующей на плоскость.

Чтобы сформулировать эти рассуждения количественно, рассмотрим поток молекул, пересекающих плоскость за 1 *сек* в том и другом направлении, который в соответствии с соотношением (8.9) равен $^1/_2 n\bar{v}$. Молекулы, идущие слева направо, переносят поток

импульса $m(u - \Delta u)$, а молекулы, идущие справа налево,— поток импульса $m(u + \Delta u)$. По аналогии с уравнением (8.10) суммарный импульс, переносимый через единицу площади плоскости за одну секунду, равен напряжению сдвига S:

$$S \approx -n\bar{v}m\Delta u.$$

Теперь, так же как и при выводе соотношения (8.11), мы предположим, что молекулы, пересекающие плоскость, приобрели их импульсы переноса в момент последнего соударения, и поэтому

$$\Delta u \approx L du/dx.$$

Используя последнее соотношение и вспоминая, что $nm = \rho$, мы получаем

$$S = -\rho\bar{v}L du/dx,$$

и отсюда

$$\eta \approx \rho\bar{v}L. \tag{8.26}$$

Сравнение соотношений (8.26) и (8.15) показывает, что наша теория предсказывает, что

$$\varkappa \approx C\eta.$$

Наши довольно грубые рассуждения можно улучшить; выполненные более аккуратно и точно вычисления показывают, что

$$x \approx {}^5/_2 C\eta. \tag{8.27}$$

Коэффициент здесь в точности равен 5/2 для отталкивания по закону обратной пятой степени и будет больше на 1% для случая твердых сфер. Последнее соотношение в особенности интересно, так как оно содержит только экспериментально измеряемые величины. Оно подтверждается экспериментально для благородных газов He, Ne и Ar, и, таким образом, значение L, которое получается из теории вязкости газов, находится в согласии со значением, которое дает теория теплопроводности. Для молекул более сложного строения согласие уравнения (8.27) с экспериментом не столь хорошее. Для большинства газов отношение $\varkappa/C\eta$ меньше 2, вместо значения 2,5, которое предсказывает уравнение (8.27). Похоже, что уточнения теории, которые приводят к множителю 2,5 вместо 1, не являются справедливыми для внутренних движений молекул, таких как вращение молекул и колебания атомов в молекулах. Тем не менее наша теория содержит в уравнении (8.27) замечательный результат, связывая термические ($\varkappa$) и механические (η) характеристики газа, хотя, можно было бы подумать с первого взгляда, что они не имеют никакого отношения друг к другу.

Зависимость коэффициента вязкости от температуры и от давления будет приблизительно той же, что и для коэффициента теплопроводности, так как теплоемкость, как мы увидим в гл. 9, почти постоянна. Некоторые экспериментальные данные приведены на рис. 8.9. Удивительно то, что коэффициент вязкости не зависит от давления (или от плотности), по крайней мере в том интервале давлений, где средняя длина свободного пробега мала по сравнению с размерами сосуда. *Увеличение* коэффициента вязкости газа с повышением температуры также до некоторой степени удивительно, так как оно противоположно более привычному поведению коэффициента вязкости жидкостей, которые становятся менее вязкими с повышением их температуры.

§ 8.5. Диффузия

Диффузия газа одного сорта в другой также представляет собой явление переноса. В этом случае, однако, переносится не энергия или импульс, а число молекул. Это явление приводит к медленному перемешиванию двух сортов газа, которые, будучи первоначально разделенными, приведены в контакт. Например, если бутылку с аммиаком раскупорить на достаточно далеком расстоянии от нас, то должно пройти порядочное время, прежде чем мы почувствуем запах аммиака. Мы знаем, что сами молекулы аммиака двигаются очень быстро (0,6 *км/сек* при комнатной температуре), однако распространение заметного числа этих молекул будет очень медленным вследствие их бесчисленных соударений с другими молекулами. Допустим, что поток молекул через некоторую плоскость пропорционален градиенту концентрации (плотности) молекул этого сорта (рис. 8.8):

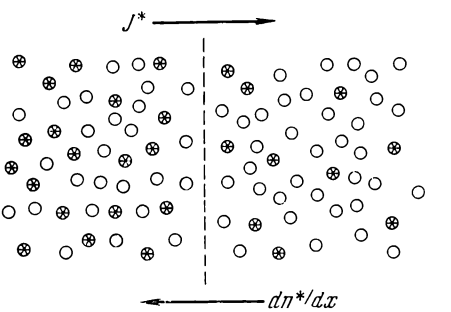


Рис. 8.8.

$$J^* = -D\, dn^*/dx. \tag{8.28}$$

Это уравнение можно сравнить с уравнениями (8.14) и (8.25). Коэффициент D называется *коэффициентом диффузии*, а само уравнение называется *законом Фика*.

В уравнении (8.28) мы обозначили через J^* поток молекул через единицу площади и через n^* их число в единице объема, потому что следует отличать молекулы, которые диффундируют, от

молекул среды, в которой они диффундируют. (В действительности молекулы каждого сорта диффундируют в среде молекул другого сорта.) Величины J^* и n^* относятся только к рассматриваемому нами сорту молекул. Введение в рассмотрение молекул двух различных сортов, которого мы избегали до сих пор, приводит к затруднениям, которые можно разрешить непосредственно, вводя среднюю длину свободного пробега для молекул каждого из сортов. Чтобы избежать этих усложнений, мы ограничимся рассмотрением только *самодиффузии*, когда все молекулы — одного и того же сорта, но мы предполагаем, что можем каким-то образом пометить некоторые из них и следить за распространением этих отмеченных молекул. К сожалению, хотя такое предположение и упрощает задачу, однако оно, строго говоря, бессмысленно: мы говорим, что все молекулы одинаковы, но в то же время выделяем некоторые из них. Единственный способ, которым можно пометить молекулу среди ей подобных,— это считать ее молекулой другого сорта.

То, что действительно придает смысл этому предположению и делает его достойным рассмотрения, заключается в следующем. Можно создать молекулы двух незначительно различающихся сортов, так что меченые молекулы можно каким-то способом отличить от немеченых, однако взаимодействия меченых молекул с мечеными и немеченными одинаковы, и поэтому средняя длина свободного пробега меченых молекул равна средней длине свободного пробега немеченых молекул. Способ различения атомов состоит в использовании различных *изотопов* одного и того же элемента. Различные изотопы некоторого элемента имеют различные массы, но тождественные химические свойства, т. е. одинаково взаимодействуют с другими атомами. В частности, в случае достаточно тяжелых элементов различие сортов по массам относительно мало, так что меченые атомы или молекулы почти полностью тождественны. Практически особенно удобно бывает использовать изотопы, которые являются *радиоактивными*, так как концентрацию меченых молекул в этом случае можно подсчитать с помощью стандартной техники измерения радиоактивных излучений, применяемой в ядерной физике. Поэтому мы и собираемся рассмотреть самодиффузию, считая, что коэффициент самодиффузии можно измерить, если наблюдать диффузию некоторой порции газа, содержащей радиоактивные атомы, в газе, состоящем из обычных атомов того же самого сорта.

После такого объяснения вычисление коэффициента самодиффузии производится на деле даже легче, чем в случаях коэффициентов теплопроводности и вязкости. В данном случае сам поток меченых молекул будет различным для двух рассматриваемых направлений. Пусть концентрация меченых молекул слева от плоскости раздела равна $n^* - \Delta n^*$, а справа от нее равна $n^* + \Delta n^*$.

Тогда из уравнения (8.9) мы получаем, что суммарный поток через 1 $см^2$ плоскости за 1 *сек* равен

$$J^* = \Delta F^* = \frac{1}{2}(n^* - \Delta n^*)\bar{v} - \frac{1}{2}(n^* + \Delta n^*)\bar{v} = -\bar{v}\Delta n^*.$$

Далее,

$$\Delta n^* \approx L\, dn^*/dx,$$

так что

$$J^* = -\bar{v}L\, dn^*/dx$$

и

$$D \approx \bar{v}L. \tag{8.29}$$

Сравнение соотношений (8.29) и (8.26) показывает, что

$$\eta \approx \rho D. \tag{8.30}$$

И в этом случае более аккуратные вычисления (для твердых сфер) дают соотношение

$$\eta = {}^5/_6 \rho D.$$

Полные сечения рассеяния или диаметры молекул, вычисленные с помощью экспериментальных значений коэффициентов диффузии, достаточно хорошо (в пределах около 20%) согласуются со значениями диаметров, полученных с помощью экспериментальных значений коэффициентов вязкости. Таким образом, наша теория дает последовательную картину всех явлений переноса. Из уравнения (8.29) следует, что коэффициент диффузии D пропорционален $\sqrt{T}$ (вследствие зависимости D от $\bar{v}$) и $1/P$ (вследствие зависимости от L).

§ 8.6. Явления переноса в газах

Для того чтобы дать некоторое представление о величине вычисленных нами коэффициентов переноса, рассмотрим несколько примеров для какого-либо типичного газа. Мы видели, что коэффициенты диффузии имеет порядок

$$D \approx \bar{v}L. \tag{8.29}$$

Здесь $\bar{v}$ — среднее значение модуля скорости молекулы, L — средняя длина свободного пробега. Коэффициент вязкости имеет порядок

$$\eta \approx \rho D. \tag{8.30}$$

Здесь ρ — плотность массы газа. Коэффициент теплопроводности имеет порядок

$$\varkappa \approx C\eta. \tag{8.31}$$

Здесь C — теплоемкость единицы массы газа (измеренная при постоянном объеме и поэтому часто обозначаемая C_V). Мы должны, следовательно, оценить величины $\bar{v}$, L, ρ, C. Для примера выберем аргон, газ со средним молекулярным весом, при комнатной температуре имеющий свойства, близкие к свойствам идеального газа.

Молекулярный вес аргона $M = 40$, диаметр его молекулы d приближенно равен $4\text{Å} = 4 \cdot 10^{-8}$ *см*. В соответствии с уравнением (8.12) теплоемкость одной молекулы идеального газа $(d\bar{E}/dT) = {}^3/_2\, k$. Умножая ее на число молекул в грамме N_0/M и вспоминая, что $N_0\, k = R$ (молярная газовая постоянная), мы получаем

$$C = \frac{3}{2}\frac{R}{M} = \frac{3}{2}\,\frac{2\,кал/(моль \cdot град)}{40\ г/моль} = \frac{3}{40}\,\frac{кал}{г \cdot град} \approx 0{,}3 \cdot 10^7\,\frac{эрг}{г \cdot град}.$$

Плотность массы ρ равна молекулярному весу, деленному на объем V, занимаемый одним молем газа. При нормальных условиях для идеального газа $V = 22{,}4$ *л*, так что

$$\rho = \frac{M}{V} = \frac{40\ г/моль}{22{,}4\ л/моль} \approx 2 \cdot 10^{-3}\,\frac{г}{см^3}.$$

Средняя длина свободного пробега L зависит от числа молекул n в единице объема (уравнение (8.6)). При нормальных условиях для идеального газа

$$n = \frac{N_0}{V} = \frac{6{,}02 \cdot 10^{23}\ молекул/моль}{22{,}4 \cdot 10^3\ см^3/моль} \approx 3 \cdot 10^{19}\ см^{-3}.$$

Тогда, используя выражение (8.8) для полного сечения рассеяния, имеем

$$L = \frac{1}{\sqrt{2}\, n \pi d^2} = (\sqrt{2} \cdot 3 \cdot 10^{19}\ см^{-3} \cdot \pi \cdot 4^2 \cdot 10^{-16}\ см^2)^{-1} \approx 6 \cdot 10^{-6}\ см.$$

Наконец, мы можем приближенно заменить $\bar{v}$ на среднеквадратичную скорость

$$\bar{v} \approx \sqrt{\frac{3kT}{m}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}} = \sqrt{2 \cdot \frac{3}{2}\,\frac{RT}{M}} =$$

$$= (2 \cdot 0{,}3 \cdot 10^7\ эрг/(г \cdot град) \cdot 300\ град)^{1/2} \approx 4 \cdot 10^4\ см/сек.$$

Все приведенные выше значения дают правильный порядок величин для любых газов при комнатной температуре и атмосферном давлении.

Коэффициент диффузии будет равен

$$D \approx \bar{v} L = 0{,}25\ см^2/сек.$$

Для того чтобы «почувствовать» полученные значения, мы воспользуемся теоретической формулой, выводить которую здесь

было бы слишком долгим делом. Если некоторое количество аргона в начальный момент времени было сконцентрировано, например, в ограниченной области атмосферы, то уравнение (8.28) показывает, что благодаря диффузии аргон распространится из этой области во все стороны, вследствие чего концентрация аргона изменится во всех точках. (Диаметр «молекул» воздуха почти такой же, как диаметр молекулы аргона, и поэтому в качестве некоторого приближения можно использовать формулу, полученную для случая самодиффузии.) Если эту проблему сформулировать математически и решить ее, то мы получим, что время t, за которое некоторое заметное количество аргона путем диффузии распространится на расстояние x от области первоначальной концентрации, приближенно определяется формулой

$$t \approx x^2/D. \tag{8.32}$$

(Заметим, что такая формула подсказывается размерностью коэффициента D.) Если $x = 1$ *м*, то $t = 4 \cdot 10^4$ *сек*, т. е. газу требуется более чем 10 *час*,чтобы продиффундировать на 1 *м*. Это показывает, что диффузия — процесс очень медленный. Обычно перемешивание в газах или жидкостях осуществляется гораздо быстрее за счет конвекции. Диффузия в газах, хотя и является такой медленной, все же происходит в тысячи раз быстрее, чем диффузия в жидкостях, где атомы расположены очень близко друг к другу. Диффузия в твердых телах еще медленнее, чем диффузия в жидкостях. Тем не менее иногда диффузия в твердых телах является очень важным эффектом, так как перемешивание различных атомов нельзя осуществить никаким иным путем (см. гл. 15).

Из уравнения (8.30) получаем для коэффициента вязкости значение

$$\eta \approx \rho D \approx 0{,}5 \cdot 10^{-3}\ г/(см \cdot сек).$$

Единицей вязкости в системе СГС является *г/см·сек*, или, соответственно, *дин·сек/см*^{2} (ср. с уравнением (8.25)). Эта единица называется *пуаз* (*пз*), в честь французского ученого Пуазейля, который исследовал течение вязкой жидкости в 1843 г. Вязкость газов обычно измеряют в *микропуазах* (1 *мкпз* $= 10^{-6}$ *пз*). Наша оценка, 500 *мкпз*, довольно завышена, если речь идет о газах. Для того чтобы дать некоторое представление о ее величине, ее можно сравнить с типичными значениями вязкости для жидкостей. Вязкость *жидкостей* измеряют обычно в сантипуазах (1 *спз* $= 10^{-2}$ *пз*). Вязкость воды при температуре 20° С оказывается равной 1,00 *спз*, а это значение очень легко запомнить. Таким образом, наш типичный газ еще в сотни раз менее вязок, чем типичная жидкость. (Разумеется, некоторые жидкости, состоящие из сложных молекул,

как, например, смола или патока, могут быть еще гораздо более вязкими.) Поэтому воздушный слой будет обладать гораздо лучшими смазывающими свойствами, чем масляная пленка, и «воздушный подшипник» будет обладать очень малым трением.

Некоторые экспериментальные данные для коэффициента вязкости аргона и некоторых других газов приведены на рис. 8.9 в логарифмическом масштабе. Согласно формулам (8.27) и (8.16) коэффициент вязкости, так же как и коэффициент теплопроводности, должен быть приблизительно пропорционален $\sqrt{T}$. Графики, приведенные на рис. 8.9, приближенно являются прямыми линиями с тангенсом угла наклона, равным 0,5; однако имеются и отклонения от этого правила, которые не совсем несущественны. Более высокий наклон можно до некоторой степени объяснить, если предположить, что молекулы не являются твердыми сферами (§ 8.3).

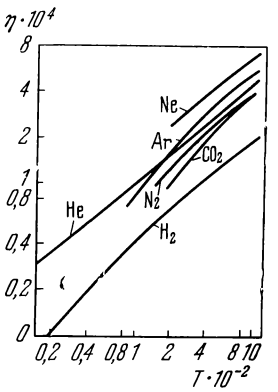


Рис. 8.9.

Коэффициент теплопроводности согласно уравнению (8.31) равен

$$\varkappa \approx C\eta \approx 1{,}5\cdot 10^3 \ \text{эрг/(см·сек·град)} = 4\cdot 10^{-5} \ \text{кал/(см·сек·град)}.$$

Коэффициент теплопроводности газа сравнительно мал. Типичная *жидкость* имеет коэффициент теплопроводности примерно в 10 раз больше (для воды это значение относительно велико: $1{,}4\cdot 10^{-3}$ *кал/(см·сек·град)*). Типичные плотные (т.е. непористые) *твердые тела* также имеют значения коэффициента теплопроводности бóльшие, чем у газов, в несколько раз (от десяти до ста). *Металлические* твердые тела имеют еще гораздо бóльшую теплопроводность: медь и серебро при комнатной температуре имеют наибольшее среди всех материалов значение коэффициента теплопроводности (1,0 *кал/(см·сек·град)*. Чрезвычайно большие значения коэффициента теплопроводности металлов зависят от движения в них *электронов*, и этот эффект мы не будем обсуждать вплоть до части IV. Газы, несмотря на их малую теплопроводность, практически не являются хорошими теплоизоляторами, если не позаботиться об устранении конвекции, так как в противном случае конвекция переносит тепло через газ или жидкость намного быстрее, чем обычная теплопроводность.

Подведем итоги этой главы. Зная свойства молекул, можно вычислить с помощью уравнений (8.29), (8.30), (8.31) значения коэффициентов переноса. Тогда можно рассчитать потоки тепла, им-

пульса и числа частиц по соответствующим значениям градиентов температуры, скорости течения и концентрации с помощью уравнений (8.14), (8.25) и (8.28) соответственно. Математические вычисления, необходимые для этого расчета, без сомнения, знакомы читателю для случаев, когда задача обладает простой плоской или цилиндрической симметрией, но они довольно затруднительны, если симметрия задачи не так проста. Мы должны, однако, воздержаться от обсуждения этого, так как в настоящем изложении нас в действительности интересует обратная задача: с помощью измеренных на опыте значений коэффициентов (полученных с учетом симметрии, существующей в эксперименте) мы определили некоторые свойства микроскопических частиц, составляющих газ.

Задачи

8.1. Экспериментальное значение коэффициента теплопроводности для газообразного гелия при нормальных условиях равно $3{,}4 \cdot 10^{-4}$ *кал/(см·сек·град)*. Вычислить диаметр атома He. Коэффициент теплопроводности для аргона равен $3{,}9 \cdot 10^{-5}$ *кал/(см·сек·град)*. Почему это значение для аргона на порядок меньше, чем для гелия?

8.2. Используя диаметр атома He, найденный в задаче 8.1, вычислить среднюю длину свободного пробега и среднее время между соударениями для газообразного гелия.

8.3. Предположим, что коэффициент теплопроводности газа $\varkappa$ пропорционален произведению некоторых степеней следующих величин: средней длины свободного пробега L, среднего значения модуля скорости $\bar{v}$, теплоемкости *на единицу объема* C. Определить с помощью метода размерностей зависимость $\varkappa$ от этих величин.

8.4. Один из приборов для измерения давления, используемых в вакуумной технике, называется термопарным манометром. Он состоит из проволоки, протянутой по оси цилиндрической трубки, содержащей газ, давление которого надо измерить. По проволоке пропускается электрический ток, и температура проволоки, которая зависит от теплопроводности окружающего ее газа, измеряется при помощи термопары, присоединенной к проволоке. Дать оценку интервала давлений, в котором прибор может работать, если радиус трубки около 1 *см*. Считать, что эффективный диаметр «молекулы воздуха» (главным образом состоящего из N_2) равен 4,2 Å.

8.5. Газообразный аммиак NH_3 при нормальных условиях довольно далек от идеальности. Найти в справочнике значения коэффициента теплопроводности, плотности и т. п. и вычислить среднюю длину свободного пробега и эффективный диаметр при нормальных условиях. Вероятно, вы не сможете найти в таблицах значения теплоемкости при постоянном объеме C_V, так как экспериментально легче определить теплоемкость при постоянном давлении C_P. Однако для всех газов очень хорошо выполняется соотношение

$$C_P - C_V = R.$$

(Кроме того, вы можете сравнить значение плотности, приведенное в таблицах, с тем значением, которое получается, если NH_3 считать идеальным газом.)

8.6. Приведем таблицу значений коэффициентов теплопроводности $\varkappa$ (10^{-7} *кал/(см·сек·град)* для некоторых газов)*:

T (°K)	90,2	194,7	273,2	373,2	491,2	579,1
He	1655	2706	3406	4165	4947	5504
Ne	489	876	1110	1357	1595	1789
Ar	141	293	394	506	614	685
Kr		152	208	272	340	388
Xe		91	123	168	208	237

Нарисовать графики зависимости $\varkappa$ от T для каждого газа в логарифмической шкале. Определить тангенсы углов наклона соответствующих графиков, а тем самым показатели m в эмпирическом законе:

$$\varkappa = \text{const} \cdot T^m.$$

Предполагая, что потенциальная энергия взаимодействия (отталкивания) между атомами обратно пропорциональна расстоянию между ними в степени n, определить для каждого газа соответствующий показатель n.

8.7. Рассмотрите «воздушную дорогу» — дорожку с отверстиями, сквозь которые продувается воздух. Это продувание создает на поверхности дорожки воздушную подушку, на которой плавает тело — «бегунок». Бегунок может двигаться вдоль воздушной дороги с очень малым трением вследствие малой вязкости воздуха, действующего в качестве «смазывающей» прослойки. а) Считая, что диаметр молекул воздуха равен 4,2Å, вычислить коэффициент вязкости воздуха. б) Можно считать, что при движении бегунка вдоль воздушной дороги слой воздуха, непосредственно прилегающий к бегунку, движется вместе с бегунком с его скоростью u, а слой воздуха на поверхности дороги покоится. Вычислить тормозящую силу трения, действующую на бегунок, если площадь поверхности бегунка равна A и толщина воздушной пленки равна Δx. в) Написать уравнение движения для бегунка. Решить это уравнение и найти положение бегунка как функцию времени. Как далеко уйдет бегунок, прежде чем остановиться, если его масса равна 200 *г*, начальная скорость равна 1 *м/сек*, $A = 50\,см^2$, $\Delta x = 0{,}25\,мм$?

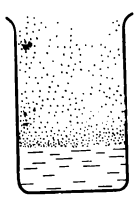


Рис. 8.10.

8.8. Вязкость, так же как и теплопроводность, начинает зависеть от давления, когда средняя длина свободного пробега L становится сравнимой с линейными размерами H сосуда. Так как вам известно, что коэффициент вязкости зависит в этом случае от ρ, $\bar{v}$, L, H и давления P, попытайтесь найти эту зависимость методом размерностей. (Это будет тщетной попыткой, так как этот метод в данном случае не даст искомого результата, но тем не менее полезно самому убедиться в этом и выяснить почему.)

8.9. Найти в справочниках экспериментальные значения коэффициентов вязкости η и теплопроводности $\varkappa$, а также теплоемкости C_V. (Теплоемкость при постоянном объеме C_V можно вычислить, зная C_P, с помощью соотношения, приведен-

*) Взято из работы W. G. Kannuluik, E. H. Carman, Proc. Phys. Soc. (London) 65B, 701 (1952).

ного в задаче 8.5.) Составить таблицу значений отношения $\varkappa/C\eta$ для возможно большего числа газов.

8.10. Вычислить для молекул H_2O коэффициент их диффузии через воздух, предполагая, что эффективный диаметр молекулы воды равен 3,4 Å. (Слово «эффективный» означает, что можно пользоваться формулой для коэффициента самодиффузии.)

8.11. Используя значение коэффициента диффузии, полученное в задаче 8.10, вычислить скорость испарения воды в мензурке при комнатной температуре (рис. 8.10), предполагая, что вода и водяной пар над ней находятся в равновесии. Считать, что парциальное давление водяного пара на уровне поверхности воды равно 20 *мм рт. ст.*, а на уровне горлышка мензурки оно равно нулю и что водяной пар является идеальным газом (хотя это предположение и неправильно, практически оно достаточно хорошо).

Литература для справок

1. Кикоин И. К. и Кикоин А. К., Молекулярная физика, Физматгиз, 1963.
2. Левич В. Г., Введение в статистическую физику, Гостехиздат, 1954.
3. Леонтович М. А., Введение в термодинамику, Гостехиздат, 1952.
4. Эпштейн П. С., Курс термодинамики, Гостехиздат, 1948.

Глава 9

Распределение Максвелла — Больцмана

До сих пор при расчете тех свойств газов, которые зависят от скоростей молекул, мы предполагали, что все молекулы имеют одну и ту же скорость v. Может возникнуть сомнение в правильности этого предположения, и в действительности мы ведь уже исправили его, заменив в наших формулах v на некоторую среднюю скорость $\bar{v}$. Действительно, при здравом размышлении становится очевидным, что молекулы не могут иметь одну и ту же скорость: даже если вначале все скорости были одинаковы, то в результате столкновений между молекулами некоторые молекулы приобретут бо́льшую, а некоторые — меньшую скорость, как это следует из закона сохранения импульса, если его применить к упругим столкновениям молекул, которые не двигаются по одной прямой. По существу, молекулы будут обладать некоторым определенным р а с п р е д е л е н и е м *скоростей. Наша задача сейчас — исследовать это распределение и выяснить, каким образом можно с его помощью вычислять различные средние значения скоростей, которые необходимы в кинетической теории газов.*

Мы будем действовать следующим образом: постараемся просто угадать наиболее правдоподобный вид этого распределения, а затем, обобщая, предположим, что оно является фундаментальным законом статистической физики. В действительности можно было бы вывести это распределение, т. е. показать, что это — н а и б о л е е в е р о я т н о е или р а в н о в е с н о е *распределение, однако даже такие выводы включают в себя некоторые очень тонкие и принципиальные проблемы, которые вплоть до настоящего времени не разрешены и являются предметом теоретических исследований в физике. Точка зрения, которую мы здесь принимаем, состоит в том, что искомое распределение — это один из тех основных законов физики, чья справедливость аналогично, например, закону всемирного тяготения Ньютона основана на способности этого закона предсказывать результаты, которые хорошо согласуются с опытом.*

§ 9.1. Функции распределения

При попытке описать распределение скоростей было бы заведомо безнадежно пытаться определить скорость каждой молекулы в отдельности — имеется слишком много молекул, и, кроме того, скорость данной молекулы изменяется каждый раз, когда она соударяется с другой молекулой. Поэтому мы ограничимся рассмотрением некоторого числа интервалов скоростей и определим *число* молекул, заключенных в каждом интервале. Предположение о том, что газ находится в равновесии, означает, что эти

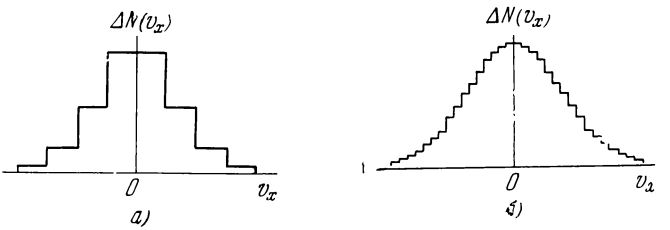


Рис 9.1.

числа не меняются с течением времени: хотя скорость любой данной молекулы может изменяться, но в среднем число молекул, имеющих скорости внутри некоторого интервала скоростей, будет постоянным. Для определенности рассмотрим x-компоненту скорости (мы выбираем декартову прямоугольную систему координат) и интервалы ее значений:

$$(0—1),\ (1—2),\ (2—3),\ \ldots, км/сек,$$

а также интервалы ее отрицательных значений, что соответствует движению в противоположном направлении. *Функцию распределения* можно задать, составляя таблицу чисел молекул, имеющих x-компоненту скорости в указанных интервалах. С другой стороны, мы можем нарисовать ступенчатый график, называемый *гистограммой*, который содержит ту же самую информацию (рис. 9.1, *а*). Между прочим, мы уже знаем, что функция распределения должна быть четной функцией (симметричной относительно точки $v_x = 0$), так как иначе среднее значение v_x будет не равно нулю, т.е.в газе будет существовать поток, и, кроме того, интуитивно ясно, что числа молекул, имеющих скорости v_x и $-v_x$, должны быть равны (ведь положительное направление координатной оси произвольно).

Для того чтобы полная кинетическая энергия молекул газа была конечной, функция распределения должна стремиться к нулю, когда v_x возрастает до бесконечности.

Так как обычно в рассматриваемых объемах газа содержится порядка 10^{23} молекул, то число молекул, имеющих скорость в каждом отдельном интервале, будет очень велико. Интервал останется еще очень большим, если мы уменьшим его до 0,1 *км/сек* или даже до 0,01 *км/сек* и т. д. (рис. 9.1, *б*). При уменьшении величины интервалов наша гистограмма будет стремиться к некоторой *непрерывной* кривой (рис. 9.2), при условии, конечно, что интервал все время остается достаточно большим, чтобы содержать достаточно большое число молекул, и, таким образом, не является «бесконечно малым» в математическом смысле этого слова. Теперь мы можем аппроксимировать искомую функцию распределения предельной непрерывной кривой, что дает значительные преимущества при вычислениях.

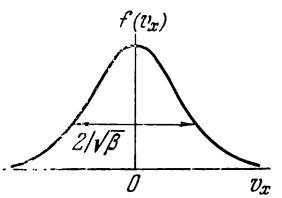


Рис. 9.2.

Если интервал скоростей dv_x выбран достаточно малым, то число молекул $dN(v_x)$, имеющих скорости в этом интервале, пропорционально dv_x. Удобно ввести функцию $f(v_x)$ с помощью соотношения

$$dN(v_x) \equiv Nf(v_x)dv_x, \tag{9.1}$$

где N — полное число молекул. Величина fdv_x равна относительной *доле* числа молекул, имеющих v_x-компоненту скорости в интервале от v_x до $v_x + dv_x$. Поэтому сама «функция распределения» f представляет собой плотность (на единицу скорости) относительной доли числа молекул, имеющих v_x-компоненту скорости от v_x до $v_x + dv_x$. Мы можем также интерпретировать fdv_x как *вероятность* того, что некоторая данная молекула будет иметь x-компоненту скорости в интервале между v_x и $v_x + dv_x$. Заметим, что

$$\int dN(v_x) = \int_{-\infty}^{+\infty} Nf(v_x)\,dv_x = N,$$

так как суммарное число молекул во всех интервалах скоростей равно, очевидно, полному числу молекул N. Поэтому

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(v_x)\,dv_x = 1, \tag{9.2}$$

или, как говорят, функция распределения f *нормирована* на единицу.

Нормировка функции на единицу есть необходимое свойство любой вероятности, так как интеграл (9.2) представляет просто вероятность того, что молекула имеет какое-то значение x-компо-

ненты скорости. Чтобы проиллюстрировать это, рассмотрим интеграл (9.2) как предел суммы

$$\sum_{i=-\infty}^{+\infty} f(v_{x_i})\,\Delta v_{x_i}.$$

Когда величина интервала Δv_{x_i} стремится к нулю, каждый член в сумме представляет собой вероятность того, что молекула имеет скорость в соответствующем интервале. Сумма таких членов есть вероятность того, что молекула имеет x-компоненту скорости в первом интервале или во втором, или в третьем и т. д., так как вероятность осуществления одного какого-либо из некоторого числа происходящих событий равна сумме вероятностей осуществления каждого из этих событий. Сумма по всем возможным интервалам скорости (событиям) есть вероятность того, что молекула имеет скорость в каком-то из интервалов. Эта суммарная вероятность, конечно, равна 1: молекула должна иметь *некоторую* скорость (включая значение $v_x = 0$).

Аналогично интеграл от функции f по некоторому конечному интервалу скоростей дает вероятность того, что молекула имеет x-компоненту скорости внутри этого конечного интервала. Например, вероятность того, что молекула имеет скорость $v_x \geqslant 0$, равна

$$\int_0^{\infty} f(v_x)\,dv_x.$$

Мы уже отмечали, что этот интеграл равен 1/2, так как f — четная функция.

§ 9.2. Распределение Максвелла по скоростям

Теперь, после того как мы установили точное значение понятия распределения скоростей, мы можем попытаться угадать явный вид функции распределения $f(v_x)$. Если изменения скоростей молекул вследствие соударений происходят по случайному закону, то мы можем ожидать, что искомое распределение будет *нормальным распределением*, которое в физике чаще называют распределением Гаусса:

$$f(v_x) = A_x e^{-\beta v_x^2}. \tag{9.3}$$

Эта функция удовлетворяет всем отмеченным нами выше требованиям: она — четная функция v_x (симметричная относительно точки $v_x = 0$) и стремится к нулю при возрастании v_x до бесконечности. Постоянная A_x является просто «нормировочной константой»,

и ее значение можно определить из условия нормировки функции f на единицу. Из уравнения (9.2) имеем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(v_x)\,dv_x = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} A_x e^{-\beta v_x^2} dv_x = A_x \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = A^x \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sqrt{\pi}.$$

(Неопределенный интеграл $\int e^{-\xi^2} d\xi$ нельзя выразить в замкнутой форме, в то время как значение определенного интеграла $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi$ можно найти в таблицах.) Таким образом,

$$A_x = \frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta v_x^2} dv_x} = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}}. \tag{9.4}$$

Постоянная β более интересна, потому что ее значение определяет *ширину* распределения. Значение скорости v_x, при котором функция f уменьшается в $e = 2{,}718$ раз по сравнению с ее значением в точке $v_x = 0$, равно $1/\sqrt{\beta}$. Чем больше будет β, тем у́же будет функция распределения. Впоследствии мы увидим, что величина β связана с *температурой* газа.

Однако, прежде чем выяснять физический смысл величины β, мы обобщим написанную функцию распределения на случай трех измерений. Это обобщение производится очень легко, так как распределения по компонентам v_y и v_z должны иметь тот же самый вид, что и распределение по v_x (ведь направления координатных осей и их наименования полностью произвольны). Другими словами, газ *изотропен*. Так как вероятность одновременного осуществления данного определенного набора из некоторого числа происходящих независимых событий равна произведению вероятностей осуществления каждого события из данного набора, мы можем написать, используя соотношения (9.3) и (9.4)

$$f(v_x, v_y, v_z) = f(v_x) f(v_y) f(v_z) = A_x A_y A_z e^{-\beta v_x^2} e^{-\beta v_y^2} e^{-\beta v_z^2} = A e^{-\beta (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}, \tag{9.5}$$

где

$$A = \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \int\int e^{-\beta (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}\, dv_x dv_y dv_z \right\}^{-1} = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{3/2}. \tag{9.6}$$

Смысл функции $f(v_x, v_y, v_z)$ заключается в том, что величина

$f(v_x, v_y, v_z)\,dv_x dv_y dv_z$ равна вероятности того, что молекула имеет x-компоненту скорости в интервале от v_x до $v_x + dv_x$ и в то же самое время имеет y-компоненту скорости в интервале от v_y до $v_y + dv_y$ и z-компоненту скорости в интервале от v_z до $v_z + dv_z$.

§ 9.3. Вычисление средних значений и понятие температуры

С помощью функции распределения можно определить число молекул, обладающих данной скоростью. Однако более ценным является ее использование для вычисления *среднего* значения любой физической величины, зависящей от скорости молекулы. Если $g(\mathbf{v}) = g(v_x, v_y, v_z)$ — интересующая нас функция скорости $\mathbf{v}$, то среднее значение этой величины равно

$$\bar{g} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} g(v_x, v_y, v_z)\, f(v_x, v_y, v_z)\, dv_x dv_y dv_z, \qquad (9.7)$$

т. е. правило вычисления среднего значения состоит в том, что для каждого значения скорости $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ мы умножаем соответствующее значение функции g на вероятность осуществления данного значения скорости $\mathbf{v}$ и суммируем (интегрируем) по всем возможным значениям $\mathbf{v}$.

Например, кинетическая энергия молекулы зависит от ее скорости $\mathbf{v}$. Заметим, что когда на молекулу не действуют никакие силы (в идеальном газе), полная энергия молекулы равна ее кинетической энергии и тем самым также является функцией только скорости молекулы

$$E = {}^1/_2 mv^2 = {}^1/_2 m\,(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2). \qquad (9.8)$$

Вычислим среднее значение

$$\bar{E} = \frac{\iiint E e^{-\beta(v_x^2+v_y^2+v_z^2)}\, dv_x dv_y dv_z}{\iiint e^{-\beta(v_x^2+v_y^2+v_z^2)}\, dv_x dv_y dv_z}. \qquad (9.9)$$

Знаменатель является просто нормировочной константой, которая определена соотношением (9.6). Подставляя в соотношение (9.9) значение E из уравнения (9.8), мы получим сумму трех интегралов вида

$$\frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} mv_x^2 e^{-\beta v_x^2} dv_x \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta(v_y^2+v_z^2)}\, dv_y dv_z}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta v_x^2} dv_x \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta(v_y^2+v_z^2)}\, dv_y dv_z}.$$

Отсюда видно, что интегралы по v_y и v_z в числителе и знаменателе сокращаются, а остающийся интеграл по v_x преобразуется к виду

$$\frac{\frac{1}{2}m\int\limits_{-\infty}^{+\infty} v_x^2 e^{-\beta v_x^2} dv_x}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta v_x^2} dv_x} = \frac{\frac{m}{2\beta}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi},$$

если перейти к безразмерной переменной интегрирования $\xi^2 \equiv \beta v_x^2$.

Мы уже отмечали (см. (9.4)), что определенный интеграл в знаменателе равен

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}.$$

Определенный интеграл в числителе также можно легко вычислить, если использовать обходный математический прием: рассмотрим интеграл

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda\xi^2} d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}},$$

где λ — просто некий параметр. Продифференцируем теперь обе части последнего соотношения по λ, выполняя в левой части дифференцирование под знаком интеграла. В результате получим

$$-\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 e^{-\lambda\xi^2} d\xi = -\frac{\sqrt{\pi}}{2\lambda^{3/2}}.$$

Если теперь мы положим $\lambda = 1$, то получим искомое значение:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}.$$

Теперь нам известны значения определенных интегралов в числителе и знаменателе, и мы находим

$$\frac{\frac{m}{2\beta}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi} = \frac{1}{2}\frac{m}{2\beta}. \qquad (9.10)$$

Вспомним, что $\overline{E}$ будет суммой трех одинаковых членов. Один, связанный с $\frac{1}{2}mv_x^2$, мы только что вычислили, а два других, связанных с $\frac{1}{2}mv_y^2$ и $\frac{1}{2}mv_z^2$, будут иметь такую же величину. Поэтому $\overline{E}$ есть просто утроенная правая часть соотношения (9.10):

$$\overline{E} = \frac{3}{2}\frac{m}{2\beta}. \tag{9.11}$$

Эта связь между средней энергией молекулы и постоянной β позволяет нам получить некоторую информацию о физическом смысле β: чем больше β, тем меньше средняя энергия $\overline{E}$ молекулы.

Соотношение (9.11), которое выражает среднюю энергию молекулы через величину β, можно обратить и использовать для физической интерпретации β, так как мы уже видели из соотношения (7.5), что в случае, когда потенциальная энергия равна нулю, будет

$$\overline{E} = {}^3/_2 kT. \tag{9.12}$$

Для того чтобы соотношение (9.11) было согласовано с этой элементарной формулой, надо положить

$$\beta = m/2kT. \tag{9.13}$$

Этим соотношением в статистическую теорию вводится понятие *температуры*. Используя (9.13), мы получим для распределения по компонентам скорости (9.5) и (9.6) выражение

$$f(\mathbf{v}) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2kT}(v_x^2+v_y^2+v_z^2)}. \tag{9.14}$$

Эта функция носит название *распределения Максвелла по компонентам скоростей*. Чем выше температура, тем шире распределение и тем больше молекул с высокими скоростями.

§ 9.4. Распределение Максвелла для абсолютной величины скорости

Функцию распределения можно также записать в другой форме, которая зачастую оказывается более удобной. Мы можем представить себе, что вектор $\mathbf{v}$ определяет *точку* не в обычном пространстве, но точку в «*пространстве скоростей*». До сих пор мы выбирали в качестве компонент скорости v_x, v_y, v_z, т. е. использовали декартову систему координат в пространстве скоростей. Однако отнюдь не обязательно пользоваться этой частной системой координат. Интересно ввести сферические координаты в пространстве

скоростей, в которых мы определим вектор $\mathbf{v}$, задав его длину v и углы θ и φ, указывающие его направление (рис. 9.3).

Теперь вместо величины

$$f(v_x, v_y, v_z)\, dv_x\, dv_y\, dv_z,$$

которая представляет собой относительную долю числа молекул в элементе объема $dv\, dv_y dv_z$ в пространстве скоростей (т.е. молекул,

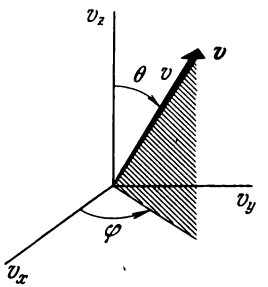


Рис 9.3.

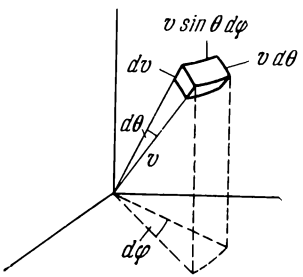


Рис. 9.4.

имеющих компоненты скорости в интервалах от v_x до $v_x + dv_x$, от v_y до $v_y + dv_y$, от v_z до $v_z + dv_z$), мы можем рассмотреть величину

$$f_1(v, \theta, \varphi)\, v^2 dv\, \sin\theta\, d\theta\, d\varphi,$$

которая представляет собой относительную долю числа молекул в элементе объема $v^2 dv \sin\theta d\theta d\varphi$ в сферических координатах (рис. 9.4). Новая функция $f_1(v, \theta, \varphi)$ получается из функции $f(v_x, v_y, v_z)$ простой заменой

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$$

в соотношении (9.14):

$$f_1(v, \theta, \varphi) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}}. \qquad (9.15)$$

Мы видим, что в сферических координатах функция распределения зависит только от одной переменной v и не зависит от двух других, θ и φ. Таким образом, распределение *изотропно* — вероятность движения в любом направлении будет одна и та же, как это и должно следовать из соображений симметрии, ибо нет никакой физической причины выделять какое-либо направление.

Так как распределение изотропно, то нам не к чему интересоваться зависимостью от углов θ и φ. Введем поэтому новую функ-

цию $f_1(v)$ с помощью соотношения

$$f_1(v)\,dv \equiv \int_0^{\pi} \sin\theta\,d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, f_1(v, \theta, \varphi)\, v^2 dv$$

Тогда величина $f_1(v)\,dv$ будет относительной долей числа молекул, абсолютная величина скорости которых имеет значения в интервале от v до $v + dv$ вне зависимости от направления движения, так как, интегрируя по углам θ и φ, мы просуммировали вероятность по всем направлениям. Функцию $f_1(v, \theta, \varphi)$ можно вынести из-под знака интеграла, а интеграл от элемента телесного угла $\sin\theta d\theta d\varphi$ дает просто полный телесный угол 4π, и поэтому

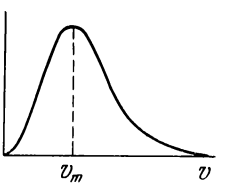


Рис. 9.5.

$$f_1(v) = 4\pi\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}}. \quad (9.16)$$

Эта функция называется *распределением Максвелла для модуля скорости* (*абсолютной величины скорости*), а ее график показан на рис. 9.5.

Хотя наиболее вероятное значение некоторой декартовой компоненты скорости равно нулю, *наиболее вероятное значение абсолютной величины скорости* v_m (см. рис. 9.5) не нуль, а равняется (задача 9.4)

$$v_m = \sqrt{2kT/m}. \quad (9.17)$$

Этот кажущийся парадоксальным результат получается только вследствие разного выбора элемента объема в наших двух случаях: либо в виде маленького кубика $dv_x dv_y dv_z$, либо в виде сферического слоя $4\pi v^2 dv$. На рис. 9.6, *а* показан элемент объема $dv_x dv_y dv_z$, который соответствует функции распределения по компонентам скорости (9.14), а на рис. 9.6, *б* нарисован один октант шарового слоя, который соответствует функции распределения по модулю скорости (9.16). Как мы уже видели на рис. 9.3, наиболее вероятные значения компоненты скорости равны нулю, так что плотность числа молекул в пространстве скоростей будет наибольшей в нуле и уменьшается при удалении от начала отсчета. С другой стороны, объем шарового слоя (рис. 9.6, *б*) увеличивается пропорционально росту площади его поверхности v^2 и число молекул в элементе объема, которое равно плотности числа молекул, умноженной на элемент объема, будет иметь максимум при значении $v = v_m$.

Основанием для введения новой формы распределения Максвелла служит то, что в таком виде его более удобно применять для вычисления средних значений от величин, которые являются

функцией только модуля скорости. Например, с его помощью можно вычислить среднее значение самого модуля скорости (задача 9.2):

$$\bar{v} = \int_0^\infty v f_1(v)\, dv = \sqrt{8kT/\pi m}. \tag{9.18}$$

Это значение можно сравнить с величиной среднеквадратичной скорости

$$\overline{(v^2)}^{1/2} = \sqrt{3kT/m}. \tag{9.19}$$

Хотя последняя величина всего лишь на 7% больше, чем $\bar{v}$, это

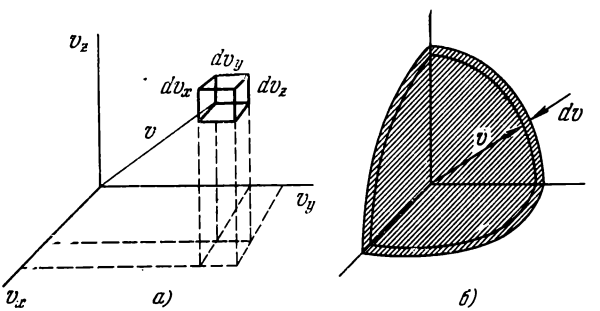


Рис. 9.6.

различие указывает на то обстоятельство, что операция усреднения, вообще говоря, не коммутирует с другими операциями, как, например, возведение в квадрат (см. также задачу 9.3).

§ 9.5. Эффузия

В качестве примера применения функции распределения по скоростям подсчитаем число молекул, вылетающих в вакуум через малое отверстие в стенке сосуда, содержащего газ. Этот эффект носит название эффузии или «истечения в вакуум» и отличается от обычного вытекания газа через большое отверстие. Когда мы говорим, что отверстие «малое», мы подразумеваем, что оно достаточно мало для того, чтобы те немногие молекулы, которые выходят через него, оказывали незначительное влияние на распределение скоростей молекул, оставшихся в сосуде. Таким образом, скорость, с которой молекулы уходят через дырку, должна быть малой по сравнению со скоростью, с которой оставшиеся молекулы могут восстанавливать их равновесное распределение скоростей. (Заметим что в число выходящих молекул попадают молекулы, имеющие скорость, направленную к отверстию, так что распределение

Максвелла должно, вообще говоря, измениться.) С другой стороны, если отверстие велико, то распределение Максвелла сильно исказится: вместо распределения, в котором средняя скорость есть нуль, должно установиться распределение, описывающее движение газа в направлении отверстия с некоторой средней скоростью, отличной от нуля. Такую задачу можно рассматривать, используя те соображения о вязкости, которые мы уже обсуждали в гл. 8.

Для того чтобы вычислить число молекул, покидающих сосуд, вернемся к рассмотрению соотношения (7.3) и усредним обе его части. В правой части мы, по существу, получим среднее значение модуля компоненты v_x: половина молекул, имеющих отрицательные значения v_x, уходит от дырки, и это обстоятельство мы уже учли, введя коэффициент 1/2 в соотношение (7.3). Итак, среднее число молекул, проходящих через единицу площади нашего отверстия за 1 *сек*, будет равно

$$\bar{F} = \frac{1}{2} n \overline{|v_x|}.$$

Вычислим теперь $\overline{|v_x|}$ с помощью соотношений (9.7) и (9.3):

$$\overline{|v_x|} = \int_{-\infty}^{+\infty} |v_x| f(v_x)\, dv_x = 2A_x \int_0^{\infty} v_x e^{-\beta v_x^2} dv_x = \frac{2A_x}{2\beta} \int_0^{\infty} e^{-\xi^2} d(\xi^2).$$

Здесь сделана замена $\xi^2 \equiv \beta v_x^2$. Далее, используя (9.4) и (9.13), получаем

$$\overline{|v_x|} = A_x/\beta = \sqrt{2kT/\pi m}.$$

Сравнивая последнее выражение с (9.18), мы видим, что

$$\overline{|v_x|} = {}^1/_2 \bar{v},$$

и в итоге мы имеем

$$\bar{F} = {}^1/_4 n\bar{v}. \tag{9.20}$$

Это важное соотношение дает выражение для потока числа молекул через единицу площади малого отверстия, или, если угодно, для потока числа молекул, протекающего через единицу площади плоской площади, перпендикулярной некоторому направлению внутри максвелловского газа.

§ 9.6. Распределение Больцмана

После того как мы рассмотрели несколько примеров применения функции распределения, можно попытаться ее обобщить. Мы установили уже, что если на молекулу не действуют никакие силы,

т. е. когда

$$E = {}^1/_2\ m\ (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2),$$

то в соответствии с определением (9.14)

$$f(v_x, v_y, v_z) = Ae^{-\frac{E}{kT}}.$$

Таким образом, чем больше энергия, тем меньше вероятность того, что молекула займет это состояние. Искомое нами обобщение функции распределения состоит просто в том, что мы будем считать последнее утверждение правильным в любом случае. Предположим, например, что на молекулы действует некоторая внешняя (потенциальная) сила. В этом случае полная энергия одной молекулы равна

$$E = {}^1/_2\ m\ (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)\ + V(x,\ y,\ z).$$

Тогда вероятность обнаружить эту молекулу зависит не только от ее скорости, но и от ее *положения*. Поэтому величина

$$f(v_x, v_y, v_z, x, y, z)\, dv_x dv_y dv_z dx\, dy\, dz =$$

$$= A'e^{-\frac{E}{kT}}\, dv_x\, dv_y\, dv_z\, dx\, dy\, dz \quad (9.21)$$

представляет собой вероятность того, что молекула имеет скорость в элементе объема $dv_x dv_y dv_z$ в пространстве скоростей (в точке (v_x, v_y, v_z)), но в то же самое время будет находиться в элементе объема $dxdydz$ (в точке (x, y, z)) в обычном «*конфигурационном пространстве*». (Шестимерное пространство, которое является произведением пространства скоростей и конфигурационного пространства, называется «фазовым пространством».) Обобщенная функция распределения (9.21) называется *распределением Больцмана*.

Прежде всего мы рассмотрим распределение Больцмана в случае, уже проанализированном нами ранее, для того чтобы выяснить, каким образом из него можно получить уже имеющиеся результаты. Если на молекулу не действует никакая сила, то $V = 0$ и

$$f(v_x, v_y, v_z, x, y, z) = A'e^{-\frac{m}{2kT}(v_x^2+v_y^2+v_z^2)}.$$

В этом случае распределение будет *однородным* (в конфигурационном пространстве), так как f в действительности не зависит от x, y, z. Иначе говоря, вероятность того, что молекула находится в некоторой точке объема Ω сосуда, будет одной и той же для различных точек. Так как функция f не зависит от x, y, z, то мы можем

перейти к другой функции, интегрируя по всему объему сосуда:

$$f(v_x, v_y, v_z) \equiv \iiint dx\,dy\,dz\, f(v_x, v_y, v_z, x, y, z) = A'\Omega e^{-\frac{m}{2kT}(v_x^2+v_y^2+v_z^2)}.$$

Эта функция в точности совпадает с распределением Максвелла (9.14), если считать, что новая нормировочная константа A' содержит множитель $1/\Omega$. Вполне достаточно пользоваться этой функцией распределения, если мы молчаливо будем подразумевать, что пространственное распределение является однородным, хотя это явно и не указывается. Аналогичным образом мы поступали в случае распределения Максвелла для модуля скорости, когда мы не подчеркивали явно, что это распределение является изотропным.

§ 9.7. Барометрическая формула

В качестве примера нетривиального применения распределения Больцмана рассмотрим газ, который находится в *однородном поле силы тяжести*, так что

$$V(x, y, z) = mgz.$$

Тогда в соответствии с определением (9.21) полная функция распределения имеет вид

$$f(v_x, v_y, v_z, x, y, z) = A'e^{-\frac{m}{2kT}(v_x^2+v_y^2+v_z^2)} e^{-\frac{mgz}{kT}}.$$

Отметим, прежде всего, что эта функция распределения не зависит от x и y, так что распределение будет однородным в любой горизонтальной плоскости (ось z предполагается направленной вертикально вверх). Это не удивительно, так как сила, действующая в вертикальном направлении, не должна влиять на распределение молекул вдоль горизонтальной плоскости. Поэтому мы можем просто запомнить это обстоятельство и проинтегрировать функцию распределения по y и x, для того чтобы исключить явную зависимость от x и y.

Более важно отметить, что функция распределения — это произведение функции только координат на функцию только скоростей, причем последняя является просто распределением Максвелла. Это означает, что для любого данного значения z распределение скоростей в этой точке будет строго максвелловским, т. е. таким, как если бы на частицу не действовала вообще никакая сила. Поэтому мы можем проинтегрировать по всем компонентам скорости и просто запомнить, что в каждой точке справедливо максвелловское распределение скоростей. В итоге мы получаем

барометрическую формулу

$$f_2(z) = \iiiiint dv_x\, dv_y\, dv_z\, dx\, dy\, f(v_x, v_y, v_z, x, y, z) = A''e^{-\frac{mgz}{kT}}. \quad (9.22)$$

Мы видим, что вероятность нахождения молекулы в некоторой точке, пропорциональная плотности числа молекул или давлению газа, падает экспоненциально с ростом высоты. Если бы температура в атмосфере Земли не зависела от высоты над поверхностью Земли (на самом деле это предположение довольно далеко от действительности), то барометрическая формула должна была бы быть очень точной, так как «толщина» атмосферы составляет всего несколько сотен километров и на таких расстояниях сила тяжести практически постоянна.

§ 9.8. Теплоемкость многоатомных газов

В качестве второго примера применения распределения Больцмана рассмотрим снова идеальный газ, на который не действуют никакие силы, но будем теперь считать, что молекулы неодноатомны. В этом случае неточечной молекулы к кинетической энергии поступательного движения следует добавить кинетическую энергию вращательного движения:

$$E = {}^1/_2 mv^2 + {}^1/_2 I\omega^2.$$

Здесь I — момент инерции, а ω — угловая скорость. В действительности, так как молекулы могут свободно вращаться в пространстве, они могут вращаться относительно любой из трех координатных осей, и момент инерции будет, вообще говоря, различным для разных осей. Поэтому

$$E = \frac{1}{2} m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) + \frac{1}{2} I_x\omega_x^2 + \frac{1}{2} I_y\omega_y^2 + \frac{1}{2} I_z\omega_z^2.$$

Функция распределения принимает вид

$$f_3(v_x, v_y, v_z, \omega_x, \omega_y, \omega_z) =$$

$$= A''' \exp\left[-\frac{m}{2kT}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) - \frac{1}{2kT}(I_x\omega_x^2 + I_y\omega_y^2 + I_z\omega_z^2)\right]. \quad (9.23)$$

Средняя энергия молекулы вычисляется по формуле

$$\bar{E} = \int E f_3 dv_x dv_y dv_z d\omega_x d\omega_y d\omega_z.$$

Так же как и ранее в формуле (9.9), мы получаем три члена вида (9.10)

$$\frac{kT\int_{-\infty}^{+\infty}\xi^2 e^{-\xi^2}\,d\xi}{\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\xi^2}\,d\xi}=\frac{1}{2}kT \tag{9.24}$$

для каждой из трех компонент скорости. Но теперь мы получаем еще три аналогичных члена, обусловленных тремя компонентами угловой скорости. Поэтому средняя энергия одной неточечной (многоатомной) молекулы равна

$$\overline{E}=3kT.$$

Если молекула двухатомная (рис. 9.7), то момент инерции относительно оси, проходящей через оба ядра, равен нулю. Поэтому при усреднении у нас будет только пять членов и

$$\overline{E}={}^5/_2kT.$$

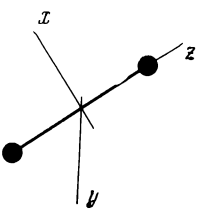


Рис. 9.7.

Если же молекула одноатомная,то момент инерции относительно любой оси равен нулю и $\overline{E}={}^3/_2kT$. Рассмотренные частные случаи иллюстрируют *закон равнораспределения энергии*: каждая *степень свободы* дает вклад $^1/_2\,kT$ в среднюю кинетическую энергию. (В рассматриваемом нами случае каждой степени свободы соответствует переменная, которая входит квадратично в выражение для кинетической энергии.)

Закон равнораспределения можно сравнить с опытными данными по *теплоемкости*. Мы только что показали, что средняя энергия отдельной молекулы равна

$$\overline{E}=\tfrac{n}{2}kT, \tag{9.25}$$

где n — число степеней свободы. Так как в одной грамм-молекуле имеется N_0 молекул, то внутренняя энергия на один моль равна

$$U_T=N_0\overline{E}=\tfrac{n}{2}RT. \tag{9.26}$$

Теплоемкссть моля газа представляет собой производную от внутренней энергии по температуре (предполагается, что объем газа остается постоянным):

$$C_V\equiv dU_T/dT=\tfrac{n}{2}R. \tag{9.27}$$

Молярные теплоемкости *всех идеальных газов* должны быть такими, как указано ниже. Эти значения довольно хорошо согласуются с экспериментальными данными для многих газов, по крайней мере при комнатной температуре.

Газ	n	c_V
Одноатомный . .	3	$\frac{3}{2}R$
Двухатомный . .	5	$\frac{5}{2}R$
Многоатомный . .	6	$3R$

При более низких и при более высоких температурах наблюдаются отклонения: с ростом температуры теплоемкость увеличивается. Причины этих отклонений будут детально рассмотрены в гл. 14 и 18. Здесь же достаточно только сказать, что эти отклонения суть проявления квантовомеханических эффектов и нарушения классического закона равнораспределения энергии. При низких температурах средняя энергия, обусловленная вращением молекул, меньше вычисленной нами; при высоких же температурах начинает давать заметный вклад энергия, связанная с колебаниями атомов в молекуле, которыми мы здесь пренебрегали.

Следует подчеркнуть, что при рассмотрении вида функции распределения мы вернулись к предположению о том, что газ является идеальным. И хотя мы смогли учесть действие поля внешних сил на молекулы газа, мы не учитывали *сил взаимодействия между молекулами* (за исключением мгновенных упругих соударений). Это не связано с какой-либо ограниченностью применимости распределения Больцмана. Причина этого состоит в том, что при учете сил взаимодействия между молекулами мы столкнемся с чрезвычайно сложной математической задачей. В этом случае энергия (потенциальная) каждой отдельной молекулы должна зависеть не только от координат самой молекулы, но и от координат всех остальных молекул газа. Другими словами, существует *корреляция* между молекулами. Вместо шести переменных появится очень большое число переменных, так как в интегралы войдут расстояния между данной молекулой и всеми остальными. Функция распределения не будет теперь «одночастичной функцией распределения», которая дает вероятность найти отдельную молекулу в некоторой точке (шестимерного) фазового пространства. Это будет «многочастичная функция распределения» всех частиц системы, которая дает вероятность одновременного нахождения первой ча-

стицы в точке 1 фазового пространства, второй частицы в точке 2, третьей — в точке 3 и т. д. Таким образом, хотя и возможно будет написать явное замкнутое выражение для функции распределения, задача точного вычисления чего-либо с ее помощью будет исключительно сложной. Вплоть до настоящего времени все попытки точного расчета свойств неидеальных газов, и в особенности жидкостей, имели только весьма скромный успех. Тем не менее распределение Больцмана остается в принципе основным физическим законом для ансамблей большого числа частиц, находящихся в равновесии.

Хотя многочастичная функция распределения большого числа частиц будет всегда больцмановского типа, есть очень важные одночастичные равновесные функции распределения, которые существенно отличны от больцмановской. Достаточно сказать здесь, что принцип Паули (гл. 22) и принцип неразличимости одинаковых частиц (гл. 26) ведут к корреляции между частицами, даже если мы не учитываем обычные силы взаимодействия между ними. Однако многочастичная функция распределения для всей системы опять-таки будет распределением Больцмана. Если нет обычных сил взаимодействия между частицами, можно установить явное выражение также и для одночастичной функции распределения, которая, однако, не будет теперь распределением типа Максвелла — Больцмана. В системе частиц, удовлетворяющих принципу Паули (например, газ свободных электронов) распределение будет так называемым распределением Ферми — Дирака (гл. 26). Для других квантовомеханических систем, как, например, газ фотонов, для которых принцип Паули неприменим, получается одночастичное распределение другого типа, которое называется распределением Бозе — Эйнштейна (гл. 26).

Задачи

9.1. Вычислить $\overline{v^2}$ с помощью распределения $f_1(v)$ для *модуля* скорости.

9.2. Найти $\bar{v}$.

9.3. Сравнить $\overline{(1/v)}$ с $1/\bar{v}$.

9.4. Используя распределение Максвелла для модуля скорости, показать, что $v_m = \sqrt{2\kappa T/m}$

9.5. Вычислить давление газа в атмосфере на некоторой высоте z, т. е. полный вес газа вертикального столба с основанием в 1 $см^2$, находящегося над этой точкой. Газ считать идеальным. Получить тот же результат с помощью барометрической формулы.

9.6. Определить температуру атмосферы (в среднем), если дано, что на высоте в 230 $км$ $\rho = 10^{-13}$ $г/см^3$.

9.7. Вычислить теплоемкости He и N_2 при 0°C в *кал/(г·град)* с помощью классического закона равнораспределения. Сравнить с табличными данными. Каково число степеней свободы для молекулы каждого газа?

9.8. Какова средняя кинетическая энергия (в *эв*) атома дейтерия при 10^7 °K? (Это та температура, которую надо достичь в термоядерном реакторе).

9.9. Некоторые химические реакции не начинаются, пока соударяющиеся молекулы не имеют энергию больше, чем определенная минимальная кинетическая энергия E_0. а) С помощью функции распределения определить число молекул, имеющих кинетическую энергию, превышающую E_0. б) Предполагая, что $E_0 \gg kT$, вычислить интеграл для случая а) приближенно. *Указание*: интегрируя по частям, показать, что

$$\int_{\xi_0}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \approx \frac{1}{2\xi_0} e^{-\xi_0^2},$$

так как

$$\int_{\xi_0}^{\infty} \frac{e^{-\xi^2}}{\xi^2} d\xi < \frac{1}{\xi_0^2} \int_{\xi_0}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi.$$

в) Если $E_0 = 30$ *ккал/моль*, то какое число молекул имеет бо́льшую энергию при 300°К? При 500°К? Во сколько раз возрастает скорость реакции, когда T увеличивается от 300 до 500°К?

9.10. Молекулы, которые вытекают в вакуум через малое отверстие в стенке сосуда, имеют среднюю энергию более высокую, чем средняя энергия молекулы газа внутри сосуда, равная $^3/_2 kT$. Причина состоит в том, что в соответствии с соотношением (7.3), молекулы, имеющие бо́льшую скорость, имеют и бо́льшую вероятность выхода. Для выходящей молекулы средние значения $^1/_2 mv_y^2$ и $^1/_2 mv_z^2$ равны, как обычно, $^1/_2 kT$, однако среднее значение v_x^2 надо вычислять с помощью формулы $v_x^2 F/\bar{F}$. Показать, что это вычисление ведет к полной средней энергии, равной $2kT$. *Указание*: показать сначала, что

$$\int_0^{\infty} \xi^3 e^{-\xi^2} d\xi = \frac{1}{2},$$

используя тот же самый математический прием, который был использован в § 9.3, и вычислить значение $\int_0^{\infty} \xi e^{-\xi^2} d\xi$, которое можно получить непосредственно.

9.11. Предположим, что два сосуда, которые поддерживаются при различных температурах T_1 и T_2, соединены друг с другом узким отверстием. В стационарном (устойчивом) случае потока числа частиц через отверстие не будет. Найти в этом случае: а) отношение плотностей n_1/n_2; б) отношение давлений P_1/P_2; в) скорость переноса энергии от сосуда с T_1 к сосуду с T_2, если $T_1 > T_2$.

9.12. Вычислить среднюю потенциальную энергию молекул, находящихся в изотермической атмосфере. Сравнить ее со средней кинетической энергией молекулы.

Литература для справок

1. Кикоин И. К. и Кикоин А. К., Молекулярная физика, Физматгиз, 1963.
2. Левич В. Г., Введение в статистическую физику, Гостехиздат, 1954.
3. Леонтович М. А., Введение в термодинамику, Гостехиздат, 1952.
4. Эпштейн П. С., Курс термодинамики, Гостехиздат, 1948.

Глава 10

Слабо ионизованные газы

До сих пор наше обсуждение ограничивалось электрически нейтральными газами. Если некоторые, или все молекулы в газе электрически заряжены, или ионизованы, то свойства газов во многом существенно меняются. Электрически нейтральный газ можно ионизовать, если оторвать по одному отрицательно заряженному электрону от некоторого числа нейтральных молекул, которые станут положительно заряженными ионами. Поэтому ионизованный газ обычно представляет смесь по крайней мере трех сортов частиц: электронов, однократно заряженных положительных ионов и нейтральных молекул. Иногда присутствуют и многократно заряженные ионы (молекулы, от которых оторвано более одного электрона), а также, если газ не одноатомный, могут присутствовать как атомные, так и молекулярные ионы. Некоторые нейтральные молекулы могут даже захватывать электроны, образуя отрицательно заряженные молекулярные ионы. Мы пренебрежем, однако, всеми этими усложнениями, так как важными обычно являются только три первоначально упомянутых сорта частиц.

Пусть n_+, n_-, n_0 *обозначают плотность числа положительных ионов, электронов и нейтральных молекул соответственно. Обычно выполняется условие* $|n_+ - n_-| \ll n_+$ *или*

$$n_+ \approx n_-, \tag{10.1}$$

так что газ в целом, в указанном макроскопическом смысле, можно приближенно считать нейтральным. Если в одной части объема, занимаемого газом, имеется избыток зарядов одного знака, а в другой части — избыток зарядов противоположного знака, то обязательно возникает электростатическое поле, которое заставляет двигаться заряды так, чтобы газ становился в среднем (макроскопически) нейтральным. Только в очень неоднородных областях на границах объема, занимаемого газом, где плотность заряженных частиц очень низка, может нарушаться условие нейтральности (10.1).

Так как свойства ионизованного газа существенно зависят от степени ионизации n_+/n_0, *то важно установить причины, которые определяют ее значение. Известно, что это*

отношение изменяется в пределах от 10^{-10} в слабом электрическом разряде до 10^{12} в солнечной короне.

Если электроны соударяются с нейтральными атомами чаще, чем с положительными ионами, то такой газ мы будем называть слабо ионизованным. С другой стороны, если преобладают электрон-ионные взаимодействия, то газ считается сильно ионизованным и называется плазмой (гл. 11). Степень ионизации, различающая эти случаи, зависит от температуры и в несколько меньшей степени от плотности газа. При заданной степени ионизации электрон-ионные взаимодействия относительно более важны при низких температурах, чем при высоких. Однако обычно газ, в котором степень ионизации больше, чем $\sim 10^{-3}$, можно считать сильно ионизованным при условии, что T будет порядка 10^3—10^4° K. Может показаться удивительным, что, когда в окружении электрона нейтральных атомов в 1000 раз больше, чем ионов, взаимодействия электронов с ионами могут оказаться более существенными, чем взаимодействия электронов с нейтральными атомами. Причина этого заключается в том, что кулоновские взаимодействия являются дальнодействующими, и поэтому электрон может «чувствовать» немногие удаленные от него ионы сильнее, чем многочисленные и близкие к нему нейтральные атомы. В этой главе мы ограничимся рассмотрением главным образом слабо ионизованных газов, когда $n_+/n_0 < 10^{-3}$, хотя выводы § 10.1 в действительности применимы для любого значения степени ионизации.

§ 10.1. Ионизация газа, находящегося в термодинамическом равновесии

Экспериментально установлено, что для того, чтобы оторвать электрон от атома или от молекулы, требуется определенная энергия

$$E_i = e\Phi_i, \tag{10.2}$$

называемая *энергией ионизации*. Величина Φ_i, известная как *ионизационный потенциал*, имеет обычно значения порядка 10 *в*. Так, например, ионизационный потенциал атома водорода равен 13,6 *в*, в то время как у цезия он имеет низкое значение 3,9 *в*, а у гелия — высокое значение 24,5 *в*. Причины этих различий будут выявлены в гл. 22 и 23. Значения ионизационных потенциалов, будучи выражены в вольтах, кажутся совсем скромными, но если приравнять энергию ионизации средней кинетической энергии $^3/_2 kT$ молекулы газа, находящегося в термодинамическом равновесии, то мы увидим, что средняя энергия 1 *эв* $= 1{,}6 \cdot 10^{-12}$ *эрг* соот-

ветствует температуре 7730 °К:

$$T = \frac{1\ эв}{\frac{3}{2}k} = \frac{2 \cdot 1{,}60 \cdot 10^{-12}\ эрг}{3 \cdot 1{,}38 \cdot 10^{-16}\ эрг/град} = 7730\,°\text{К}.$$

Поэтому очевидно, что только при очень высоких температурах средняя кинетическая энергия частиц газа или энергия *теплового движения*, которая может служить мерой температуры тела, превосходит энергию ионизации. Тем не менее, даже если энергия теплового движения много меньше энергии ионизации, всегда найдется некоторое число частиц на высокоэнергетическом конце распределения Максвелла — Больцмана, которые обладают кинетической энергией, достаточной для того, чтобы вызвать ионизацию при соударениях с другими молекулами. Этот способ ионизации называется *термоионизацией*. При повышении температуры число таких частиц, обладающих высокой энергией, увеличивается, и поэтому степень тепловой ионизации газа возрастает с температурой.

При соударениях, ведущих к ионизации, образуются ионы и электроны, число которых, однако, может уменьшаться вследствие противоположного процесса *рекомбинации*. Как ясно из самого названия, этот процесс состоит в том, что электрон и ион, взаимодействуя, образуют нейтральный атом или молекулу. *Равновесной степенью ионизации* является такая, при которой скорость ионизации равна скорости рекомбинации. С помощью методов статистической физики, аналогичных тем, которые мы использовали в гл. 9, можно получить выражение для *равновесной степени ионизации*, не рассматривая сложные детали процессов ионизации и рекомбинации.

В гл. 9 мы установили, что вероятность нахождения системы, которая имеет энергию E, в единице объема фазового пространства пропорциональна больцмановской экспоненте $e^{-\frac{E}{kT}}$. В настоящий момент мы интересуемся только относительными плотностями чисел частиц при данной температуре и нас не интересуют скорости этих частиц. Для того чтобы подсчитать вероятность Π нахождения в единице объема частицы с любой скоростью, мы должны проинтегрировать больцмановскую экспоненту по всему пространству скоростей точно таким же образом, как мы делали это при получении барометрической формулы:

$$\Pi \sim \int_{-\infty}^{+\infty} dv_x \int_{-\infty}^{+\infty} dv_y \int_{-\infty}^{+\infty} dv_z\, e^{-\frac{E}{kT}} \sim \int_0^{\infty} dv \cdot v^2 e^{-\frac{E}{kT}}.$$

При термодинамическом равновесии плотность числа частиц пропорциональна П:

$$n \sim \int_0^\infty dv \cdot v^2 e^{-\frac{E}{kT}}.$$

Вероятность найти в единице объема свободную пару электрон —ион должна равняться произведению (независимых) вероятностей найти каждую частицу:

$$\Pi_{+-} = \Pi_+ \Pi_- \sim \int_0^\infty dv_- \cdot v_-^2 e^{-\frac{m_- v_-^2}{2kT}} \int_0^\infty dv_+ \cdot v_+^2 e^{-\frac{m_+ v_+^2}{2kT}} \sim (kT)^3.$$

Вероятность Π_0 найти нейтральную молекулу, т. е. пару электрон — ион в связанном состоянии с произвольной кинетической энергией $1/2\, m_0 v_0^2$, но с фиксированной потенциальной энергией $V = -E_i$, будет пропорциональна

$$\Pi_0 \sim \int_0^\infty dv_0 \cdot v_0^2 e^{-\frac{m_0 v_0^2}{2kT} + \frac{E_i}{kT}} \sim (kT)^{3/2} e^{\frac{E_i}{kT}}.$$

Так как в состоянии термодинамического равновесия вероятности пропорциональны плотностям числа частиц, то мы имеем

$$\frac{n_+ n_-}{n_0} \sim \frac{\Pi_+ \Pi_-}{\Pi_0} \sim (kT)^{3/2} e^{-\frac{E_i}{kT}}.$$

Точное значение постоянной пропорциональности можно вычислить только с помощью квантовой механики. Если использовать это значение, мы получим так называемое *уравнение Саха*

$$\frac{n_+ n_-}{n_0} = \left(\frac{2\pi m_- kT}{h^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{E_i}{kT}}. \qquad (10.3)$$

Здесь h есть постоянная Планка, и мы предположили, что $m_+ = m_0$. Отсюда видно, что степень ионизации пропорциональна

$$\frac{n_+}{n_0} \sim \frac{T^{3/2}}{n_-} e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

или при $n_+ = n_-$

$$\frac{n_+}{n_0} \sim \frac{T^{3/4}}{n_0^{1/2}} e^{-\frac{E_i}{2kT}}. \qquad (10.4)$$

Легко понять, почему степень ионизации возрастает с повышением температуры. Когда температура T повышается, то появляется все больше частиц, которые имеют кинетическую энергию, превышающую E_i, и тем самым могут приводить к ионизации при соударениях с другими частицами. Поэтому степень ионизации быстро возрастает с ростом T. С другой стороны, для процесса рекомбинации не требуется никакой энергии, даже, напротив, в этом процессе высвобождается энергия ионизации E_i. Поэтому нет никаких причин ожидать, что степень рекомбинации подобно степени ионизации будет экспоненциально расти с ростом T. В итоге мы получаем быстрое возрастание степени ионизации с ростом температуры, что и отражено в уравнении (10.4).

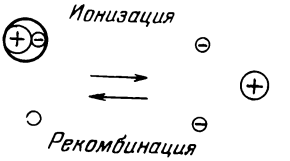


Рис. 10.1.

То обстоятельство, что степень ионизации увеличивается при уменьшении плотности n_0 газа, является менее очевидным. Причина этого состоит в том, что в процессе рекомбинации должно участвовать больше частиц, чем в процессе ионизации. Так, например, ионизация при столкновении электрона с нейтральной молекулой является результатом взаимодействия двух тел. Скорость ионизации при таком процессе пропорциональна $n_- n_0$, т. е. произведению плотностей чисел электронов и нейтральных молекул. Обратный этому процесс рекомбинации происходит уже при взаимодействии трех тел (рис. 10.1), когда один ион и два электрона должны взаимодействовать одновременно. (Как следует из задачи 10.1, третья частица действительно нужна для того, чтобы обеспечить выполнение законов сохранения энергии и импульса.) Поэтому скорость рекомбинации при таком процессе должна быть пропорциональна $n_-^2 n_+$. Таким образом, при данном значении степени ионизации скорость ионизации пропорциональна n_0^2, а скорость рекомбинации пропорциональна n_0^3. Другими словами, при уменьшении n_0 скорость рекомбинации падает быстрее, чем скорость ионизации, что и ведет к повышению степени ионизации. В качестве примера рассмотрим горячую газообразную звездную туманность при температуре 6000° К и с очень низкой плотностью полного числа частиц порядка 10^3 *частиц/см*^{3}. Как следует из уравнения Саха, эти газы, по существу, полностью ионизованы (степень ионизации n_+/n_0 порядка 10^7), в то время как на солнечной поверхности при той же самой температуре, но при плотности полного числа частиц 10^{16} *см*$^{-3}$ степень ионизации составляет только 10^{-3}. Проиллюстрируем зависимость, которую дает уравнение Саха, на примере газообразного водорода. На рис. 10.2 для двух случаев: $n_+/n_0 = 1$ и $n_+/n_0 = 100$ приведены графики зависимости

плотности числа ионов n_+ (в логарифмической шкале) от температуры, соответствующие уравнениям (10.3) и (10.1).

Мы обсуждали вопрос о степени ионизации газа, предполагая, что газ находится в состоянии термодинамического равновесия. В этом случае достижение заметной ионизации требует очень высоких температур и малых плотностей газа. Простое нагревание газа в печи бывает обычно недостаточным. При хорошем вакууме ($n_0 \approx 10^{10}$ *см*$^{-3}$) и в самой горячей печи ($T \approx 3 \cdot 10^3$ °K) степень ионизации будет только $\sim 10^{-13}$ для водорода (в то время как для цезия ~ 20). Так как достигнуть высокой степени ионизации с помощью простого нагревания трудно, то большинство газов ионизуется в лабораторных условиях с помощью пропускания через газ электрического тока, как, например, в случае лампы дневного света. Такой газ не находится в состоянии термодинамического равновесия, так как в газе имеется некоторый суммарный поток заряженных частиц. Равновесное же распределение Максвелла изотропно в пространстве скоростей и поэтому не допускает никаких потоков. Тем не менее если отклонение от равновесия невелико, как, например, в высоковольтной дуге, то можно считать, что уравнение Саха еще остается в некотором приближении справедливым.

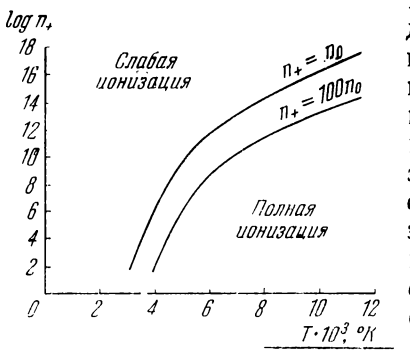


Рис. 10.2.

Если электрический ток в газе вызван наложением внешнего электрического поля (см. § 10.3), то механизм процесса ионизации еще может быть термоионизацией, которая описана в настоящем параграфе. Именно так и будет в случае слабых электрических полей и (или) малой средней длины свободного пробега, т. е. большой плотности, когда кинетическая энергия, приобретенная заряженной частицей во время ее «свободного падения» в электрическом поле между двумя последовательными соударениями, будет мала по сравнению с энергией ионизации. Тогда кинетическая энергия, приобретенная заряженной частицей при ее ускорении в электрическом поле, будет распределяться посредством упругих столкновений между всеми частицами газа. В результате газ нагревается *джоулевым теплом*, которое обусловлено обычным омическим сопротивлением газа. Это явление полностью аналогично хорошо известному эффекту омического нагрева твердых проводников. В свою очередь повышение температуры, как мы уже видели, ведет к увеличению тепловой ионизации.

Если уменьшение потенциальной энергии заряженной частицы в электрическом поле на средней длине свободного пробега сравнимо с энергией ионизации, то частица может между двумя последовательными соударениями приобрести кинетическую энергию, достаточную для того, чтобы вызвать ионизацию при соударении. Эта так называемая *ударная ионизация* играет важную роль в разрядах при низком давлении, когда средняя длина свободного пробега велика. В некоторых экспериментах случается так, что в одной области газа преобладает тепловая ионизация, в то время как в других — ударная. В тех областях, где преобладает ударная ионизация, газ далек от состояния термодинамического равновесия и не следует ожидать, что уравнение Саха будет в какой бы то ни было мере справедливым.

§ 10.2. Диффузионный ток

Наиболее важным отличием ионизованного газа от нейтрального является то, что в ионизованном газе может протекать электрический ток, который, конечно, представляет собой не что иное, как явление переноса электрически заряженных частиц. Действительно, так как ионизованный газ содержит свободно двигающиеся электроны и положительные ионы, то он должен быть проводником. Мы уже видели в гл. 8, что посредством диффузии частицы могут переноситься в некотором направлении. Если в данной части объема, занимаемого ионизованным газом, имеется повышенная плотность числа заряженных частиц, то частицы будут быстро диффундировать в области с более низкой плотностью.

Согласно уравнению (8.28) плотность диффузионного потока числа частиц J в направлении оси x равна

$$J = -D dn/dx.$$

Здесь D — коэффициент диффузии заряженных частиц плотности n через газ, состоящий в основном из нейтральных частиц плотности n_0. Мы будем пользоваться именно этим уравнением вместо уравнений для положительно и отрицательно заряженных частиц:

$$J_+ = -D_+ dn_+/dx, \quad J_- = -D_- dn_-/dx,$$

опуская индексы тогда, когда в них не будет необходимости. В большинстве наших примеров $n_+ = n_- = n$. Даже в этом случае, вообще говоря, $D_+ \neq D_-$. (Для слабо ионизованных газов можно предположить, что ионы и электроны диффундируют независимо.) Коэффициент диффузии D определяется уравнением (8.29) и равен приближенно $\frac{1}{3}\bar{c}L$, где L — средняя длина свободного пробега

заряженной частицы между двумя последовательными соударениями ее с нейтральными молекулами. (Вообще говоря, $L_+ \neq L_-$.)

Если частицы имеют заряд q, то плотность электрического тока j, обусловленная плотностью диффузионного потока числа частиц J, равна

$$j = qJ = -qDdn/dx. \tag{10.5}$$

Уравнение (10.5) справедливо как для электронов ($q = -e$), так и для положительных ионов ($q = +e$). Однако вклад ионов в электрический ток обычно пренебрежимо мал в случае газов. Это следует из уравнения (8.29) для коэффициента диффузии D. Средняя длина свободного пробега для электронов и тяжелых ионов будет приближенно одного и того же порядка: $L_+ \approx L_-$. Сами по себе электроны имеют, по существу, диаметр, равный нулю, и поэтому полное сечение рассеяния определяется полностью диаметром нейтральных молекул, с которыми сталкиваются электроны. С другой стороны, если газ находится в термодинамическом равновесии, то среднее значение модуля скорости электронов много больше средней скорости тяжелых ионов. Действительно, и для электронов, и для ионов мы можем приближенно использовать значение $\bar{v} \approx \sqrt{3kT/m}$, и поэтому из уравнения (8.29) мы получаем

$$D_-/D_+ \approx (m_+/m_-)^{1/2}. \tag{10.6}$$

Так как масса электрона приблизительно в 2000 раз меньше массы протона, то даже для наиболее легкого газа H_2 средняя скорость электрона примерно в $\sqrt{4000} \approx 60$ раз больше средней скорости положительного иона. Для аргона средняя скорость электрона примерно в 300 раз больше средней скорости иона. Следовательно, основную часть тока обусловливают свободные электроны. Если газ в целом электрически нейтрален, то числа отрицательных и положительных ионов равны, однако движение электронов обусловливает появление электрического тока, в то время как положительные ионы, по существу, остаются в покое.

§ 10.3. Проводимость

Ясно, что, кроме электрического тока, вызванного диффузией, в ионизованном газе будет возникать ток при наложении внешнего электрического поля. Электрическое поле заставляет положительные заряды двигаться в направлении поля, а отрицательные — в противоположном направлении, создавая тем самым ток, направление которого совпадает с направлением поля. Мы определим *коэффициент электропроводности* (*проводимость*) газа σ как отнесенную к единице напряженности электрического поля плотность элек-

трического тока

$$\mathbf{j} \equiv \sigma \mathbf{E}, \tag{10.7}$$

возникающего в газе при наложении внешнего поля $\mathbf{E}$. И в этом случае, если учитывать два сорта носителей заряда, мы имеем $\mathbf{j}_+ = \sigma_+ \mathbf{E}$, $\mathbf{j}_- = \sigma_- \mathbf{E}$, и наблюдаемое значение проводимости равняется сумме $\sigma_+ + \sigma_-$. (В газе обычно σ_+ бывает пренебрежимо мало.) Пусть поле $\mathbf{E}$ направлено вдоль оси x. Так как в этом случае напряженность электрического поля $\mathbf{E}$ выражается через потенциал поля Φ следующим образом:

$$\mathbf{E} = -\frac{d\Phi}{dx}\mathbf{e}_x,$$

то уравнение, определяющее σ, запишется в виде

$$j = -\sigma \frac{d\Phi}{dx}. \tag{10.8}$$

Отсюда видна близкая аналогия σ с другими коэффициентами переноса, определяемыми уравнениями (8.14), (8.25) и (8.28).

В газах обычно ток электронов преобладает по сравнению с током положительных ионов. Силы, действующие на электрон и однократно заряженный ион, по модулю одинаковы, однако вследствие того, что электроны обладают меньшей массой, они ускоряются под действием поля быстрее и пробегают среднюю длину свободного пробега в значительно более короткое время, чем ионы. Поэтому средняя скорость в направлении поля будет у электронов значительно больше. Всегда, следовательно, в любом ионизованном газе, где выполняется условие нейтральности $n_+ \approx n_-$, ток обусловлен главным образом электронами.

Если имеются одновременно внешнее электрическое поле и градиент плотности числа носителей заряда, то полная плотность электрического тока получается сложением уравнений (10.5) и (10.8):

$$j = -\sigma \frac{d\Phi}{dx} - qD\frac{dn}{dx}. \tag{10.9}$$

Так как значения обоих токов, связанных с градиентом плотности (10.5) и с градиентом потенциала внешнего поля (10.8) ограничены одним и тем же явлением, а именно, столкновениями с нейтральными атомами, то можно ожидать, что коэффициенты σ и D будут пропорциональны друг другу. Мы сейчас увидим, что это действительно так. Предположим, что газ помещен во внешнее электрическое поле таким образом, что никакого тока нет. Эту ситуацию можно осуществить, по крайней мере в принципе, если поместить газ между пластинками конденсатора и принять меры к предотвращению нейтрализации ионов на электродах. Если никакого тока не течет, то

согласно уравнению (10.9) будет

$$0 = -\sigma \frac{d\Phi}{dx} - qD \frac{dn}{dx}.$$

Это уравнение означает просто, что подбирается такой градиент плотности, что электрический ток, возникающий при наложении внешнего поля (градиента потенциала внешнего поля), точно компенсируется диффузионным током, текущим в противоположном направлении, так что в случае равновесия полный ток равен нулю (рис. 10.3). Необходимый градиент плотности равен

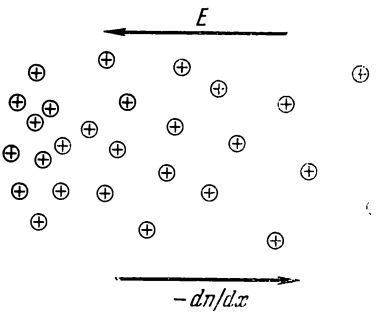


Рис. 10.3.

$$\frac{dn}{dx} = -\frac{\sigma}{qD} \frac{d\Phi}{dx}. \quad (10.10)$$

Можно ожидать, что равновесная функция распределения заряженных частиц во внешнем электрическом поле будет распределением Больцмана (9.21), в котором потенциальную энергию частицы следует положить равной $q\Phi$. После интегрирования по пространству скоростей мы получаем, по аналогии с формулой (9.22), распределение в конфигурационном пространстве в следующем виде:

$$f_2(x) = A'' e^{-\frac{q\Phi}{kT}}.$$

Плотность числа заряженных частиц, находящихся в состоянии термодинамического равновесия, будет пропорциональна функции $f_2(x)$, так что

$$n(x) = n' e^{-\frac{q\Phi}{kT}}. \quad (10.11)$$

Здесь n' — постоянная, которая просто равна плотности числа заряженных частиц в точке, где $\Phi = 0$. Полученная формула для плотности аналогична барометрической формуле (9.22), только здесь частицы распределяются неоднородно в пространстве под действием электрического поля, а не поля силы тяжести.

Дифференцируя соотношение (10.11) получаем

$$\frac{dn}{dx} = n' \left(-\frac{q}{kT}\right) e^{-\frac{q\Phi}{kT}} \quad \frac{d\Phi}{dx} = -\frac{nq}{kT} \frac{d\Phi}{dx}.$$

Если теперь приравнять коэффициенты, стоящие перед $d\Phi/dx$ в

этом соотношении и в уравнении (10.10), то мы получим *соотношение Эйнштейна*

$$\sigma = \frac{nq^2}{kT} D. \tag{10.12}$$

Очевидно, что это соотношение будет справедливо для любых носителей заряда, которые находятся в состоянии термодинамического равновесия во внешнем электрическом поле и описываются распределением Больцмана, если подставить в него плотность числа частиц и заряд, соответствующие данному носителю заряда. Видно, кроме того,что проводимость σ пропорциональна не только D, но и плотности числа заряженных частиц n.Если заряженных частиц вообще нет и $n = 0$, то проводимость обращается в нуль, как, очевидно, и следует ожидать. Отметим также, что в газе вследствие того, что $D \sim L \sim 1/n_0$, проводимость σ пропорциональна степени ионизации $n_+/n_0 \approx n_-/n_0$ и *не зависит от давления*, если не учитывать зависимость от давления степени ионизации.

§ 10.4. Газовый разряд

Чтобы дать некоторые представления о численном значении проводимости газа, мы опять используем пример аргона и предположим, что степень ионизации n/n_0 мала. Проводимость выражают в единицах системы МКС, так как обычно сопротивление измеряют в омах. Поэтому полученное нами ранее (§ 8.6) значение коэффициента диффузии атомов или ионов при нормальных условиях запишется в следующем виде:

$$D_+ = 0{,}25\ см^2/сек = 2{,}5 \cdot 10^{-5}\ м^2/сек.$$

Практически наиболее интересные случаи проводимости осуществляются при более низких давлениях, однако, как уже отмечалось в предыдущем параграфе, при фиксированной степени ионизации (n/n_0) проводимость σ оказывается не зависящей от давления. Как следует из соотношения (10.6), средняя скорость электронов, а, следовательно, и их коэффициент диффузии будут приблизительно в 300 раз больше, или

$$D_- \approx 7 \cdot 10^{-3}\ м^2/сек.$$

Подставив значения $q = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\ к$, $k = 1{,}38 \cdot 10^{-23}\ дж/град$ и $T = 300°\text{K}$ в уравнение (10.12), получим

$$\sigma \approx \sigma_- \approx 10^6\, n/n_0\ (ом \cdot м)^{-1}.$$

При этом мы использовали значение n_0

$$n_0 = 3 \cdot 10^{19}\ см^{-3} = 3 \cdot 10^{25}\ м^{-3},$$

В справочниках значения электропроводности приводятся обычно в «смешанных» единицах $(ом \cdot см)^{-1}$. В этих единицах

$$\sigma \approx 10^4 \, n/n_0 \; (ом \cdot см)^{-1}.$$

При значении $n/n_0 = 0{,}01\%$, т. е. около наибольшего значения степени ионизации, при котором изложенная здесь теория еще применима, мы получаем $\sigma \approx 1 \; (ом \cdot см)^{-1}$. Это уже заметная величина, хотя значение ее еще в миллион раз меньше, чем типичные значения проводимости для металлов, имеющие порядок $10^6 \; (ом \cdot см)^{-1}$.

Полученное значение проводимости можно использовать для грубой оценки в реальном случае *газового разряда*, известными примерами которого являются лампа дневного света и неоновые рекламные трубки. Если разряд происходит в трубке длиной $1 \, м$ с поперечным сечением $1 \, см^2$, а $\sigma = 1 \; (ом \cdot см)^{-1}$, то *сопротивление* R будет равно

$$R = 100/(\sigma \cdot 1) = 100 \, ом.$$

Сопротивление в газовых разрядах должно иметь значения этого порядка, однако на деле ситуация значительно сложнее, чем мы ее здесь описали. Сущность усложнений не в том, что нарушается соотношение Эйнштейна (10.12), а скорее в том, что степень ионизации n/n_0 не является постоянной величиной. Действительно, как мы уже видели в § 10.2, степень ионизации может зависеть от величины протекающего тока вследствие нагревания газа джоулевым теплом, а также от величины электрического поля через механизм ионизации полем. Так как σ зависит от степени ионизации, которая в свою очередь зависит от тока или приложенного напряжения, то зависимость (10.7) тока от приложенного напряжения в случае газового разряда не будет линейной, т. е. в этом случае проводимость σ уже не будет постоянной величиной, но будет функцией приложенного напряжения (или тока).

При заданном значении степени ионизации проделанные нами ранее вычисления будут приближенно верными. Однако для того, чтобы найти правильную зависимость тока в газовом разряде от величины приложенного напряжения, надо суметь вычислить степень ионизации как функцию тока. Подобные вычисления очень сложны. Во-первых, соударения являются частично *неупругими*, в то время как мы считали их упругими. Вывод о неупругой природе соударений можно сделать на основании того, что атомы, с которыми сталкиваются электроны, испускают свет. Как мы увидим в гл. 18, часть кинетической энергии электрона при столкновении с атомом поглощается атомом, который впоследствии испускает поглощенную энергию в виде света. Во-вторых, сами условия *поддержания ионизации* зависят от столкновений (§ 10.1),так как электрон либо может выбить дополнительный электрон из нейтрального атома, с которым он

сталкивается, либо же рекомбинировать с положительным ионом, образуя нейтральный атом. Эти условия будут особенно сложными в областях, близких к электродам, где условие нейтральности (10.1) обычно не выполняется, и значительная доля падения напряжения в газообразной трубке приходится в действительности на эти области. Как мы уже отмечали, степень ионизации зависит от протекающего тока, так что проводимость также зависит от тока. Поэтому ток в газовом разряде зависит нелинейно от приложенного напряжения. На опыте действительно наблюдается нелинейная зависимость довольно сложного вида.

§ 10.5. Подвижность

Так как согласно уравнению (10.12) проводимость пропорциональна плотности числа носителей заряда, то в некоторых случаях удобнее ввести в рассмотрение величину, которая не зависит от плотности. Эта величина называется *подвижностью*. Если носители заряда имеют ненулевую среднюю скорость $\mathbf{u}$ (заметьте, что сейчас речь идет о средней скорости в некотором выделенном направлении, а *не* о среднем значении модуля скорости), которую часто называют *скоростью дрейфа* или гидродинамической скоростью, то плотность потока числа частиц (§ 10.2) равна $\mathbf{J} = n\mathbf{u}$. Плотность электрического тока поэтому равна

$$\mathbf{i} = q\mathbf{J} = qn\mathbf{u}. \tag{10.13}$$

Если дрейф (упорядоченное течение) носителей заряда обусловлен электрическим полем E, то из уравнения (10.7) следует, что

$$\sigma\mathbf{E} = qn\mathbf{u}. \tag{10.14}$$

Подвижность μ определяется как скорость дрейфа на единицу напряженности электрического поля:

$$\mathbf{u} = \mu\mathbf{E}, \tag{10.15}$$

и, сравнивая соотношения (10.15) и (10.14), мы получаем

$$\sigma = qn\mu. \tag{10.16}$$

Следовательно, подвижность носителя заряда есть также «проводимость на единицу плотности заряда» этого носителя. Вводя подвижность в соотношение Эйнштейна (10.12), получим

$$\mu = qD/kT, \tag{10.17}$$

т. е. действительно подвижность не зависит от n. В отличие от проводимости подвижность зависит от полного давления вследствие зависимости от средней длины свободного пробега, так как $D \approx \approx \bar{v}L$, $L \sim 1/n_0$ (гл. 8), но не зависит от степени ионизации.

Подставляя в соотношение (10.17) значения D_- и T при нормальных условиях (§ 10.4), мы получим для подвижности электронов значения

$$\mu_- \approx 0{,}3\ м^2/(в \cdot сек) = 3000\ см^2/(в \cdot сек).$$

Подвижность положительных ионов аргона будет в 300 раз меньше:

$$\mu_+ \approx 0{,}001\ м^2/(в \cdot сек) = 10\ см^2/(в \cdot сек).$$

Единица измерения подвижности в системе МКС, как следует из уравнения (10.15), будет $(м/сек)/(в/м) = м^2/(в \cdot сек)$. В литературе чаще используются смешанные единицы измерения подвижности: $(см/сек)/(в/см) = см^2/(в/сек)$. Приведенные грубые оценки для μ_+ и μ_- немного завышены, но дают правильный порядок величин. При более низком давлении, скажем, в 100 раз меньше атмосферного, значения D и μ будут, разумеется в 100 раз больше как для электронов, так и для положительных ионов (гл. 8).

Полученное нами значение подвижности электронов в газообразном аргоне больше значений подвижности электронов в металлах, где ток также обусловлен движением электронов (ч. IV). Причина того, что металлы все же обладают большей проводимостью, заключается в том, что в металлах значительно больше плотность электронов (см. уравнение (10.16)).

Задачи

10.1 Показать, что свободный электрон и свободный ион не могут рекомбинировать, если при этом нет третьей частицы. *Указание*: выписать уравнения для законов сохранения энергии и импульса.

10.2. Подсчитать степень ионизации (n_+/n_0) для газообразных цезия, водорода и гелия при $T = 10^4$ °K. Считать, что $n_+ + n_- = 10^{15}\ см^{-3}$ и $n_+ = n_-$.

10.3. Выбрать разумные значения коэффициента диффузии D и оценить проводимость паров цезия при давлении 10^{-6} *мм рт. ст.* и температуре $T = 300$ °K. Проделать то же самое для того же самого давления и $T = 1500$ ° K *Указание*: использовать соотношение Эйнштейна и уравнение Саха.

Литература для справок

1. Арцимович Л. А., Элементарная физика плазмы, Атомиздат, 1963.
2 Грановский В. Л., Электрический ток в газе, т. I, Общие вопросы электродинамики газов, Гостехиздат, 1952.

Глава 11

Свойства плазмы

Когда степень ионизации газа настолько высока, что динамическое поведение газа определяется электромагнитными силами взаимодействия между частицами, свойства такой среды существенно отличаются от свойств газа нейтральных частиц. Такой сильно ионизованный газ заслуживает особого наименования и был назван И. Лэнгмюром (1929 г.) плазмой.

В противоположность слабо ионизованному газу в плазме наибольшую роль играют взаимодействия между заряженными частицами, т. е. взаимодействия электрон — электрон, электрон — ион и ион — ион. Нейтральные молекулы здесь играют ничтожную роль и при объяснении многих свойств плазмы ими можно полностью пренебречь. Разумеется, такое пренебрежение оправдано, если газ полностью ионизован, однако вследствие дальнодействующей природы кулоновских сил оно будет служить хорошим приближением даже в случае таких низких степеней ионизации, как 10^{-3}. В этой главе мы будем поэтому полностью игнорировать присутствующие нейтральные молекулы и рассматривать плазму как полностью ионизованный газ.

§ 11.1. Состояние плазмы

В некотором смысле плазма представляет нормальное состояние вещества. Только в очень нетипичных областях Вселенной, таких как, например, Земля, преобладают твердые, жидкие состояния и состояния нейтральных газов. Бóльшая часть вещества во Вселенной или достаточно нагрета (например, звезды) или достаточно разрежена (например, вещество в межзвездном пространстве) и потому в соответствии с уравнением (10.3) будет очень сильно ионизована. Если мы вернемся «ближе к дому», то найдем, что внешний слой земной атмосферы, называемый *ионосферой*, также представляет собой ионизованный газ, который имеет большое значение для распространения радиоволн. За ионосферой следует область, которую теперь называют *магнитосферой* и в которой с помощью недавних запусков искусственных спутников были открыты *радиационные пояса Ван Аллена* (§ 11.6), представляющие плазму частиц высокой энергии, по-видимому, захваченных магнитным полем Земли. К магнитосфере

можно отнести область, окружающую Землю и ее атмосферу, причем в этой области величина магнитного поля Земли значительно превышает величину общего межпланетного магнитного поля. Считается, что радиус этой области достигает порядка десяти земных радиусов. На магнитосферу и ионосферу очень сильно влияют *вспышки на Солнце* (фото I и II) — короткоживущие «горячие пятна», которые внезапно появляются на солнечной поверхности и сопровождаются испусканием громадного числа частиц высокой энергии. Такое возмущение на Солнце распространяется обычно через межпланетную плазму до Земли в течение одного или двух дней, где оно может вызвать такие удивительные явления, как *северные сияния* и *магнитные бури*.

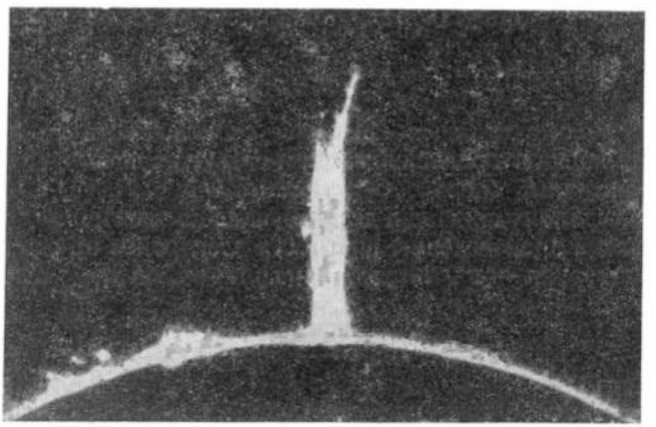
Даже на поверхности Земли теперь легко получают плазменное состояние. Из многих способов следует отметить установки для термоядерных реакций. Возможное использование плазмы в термоядерных реакторах и в двигателях ракет для межпланетных рейсов внезапно пробудило большой технический и научный интерес к изучению плазменного состояния.

Плазма будет удовлетворять макроскопическому условию нейтральности (10.1)

$$n_+ \approx n_- \approx n,$$

и в состоянии термодинамического равновесия при некоторой температуре T оба сорта частиц будут описываться функциями распределения Максвелла. Поэтому состояние такой плазмы можно полностью описать двумя параметрами: n и T. Мы выясним в § 11.3, что в плазме любая частица взаимодействует одновременно с большим числом других частиц. Таким образом, при изучении плазмы мы встречаемся с настоящей «проблемой многих тел» в том смысле, что для статистического описания свойств такой среды следует использовать многочастичную функцию распределения, о которой мы говорили в конце гл. 9. Однако взаимодействия между частицами, составляющими плазму, слабы и частично компенсируют друг друга, так как $n_+ \approx n_-$. Поэтому средняя потенциальная энергия некоторой частицы в поле остальных частиц плазмы намного меньше, чем средняя кинетическая энергия $^3/_2 kT$ этой частицы. В этом смысле можно считать частицы почти свободными и приближенно будет правильно, если мы пренебрежем потенциальной энергией в выражении для многочастичной функции распределения Больцмана. Именно поэтому мы и можем для статистического описания поведения частиц в плазме использовать одночастичные функции распределения Максвелла. Это не означает, что мы считаем, что частицы в плазме полностью некоррелированы. В действительности они коррелированы через макроскопическое условие нейтральности. Только в том случае, когда это условие выполняется, средняя потенциальная

I. Вспышка на Солнце (фотография обсерватории Париж — Медон).



II. Выброс плазмы с Солнца во время вспышки.

энергия частицы будет мала по сравнению со средней кинетической энергией. Области ионизованного газа, в которых нарушается условие нейтральности, нельзя рассматривать как собственно плазму. Так, переходный слой между плазмой и твердым телом, в котором $n_- \neq n_+$, называется *экранирующим слоем* и будет рассмотрен в § 11.5. В этом слое средние кинетическая и потенциальная энергии частицы становятся сравнимыми по величине.

Макроскопическое условие нейтральности $n_+ \approx n_-$ определяет одно из наиболее важных свойств плазмы. Исследуя вопрос о том, на каких расстояниях и для каких интервалов времени условие нейтральности может быть нарушено, мы придем к понятиям фундаментальной частоты и фундаментальной длины, которые устанавливают естественную шкалу времени и длины в плазме.

§ 11.2. Плазменные колебания

Если электроны в плазме смещены по отношению к ионам, то возникает электрическое поле, которое стремится вернуть электроны в их равновесные положения. Рассмотрим однородный слой плазмы толщины l и сместим все электроны на расстояние x (рис. 11.1) В результате мы получим нечто напоминающее плоский конденсатор, напряженность электрического поля между пластинами которого, как мы помним, равняется произведению поверхностной плотности заряда на 4π (если мы пользуемся системой единиц МКС, то надо еще умножить на $1/\varepsilon_0$). Поверхностная плотность заряда, очевидно, равна en_-x, и поэтому напряженность поля в направлении оси x равна

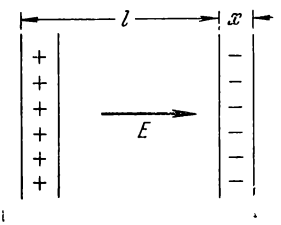


Рис. 11.1.

$$E = 4\pi e n_- x.$$

Это поле действует одновременно и на электроны, и на ионы, но вследствие их много большей массы ионы, по существу, остаются в покое. Электроны, однако, будут двигаться.

Сила на единицу площади, действующая на электроны в слое толщины l, равна произведению плотности электронов на единицу площади $n_- l$ на заряд $-e$ электрона и на напряженность электрического поля:

$$F = (-en_- l)E = -4\pi e^2 n_-^2 l x = -Kx.$$

Здесь $K \equiv 4\pi e^2 n_-^2 l$. Эта сила действует на массу всех электронов, приходящихся на единицу площади, $M = n_- m_- l$. По второму

закону Ньютона мы имеем

$$M\frac{d^2x}{dt^2} = -Kx.$$

В этом уравнении мы узнаем уравнение для одномерного гармонического осциллятора. В гл. 4 мы получили выражение для круговой частоты колебаний $\omega = \sqrt{K/M}$. Подставляя сюда приведенные выше значения для K и M, мы видим, что плазма колеблется с круговой частотой

$$\omega_p = \left(\frac{4\pi n_- e^2}{m_-}\right)^{1/2}, \tag{11.1}$$

которая называется *плазменной частотой*. Это — характеристическая частота плазмы. Как только газ электронов незначительно смещается по отношению к газу ионов, газ электронов начинает колебаться с данной характеристической частотой вперед и назад под действием возвращающей кулоновской силы со стороны ионов. Разумеется, со временем столкновения электронов с ионами, учетом которых мы здесь пренебрегли, приведут к затуханию колебаний.

Период колебаний (гл. 4) равняется $P = 2\pi/\omega_p$, и так как время возвращения от положения максимального смещения к равновесному положению равняется четверти периода, то мы видим, что плазма восстанавливает нарушения зарядовой нейтральности за времена порядка ω_p^{-1}. Эту величину следует рассматривать как характеристическую единицу времени для плазмы. Для большинства видов плазмы это очень малая величина. Для плазмы, полученной в лабораторных условиях, порядок величины ω_p^{-1} заключен в пределах от 10^{-9} *сек* до 10^{-13} *сек* (см. рис. 11.5).

Колебания плазмы отличаются от волнового процесса (гл. 16) тем, что они не распространяются в среде, т. е. некоторое локальное возмущение остается локальным. Из этого, однако, не следует, делать вывод, что в плазме вообще не могут распространяться никакие волны. Напротив, в действительности в плазме может осуществляться целый ряд разнообразных волновых процессов, и даже сами колебания плазмы не будут строго локальными, если учесть случайные (или тепловые) движения электронов.

Величина плазменной частоты в ионосфере имеет особо важное значение для радиопередач. Электромагнитная волна может распространяться через плазму только в том случае, если частота волны больше плазменной частоты. Волна, падающая извне на плазму, будет полностью отражена, если ее частота меньше ω_p. Это объясняет распространение радиосигналов с амплитудной модуляцией «за линию горизонта»: радиоволна «отскакивает» от ионосферы (рис. 11.2). Радиосигналы с частотной модуляцией и сигналы телевидения, имеющие более высокую частоту, однако, проходят ионосферу

насквозь, поэтому для их хорошего приема необходимо находиться в «пределах видимости» передающей антенны. Так как ω_p пропорциональна $\sqrt{n_-}$, то ясно, что любое изменение n_-, например, изменения n_- от дня к ночи, а также изменения n_-, вызванные вспышками на Солнце или взрывами на большой высоте водородных бомб, должно сильно влиять на качество приема радиопередач.

Интересно отметить, что, хотя теорию плазменных колебаний в ионизованном газе дали в 1929 г. И. Лэнгмюр и Л. Тонкс, аналогичную идею гораздо раньше развивал, правда по другому поводу,

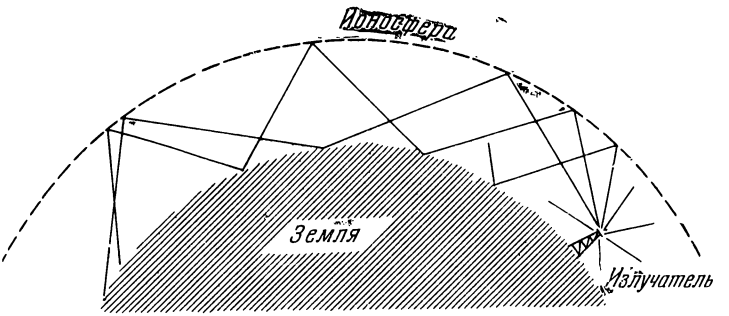


Рис. 11.2.

лорд Рэлей (1906 г.) Рэлей представлял себе атом как «пудинг с изюмом», в котором электроны — «изюминки» распределены более или менее однородно в среде «пудинга» (среде положительных зарядов). Он понимал, что электроны, будучи смещены из равновесных положений, должны начать колебаться около них, и безуспешно пытался связать частоту этих колебаний с атомными спектрами. В некотором смысле можно сказать, что у него была правильная теория, но применял он ее не к тому объекту. Модель «плум-пудинга» («пудинга с изюмом»), впервые предложенная Дж. Дж. Томсоном, была, разумеется, опровергнута опытами Резерфорда по рассеянию в в 1911 г. (см. гл. 5).

§ 11.3. Дебаевская экранировка и дебаевский радиус

Мы получили значение времени, за которое плазма может отклоняться от зарядовой нейтральности. Теперь исследуем вопрос о характерных расстояниях, на которых может нарушаться условие нейтральности. Предположим, что все электроны в слое плазмы толщины l смещены на расстояние l. Слой электронов может находиться внутри плазмы или же на краю ее. Это показано на рис. 11.3. Локальная напряженность электрического поля равняется (§ 11.2)

$$E = 4\pi e n_- l.$$

Увеличение потенциальной энергии ΔV электрона, прошедшего расстояние l в направлении этого поля, равно $\Delta V = eEl = 4\pi e^2 n_- l$. Если других сил, действующих на электрон, нет, то он может увеличить свою потенциальную энергию только за счет уменьшения

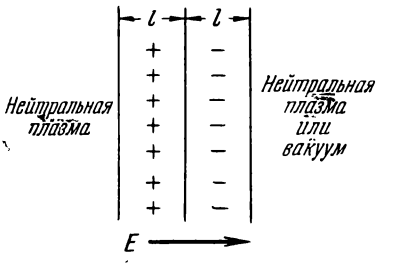


Рис. 11.3.

кинетической, которая в среднем будет порядка kT. Положив $\Delta V \approx kT$ и определив *дебаевский радиус* λ_D как

$$\lambda_D \equiv \left(\frac{kT}{4\pi e^2 n_-}\right)^{1/2}, \tag{11.2}$$

мы видим, что

$$l \approx \lambda_D.$$

Следовательно, дебаевский радиус представляет собой максимальное значение пространственного разделения зарядов, которое может достигаться при тепловом движении частиц. Это можно показать нагляднее, если мы заметим, что из соотношений (11.1) и (11.2) следует

$$\lambda_D = \bar{v}\omega_p^{-1}, \tag{11.3}$$

где $\bar{v} = \sqrt{kT/m_-}$ приближенно равняется средней тепловой скорости электронов (уравнение (9.18)). Другими словами, дебаевский радиус есть среднее расстояние, на которое может смещаться электрон за время ω_p^{-1}, т. е. за характерное время, за которое плазма реагирует на нарушение нейтральности. Если ω_p^{-1} представляет характеристическую единицу времени для плазмы, то λ_D следует рассматривать как характеристическую единицу длины.

Покажем, теперь, что дебаевский радиус равняется расстоянию, на котором плазма экранирует себя от локального избытка заряда. Предположим, что положительный точечный заряд q помещен в макроскопически нейтральную плазму. Расположенные рядом с этим зарядом q электроны плазмы будут притягиваться к нему, а положительные ионы — отталкиваться от него, так что вокруг этого заряда q образуется отрицательно заряженное облако, которое

будет, следовательно, начиная с некоторого расстояния, экранировать плазму от действия заряда q. Вплоть до расстояний, где экранировка осуществляется не полностью, а, скажем, не более чем на 50%, хорошим приближением для вида электростатического потенциала вокруг заряда q будет

$$\Phi \approx q/r.$$

Предположим, что соседние электроны и ионы располагаются в поле этого потенциала, подчиняясь распределению Больцмана

$$n_+ = ne^{-\frac{e\Phi}{kT}}, \quad n_- = ne^{+\frac{e\Phi}{kT}},$$

где n — постоянная плотность числа частиц в плазме в случае, когда нет заряда q.

Далее, допустим, что величина заряда q достаточно мала, так что энергия $e\Phi$ электрона или иона мала по сравнению со средней кинетической энергией частицы, порядок которой равен kT. Тогда мы можем разложить в ряд экспоненты: $n_+ \approx n\,(1 - e\Phi/kT)$; $n_- \approx \approx n\,(1 + e\Phi/kT)_-$ и приближенно представить полный отрицательный заряд облака $-e\,(n_- - n_+)$ в виде

$$-e\,(n_- - n_+) \approx -2ene\Phi\frac{1}{kT} = -\frac{2e^2nq}{rkT}.$$

Полный отрицательный заряд в шаровом слое (в центре которого помещен заряд q) радиуса r и толщины dr равен произведению объема этого слоя $4\pi r^2dr$ на найденную плотность заряда: $4\pi r^2dr\left(-\frac{2e^2nq}{rkT}\right)$. Пусть R — расстояние, на котором полный отрицательный заряд облака, окружающего q, равен $-q$, т. е. расстояние, на котором экранировка будет полной. Тогда значение R находится из условия

$$-q = \int_0^R 4\pi r^2dr\left(-\frac{2e^2nq}{rkT}\right) = -qR^2\frac{4\pi e^2n}{kT} = -q\frac{R^2}{\lambda_D^2}.$$

Другими словами, дебаевский радиус есть расстояние, необходимое для экранировки,

$$R = \lambda_D.$$

Аналогично полная потенциальная энергия V заряда q в поле экранирующего его облака будет равна

$$V \approx \int_0^R \frac{q}{r}4\pi r^2dr \cdot \frac{2e^2nq}{rkT} = \frac{2q^2R}{\lambda_D^2} = \frac{2q^2}{\lambda_D}. \qquad (11.4)$$

Приведенный здесь вывод не является строгим, так как Φ не рав-

няется в точности q/r, когда r приближается к λ_D. Более аккуратное рассмотрение дает для потенциала выражение

$$\Phi = \frac{q}{r} e^{-\frac{r}{\lambda_D}}.$$

Отсюда видно, что потенциал будет меньше величины q/r в $1/e$ раз на расстоянии λ_D и в $(1/e^2)$ раз на расстоянии $2\lambda_D$ (рис. 11.4). Поэтому экранировка будет, по существу, полной уже на расстояниях порядка нескольких дебаевских радиусов.

Плазменная частота и дебаевский радиус, вероятно, являются двумя наиболее важными плазменными параметрами. Если мы подставим значения постоянных величин, входящих в уравнения (11.1) и (11.2), то получим

$$\nu_p \equiv \frac{\omega_p}{2\pi} = 9{,}0 \cdot 10^3 n^{1/2} \text{ сек}^{-1} \qquad (11.5)$$

и

$$\lambda_D = 6{,}9 \left(\frac{T}{n}\right)^{1/2} \text{ см}, \qquad (11.6)$$

где n измеряется в см^{-3}, а T — в градусах Кельвина. На рис. 11.5 представлены значения n, T, ν_p, λ_D для некоторых наиболее важных видов плазмы *). Следует отметить, что для плазмы, получаемой в лабораторных условиях, порядок значений λ_D может меняться в пределах от 10^{-1} см для разряда при низком давлении до 10^{-6} см для высоковольтной дуги.

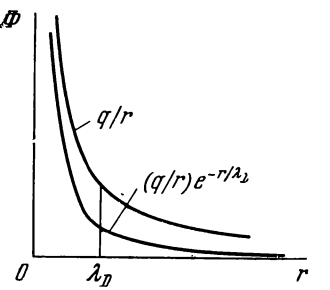


Рис. 11.4.

Сравнивая значения λ_D, приведенные на рис. 11.5, с соответствующими средними расстояниями между частицами $n^{-1/3}$, мы находим, что

$$\lambda_D \gg n^{-1/3}.$$

Поэтому число частиц Λ в объеме порядка λ_D^3, т. е. порядка объема сферы с радиусом, равным дебаевскому радиусу, равно

$$\Lambda \equiv n\lambda_D^3 \qquad (11.7)$$

и следовательно, очень велико

$$\Lambda \gg 1. \qquad (11.8)$$

Так как на расстояниях, меньших λ_D, нет заметной экранировки, то все $n\lambda_D^3$ частиц будут взаимодействовать друг с другом одновременно. В этом и состоит одно из наиболее важных различий между

*) Взято из ст. S. C. Brown et al., Amer. J. Phys **31**, 638 (1963).

плазмой и газом нейтральных частиц: в газе нейтральных частиц очень редко взаимодействуют одновременно более чем две частицы, и даже соударения двух частиц происходят относительно не часто, в то время как в плазме любая частица непрерывно «соударяется»

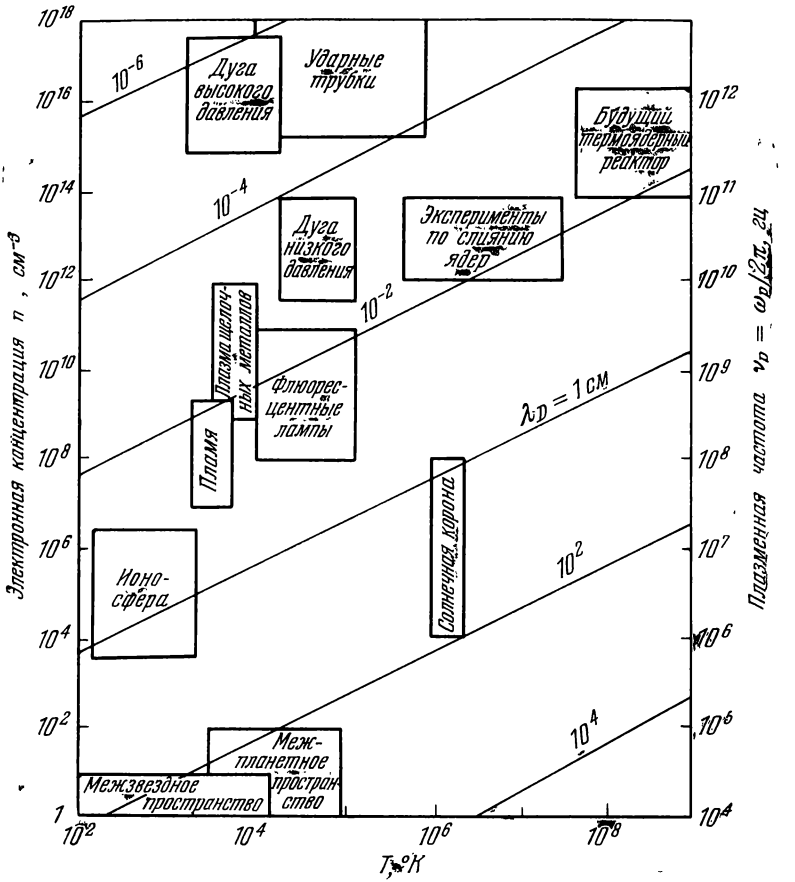


Рис. 11.5.

(взаимодействует!) с большим числом других частиц через посредство дальнодействующего кулоновского поля. Поэтому строгая кинетическая теория плазмы будет математически очень сложной. Ее вообще можно развивать только потому, что взаимодействия между частицами, хотя и являются многочисленными, будут очень слабыми в том смысле, что средняя потенциальная энергия двух взаимодействующих частиц $\sim e^2/\lambda_D$ мала по сравнению со средней кинетической энергией $\sim kT$.

Однако не только взаимодействие двух частиц будет в среднем слабым, но вследствие приближенного макроскопического условия нейтральности и потенциальная энергия частицы в поле всех остальных частиц плазмы будет мала по сравнению с kT. Мы уже вычислили в соотношении (11.4) потенциальную энергию заряженной частицы в поле экранирующего ее заряд облака с радиусом, равным дебаевскому. Для частицы с зарядом e получаем

$$V \approx 2e^2/\lambda_D.$$

Легко показать, что эта величина мала по сравнению со средней кинетической энергией ($\sim kT$)

$$kT\lambda_D/e^2 \gg 1,$$

так как из уравнений (11.2) и (11.7) следует, что

$$kT\lambda_D/e^2 = 4\pi n\lambda_D^3 = 4\pi\Lambda, \tag{11.9}$$

а из оценки (11.8) видно, что число Λ очень велико.

Даже средняя потенциальная энергия взаимодействия между двумя ближайшими соседями $e^2n^{1/3}$ будет мала по сравнению с kT:

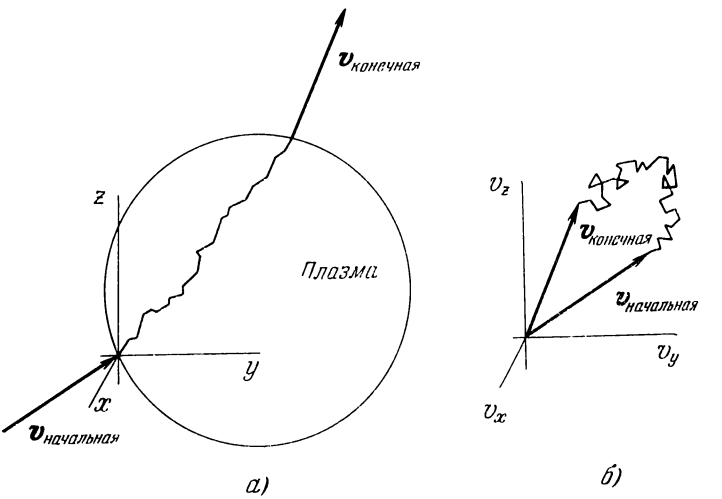
$$kT/e^2n^{1/3} \gg 1.$$

Действительно, $kT/e^2n^{1/3} = 4\pi\,(n^{1/3}\lambda_D)^2$ согласно уравнению (11.2), а, как уже было отмечено, дебаевская длина λ_D велика по сравнению со средним расстоянием между частицами $n^{-1/3}$. С помощью более общих физических соображений можно показать, что средняя потенциальная энергия $-e^2n^{1/3}$ взаимодействия электрона с соседним ионом не может быть велика по сравнению с kT, так как в этом случае полная энергия будет отрицательной, и поэтому эл ктрон и ион легко рекомбинируют и образуют связанную нейтральную систему. Разумеется, рекомбинация «рядовых» электрон-ионных пар несовместима с предполагаемым сильно ионизованным состоянием газа.

§ 11.4. Проводимость

Мы видели в предыдущем параграфе, что средняя потенциальная энергия взаимодействия двух частиц в плазме мала по сравнению с их средней кинетической энергией. Каждое из множества одновременных кулоновских «столкновений» будет, следовательно, лишь незначительно изменять импульс каждой частицы, а направление этого изменения будет случайным. Однако итоговый результат этого «случайного блуждания» при усреднении не будет равен нулю. На рис. 11.6, *а* и *б* показано соответственно в координатном пространстве и в пространстве скоростей, каким образом многочисленные малые случайные отклонения могут привести к изменению скорости частицы от ее начального к конечному зна-

чению. Можно произвести оценку того, сколько нужно этих слабых «соударений на расстоянии» для того, чтобы значительно, скажем на 90°, изменить направление движения частицы. Если проделать это, то мы получим, что частица в среднем проходит расстояние (обозначим его λ_{90}), большое по сравнению с дебаевской длиной, прежде чем будет достигнуто такое большое отклонение. Само получение



а) б)

Рис. 11.6.

оценки слишком длинно и сложно для нашего общего рассмотрения, поэтому мы просто воспользуемся результатом: приближенно получается

$$\lambda_{90} \approx (4\pi)^2 \lambda_D \, \Lambda/\ln \Lambda.$$

В нейтральном газе уже отдельное соударение приводит в среднем к большому отклонению, поэтому в нейтральном газе λ_{90} просто будет равным средней длине свободного пробега L. В этом смысле величину λ_{90} можно рассматривать как «эффективную среднюю длину свободного пробега» заряженной частицы в плазме

$$L = \lambda_{90} \approx (4\pi)^2 \, \lambda_D \, \Lambda/\ln \Lambda. \qquad (11.10)$$

В гл. 10 мы получили следующее выражение для проводимости (уравнение (10.12)):

$$\sigma = (nq^2/kt)D. \qquad (10.12)$$

Так как коэффициент свободной диффузии D приближенно равен (уравнение (8.29))

$$D \approx \bar{v}L \approx L\sqrt{kT/m},$$

то в итоге мы получаем

$$\sigma \approx nq^2L/\sqrt{mkT}. \tag{11.11}$$

Вообще говоря, диффузия в плазме не является свободной (см. § 11.5). Тем не менее приведенное выше выражение (11.11) для σ будет справедливо, если L определяется соотношением (11.10)

$$\sigma \approx \frac{(4\pi)^2 nq^2\lambda_D}{\sqrt{mkT}} \frac{\Lambda}{\ln \Lambda}. \tag{11.12}$$

Чтобы убедиться в этом, мы дадим сейчас непосредственный вывод уравнения (11.11), не прибегая к помощи соотношения Эйнштейна (10.12).

Если течение тока установилось, то скорость дрейфа $\mathbf{u}$ носителя заряда будет постоянной. Импульс, приобретаемый в среднем частицей за счет электрического поля, должен тогда равняться средней потере импульса за счет соударений. Мы можем считать, что направленная (или дрейфовая) скорость $\mathbf{u}$ полностью теряется при каждом отклонении на большой ($\sim 90°$) угол, т. е. на расстоянии одной средней длины свободного пробега $L = \lambda_{90}$, или же за время $\tau = L/\bar{v}$, предполагая, что $\bar{v} \gg u$. Потеря импульса за единицу времени (средняя тормозящая сила) равняется тогда

$$mu/\tau = mu\bar{v}/L,$$

в то время как прирост импульса за единицу времени (сила, действующая на заряженную частицу со стороны поля), очевидно, равен qE. Поэтому

$$qE = mu\bar{v}/L,$$

и подвижность будет равна

$$\mu \equiv u/E = qL/m\bar{v}. \tag{11.13}$$

Так как проводимость связана с подвижностью соотношением (10.16) $\sigma = qn\mu$, то мы показали, что в соответствии с уравнением (11.11)

$$\sigma = \frac{nq^2L}{m\bar{v}} \approx \frac{nq^2L}{\sqrt{mkT}}.$$

Используя уравнения (11.2) и (11.7), мы можем переписать уравнение (11.12) в следующем виде:

$$\sigma \approx (kT)^{3/2} \frac{1}{m^{1/2}e^2 \ln \Lambda}, \tag{11.14}$$

где мы пренебрегли числовыми множителями (порядка единицы) и, как обычно, предположили, что носителями заряда являются электроны. Более тщательные вычисления Ландсхофа показывают, что

в правую часть нашего приближенного уравнения (11.14) надо добавить числовой множитель 0,59. Учитывая этот множитель и значения величин m_-, e, k, мы получаем

$$\sigma = 1{,}5 \cdot 10^{-4} T^{3/2}/\ln \Lambda \ [ом \cdot см]^{-1}. \qquad (11.15)$$

Здесь T выражается в градусах Кельвина. Разумеется, логарифм — это очень медленно меняющаяся функция своего аргумента. Для большинства представляющих интерес видов плазмы величина $\ln \Lambda$ будет порядка 10. Поэтому порядок величины проводимости в плазме можно определить по следующей очень простой формуле:

$$\sigma \approx 10^{-5} T^{3/2} \ [ом \cdot см]^{-1}. \qquad (11.16)$$

При высоких температурах плазма становится очень хорошим проводником. Так, например, при температурах порядка 10^8 °K, достигаемых в установках для термоядерных реакций,

$$\sigma \approx 10^7 \ [ом \cdot см]^{-1},$$

что превосходит значение $10^6 \ [ом \cdot см]^{-1}$, которое достигается в наилучших металлических проводниках.

Следует отметить, что согласно уравнению (11.14) σ не зависит от плотности плазмы n, если не считать зависимости за счет слабо меняющейся функции $\ln \Lambda$. Эта независимость проводимости от плотности находится в разительном контрасте со случаем слабо ионизованного газа, где мы получили, что σ пропорциональна n_-. В слабо ионизованном газе, где L в широких пределах не зависит от T, мы получили, что σ пропорциональна $T^{-1/2}$ (с точностью до выполнения условия $\bar{v} \approx (kT/m)^{1/2} \gg u$), в то время как в плазме $\sigma \sim T^{3/2}$ (пренебрегая зависимостью от $\ln \Lambda$), так как L пропорциональна T^2. Эти коренные различия наблюдаются потому, что в слабо ионизованном газе электрическое сопротивление обусловлено соударениями электронов с нейтральными молекулами, в то время как в плазме оно обусловлено взаимодействиями электронов с ионами.

§ 11.5. Амбиполярная диффузия и экранирующие слои

В гл. 70 мы установили, что в слабо ионизованном газе, в котором электроны и ионы могут диффундировать независимо друг от друга сквозь газ, состоящий в основном из нейтральных частиц, электроны диффундируют намного быстрее, чем ионы. Для газа, который находится в состоянии термодинамического равновесия, мы получили формулу (10.6) для отношения коэффициентов диффузии

$$D_-/D_+ = (m_+/m_-)^{1/2}.$$

Более быстрая диффузия электронов не согласуется, однако, с макроскопическим условием нейтральности. Пусть вначале $n_+(x) \approx \approx n_-(x)$, так что если есть градиент плотности числа электронов, то имеется точно такой же градиент плотности числа ионов. Если электроны диффундируют из этой области быстрее, чем ионы, то плотности чисел частиц n_+ и n_- не могут более равняться друг другу.

В действительности в неоднородной плазме все происходит следующим образом. Электроны начинают диффундировать гораздо быстрее, чем ионы, и оставляют их позади себя. Получающееся разделение зарядов создает электрическое поле, которое в свою очередь ограничивает диффузию электронов. Разделение зарядов продолжает усиливать электрическое поле до тех пор, пока поле полностью не скомпенсирует *относительную* ион-электронную диффузию. После этого электроны будут «привязаны» к ионам и могут диффундировать только со скоростью ионов, т. е. медленнее, чем это делают свободные электроны, приблизительно в $(m_+/m_-)^{1/2}$ раз. Этот случай «совместной диффузии» носит название *амбиполярной диффузии*. Мы покажем сейчас, что коэффициент амбиполярной диффузии D_a действительно много меньше D_-.

Так как имеются и электрическое поле и градиент плотности числа частиц, то мы должны определить токи по формуле (10.9)

$$j = \sigma E - qD\frac{dn}{dx} = qD\left(\frac{nqE}{kT} - \frac{dn}{dx}\right). \qquad (11.17)$$

Здесь мы использовали также уравнение (10.12). Мы будем предполагать, что выполняется макроскопическое условие нейтральности: $n_+ \approx n_- \approx n$. Если электроны и ионы движутся «совместно», то полный электрический ток должен равняться нулю: $j = j_+ + j_- = 0$, или $j_+ = -j_-$.

Так как $D_- \gg D_+$, то ток электронов j_- был бы много больше тока ионов j_+, если бы не член в круглых скобках в правой части уравнения (11.17), который очень мал в случае электронов:

$$\frac{n(-e)E}{kT} \approx \frac{dn}{dx},$$

или

$$E \approx \left(-\frac{kT}{e}\right)\frac{1}{n}\frac{dn}{dx}.$$

Используя это значение напряженности электрического поля, мы получим согласно уравнению (11.17) для тока ионов выражение

$$j_+ = -2eD_+\, dn/dx.$$

Мы видим, что в результате совместного влияния свободной диффузии и движения в электрическом поле, возникающем вследствие разделения зарядов, ионы двигаются вдвое быстрее, чем при

их свободной диффузии. Иными словами, в плазме ионы и электроны диффундируют совместно с некоторым эффективным коэффициентом диффузии

$$D_a = 2D_+ = 2D_- (m_-/m_+)^{1/2}. \qquad (11.18)$$

В областях, где градиент плотности числа частиц становится очень большим, например в слое, переходном между плазмой и твердым телом, который называется *экранирующим слоем*, макроскопическое условие нейтральности нарушается. Уравнение (11.17) еще будет иметь силу как для электронов, так и для ионов, однако теперь уже нельзя считать, что $n_+ \approx n_-$. Если плазма соприкасается (находится в контакте) с изолятором или с электрически изолированным (свободно плавающим в плазме) проводником, то электрический ток не будет течь от плазмы к твердому телу и мы опять имеем

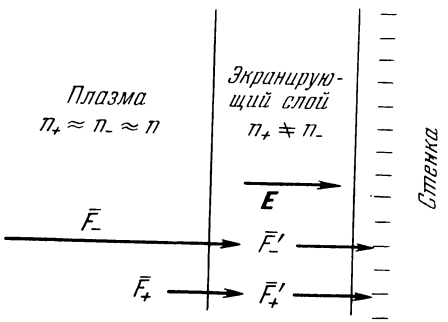


Рис. 11.7.

$$j_+ + j_- = 0.$$

Если в однородную плазму внезапно внести такую стенку, то вначале электроны будут диффундировать к стенке гораздо быстрее, чем ионы, так как $D_- \gg D_+$.

Это приводит к появлению на стенке отрицательного заряда, который противодействует дальнейшей диффузии электронов и способствует диффузии ионов, пока скорости этих двух процессов не станут равными. Когда процесс установится, электроны и ионы будут достигать стенки в равном количестве и рекомбинировать на ней в нейтральные молекулы. Таким образом, они уходят из плазмы, и если число их в плазме не пополняется непрерывно, то плазма быстро гибнет. В случае плазмы стенка играет роль, аналогичную роли, которую играет дырка в стенке сосуда при истечении газа в вакуум (§ 9.5). Мы установили (см. формулу (9.20)), что поток частиц через единицу площади за единицу времени равен

$$\bar{F} = {}^1/_4 n\bar{v} = n\sqrt{kT/2\pi m}. \qquad (11.19)$$

Здесь мы использовали также соотношение (9.18). Внутри газа поток через некоторую воображаемую плоскость в одном направлении компенсируется равным по величине потоком в противоположном направлении. На стенке, однако, нет обратного потока ионов или электронов.

Плотность числа электронов в областях, близких к стенке, будет понижена вследствие того, что электроны отталкиваются отрицательными зарядами, которые собираются на стенке. Эти отрицательные заряды приводят к резкому изменению электростатического потенциала, так называемого *потенциала экранирующего слоя* Φ_s, в области вблизи стенки. Электроны в поле этого потенциала будут распределяться согласно распределению Больцмана, так что плотность числа электронов на стенке уменьшается до значения

$$n_-(\text{стенка}) = ne^{-\frac{e\Phi_s}{kT}}. \tag{11.20}$$

Сразу видна аналогия с барометрической формулой (9.22). Хотя поток электронов за 1 *сек* через 1 *см*^{2} переходного слоя между плазмой и твердым телом (рис. 11.7) будет равен

$$\overline{F}_- = n\left(\frac{kT}{2\pi m_-}\right)^{1/2},$$

многие из этих электронов будут отброшены назад потенциалом экранирующего слоя. На стенку падает только поток электронов, равный

$$\overline{F}'_- = n_-(\text{стенка})\left(\frac{kT}{2\pi m_-}\right)^{1/2} = ne^{-\frac{e\Phi_s}{kT}}\left(\frac{kT}{2\pi m_-}\right)^{1/2}. \tag{11.21}$$

С другой стороны, все ионы, которые входят в экранирующий слой, проходят к стенке, так как поле экранирующего слоя помогает их движению. Поэтому плотность потока ионов, проходящих через переходный слой между плазмой и твердым телом, будет равна плотности потока ионов, падающих на стенку:

$$\overline{F}_+ = \overline{F}'_+ = n\left(\frac{kT}{2\pi m_+}\right)^{1/2}. \tag{11.22}$$

Равновесное значение потенциала экранирующего слоя определяется из условия, что плотности потоков электронов и ионов, падающих на стенку, должны быть равны $\overline{F}'_- = \overline{F}'_+$. С помощью уравнений (11.21) и (11.22) получаем

$$e^{-\frac{e\Phi_s}{kT}} m_-^{-1/2} = m_+^{-1/2}.$$

Следовательно, потенциал экранирующего слоя будет равен

$$\Phi_s = \frac{kT}{2e}\ln\frac{m_+}{m_-}. \tag{11.23}$$

Множитель $^1/_2 \ln(m_+/m_-)$ представляет собой не очень большое число ($\sim$3,8 для атомного водорода). Обычно уменьшение потенциальной

энергии $e\Phi_s$ при переходе через экранирующий слой в 2 или 3 раза больше средней кинетической энергии $^3/_2 kT$ частицы в плазме.

В § 11.3 мы установили, что потенциальная энергия, связанная с пространственным разделением заряда, становится сравнимой с тепловой энергией $\sim kT$, когда заряды разделены расстоянием порядка дебаевского радиуса. Точно такая ситуация и реализуется в экранирующем слое, где $e\Phi_s \approx kT$, и, таким образом, толщина экранирующего слоя должна быть порядка величины λ_D, типичные значения которой приведены на рис. 11.6.

§ 11.6. Плазма в магнитном поле

Некоторые из наиболее интересных проявлений динамики плазмы происходят только тогда, когда плазма сильно взаимодействует с внешним магнитным полем. Рассмотрение этих весьма привлекательных явлений наиболеее удобно производить (хотя только приближенно) в рамках предположения, что плазма является сплошной средой (магнитная гидродинамика). Однако изложение такого типа завело бы нас слишком далеко в сторону. Поэтому мы постараемся выяснить поведение плазмы, изучая движение отдельной заряженной частицы плазмы в магнитном поле. Согласно уравнениям (11.6), (11.9) и (11.10) при высоких температурах или низких плотностях плазмы средняя длина свободного пробега становится очень большой. В этом случае взаимодействия между частицами будут относительно несущественными и ими можно полностью пренебречь по сравнению с взаимодействием этих частиц с внешним магнитным полем. Следовательно, плазму можно будет рассматривать как совокупность заряженных частиц, которые движутся почти независимо друг от друга во внешнем магнитном поле и удовлетворяют только макроскопическому условию нейтральности.

Сила, которая действует на частицу с зарядом q, движущуюся со скоростью $\mathbf{v}$ в магнитном поле $\mathbf{B}$, согласно уравнению (1.14) равна

$$\mathbf{F} = q\left[\mathbf{v}\,\frac{\mathbf{B}}{c}\right]. \tag{11.24}$$

Если $\mathbf{v}$ параллельна $\mathbf{B}$, то

$$\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt = 0$$

или

$$\mathbf{p} = \text{const}.$$

Мы видим, что движение вдоль направления магнитного поля полностью не зависит от этого поля (рис. 11.8, *а*).

Если, напротив, $\mathbf{v}$ перпендикулярна $\mathbf{B}$, то абсолютное значение силы будет равно qvB/c, а ее направление будет таким, как показано

на рис. 11.8, *б*. Так как сила **F** в этом случае перпендикулярна **v**, то поле не производит никакой работы (гл. 3), и поэтому согласно уравнению (3.6) кинетическая энергия и модуль скорости v частицы остаются постоянными. Нерелятивистское ускорение $\mathbf{a} = \mathbf{F}/m$ будет перпендикулярно **v**, а его модуль равен

$$a = F/m = qvB/mc. \tag{11.25}$$

Будем предполагать, что магнитное поле является однородным: $\mathbf{B} = \text{const}$. Так как модуль скорости v постоянен, то, как следует

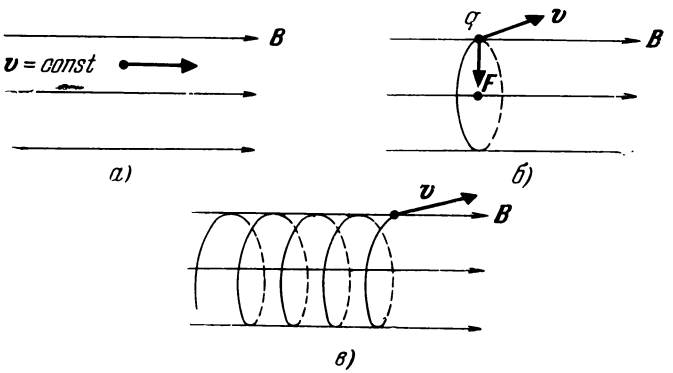


Рис. 11.8.

из уравнения (11.25), модуль ускорения a также будет постоянным. Поэтому частица будет совершать равномерное движение по окружности радиуса R_L, значение которого определяется значениями a и v: $R_L = v^2/a$. Используя уравнение (11.25), мы получаем

$$R_L = mvc/qB. \tag{11.26}$$

Эта величина обычно называется *ларморовским радиусом* и для осредненной частицы, движущейся со скоростью $v \approx \sqrt{kT/m}$, будет равна

$$R_L \approx c\sqrt{mkT}/qB. \tag{11.27}$$

Угловая частота ω_c движения по окружности называется *ларморовской* (или *циклотронной*) *частотой* и равна

$$\omega_c = v/R_L = qB/mc. \tag{11.28}$$

В отличие от ларморовского радиуса ларморовская частота не зависит от скорости частицы и поэтому будет одной и той же для всех частиц одного и того же сорта.

Надо отметить, что ларморовская частота для электронов будет в m_+/m_- раз больше, чем ларморовская частота для ионов, т. е. в тысячи раз больше, в то время как уравнение (11.27) показывает, что в среднем ларморовский радиус иона больше, чем ларморовский радиус электрона, в $(m_+/m_-)^{1/2}$ раз. Отметим также, что, как следует из уравнения (11.28), ларморовская частота для электронов будет приближенно равна

$$\omega_{c-} = v_-/R_L \approx \sqrt{kT/m_-}/R_{L-},$$

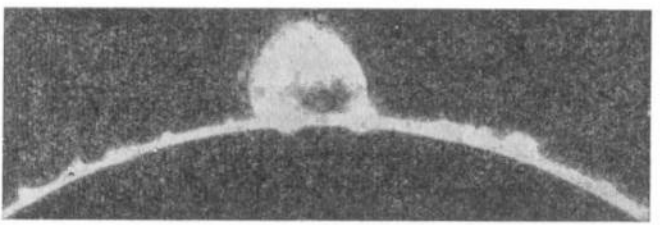
а, как следует из уравнения (11.3), плазменная частота в том же приближении равна

$$\omega_p \approx \sqrt{kT/m_-}/\lambda_D,$$

так что мы получаем следующее простое соотношение между четырьмя основными плазменными параметрами:

$$\omega_{c-}/\omega_p \approx \lambda_D/R_{L-}. \qquad (11.29)$$

Если частица движется со скоростью, которая имеет компоненты как вдоль направления **B**, так и перпендикулярные **B**, то, комбинируя движение с постоянной скоростью вдоль направления **B** с движением по окружности в плоскости, перпендикулярной **B**, мы получим в итоге, что частица будет двигаться по спирали, ось которой совпадает с направлением магнитной силовой линии, как и показано



III. Солнечный протуберанец.

а рис. 11.8., *в*. Мы видим, что в своем движении частицы придерживаются силовых линий поля до тех пор, пока они не столкнутся с другими частицами или со стенками. Если средняя длина свободного пробега велика, как это и будет согласно уравнению (11.10) в плазме при высокой температуре и (или!) при низкой плотности, то диффузия поперек магнитных силовых линий будет медленной.

Если вдобавок ларморовский радиус мал по сравнению с размерами объема, занимаемого плазмой, то столкновения со стенками или с другими чужеродными предметами не будут играть значительной

роли и *плазма будет вынуждена двигаться вдоль направления магнитного поля.*

В интересной для астрономии плазме огромных объемов радиус R_L всегда мал по сравнению с размерами плазмы. Это осуществляется также в случае многих видов плазмы, получаемых в лабораторных условиях. В качестве примера рассмотрим *С*-стелларатор в Принстоне. Его основные рабочие характеристики таковы: $B \sim 5 \cdot 10^4$ *гс*, $T \approx 10^6$ °К. Согласно уравнению (11.27) ларморовские радиусы протонов и электронов равны соответственно $R_{L_+} \approx 3 \cdot 10^{-2}$ *см*

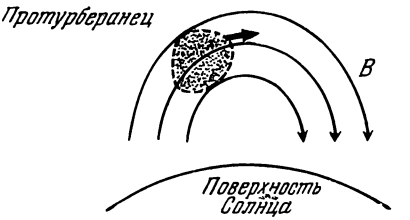


Рис. 11.9.

и $R_{L_-} \approx 7 \cdot 10^{-4}$ *см*. Наименьшие размеры плазмы в стелларатоpe будут порядка 10 *см* или составляют величину в несколько порядков большую, чем R_{L_+}, не говоря уже об R_{L_-}.

Существуют многие яркие иллюстрации способности магнитного поля направлять движение плазмы. Одним из примеров является *солнечный протуберанец* (фото III), который представляет собой плазму, извергаемую с поверхности Солнца. На рис. 11.9 показано, как плазма движется по длинным дугам вдоль магнитных силовых линий над поверхностью Солнца. Способность магнитного поля ограничивать размеры плазмы представляет также большой интерес с точки зрения использования в установках для термоядерных реакций. По причинам, которые будут выяснены позднее (гл. 30), температура плазмы, которую необходимо поддерживать в термоядерных реакторах, должна быть порядка 10^8 °К. Для того чтобы не допустить прикосновения плазмы к каким бы то ни было материальным стенкам (что будет быстро охлаждать плазму), пытаются использовать стремление плазмы облегать магнитные силовые линии. Мы видели, однако, что плазма может совершенно свободно двигаться вдоль магнитного поля. Так как термоядерный реактор не может быть бесконечно длинным, возникает вопрос, что же делать с двумя его концами? Одно из решений — соединить эти два конца вместе и построить тор (рис. 11.10, *а*). Другое решение — усилить магнитное поле на концах установки (рис. 11.10, *б*), так что оно будет отражать бо́льшую часть (но не все!) частиц. Конструкция стеллатора имеет форму тора, а устройства типа, показанного на

рис. 11.10, *б*, носят название «магнитных пробок» или «машин с магнитным зеркалом».

Для того чтобы выяснить, как работает магнитное зеркало, рассмотрим частицу, совершающую движение по окружности в области, где магнитные линии сходятся. Как показано на рис. 11.11, магнитное поле **B** в точках окружности, по которой движется частица, будет иметь не только компоненту $B_\parallel$, параллельную направлению

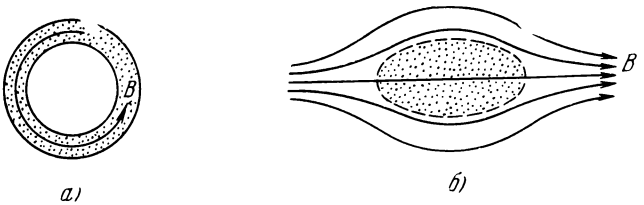


Рис. 11.10.

поля $\mathbf{B}_0$, проходящего через центр окружности, но также и компоненту $B_\perp$, перпендикулярную этому направлению. Поэтому, кроме силы, действующей на частицу в направлении к центру окружности

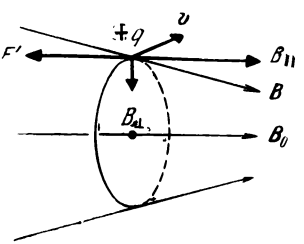


Рис. 11.11.

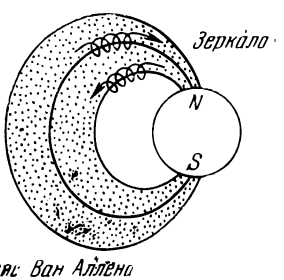


Рис. 11.12.

и равной по модулю $qvB_\parallel/c$, будет также иметься сила F', которая по модулю равна $qvB_\perp/c$ и направлена в сторону, противоположную направлению, в котором сходятся магнитные силовые линии. Если зеркало достаточно сильное, т. е. возрастание **B** на одном из концов достаточно велико, то большинство частиц, падающих на зеркало, будет отбрасываться этой силой F' назад. Некоторая часть частиц, движущихся вдоль направления $\mathbf{B}_0$ по оси зеркала, будет, однако, всегда проходить сквозь зеркало.

Хотя сейчас достигнут очень большой прогресс в устройстве термоядерных реакторов, имеющих магнитное поле как вида, показанного на рис. 11.10, так и других, однако время «жизни» плазмы в таких установках все еще очень мало́, а достигнутые температуры еще

очень низки, чтобы можно было бы ожидать в ближайшем будущем осуществления контролируемой термоядерной реакции. Возможно, что некоторое ободрение может дать тот факт, что известны сорта плазмы, живущие в течение достаточно долгих периодов времени в магнитных полях, существующих в природных условиях. Так, например, радиационные пояса Ван Аллена, открытые с помощью недавних запусков искусственных спутников, представляют собой виды плазмы, захваченной магнитным полем Земли, которое имеет «зеркальную» конфигурацию (рис. 11.12).

Задачи

11.1. Частота видимого света равняется приблизительно $6 \cdot 10^{14}$ *сек*$^{-1}$. Какой должна быть плотность электронов, чтобы получить такую же плазменную частоту? Сравнить полученное значение плотности с плотностью электронов в типичном атоме радиуса порядка 10^{-8} *см*.

11.2. При получении формулы для частоты плазменных колебаний считалось, что ионы покоятся. Выяснить, как влияет учет движения ионов на значение плазменной частоты?

11.3. Вычислить значения дебаевского радиуса и плазменной частоты для ионизованных газов, описанных в задаче 10.2.

11.4. Сколько будет частиц в «дебаевской сфере» объема $^4/_3\pi\lambda_D^3$ для ионизованных газов задачи 11.3?

11.5. Рассмотреть водородную плазму при $T = 10^8$ °К, $n_+ = n_- = 10^{15}$ *см*$^{-3}$. Вычислить степень ионизации, плазменную частоту, дебаевский радиус и число частиц в «дебаевской сфере». Каким будет давление в такой плазме?

11.6. Вычислить проводимости для сортов плазмы, описанных в задаче 11.5.

11.7. Плазма задачи 11.5 помещена в магнитное поле напряженностью 10^5 *гс*. Вычислить значения циклотронных частот и ларморовских радиусов для электронов и ионов.

11.8. Цезиевая плазма при 3000 °К находится в контакте с металлической стенкой, изолированной непроводящим материалом. Вычислить потенциал экранирующего слоя.

11.9. Вычислить коэффициент амбиполярной диффузии как функцию D_+ в гипотетическом случае $m_+/m_- = 5$.

11.10. Какова средняя кинетическая энергия частицы плазмы задачи 11.5? Какова средняя потенциальная энергия ее в поле остальных частиц плазмы, занимающих дебаевскую сферу? Какова средняя потенциальная энергия взаимодействия между двумя ближайшими соседями?

11.11. Вычислить проводимость паров цезия (см. задачу 10.3) с помощью уравнения (11.12) и сравнить результат с результатами задачи 10.3.

11.12. Если сопротивления, обусловленные соударениями электронов с атомами и взаимодействием электронов с ионами, имеют сравнимую величину, то как следует оценить действительное сопротивление или проводимость?

Литература для справок

1. Арцимович Л. А., Элементарная физика плазмы, Атомиздат, 1963.
2. Спитцер Л., Физика полностью ионизированного газа, ИЛ, 1957.

Глава 12

Уравнение состояния твердых тел

Мы уже видели, что уравнение Ван-дер-Ваальса, описывающее состояние газа, позволяет в значительной степени проникнуть в детали атомистического строения газа, если пытаться объяснить это уравнение с помощью микроскопической механической модели. Исследуя такие явления переноса как диффузия и теплопроводность, можно получить дополнительную информацию о свойствах молекул. Теплоемкость также зависит от строения молекул, хотя и более простым образом: согласно закону равнораспределения энергии теплоемкость зависит не от природы атомов, а только от того, является ли молекула одноатомной, двухатомной и т. д. В последующих главах мы будем аналогичным образом исследовать твердые тела, начав с рассмотрения макроскопического уравнения состояния в этой главе.

В качестве первого приближения мы можем рассматривать кусок вещества в твердом состоянии как абсолютно твердое тело. Абсолютно твердое тело определяется как материальная система, для которой расстояние между любыми двумя ее точками остается неизменным, так что, какое бы движение ни совершало абсолютно твердое тело, оно сохраняет свою форму.

Очевидно, что такое предположение будет качественно довольно хорошим, так как большинство твердых предметов имеет присущую им форму, которая не очень сильно изменяется, если, конечно, не обращаться с ними слишком грубо. Так как форма абсолютно твердого тела не изменяется, то его механическое состояние можно описать полностью, если задать положение и ориентацию тела. Это может быть сделано заданием положений любых трех его точек в каждый момент времени. Более удобно бывает фиксировать положение одной его точки (обычно выбирают центр масс тела) и ориентацию тела относительно этой точки (заданием трех углов). В любом из указанных методов требуется шесть координат. С помощью уравнений движения для этих координат (сила равняется произведению массы тела на ускорение центра масс; момент силы равен скорости изменения момента импульса относительно центра масс) можно построить важную и интересную теорию. Однако этой теорией мы заниматься не будем, так как с ее помощью можно получить очень малое представление об

атомной структуре тела: единственное свойство абсолютно твердого тела (за исключением формы, которая не должна зависеть от природы его атомов),— это его плотность, а плотность определяется только тем, как близко друг к другу расположены атомы и каковы их массы.

§ 12.1. Деформации и напряжения

Поэтому мы немедленно переходим к рассмотрению последующего приближения, в котором допускаются малые *относительные смещения* точек твердого тела. Позднее (гл. 15) мы рассмотрим также случай, когда смещения «не малы». Мы сконцентрируем наше внимание исключительно на рассмотрении относительных смещений точек тела, так как поступательное движение или вращение тела как целого уже описаны в механике абсолютно твердых тел, которую мы решили обойти. Мы предположим, что, когда тело *деформируется*, точка тела, которая имела координату x, смещается на величину ξ. Если бы смещение было одним и тем же для всех точек тела, мы получили бы просто параллельный перенос (трансляцию) абсолютно твердого тела. Поэтому мы предположим, что в соседней точке $x + dx$ смещение немного отличается и равно $\xi + d\xi$ (рис. 12.1). *Деформация* в точке x определяется как

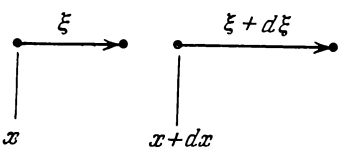


Рис. 12.1.

$$\varepsilon \equiv d\xi/dx, \tag{12.1}$$

т. е. деформация есть относительное смещение двух точек, деленное на первоначальное расстояние между ними. Показанная на рис. 12.1 деформация называется деформацией *растяжения*, так как расстояние между точками увеличивается. Если бы расстояние между ними при деформации уменьшалось, мы имели бы деформацию *сжатия*.

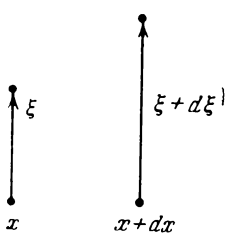


Рис. 12.2.

Следует отметить, что направление $d\xi$ не обязательно должно совпадать с направлением dx. Например, можно представить себе деформацию, при которой $d\xi$ перпендикулярно dx. Такая деформация тоже определяется как $\varepsilon \equiv d\xi/dx$, но называется деформацией *сдвига* (рис. 12.2). В действительности возможны также и любые промежуточные направления и мы должны считать $d\xi$ и dx векторами. В таком случае величина ε устанавливает соотношение между двумя векторами и называется «тензором второго ранга» (ее можно предста-

вить в виде матрицы с тремя столбцами и тремя строками), но нам здесь нет необходимости входить в это общее рассмотрение.

Если деформация одинакова для всех точек тела, то полная деформация равна

$$\varepsilon = \xi/x,$$

где ξ — относительное смещение двух концов тела, а x — полная длина тела (рис. 12.3). Если ε — функция точки внутри тела, то

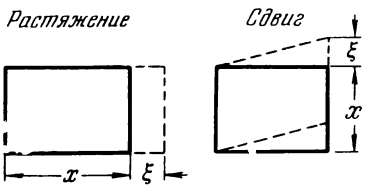


Рис. 12.3.

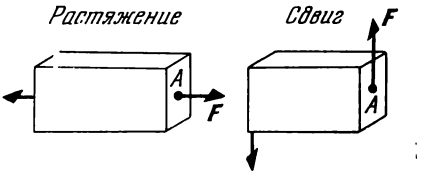


Рис. 12.4.

соответствующее соотношение можно получить путем интегрирования уравнения (12.1)

$$\xi = \int \varepsilon(x)\, dx.$$

Силы, которые производят эти деформации (рис. 12.4), называются растягивающими (или сжимающими) силами и силами сдвига. *Напряжения*, соответствующие этим видам сил, определяются как сила на единицу соответствующей площади:

$$S = F/A.$$

Понятие напряжения имеет перед понятием силы то преимущество, что его можно установить локально в каждой точке тела. Напряжение, так же как и деформация, может быть функцией точки. Оно определяется как локальный вектор силы, действующей на единицу площади некоторой воображаемой плоскости внутри тела (рис. 12.5). Вообще говоря, напряжение зависит от ориентации этой плоскости, и опять-таки возможны все промежуточные случаи между чистым растяжением (или сжатием) и чистым сдвигом. Поэтому в действительности напряжение также является тензором второго ранга, имеет девять компонент и устанавливает соотношение между тремя компонентами силы и тремя направляющими косинусами плоскости, на которую действует эта сила.

Необходимо сделать еще некоторые замечания о напряжении сдвига. Вы могли заметить, что тело, находящееся под действием растяжения, будет покоиться (см. рис. 12.4), в то время как при действии напряжений сдвига оно уже покоиться не будет, а будет вра-

щаться как целое в направлении против часовой стрелки. Для того чтобы тело не вращалось, на него должна действовать другая пара сил в противоположном направлении. Это условие можно выполнить, если вторая пара напряжений сдвига действует на верхнюю и нижнюю грани параллелепипеда, нарисованного на рис. 12.4. Таким образом, внутри тела, находящегося в равновесии, на соответствующих перпендикулярных плоскостях будут равны напряжения сдвига. В результате этого ограничения только шесть из девяти компонент тензора напряжений будут независимыми. По этой же причине, тензор деформаций также имеет только шесть независимых компонент вместо девяти.

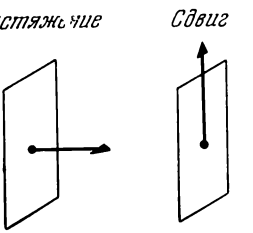


Рис. 12.5.

Следовательно, в случае твердого тела мы видим, что, вообще говоря, число переменных, необходимых для описания равновесного *состояния* системы, больше, чем в случае газа. Мы должны задать напряжения растяжения и сдвига и соответствующие деформации в каждом из трех направлений, или значения 18 переменных (из которых только 12 являются независимыми), вместо только двух переменных, как P и V в случае газа. На деле, однако, мы так же, как и в случае твердого тела, будем рассматривать только случаи, где достаточно двух переменных: простое растяжение в одном направлении или простой сдвиг в одном направлении.

§ 12.2. Модули упругости

В рассматриваемом нами случае уравнение состояния должно давать соотношение между S и ε, точно так же как в случае газа уравнение состояния устанавливает связь между P и V. Это соотношение записывается в следующем виде: для растяжения и сжатия

$$S = E\varepsilon, \tag{12.2}$$

для сдвига

$$S = G\varepsilon. \tag{12.3}$$

Интересно отметить, что значения E в случаях растяжения и сжатия равны друг другу всегда, для всех материалов, а значение G, вообще говоря, отлично от E. Значения величин E и G зависят от сорта материала. Величина E называется *модулем Юнга*, а G — *модулем сдвига*. Является опытным фактом, что в твердых телах E и G приблизительно постоянны, т. е. не зависят от напряжения в довольно широком интервале напряжений.

Для того чтобы выяснить смысл модуля упругости, подставим $S = F/A$ и $\varepsilon = \xi/x$ в уравнение (12.2), которое принимает вид

$$F = K\xi,$$

где $K = EA/x$. Таким образом, постоянство E эквивалентно утверждению о том, что рассматриваемый материал подчиняется *закону Гука*, т. е. что удлинение пропорционально приложенной силе (рис 12.6). Однако модуль Юнга E представляет более интересную для теории величину, чем постоянная K, так как K зависит от размеров тела. Интуитивно ясно, что сила, необходимая для создания данного удлинения некоторого бруска, должна быть тем больше, чем больше площадь поперечного сечения этого бруска, и что удлинение, созданное данной силой, должно быть тем больше, чем больше длина бруска. Напротив, модуль Юнга, а также модуль сдвига являются характеристиками данного *материала* и поэтому более интересны для нас.

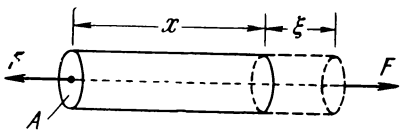


Рис. 12.6.

Если подставить уравнение (12.1) в уравнение (12.3), мы получим соотношение

$$S = Gd\xi/dx,$$

которое напоминает уравнение (8.25) для напряжения сдвига в вязкой жидкости или газе. Различие заключается в том, что в жидкости напряжение пропорционально градиенту *скорости*, в то время как здесь напряжение пропорционально градиенту смещения. Жидкость (или газ) в статическом равновесном состоянии ($u = 0$) не может испытывать никаких напряжений сдвига; для этого нужно, чтобы жидкость (или газ) двигалась. Другими словами, модуль сдвига для жидкости (или газа) всегда равен нулю.

Мы можем отметить здесь, что связь между напряжением и деформацией в общем случае определяется с помощью «тензора четвертого ранга», имеющего 81 компоненту и устанавливающего соотношения между девятью компонентами тензора напряжений и девятью компонентами тензора деформаций, по аналогии с уравнением (12.2). Так как в действительности только шесть компонент тензоров напряжений и деформаций являются независимыми, то имеется только 36 модулей упругости. Число же независимых модулей будет еще меньше вследствие той или иной симметрии кристалла (гл. 13). Тем не менее теория упругости кристаллов очень сложна. Однако для простых случаев, которыми мы интересуемся здесь, эта теория сводится к уравнениям (12.2) и (12.3).

§ 12.3. Тепловое расширение и уравнение состояния

Точно так же как и в случае газа, равновесное состояние твердого тела зависит не только от механических переменных S и ε, но и от *температуры* T. Эта зависимость заключена в линейном *коэффициенте теплового расширения* α. Удлинение ξ пропорционально увеличению температуры ΔT и первоначальной длине x

$$\xi = \alpha x \Delta T$$

или

$$\varepsilon = \alpha \Delta T. \qquad (12.4)$$

Подобно модулю E коэффициент α приблизительно постоянен для твердого тела в области температур вблизи комнатной. При $T \to 0$ α также стремится к нулю, и поэтому нельзя принимать x за длину при $T = 0$ и считать α постоянной величиной.

Мы можем объединить рассмотренные выше случаи механической и тепловой деформации в единое *уравнение состояния* твердого тела, предполагая, что имеются только напряжения растяжения:

$$\varepsilon = (1/E)S + \alpha \Delta T.$$

Здесь E и α — (приблизительно) постоянные величины. При $\Delta T = 0$ мы получаем снова уравнение (12.2), а при $S = 0$ — уравнение (12.4).

Можно установить аналогию с обычным уравнением состояния для газов (гл. 7), если рассмотреть частный вид напряжения, так называемое *гидростатическое давление*. Гидростатическое давление есть растягивающее или сжимающее напряжение, которое равномерно и одинаково действует на плоскости во всех трех взаимно перпендикулярных направлениях (рис. 12.7). Это, собственно говоря, и есть «давление» P, которое мы уже ввели в случае газов. Изменение давления ΔP вызывает изменение объема ΔV. Изменение гидростатического давления будет связано с *относительным изменением* (деформацией) объема $\Delta V/V$ с помощью *модуля всестороннего сжатия* β соотношением, аналогичным уравнению (12.2)

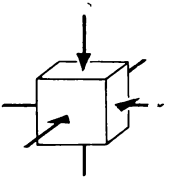


Рис. 12.7.

$$\Delta P = -\beta \Delta V/V \text{ или } \beta = -V \Delta P/\Delta V. \qquad (12.5)$$

Так как при увеличении P ($\Delta P > 0$) объем V уменьшается ($\Delta V < 0$), то величина β всегда положительна. Модуль всестороннего сжатия для твердых тел можно измерять также, как и для газов.

Для твердого тела модуль всестороннего сжатия будет иметь тот же порядок величины, как модуль Юнга и модуль сдвига. (Все эти модули имеют размерность давления или напряжения: *дин/см*^{2}, так

как деформация безразмерна.) Однако при нормальных условиях модуль всестороннего сжатия для твердого тела приблизительно в миллион раз больше, чем для газа. Величина, обратная модулю всестороннего сжатия, называется *сжимаемостью* (коэффициентом сжатия). Таким образом, газы обычно примерно в миллион раз более сжимаемы, чем твердые тела. С другой стороны, коэффициенты теплового расширения газа только в 10 или 100 раз больше, чем для твердого тела. Коэффициент объемного расширения, который, как можно показать (задача 12.1), в 3 раза больше коэффициента линейного расширения α, определяется соотношением

$$\frac{\Delta V}{V} = 3\alpha \Delta T \quad \text{или} \quad 3\alpha \equiv \frac{1}{V}\frac{\Delta V}{\Delta T}. \tag{12.6}$$

Мы сейчас выведем выражения для модуля всестороннего сжатия и коэффициента теплового расширения для случая идеального газа, уравнение состояния которого дается уравнением (7.1)

$$PV = RT.$$

Так как P и V не пропорциональны друг другу, мы предположим, что ΔP и ΔV малы, и будем писать dP и dV. Тогда выражение для модуля всестороннего сжатия принимает следующий вид:

$$\beta = -V\, dP/dV = -V\,(-RT/V^2) = P \text{ при } T = \text{const}.$$

(На самом деле следует писать $(dP/dV)_T$ вместо dP/dV). Объемный коэффициент теплового расширения равен

$$3\alpha = \frac{1}{V}\frac{dV}{dT} = \frac{1}{V}\frac{R}{P} = \frac{1}{T} \text{ при } P = \text{const}.$$

(Опять-таки, строго говоря, надо было бы писать $(\partial V/\partial T)_P$ вместо dV/dT.) Таким образом, для газа ни β, ни α нельзя считать постоянными. При нормальных условиях

$$\beta = 1\ атм \approx 10^6\ дин/см^2,$$

$$3\alpha = 1/273 \approx 10^{-3}\ 1/град.$$

Для газа как E, так и G равны нулю. Если вы попытаетесь сжать газ в одном направлении, он тотчас будет вытекать в стороны. Аналогично, если вы попытаетесь создать деформацию сдвига газа, газ только отступит. Более того, газ не может испытывать отрицательное давление (равное растяжение во всех направлениях), потому что газ будет заполнять любой объем, который будет ему предоставлен, а твердое тело этого сделать не может.

Жидкость похожа на газ тем, что E и G равны для нее нулю, ее форму можно изменять как угодно, не применяя никакого напряжения. Однако жидкость более всего похожа на твердое тело, коэффи-

циент теплового расширения и сжимаемость для нее обычно имеют значения много меньшие, чем для газов. Жидкость может также испытывать отрицательное давление, хотя и не очень большое, так как ее текучесть приводит к разрывам в среде жидкости (кавитация).

В теории упругости твердых тел возникают две различные проблемы. Одна проблема заключается в том, что с помощью данных значений модулей упругости для некоторого материала надо вычислять напряжения и деформации, которые возникают в куске твердого тела определенной формы при определенных условиях. Эта проблема имеет огромное инженерное значение при расчете конструкций, но не представляет первостепенного интереса в физике уже с прошлого века. Другая проблема, которая еще представляет интерес для физики и начинает приобретать большое значение в технике,—это вычисление самих значений модулей упругости, например выяснение вопроса о том, почему они различны для Cu и NaCl? Решение этой проблемы обещает физику более глубокое понимание природы фундаментальных взаимодействий между атомами, а инженеру-конструктору оно дает надежду научиться создавать *материалы* с требуемыми свойствами вместо простого подбора конструкции оптимальной геометрии. Мы будем заниматься только второй проблемой. В следующей главе мы попытаемся определить модуль упругости, коэффициент теплового расширения и т. п. с помощью некоторой модели атомного строения твердого тела.

Задачи

12.1. Показать, что коэффициент объемного расширения в 3 раза больше коэффициента линейного расширения. *Указание*: считать, что объем представляет собой куб с ребром L, так что $V = L^3$.

12.2. Пусть алюминиевый брусок нагрет на 1°С. Вычислить напряжение (в *атм*), которое надо приложить к этому бруску, чтобы вернуть ему первоначальную длину. Другими словами, это — напряжение, под которым должен находиться брусок при нагревании для того, чтобы сохранять свою длину неизменной. Коэффициент (линейного) теплового расширения алюминия равен $2{,}4 \cdot 10^{-5}$/*град*, модуль Юнга равен $6{,}9 \cdot 10^{11}$ *дин/см*^{2}.

12.3. Показать, что для идеального газа

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V = \frac{P}{T}\ .$$

Насколько увеличится давление (в *атм*), если идеальный газ при нормальных условиях нагреть на 1 °С при постоянном объеме?

12.4. Когда брусок подвергается сжатию (или растяжению), работа, произведенная приложенной к бруску внешней силой, переходит в энергию упругой деформации. а) Показать, что эта работа (энергия) на единицу объема равна

$$W/V = {}^1/_2 E\varepsilon^2,$$

где ε — деформация. б) Вычислить W/V для алюминия, который сжат на 0,1%.

Для алюминия $E = 6{,}9 \cdot 10^{11}$ *дин/см*^{2}. в) В 1 *см*^{3} алюминия содержится $6 \cdot 10^{22}$ *атомов*. Чему равняется энергия упругой деформации (в *эв*) в расчете на один атом?

12.5. Найти в справочниках значения модуля Юнга E и модуля сдвига G для нескольких материалов. Составить таблицу этих значений в порядке увеличения модуля Юнга. Имеется ли корреляция между значениями E и G?

12.6. В таблицу, составленную в задаче 12.5, добавить соответствующие значения коэффициента теплового расширения, найденные также в справочниках. Имеется ли связь между значениями коэффициента теплового расширения и модуля Юнга?

Литература для справок

1. Киттель Ч., Введение в физику твердого тела, Физматгиз, 1962.

Глава 13

Строение кристаллов

В качестве первого шага к изучению микроскопического строения твердых веществ мы рассмотрим приближение, которое, как мы уже раньше отметили, не очень интересно,— мы будем рассматривать наши вещества как абсолютно твердые тела. Вместо того чтобы изучать движения абсолютно твердого тела как целого, мы будем изучать, однако, единственную макроскопическую механическую характеристику, которой обладает абсолютно твердое тело, а именно, его плотность. Плотность зависит от массы атомов и от расстояния между ними. Мы увидим, что можно определить зависимость плотности от молекулярного веса материала, межатомного расстояния и числа Авогадро, а также рассмотрим методы, использующие дифракцию рентгеновских лучей для измерения межатомных расстояний. Однако наиболее удивительный результат изучения способов, с помощью которых атомы группируются вместе, состоит в том, что, кроме расстояния между атомами, очень важное значение, оказывается, имеют также углы между прямыми, соединяющими соседние атомы. Действительно, именно эти углы и отличают главным образом кристаллы от стекол, или даже от жидкостей, так как во всех этих агрегатных состояниях вещества межатомные расстояния будут одного и того же порядка. В том первоначальном рассмотрении, которым мы займемся в этой главе, мы будем предполагать, что атомы находятся в строго фиксированных положениях, из которых они никогда и никоим образом выйти не могут. Позднее мы учтем также и смещения атомов из этих положений, сначала небольшие (гл. 14), а затем и большие (гл. 15).

§ 13.1. Кристаллы

Все твердые вещества можно исчерпывающим образом подразделить на *кристаллические* и *аморфные*, в зависимости от того, образуют или не образуют фиксированные (приближенно) места расположения атомов или молекул *регулярный* строй (рис. 13.1). Такой регулярный строй, если он имеется, называется *кристаллической структурой* и представляет собой повторяющееся упорядоченное расположение точек в трехмерном пространстве. (Периодичность

структуры описывается с помощью абстрактного упорядоченного строя точек, который носит название «решетки». Понятие решетки очень важно в теоретическом анализе свойств кристалла. Однако в нашем настоящем изложении, которое носит вводный характер, мы не будем далее упоминать решетку, для того чтобы не путать решетку со структурой, которая представляет систему точек, отмечающих положения атомов.) Например, вершины плотно уложенных одинаковых кубов образуют такую структуру. Этот вид структуры можно описать математически как систему точек, три декартовы координаты каждой из которых являются целыми числами, кратными длине ребра куба. Обычно все металлы и их соли, а также большинство минералов являются кристаллическими, в то время как стекло, пластмассы, резина и т. п. обычно аморфны. (Однако при особых условиях каждый материал может приобретать противоположные свойства.)

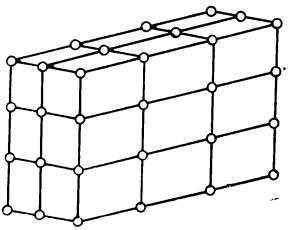
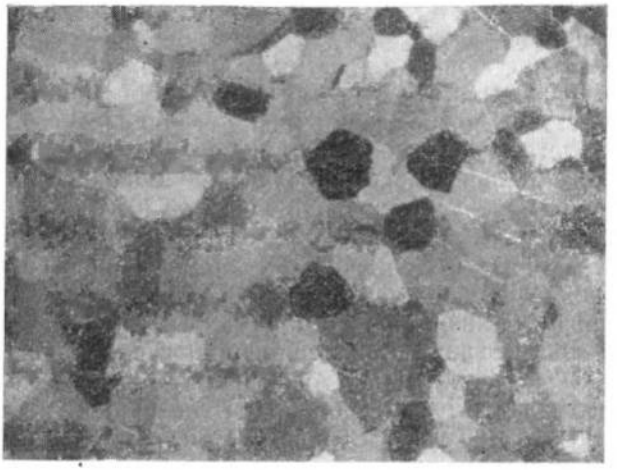


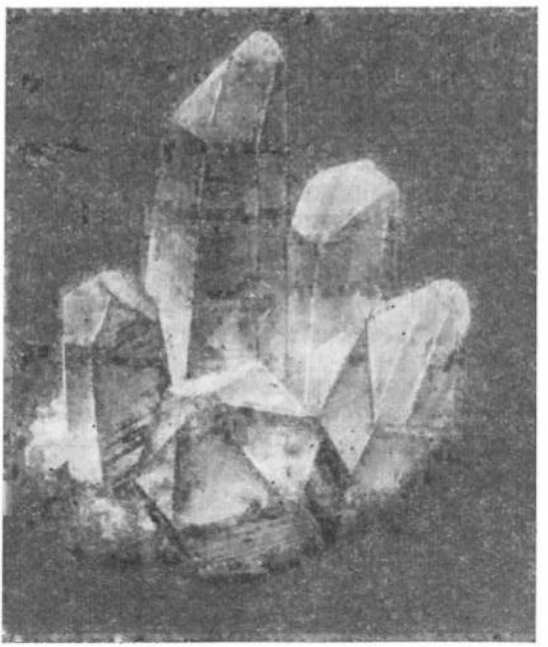
Рис. 13.1.

На первый взгляд кажется удивительным, что столь многие обычные вещества оказываются кристаллическими, т. е. их атомы не располагаются некоторым нерегулярным образом, что гораздо более вероятно. Действительно, почему из всех возможных способов расположения вокруг некоторого атома его соседи располагаются в точности так же, как и соседи другого атома? Предположим, что мы кинули множество шариков в ящик,— разве не расположатся они там более или менее случайным образом? Да, конечно. Но если мы будем потряхивать ящик с шариками в течение достаточно долгого времени, шарики будут оседать до тех пор, пока не упакуются гораздо более тесным образом. При этом их потенциальная энергия будет уменьшаться (в поле сил тяжести). Атомы в твердом теле ведут себя аналогичным образом. Случайное расположение является наиболее вероятным, однако существует такое расположение, которое соответствует минимальной потенциальной энергии. Тогда вокруг каждого атома будет именно такое расположение соседей и структура будет регулярной. При этом полная энергия всех частиц будет минимальной. (Как мы увидим позднее, в гл. 15, не все атомы располагаются регулярно, однако сейчас мы пренебрежем этими отклонениями.)

Большинство кристаллических материалов в действительности являются *поликристаллическими*, в которых расположение атомов не строго периодическое, однако имеются небольшие области, внутри которых это расположение периодично (фото IV). Эти области называются *зернами*. Таким образом, каждое зерно представляет собой кристалл, как он был определен выше, однако на *гранях зерен*



IV. Зернистая структура никелевого образца. Диаметр отдельных зерен около 3 *мм*. Они стали видны в результате протравливания кислотой, которая по-разному действует на различные кристаллические плоскости, попадающие на поверхность каждого зерна.



V. Большие естественные кристаллы кварца.

ориентация кристаллической структуры меняется. Обычный кусок металла представляет поликристалл, размеры зерна которого составляют обычно доли миллиметра, но могут быть и больше. Эту зернистую структуру металла можно сделать видимой с помощью травления металла соответствующей разведенной кислотой.

С другой стороны, довольно большие монокристаллы многих веществ можно найти в природе или получить искусственным путем, например, алмаз, а также другие драгоценные камни, монокристаллы кварца (фото V) и т. д. Монокристаллы поваренной соли, весящие несколько килограммов, приготовляются для производства инфракрасных призм и линз, а большие кристаллы германия и других полупроводников выращиваются и применяются затем в транзисторных устройствах. Каждая крупинка той соли, которая каждый день стоит на нашем обеденном столе, представляет маленький кубический монокристалл поваренной соли. Зернистое строение оказывается практически чрезвычайно важным при определении многих свойств вещества, причем зачастую до сих пор еще не ясно, каким образом зернистое строение влияет на эти свойства, однако в дальнейшем изложении мы ограничимся рассмотрением более простой проблемы монокристаллов.

§ 13.2. Простые кристаллические структуры

Прежде всего мы опишем некоторые наиболее часто встречающиеся кристаллические структуры (рис. 13.2). Самой простой является простая кубическая структура, уже описанная выше. Очень часто встречаются следующие две модификации *простой кубической* структуры (*пк*, рис. 13.2, *а*): *объемноцентрированная кубическая* структура (*оцк*, рис. 13.2, *б*) представляет простую кубическую структуру, в центре каждого куба которой находится атом; *гранецентрированная кубическая структура* (*гцк*, рис. 13.2, *в*) имеет по атому в середине каждой грани. Другой часто встречающийся тип структуры — *гексагональная структура с плотной упаковкой* (*гекс*, рис. 13.2, *г*), которая представляет собой слои атомов, находящихся

Структура	Координационное число
Алмаз	4
Простая кубическая	6
Объемноцентрированная кубическая .	8
Гранецентрированная кубическая . .	12
Гексагональная с плотной упаковкой	12

в углах шестиугольников. Если вы разложите на столе большое количество копеечных монет так близко друг к другу, как это возможно, то легко обнаружить образующиеся при этом правильные шестиугольные построения.

«*Структуру алмаза*» (*алмаз*, рис. 13.2, *д*) можно получить из гранецентрированной кубической структуры, если рассмотреть некоторый атом в вершине куба и три ближайших к нему соседних атома, расположенных в серединах граней куба, сходящихся в этой вершине. Теперь нужно в центр правильного тетраэдра, образованного этими четырьмя атомами, поместить еще один атом. Поступая точно таким же образом и с тетраэдрами при других вершинах куба, мы и получим так называемую структуру алмаза.

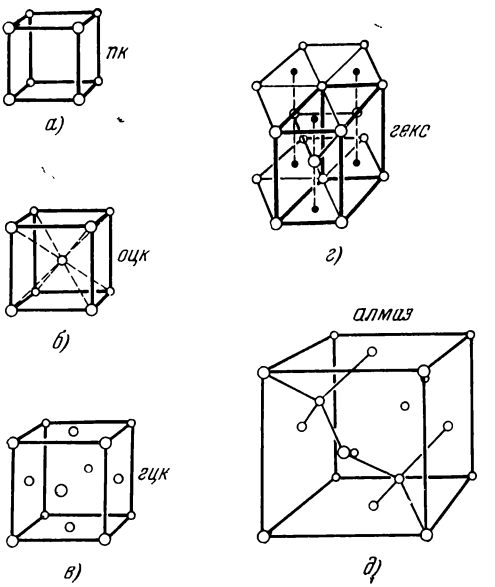


Рис. 13.2.

Очень интересно определить в каждой из этих структур число ближайших соседей атома, которое называется *координационным числом*. На стр. 246 приведены значения координационного числа для различных структур, показанных на рис. 13.2. Гранецентрированная кубическая структура и гексагональная структура с плотной упаковкой имеют одно и то же координационное число 12. Это не случайно, и в действительности эти две структуры очень близко связаны—они представляют способы наиболее плотной упаковки одинаковых твердых сфер в пространстве. Как мы только что отмечали, лежащие на плоскости плотно упакованные шары образуют правильные шестиугольные построения (рис. 13.3). Следующий слой плотно упакованных твердых сфер можно положить сверху на нижний таким образом, чтобы каждый шар верхнего слоя, касаясь трех соседних шаров нижнего слоя, попадал в одну из треугольных луночек между этими тремя шарами. Эти луночки отмечены точками на рис. 13.3, из которого видно, что если сферы во втором слое также плотно упакованы, то соседние луночки не могут быть заняты. Очевидно, что если мы рассматриваем только два слоя, то не имеет значения, какие именно луночки заняты шарами второго

слоя,—в обоих случаях получающаяся структура, по существу, одна и та же. Однако если мы добавим еще и третий слой плотно упакованных сфер, то мы получим существенные различия в зависимости от выбора системы луночек для него. Если сферы в третьем слое, который мы кладем сверху на второй, находятся прямо над сферами из первого, нижнего слоя, мы получаем гексагональную структуру с плотной упаковкой, как легко заметить из рис. 13.2, *г*. Если же мы изберем другой вариант и расположим сферы третьего слоя над теми луночками первого слоя, которые не были заняты шарами второго слоя, мы получим гранецентрированную кубическую структуру. (Мы предполагаем, что в обоих этих случаях полная структура получается повторением данной последовательности этих трех слоев.) Не совсем очевидно, что второй способ действительно приводит к гранецентрированной кубической структуре, показанной на рис. 13.2, *в*, и поэтому мы постараемся пояснить это с помощью рис. 13.4. На этом рисунке все черные атомы плотно упакованы на одном плоском слое, заштрихованные атомы входят во второй слой плотно упакованных сфер. Каждый из белых атомов лежит в третьем и четвертом слоях, а линия, соединяющая белые атомы, перпендикулярна всем плоскостям слоев. Во всяком случае из рис. 13.3 ясно, почему и в гранецентрированной кубической структуре, и в гексагональной структуре с плотной упаковкой будет 12 ближайших соседей: шесть — в плоскости слоя и по три—в плоскостях над и под слоем.

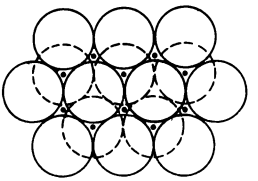


Рис. 13.3.

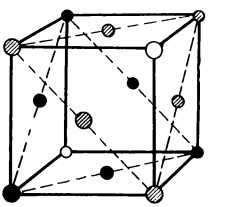


Рис. 13.4.

Гранецентрированная кубическая структура или гексагональная структура с плотной упаковкой, по-видимому, являются оптимальными в том смысле, что в них каждый атом притягивает наибольшее число атомов, которые геометрически возможно разместить вокруг него. Если силы взаимодействия между атомами в основном *сферически симметричны*, как это бывает во многих металлах или в случае благородных газов, то всегда получается одна из этих структур. (Какая именно из этих двух — решение этого вопроса требует весьма тонкого исследования. Если силы взаимодействия между атомами являются строго сферически симметричными, как в случае благородных газов, то получается гранецентрированная кубическая структура.) Если между атомами действуют сферически несимметричные *валентные силы*, то значение координационного числа будет меньше 12. Эти валентные силы очень похожи на те силы, которые обусловливают химическую связь атомов в молекулах, и мы изучим их

очень подробно в гл. 24. В качестве крайнего примера рассмотрим теперь (рис. 13.2, *д*) структуру алмаза, который представляет собой модификацию углерода. Валентность элемента IV группы C равна 4, и поэтому структура с 4 ближайшими соседями оказывается предпочтительной.

Действительно, расположение четырех соседей данного атома C в этой структуре будет в точности таким же, как расположение четырех атомов водорода H в молекуле метана CH_4, находящихся в вершинах правильного тетраэдра, в центре которого находится C.

Чем меньше координационное число, тем больший объем приходится на один атом, если считать, что расстояние между ближайшими соседями постоянно. За расстояние между ближайшими соседями можно принять диаметр атома, если мы рассматриваем атомы как твердые сферы, которые в твердом теле соприкасаются (ср. с гл. 8). Интересной иллюстрацией сказанному является пример железа. При комнатной температуре Fe имеет объемноцентрированную кубическую структуру (α-железо), но при температуре свыше 900° C железо приобретает гранецентрированную кубическую структуру (γ-железо). При нагревании железо расширяется вследствие явления теплового расширения, однако при достижении температуры перехода оно внезапно сжимается, так как атомы попадают в расположение с более плотной упаковкой и образуют гранецентрированную кубическую структуру.

§ 13.3. Структура элементов

Большинство элементов периодической таблицы при кристаллизации образует одну из структур, уже описанных в § 13.2. Эти структуры приведены в табл. 1 в конце книги. Аналогично Fe некоторые элементы могут образовывать более чем одну структуру. В приведенной нами таблице указана структура, которая остается обычно стабильной при низких температурах. Как уже указывалось, *благородные газы* имеют гранецентрированную кубическую структуру, и большинство *металлов* также имеет гранецентрированную кубическую структуру или гексагональную структуру с плотной упаковкой, т. е. одну из структур с плотной упаковкой. Значительное число металлов, включая все щелочные металлы, а также многие из переходных металлов, имеет объемноцентрированную кубическую структуру. Только лишь немногие элементы имеют структуры меньшей симметрии, которые не показаны на рис. 13.1 и обозначены пунктирными прочерками в табл. 1.

Подобно самому алмазу C все элементы группы IV A (за исключением Pb) вследствие их четырехвалентности имеют структуру алмаза. (Олово Sn более часто встречается в другой металлической

форме с менее симметричной структурой.) Все прочие *неметаллы* имеют сложные кристаллические структуры. Причина этого заключается в том, что эти атомы способны образовывать молекулы, например N_2 или Cl_2, причем атомы удерживаются в молекулах очень большими валентными силами, в то время как взаимодействие между молекулами будет гораздо слабее. Например, при комнатной температуре N_2 является газом, а когда он кристаллизуется (при температуре 63° К), его несферические двухатомные молекулы образуют несимметричную структуру. Причину всех этих указанных различий можно будет понять, по крайней мере качественно, после того как мы изучим электронное строение атомов в гл. 22. Детальное количественное предсказание вида несиммметричной структуры на основе представлений о строении атомов и молекул является проблемой, которая лежит за пределами возможностей современной теории.

§ 13.4. Структура соединений

Мы можем начать изучение неэлементарных кристаллов с рассмотрения *сплавов*, т. е. систем, которые, строго говоря, не являются химическими соединениями, а представляют собой твердые растворы двух или более металлов. *Твердым раствором* называют систему, компоненты которой диспергированы в виде отдельных атомов, т. е. некоторые из узлов заняты атомами одного сорта, а некоторые — атомами другого сорта. Это не есть соединение в строгом химическом смысле этого слова, так как обычно твердые растворы могут существовать, когда содержание той или иной компоненты меняется в довольно широком интервале значений, в противоположность стехиометрическому отношению компонент химического соединения. (Стехиометрическое отношение определяется химической формулой соединения и представляет собой отношение небольших целых чисел.) Типичным примером является *латунь* (раствор меди Cu и цинка Zn). Согласно табл. 1 чистый Cu имеет гранецентрированную кубическую структуру, а чистый Zn — гексагональную структуру с плотной упаковкой. Поэтому можно ожидать, что латунь с преобладающим содержанием меди будет иметь гранецентрированную кубическую структуру, а с преобладанием цинка — гексагональную структуру типа цинка с плотной упаковкой. Это ожидание оправдывается. При промежуточных содержаниях Cu и Zn образуются, однако, более сложные структуры и предсказать их довольно трудно. Обычная латунь состоит на $^2/_3$ из меди и имеет гранецентрированную кубическую структуру.

Среди настоящих химических соединений простые структуры, аналогичные уже описанным, имеют *ионные кристаллы*. Как мы увидим, компонентами ионного соединения можно считать ионы,

например в NaCl это Na^+ и Cl^-. Эти ионы образуют симметричные структуры, подобно атомам благородных газов, и, таким образом, симметричные силы взаимодействия между ионами приводят к образованию простых структур. Одна из простейших таких структур называется структурой *хлористого натрия*. Как видно из рис. 13.5, эта структура выглядела бы как простая кубическая, если пренебречь различием между ионами двух сортов. В действительности же она выглядит как гранецентрированная кубическая структура, если рассматривать ионы только одного сорта, скажем, черные кружочки, хотя с тем же успехом можно рассматривать и белые кружочки. («Решетка» будет гранецентрированной кубической, каждой точке которой сопоставляется *молекула* NaCl, хотя, разумеется, ионы Na^+ и Cl^- не могут *оба* быть в одной точке решетки.) Все кристаллы соединений щелочных металлов с галогенами (за исключением галоидных соединений цезия Cs) имеют структуру хлористого натрия. Многие оксидные и сульфидные соединения щелочноземельных металлов, встречающиеся в природе, также имеют эту структуру.

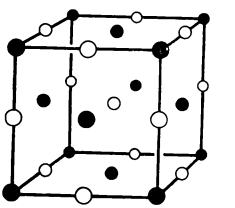


Рис. 13.5.

Галоидные соединения Cs имеют структуру, которая выглядит как объемноцентрированная кубическая, если пренебречь различием между ионами (рис. 13.6). («Решетка» будет простой кубической, в каждой точке которой находится молекула CsCl. Заметим, что примеров одноатомных кристаллов с простой кубической решеткой не имеется.) Такая структура называется структурой *хлористого цезия*.

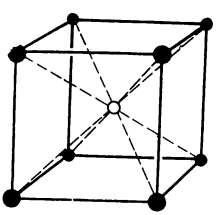
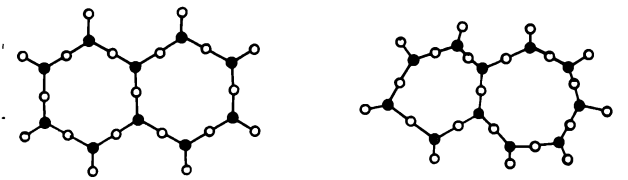


Рис. 13.6.

Пример другой простой структуры дает кубическая структура *цинковой обманки* ZnS. Она выглядит как структура алмаза (см. рис. 13.2, *д*), если пренебречь различием между ионами Zn и S, но фактически, подобно структуре NaCl, относится к гранецентрированной кубической структуре. Различие заключается в том, что в структуре NaCl промежуточные узлы в серединах ребер куба заняты другими ионами (так называемое октаэдрическое окружение). В структуре ZnS занята другая система промежуточных узлов (так называемое тетраэдрическое окружение), и в этом случае получается значительно более открытая структура, что с определенностью свидетельствует о наличии валентных сил. Если бы все атомы были одинаковы, структура цинковой обманки была бы тождественна структуре алмаза.

Более сложные химические соединения, так же как в уже рассмотренном примере N_2, имеют значительно более сложные струк-

туры, в особенности, конечно, это справедливо для органических соединений с большими несимметричными молекулами. Здесь мы не будем заниматься этими вопросами. Мы, однако, отвлечемся ненадолго от рассмотрения кристаллов и скажем несколько слов о стеклах. Отличие структуры стекла от кристаллической структуры можно проследить на примере SiO_2. Это вещество обладает как кристаллической формой (кварц), так и аморфной формой (*кремнезем*).



а) *б)*

Рис. 13.7.

Кристаллическую форму можно схематически представить как решетчатую систему правильных шестиугольников (рис. 13.7, *а*). Аморфная форма представляет аналогичную решетчатую систему, но уже нерегулярную — большей частью шестиугольники, хотя встречаются пяти- и семиугольники и т. п. (рис. 13.7, *б*). *Стекла* имеют формулу, аналогичную формуле кремнезема Si_6O_{12}, в которой некоторые из ионов Si^{++++} замещены на ионы Na^+, Ca^{++}, Pb^{++} и т. д. Например, формула оконного стекла — $Na_2CaSi_5O_{12}$. Заметьте, что суммарная валентность заместителей равняется валентности Si. Следует сказать, однако, что из рассмотренного нами примера отнюдь не следует, что все аморфные материалы должны быть химическими соединениями. Например, элементы фосфор P и сера S часто встречаются в аморфной форме.

§ 13.5. Плотность кристаллов и межатомные расстояния

Макроскопическая плотность кристалла зависит, очевидно, от массы атомов, и от их диаметра, и, кроме того, от структуры кристалла, которая определяет, насколько плотно упакованы атомы. Рассмотрим, прежде всего, гипотетический пример простой кубической структуры кристалла. Маленький куб, показанный на рис. 13.2, *а*, называется элементарной ячейкой. Если ребро этого куба обозначить через a (обычно эту величину называют «*постоянной решетки*»), то для простой кубической структуры

$$d = a,$$

где d — диаметр атома, так как ребро куба равно расстоянию между ближайшими соседями. Здесь мы предполагаем, что атомы представляют собой твердые сферы, которые соприкасаются, так что расстояние между центрами равно диаметру. Объем, приходящийся на один атом, равен a^3. (Заметим, что только один из атомов, показанных на рис. 13.2, *а*) «принадлежит» этому кубу, другие атомы «принадлежат» соседним кубам.) Масса атома $m = M/N_0$, где M — молекулярный вес, N_0 — число Авогадро, и поэтому плотность в случае простой кубической структуры равна

$$\rho = M/N_0a^3. \tag{13.1}$$

Рассмотрим более реалистический пример: для объемноцентрированной кубической структуры стороной элементарной ячейки опять будет ребро куба a. Однако теперь расстояние между ближайшими соседями (диаметр атома) равно расстоянию от вершины куба до его центра (рис. 13.2, *б*), или

$$d = a\sqrt{3}/2.$$

Объем куба равен a^3, однако в этом случае два атома «принадлежат» этому кубу (атом в вершине и атом в центре куба), так что объем, приходящийся на один атом, равен $a^3/2$. В этом случае плотность объемноцентрированной кубической структуры равна

$$\rho = 2M/N_0a^3. \tag{13.2}$$

Например, плотность Na равна 0,97 *г/см*^{3}, а его молекулярный вес $M = 23{,}0$. Тогда

$$a = (2M/N_0\rho)^{1/3} = (2 \cdot 23/6{,}02 \cdot 10^{23} \cdot 0{,}97)^{1/3}\ см = 4{,}28\ \text{Å}.$$

Поэтому диаметр атома натрия составляет

$$d = a\sqrt{3}/2 = 3{,}71\ \text{Å}.$$

Для того чтобы выяснить, сколько атомов, показанных в каждой элементарной ячейке на рис. 13.2, *принадлежит* этой ячейке, мы должны «приписать» некоторые из них данной ячейке и усмотреть, что другие атомы занимают соответствующие положения в соседних ячейках и поэтому принадлежат к ним. Например, в элементарной ячейке гранецентрированной кубической структуры (рис. 13.2, *в*) четыре атома принадлежат ячейке. В качестве этих атомов мы можем выбрать атом в левой нижней передней вершине куба и три атома в серединах граней, сходящихся в этой вершине. После этого видно, что все другие атомы принадлежат к кубам, соприкасающимся с данным. Например, атом в правой нижней передней вершине принадлежит кубу, расположенному вправо от данного, так

как для этого нового куба этот атом будет в левой нижней передней вершине. Аналогично атом в левой нижней задней вершине принадлежит кубу, расположенному сзади данного. Атом в середине задней грани относится к атому в левой нижней задней вершине и также принадлежит кубу, расположенному сзади данного. Есть и другой метод подсчета атомов в элементарной ячейке: надо рассмотреть, каким образом плоскости, представляющие грани куба, рассекают сферические атомы, и сложить доли этих атомов, которые находятся внутри данного куба. От каждого из восьми атомов в вершинах куба внутрь куба входит по одному октанту (итого — один атом), и от каждого из шести атомов, лежащих в серединах граней, внутрь куба входит по полусфере (итого — три атома). В сумме мы опять получаем четыре атома в элементарной ячейке. Числа атомов в элементарной ячейке для каждой из структур показаны ниже.

Структура	Число атомов в элементарной ячейке
Простая кубическая	1
Объемноцентрированная кубическая .	2
Гексагональная с плотной упаковкой	2
Гранецентрированная кубическая . .	4
Алмаз	8

В качестве примера ионного кристалла рассмотрим NaCl. Сумма радиусов Na^+ и Cl^- равна половине ребра куба (см. рис. 13.5), или

$$^1/_2 (d_1 + d_2) = a/2,$$

где d_1 и d_2 — диаметры ионов двух типов. Кубическая элементарная ячейка содержит четыре иона Na^+ и четыре иона Cl^- (т. е. четыре молекулы NaCl). Поэтому

$$\rho = 4M/N_0 a^3 \quad (\text{NaCl}), \tag{13.3}$$

где $M = 58{,}4$ — молекулярный вес NaCl. Отсюда

$$a = (4M/N_0\rho)^{1/3} = (4 \cdot 58{,}4/6{,}02 \cdot 10^{23} \cdot 2{,}16)^{1/3}\ см = 5{,}63\ Å.$$

Это значение равно сумме диаметров ионов Na^+ и Cl^-. Однако теперь мы уже не можем сделать вывод, что на ион Na^+ приходится 3,71 Å из этой величины, так как ион Na^+, в котором не хватает одного электрона, будет много меньше нейтрального атома Na. В действительности ион Cl^- приблизительно в 2 раза больше иона

Na^+, хотя обоснование этого заключения увело бы нас слишком далеко в сторону, и мы не будем сейчас этим здесь заниматься.

Наконец, мы воспользуемся соотношением (13.1) для того, чтобы установить область возможных значений плотности для всех материалов. Из него следует, что кристаллы более тяжелых элементов должны иметь бóльшие плотности, и, вообще говоря, это заключение оправдано. При переходе от водорода к урану атомный вес увеличивается в 238 раз. С ростом атомного веса диаметры атомов также растут, но не более чем приблизительно в 2 раза, как мы увидим в гл. 22. Поэтому можно ожидать, что значения плотности возрастают в 20 или 30 раз, и это заключение также справедливо. Однако изменение плотности в зависимости от атомного веса ни в коей мере не является монотонным: размеры атомов увеличиваются в каждой группе (столбец в периодической таблице), но в то же время они резко уменьшаются при переходе слева направо вдоль данной строки (табл. 1), так что по всей периодической таблице имеются значительные отклонения.

§ 13.6. Дифракция рентгеновских лучей

Явление дифракции падающего на кристалл пучка рентгеновских лучей, которые рассеиваются только в некоторых строго определенных направлениях, зависит, так же как и плотность вещества, в первую очередь от расположения атомов в кристалле. Так как кристаллы представляют собой регулярные распределения объектов (атомов), которые могут рассеивать свет, то они действуют как своеобразные (трехмерные) дифракционные решетки. Если на кристалл падает свет соответствующей длины волны, то будет наблюдаться дифракция. Эта соответствующая длина волны порядка величины постоянной решетки (расстояние между атомами), т. е. около 1 Å. Поэтому такой «свет» должен быть рентгеновскими лучами. Действительно, наибольшая информация о структуре кристаллов была получена в первую очередь при изучении дифракционных картин, полученных при дифракции рентгеновских лучей на кристаллах. (В последнее время дополнительная информация получается также при изучении дифракции нейтронов в кристаллах, но здесь мы это не будем рассматривать.)

Явление дифракции рентгеновских лучей в кристаллах обусловлено интерференцией излучения, рассеянного различными атомами, и происходит вследствие регулярности распределения атомов в пространстве. Если излучение (будь то свет или рентгеновские лучи) падает на атом, то часть его рассеивается во всех направлениях. (Взаимодействие между излучением и атомом зависит от электронного строения атома, однако в нашем теперешнем изложении эту

зависимость можно не рассматривать.) Так как взаимодействие рентгеновских лучей с атомами очень слабо (именно поэтому рентгеновские лучи проходят сквозь вещество), то единственными направлениями, в которых можно обнаружить сколько-нибудь заметное рассеяние, будут те, по которым миллионы атомов рассеивают «кооперированно», что и приводит к интерференции. Определение этих «дифракционных направлений» сводится просто к геометрическому построению, которым мы сейчас займемся.

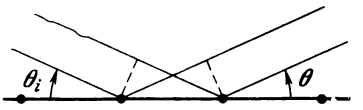


Рис. 13.8.

Прежде всего рассмотрим в кристалле некоторую атомную плоскость, т. е. плоскость, на которой лежит много атомов. Существование таких плоскостей является следствием регулярности кристаллической структуры. Из рис. 13.8 видно, что два падающих параллельных пучка, находящихся в фазе, будут рассеиваться в фазе (конструктивно интерферировать), если угол отражения θ равен углу падения θ_i, потому что тогда оптические пути по двум лучам одинаковы. Вследствие того, что испускаемое атомом излучение образует с плоскостью атомов такой же угол, что и падающее излучение, т. е. так же как и в случае отражения света от зеркала, дифрагированный пучок часто называют пучком, который «отражен» от плоскости атомов.

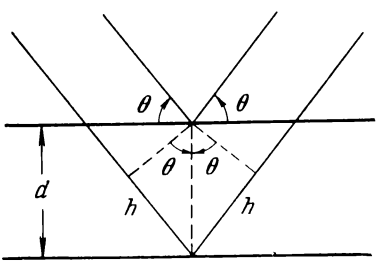


Рис. 13.9.

Падающий пучок проходит через миллионы таких плоскостей в кристалле, и поэтому нужно учесть разность фаз между пучками, «отраженными» от последовательных плоскостей. Разность хода двух пучков, показанных на рис. 13.9, равна сумме двух отрезков, обозначенных через h. Так как $h = d \sin \theta$, где d — расстояние между двумя соседними плоскостями, то разность хода равна $2d \sin \theta$. Для образования конструктивной интерференции (отраженные пучки в фазе) разность хода должна равняться $n\lambda$, где n — целое число, т. е.

$$2d \sin \theta = n\lambda. \tag{13.4}$$

Это соотношение называется «*условием Брэгга*». Оно определяет направления (при $n = 1, 2, 3, \ldots$) распространения рентгеновских лучей, дифрагированных на данной системе плоскостей кристалла.

§ 13.7. Условие Брэгга

Прежде чем рассматривать применения условия Брэгга, полезно вывести его еще раз более строгим образом. Пусть r — радиус-вектор между рассматриваемыми атомами и пусть направление падающего излучения определяется единичным вектором $\mathbf{e}_i$, а направление рассеянного излучения — единичным вектором $\mathbf{e}_s$ (рис. 13.10).

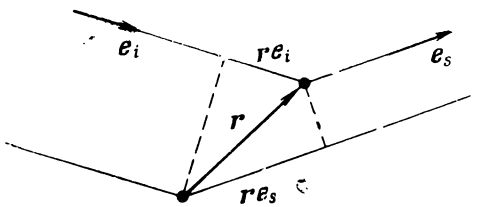


Рис. 13.10.

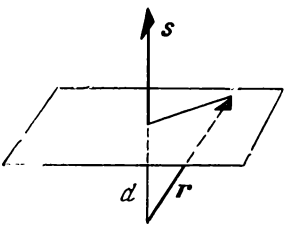


Рис. 13.11.

Чтобы получилась конструктивная интерференция, разность хода указанных двух лучей должна равняться целому числу длин волн

$$\mathbf{re}_s - \mathbf{re}_i = n\lambda, \quad \text{или} \quad \mathbf{rs} = n\lambda, \ \mathbf{s} = \mathbf{e}_s - \mathbf{e}_i.$$

Уравнение $\mathbf{rs} = \text{const}$, где $\mathbf{s}$ — постоянный вектор, представляет собой векторную форму записи уравнения плоскости, перпендикулярной направлению вектора $\mathbf{s}$. Это становится очевидно, если рассмотреть рис. 13.11, так как все векторы $\mathbf{r}$, концы которых лежат на плоскости, перпендикулярной вектору $\mathbf{s}$, имеют одну и ту же компоненту вдоль $\mathbf{s}$ (проекцию $\mathbf{r}$ на $\mathbf{s}$). Таким образом, произведение $\mathbf{rs}$ одинаково для всех этих векторов, а уравнение $s_x x + s_y y + s_z z = \text{const}$ представляет собой уравнение этой плоскости в декартовых координатах. Тогда все атомы (если они вообще имеются), которые лежат на плоскости, нормаль к которой есть $\mathbf{s}$, будут интерферировать конструктивно с атомом, находящимся в начале координат (на расстоянии d от плоскости), если будет соблюдено условие

$$\mathbf{rs} = n\lambda. \tag{13.5}$$

Это соотношение и есть *условие Брэгга* (см. уравнение (13.4)), так как из рис. 13.12 мы имеем $|\mathbf{s}| = 2\sin\theta$, так что $\mathbf{rs} = 2d\sin\theta$.

Для любой рассматриваемой кристаллической структуры имеется много (в действительности бесконечно много) различных систем плоскостей, содержащих атомы, причем расстояние между соседними плоскостями системы будет различным для разных систем. Однако для всех систем плоскостей $d \leqslant a$, где a — постоянная кристаллической решетки (рис. 13.13). Следовательно, для $\lambda > 2a$ вообще не

будет никакой дифракции, так как согласно закону Брэгга $\lambda = (2d/n)\sin 0$, и $d \leqslant a$, $1/n \leqslant 1$, $\sin 0 \leqslant 1$, т. е. должно выполняться условие

$$\lambda \leqslant 2a.$$

Этому условию, выполнение которого необходимо для получения дифракционной картины, удовлетворяют рентгеновские лучи. В твердых телах атомы, диаметры которых, как мы уже видели, составляют несколько ангстремов, «соприкасаются», так что a будет порядка нескольких ангстремов. Поэтому длины волн излучения также должны находиться в этой области спектра.

Угол θ определяется направлением падающего пучка рентгеновских лучей по отношению к кристаллу для каждой из систем отражающих плоскостей, а длина волны λ определяется источником рентгеновских лучей (получение рентгеновских лучей будет рассмотрено в

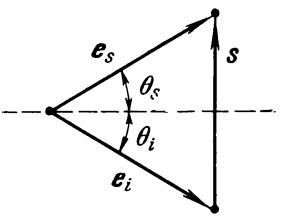


Рис. 13.12.

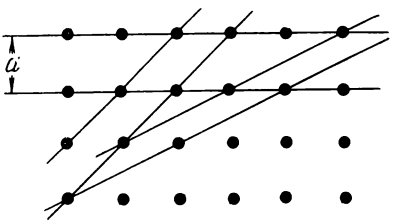


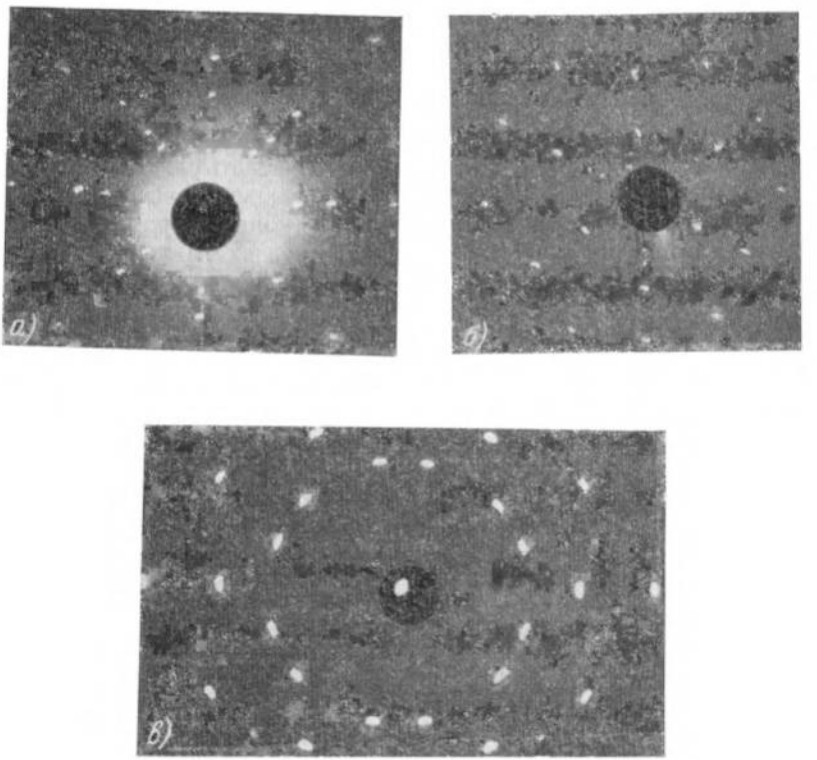
Рис. 13.13.

ч. IV). Таким образом, для произвольно выбранной длины волны и направления падающего пучка будет чистой случайностью, если в кристалле найдется система плоскостей, удовлетворяющая условию Брэгга. Действительно, для того чтобы получить дифракционную картину, мы должны иметь или источник с непрерывно меняющейся λ или возможность непрерывно менять угол θ. Существуют три основных метода наблюдения дифракции, причем на практике каждый из них имеет ряд разновидностей.

1. *Метод Лауэ*: монокристаллический образец; угол падения фиксирован; непрерывный интервал длин волн («белое» излучение). Дифрагированные пучки наблюдаются (обычно на фотопленке) в направлениях, удовлетворяющих условию Брэгга для данных λ и n для некоторой системы плоскостей (фото VI).

2. *Метод вращения кристалла*: монокристаллический образец вращается; при этом угол падения может приобретать все значения; длина волны фиксирована («монохроматическое» излучение). Дифрагированный пучок наблюдается при такой ориентации кристалла, когда условие Брэгга удовлетворяется для некоторой системы плоскостей.

3. *Метод Дебая — Шерера*: порошковый (или поликристаллический) образец; угол падения фиксирован; длина волны фиксирована.



VI. Лауэграммы:
а) кристалла AgBr. Падающий пучок направлен приближенно вдоль ребра куба. Лауэграмма имеет четырехкратную симметрию. *б*) кристалла AgBr. Падающий пучок направлен вдоль главной диагонали куба. Лауэграмма имеет трехкратную симметрию. *в*) кристалла Mg. Лауэграмма имеет гексагональную симметрию.

Условие Брэгга удовлетворяется для различных плоскостей некоторых случайно ориентированных кристалликов образца.

§ 13.8. Метод Лауэ

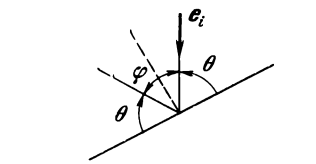
В качестве простого примера дифракции Лауэ рассмотрим простой кубический кристалл и изучим отражение белого излучения от систем плоскостей кристалла, показанных на рис. 13.14. Иначе говоря, вычислим направление рассеянных пучков и их длины волн, если

направление падающего пучка определяется вектором $\mathbf{e}_i$. Замечая, что угол φ между рассеянным и падающим пучками равен $\varphi = 180° - 2\theta$, мы получим для плоскостей *1* и *2*

$$\theta_1 = 90°, \quad d_1 = a, \quad \varphi_1 = 0, \quad \lambda_1 = 2\frac{a}{n};$$

$$\theta_2 = 45°, \quad d_2 = \frac{a}{\sqrt{2}}, \quad \varphi_2 = 90°, \quad \lambda_2 = \frac{2a}{n\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{a}{n}.$$

Для плоскости *3* найти d геометрически будет труднее, хотя, разумеется, это можно сделать. Удобнее использовать следующий прием: если в кристалле имеется N атомов, то его объем равен Na^3, так как каждому атому сопоставляется маленький кубик с ребром a. Этот объем можно также получить как сумму объемов всех маленьких прямых параллелепипедов (рис. 13.15) с ребрами a (перпендикулярно плоскости чертежа), l и d, так что $Na^3 = Nald$ или $d = a^2/l$. Геометрически найти длину l легче, чем d; в нашем случае очевидно, что $l = a\sqrt{2^2 + 1^2} = a\sqrt{5}$. Теперь для плоскостей *3* и *4* получим



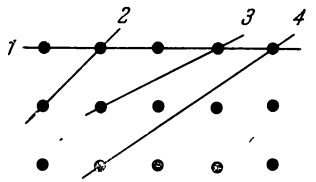


Рис. 13.14.

$$\theta_3 = \operatorname{arctg}\frac{2}{1} = 63{,}4°, \quad d_3 = \frac{a}{\sqrt{5}},$$

$$\varphi_3 = 53°, \quad \lambda_3 = \frac{2a}{n\sqrt{5}}\frac{2}{\sqrt{5}} = \frac{4}{5}\frac{a}{n};$$

$$\theta_4 = \operatorname{arctg}\frac{3}{2} = 56{,}3°, \quad d_4 = \frac{a}{\sqrt{13}},$$

$$\varphi_4 = 67°, \quad \lambda_4 = \frac{2a}{n\sqrt{13}}\frac{3}{\sqrt{13}} = \frac{6}{13}\frac{a}{n}.$$

Дифрагированные пучки будут иметь и многие другие направления, особенно если мы рассматриваем трехмерную картину. В противоположность вычислению направлений дифрагированных пучков вычисление их интенсивности представляет собой значительно более сложную задачу, которой мы здесь вообще не будем касаться. Можно, однако, отметить, что длины волн рассеянных пучков становятся все меньше при уменьшении расстояния между плоскостями. Так как в падающем пучке должна быть минимальная длина волны $\lambda_{\min}$ (в противном случае этот пучок содержал бы бесконечную энергию), то в рассеянном пучке могут быть только длины волны

$$\lambda \geqslant \lambda_{\min},$$

где величина $\lambda_{\min}$ определяется источником рентгеновских лучей, а не кристаллической решеткой. Для типичного рентгеновского излучения $\lambda_{\min} = 1/4$ Å, как мы увидим позднее. Значение «порядка»

отражения (значение n), которое получается, например, для системы плоскостей 2, равно $n_{max} = a/\lambda_{min}$. Если $a \approx 3$Å, то $n_{max} \approx 12$. Для более тесно расположенных плоскостей значения порядка отражения меньше и интенсивность отраженных пучков слабее.

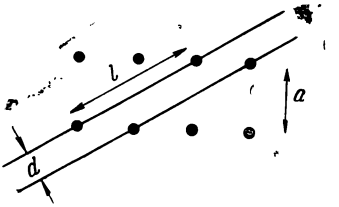


Рис. 13.15.

Если углы дифракции определены по методу Лауэ, то можно делать заключения о структуре и об ориентации образца, однако ничего нельзя сказать о величине постоянной решетки a, так как невозможно (или по крайней мере чрезвычайно трудно) измерить длины волн в дифрагированных пучках. Два других метода позволяют определить величину a, если известна длина волны источника монохроматических рентгеновских лучей.

Задачи

13.1. Показать, что отношение объема плотно упакованных твердых сфер к полному объему, занимаемому ими, равно для простой кубической структуры $\pi/6 = 0{,}52$ и для гранецентрированной кубической структуры или для гексагональной структуры с плотной упаковкой $\sqrt{2}\pi/6 = 0{,}74$.

13.2. В гексагональной структуре с плотной упаковкой разместить тетрагональные промежуточные узлы, которые должны находиться в центрах тетраэдров, образованных четырьмя ближайшими соседними атомами данной структуры. (Если половина из этих узлов занята другими ионами, то мы получаем структуру «вюртцита» *) или другую модификацию ZnS.)

13.3. Оценить относительное изменение объема, которого можно ожидать при переходе α-железа в γ-железо.

13.4. Найти в физических справочниках структуры оксидов и сульфидов двухвалентных металлов. Имеется ли какая-нибудь регулярность у тех из них, которые имеют структуру NaCl, в противоположность тем, которые имеют структуру ZnS.

13.5. Вычислить размеры элементарной ячейки Cu (значение плотности взять из справочника). Чему равен диаметр атома Cu?

13.6. Взять из справочника плотность всех щелочных металлов и вычислить диаметры их атомов.

13.7. Взять из справочника плотности всех щелочноземельных металлов и вычислить диаметры их атомов. Сравнить полученные значения со значениями, полученными в задаче 13.6, для металлов, находящихся в одной и той же строке периодической системы элементов.

13.8. Согласно результатам этой главы, если известны диаметры ионов Na^+, K^+, Cl^-, Br^-, то

$$a_{NaBr} + a_{KCl} = a_{KBr} + a_{NaCl}.$$

Вычислить размеры элементарной ячейки, используя значения плотностей, и проверить это соотношение.

*) Очень редкая димэрфная разновидность сернистого цинка ZnS гексагональной системы. (*Прим. ред.*)

13.9. Вычислить сумму диаметров ионов Cs^+ и Cl^-, используя значение плотности CsCl.

13.10. Вычислить сумму диаметров ионов Zn^{++} и S^{--}, используя значение плотности цинковой обманки. Произойдет ли изменение объема, если структура станет структурой вюртцита? (См. задачу 13.2.)

13.11. В опытах по дифракции рентгеновских лучей обычно используются лучи с длиной волны 1,54 Å (их получают в рентгеновских трубках с медной мишенью). Каков наименьший угол отражения этих лучей от кристаллов NaCl, если расстояние между ближайшими соседними атомами равно 2,81 Å? Сколько еще порядков отражения можно получить от этой же системы плоскостей?

13.12. Пусть в методе Лауэ «белое» рентгеновское излучение падает на кристалл NaCl в направлении, перпендикулярном плоскости, проведенной через диагонали параллельных друг другу граней куба (т. е. так, как проведена плоскость *2* на рис. 13.14), в то время как в условиях задачи 13.11 излучение падало перпендикулярно грани куба. Вычислить некоторые из углов, под которыми можно наблюдать рассеянное излучение.

Литература для справок

1. Киттель Ч., Введение в физику твердого тела, Физматгиз, 1962.
2. Жданов Г. С., Физика твердого тела, Физматгиз, 1962.

Глава 14

Механические и тепловые свойства кристаллов

Определенный тип структуры, который имеет данное вещество, определяется силами взаимодействия между атомами. Приступим теперь к изучению физического строения кристаллов в противоположность рассмотрению просто геометрических расположений атомов. Симметрия межатомных сил может привести к симметрии в кристалле: сферически симметричные атомы благородных газов при кристаллизации образуют плотно упакованную гранецентрированную кубическую структуру, в то время как несимметричные органические молекулы обычно имеют кристаллические структуры значительно более низкой симметрии. Реальные законы взаимодействия между атомами очень сложны и зависят от электронного строения атомов, которое можно понять только с помощью квантовой механики. Поэтому мы отложим попытки вывести эти законы теоретически, а сейчас просто предположим некоторый вид закона взаимодействия между атомами и посмотрим, какие макроскопические свойства кристалла можно рассчитать на этой основе. И наоборот, мы можем считать, что макроскопические свойства дают эмпирическую информацию о микроскопическом законе взаимодействия, который может быть позднее объяснен с помощью квантовомеханической теории строения атома. При выполнении этой программы мы не будем много заниматься тонкими различиями между разными типами кристаллических структур, а сосредоточим свое внимание на одном особенно простом примере ионного кристалла.

Для начала мы еще будем предполагать, что атомы находятся в положениях их равновесия. Как мы увидим позднее в этой главе, это предположение справедливо только в том случае, когда кристалл находится при абсолютном нуле температуры. Однако при изучении модулей упругости мы будем рассматривать также и смещения атомов из их равновесных положений. После этого мы рассмотрим колебания атомов около их положений равновесия, которые происходят при всех температурах выше абсолютного нуля, и рассчитаем теплоемкость и другие тепловые свойства кристаллов.

§ 14.1. Межатомные силы

В § 7.2 в связи с уравнением состояния Ван-дер-Ваальса мы уже обсуждали общий вид закона взаимодействия между атомами. Для того чтобы осуществлялся переход вещества в конденсированную фазу (например, жидкость), между атомами должны быть силы притяжения, а для того чтобы вещество занимало ненулевой объем, должны существовать, кроме того, и силы отталкивания. В § 8.3 мы даже

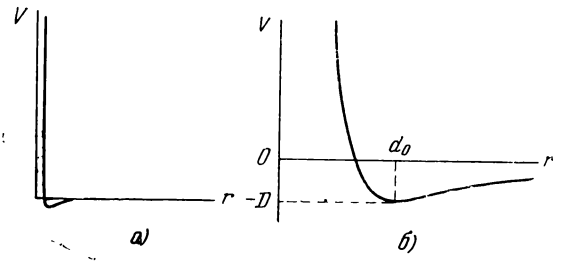


Рис. 14.1.

получили количественные сведения о силах отталкивания из рассмотрения средней длины свободного пробега, которую можно определить из экспериментов с явлениями переноса в газах и которая слабо зависит от сил притяжения между атомами. Закон сил (поле сил), действующих между атомами в твердом теле, будет точно таким же, как и для тех же атомов, образующих газообразную фазу. (Строго говоря, последнее положение будет неправильно для металлов и ионных материалов, так как в этих случаях сами атомы в твердой фазе до некоторой степени изменяются — ионизуются.) Важнейшее отличие твердого состояния от газообразного заключается не в ином виде закона взаимодействия между атомами, а в том, что если в газе атомы большую часть времени проводят на значительном удалении друг от друга, где силы взаимодействия слабы, то в конденсированной фазе атомы всегда находятся очень близко друг к другу, где эти силы довольно интенсивны. Можно сказать, что сейчас нас интересует та же самая картина, что и раньше (рис. 14.1, *а*), только в другом масштабе (рис. 14.1, *б*).

Действительно, мы сосредоточим наше внимание на области возле точки $r = d_0$, где силы отталкивания и притяжения равны (суммарная сила равна нулю) и где потенциальная энергия взаимодействия имеет *минимум*. Это расстояние d_0 можно связать с расстоянием между ближайшими соседями в кристалле, т. е. с равновесным расстоянием между ближайшими атомами. Если играют роль только силы взаимодействия между ближайшими соседями, как, например, в случае твердого состояния благородных газов, то расстояние между

ближайшими соседями будет равно расстоянию, на котором потенциальная энергия имеет минимум. Однако если важны дальнодействующие силы взаимодействия между соседними, а не только ближайшими соседними атомами, как, например, в ионных кристаллах, то равновесное расстояние несколько изменится.

Для того чтобы делать какие-либо количественные заключения, надо иметь аналитическое выражение для потенциальной энергии. Эмпирическое выражение, которое правильно передает ход кривой, было предложено Г. Ми довольно-таки давно, в 1907 г., за 20 лет до того, как стало возможным обосновать его теоретически. *Потенциал Ми* имеет вид суммы двух степенных функций:

$$V(r) = -\frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n}, \qquad n > m. \tag{14.1}$$

Постоянные A и B положительны. Условие $n > m$ необходимо для того, чтобы положительный член был преобладающим (стремился к бесконечности быстрее) при стремлении r к нулю и стремился к нулю (при стремлении r к бесконечности) быстрее, чем отрицательный член, что обеспечивает появление сил притяжения при больших r и сил отталкивания при малых r. После этого предлагались другие выражения, которые имели гораздо лучшее теоретическое обоснование. Однако они не давали значительно лучшего согласия с экспериментальными данными, а использование их было математически намного сложнее, так что мы поэтому будем рассматривать только потенциал Ми.

Из анализа явлений переноса в газах мы уже видели, что показатель степени члена, учитывающего отталкивание, довольно велик, скажем, порядка $n = 10$. Это оправдывает наше рассмотрение кристаллической структуры в виде системы плотно упакованных твердых сфер (для которых $n = \infty$). Однако эти сферы не являются абсолютно твердыми, и мы собираемся связать этот факт с явлением сжимаемости твердого тела. Кинетическая теория газов не дает много информации о показателе степени члена, учитывающего притяжение. К счастью, имеется один случай, когда мы можем предсказать значение m, не прибегая к помощи квантовомеханической теории. Считается, что *ионный кристалл* типа NaCl состоит из ионов Na^+ и Cl^-, а не из атомов Na и Cl. Справедливость этого предположения можно установить с помощью квантовой механики, однако его действительное оправдание заключается в согласии выводов, которые мы можем сделать на его основе, с наблюдаемыми на опыте свойствами кристаллов NaCl. Согласно этому предположению, притяжение между ионами Na^+ и Cl^- представляет собой просто электростатическое кулоновское притяжение. Таким образом, для одновалентных ионных кристаллов мы имеем

(в системе СГС)

$$A = e^2, \quad m = 1. \tag{14.2}$$

(В системе МКС $A = e^2/4\pi\varepsilon_0$.) В действительности можно построить теорию, вообще говоря, и для других типов связи, однако она оказывается наиболее плодотворной для случая ионной связи, и поэтому в дальнейшем мы сосредоточим свое внимание главным образом на случае ионной связи.

§ 14.2. Внутримолекулярные силы

Прежде чем применять соотношения (14.1) и (14.2) к рассмотрению проблемы об огромном числе атомов (или ионов), которые, собираясь вместе, образуют кристалл, будет полезно отойти на некоторое время в сторону и рассмотреть сначала более простую задачу двух атомов, образующих двухатомную молекулу. Для определенности мы будем иметь в виду молекулу парообразного NaCl. Предположим, что потенциальная энергия взаимодействия имеет вид (14.1), и вычислим разность энергий между стационарным равновесным состоянием молекулы (когда потенциальная энергия минимальна) и состоянием, в котором два иона разделены бесконечно большим расстоянием (рис. 14.1, *б*). Эту разность энергий, которая называется *энергией диссоциации* D молекулы, можно измерить экспериментально и результат сравнить с предсказываемым нашей теорией.

Прежде всего вычислим для потенциала Ми (14.1) значение $V(d_0)$. Для этого выразим неизвестный параметр B через параметр d_0, который можно определить экспериментально. Так как функция V имеет минимум в точке $r = d_0$ (см. рис. 14.1, *б*), то

$$\left.\frac{dV}{dr}\right|_{r=d_0} = 0.$$

Дифференцируя выражение (14.1) для $V(r)$ по r и приравнивая результат нулю в точке $r = d_0$, получим

$$B = \frac{m}{n} A d_0^{n-m}, \tag{14.3}$$

или

$$V(r) = \frac{A}{d_0^m}\left[\left(\frac{d_0}{r}\right)^m - \frac{m}{n}\left(\frac{d_0}{r}\right)^n\right]. \tag{14.4}$$

Это выражение содержит вместо постоянной B постоянную d_0, значение которой можно измерить, так как это есть просто расстояние между ядрами двух ионов нашей молекулы. Поэтому минимальное

значение потенциальной энергии будет равно

$$V(d_0) = -\frac{A}{d_0^m}\left(1 - \frac{m}{n}\right). \qquad (14.5)$$

В случае одновалентной ионной двухатомной молекулы можно использовать уравнение (14.2) и получить

$$V(d_0) = -\frac{e^2}{d_0}\left(1 - \frac{1}{n}\right). \qquad (14.6)$$

Эта энергия как раз равна кулоновской энергии $-e^2/d_0$ с поправкой на множитель $(1-1/n)$, учитывающий наличие сил отталкивания. Следовательно, энергия диссоциации молекулы будет равна

$$D \equiv -V(d_0).$$

Уравнение (14.6) связывает энергию диссоциации D и расстояние между ядрами d_0. Для того чтобы сравнивать это уравнение с экспериментом, надо знать показатель степени члена, учитывающего отталкивание n. Как мы уже видели ранее, n велико (около 10). Поэтому вклад члена, учитывающего отталкивание, в энергию мал — порядка 10%, так что не будет очень большой ошибки, если мы используем другое также большое значение n. Действительно, по причинам, которые станут ясны позднее, мы используем значение $n = 9$, однако для значений $n=9$ и $n=10$ значения D отличаются только на 1%. Как d_0, так и D можно получить из измеренного инфракрасного спектра паров NaCl. Экспериментальное значение d_0 равно 2,5 Å, так что из уравнения (14.6) для NaCl получим

$$D = 4{,}8^2 \cdot 10^{-20} \cdot 8/(2{,}5 \cdot 10^{-8} \cdot 9) = 8{,}1 \cdot 10^{-12}\ эрг = 5{,}1\ эв.$$

Это значение находится в хорошем согласии (в пределах ошибки в 4%) с экспериментальным значением, что подтверждает наши теоретические рассуждения. Для того чтобы избежать путаницы, надо подчеркнуть, что величина D является энергией диссоциации молекулы на ионы

$$NaCl \rightarrow Na^+ + Cl^-.$$

Часто энергию диссоциации определяют как энергию, необходимую для диссоциации молекулы на нейтральные атомы

$$NaCl \rightarrow Na + Cl.$$

Энергия ионизации, необходимая в промежуточной реакции

$$Na + Cl \rightarrow Na^+ + Cl^-,$$

зависит от электронного строения атомов, и мы отложим ее рассмотрение до гл. 22.

§ 14.3. Энергия связи кристалла

В качестве первого и самого простого применения наших результатов к проблеме твердого тела мы вычислим то, что обычно считают *химическим*, а не физическим свойством твердого тела, а именно, его *энергию связи*. Энергия связи — это энергия, которую надо сообщить (обычно в виде теплоты) кристаллу, для того чтобы разложить его на отдельные ионы, находящиеся далеко друг от друга. Энергия связи выражается через теплоту испарения твердого тела, энергию диссоциации NaCl и энергию ионизации Na и Cl. Очевидно, что эта энергия связана с разностью потенциальных энергий состояния, когда ионы находятся в их равновесных положениях, и состояния, когда они расходятся, удаляясь друг от друга, на бесконечность. Действительно, она представляет собой что-то вроде произведения полного числа ионов N на минимальное значение потенциальной энергии $V(d_0)$.

Вернемся к рассмотрению выражения (14.1) для потенциальной энергии взаимодействия между двумя атомами (или ионами). В твердом теле, где имеется много атомов, важно учесть взаимодействие между данным атомом и всеми другими атомами. В это взаимодействие могут включаться не только ближайшие его соседи, особенно в случае ионов, когда имеются дальнодействующие кулоновские силы. Например, в кристалле NaCl данный ион Na^+ взаимодействует путем отталкивания и притяжения с шестью ближайшими соседними ионами Cl^-. Кроме того, у него имеется заметное кулоновское взаимодействие с 12 следующими по близости к нему соседними ионами Na^+, в то время как короткодействующее отталкивание в этом случае будет очень малым, так как эти ионы «не соприкасаются». Более того, даже кулоновское взаимодействие не достигает очень большого значения не столько потому, что оно падает при увеличении расстояния между зарядами, сколько потому, что имеются взаимно уменьшающие друг друга вклады от перемежающихся последовательных слоев ионов Na^+ и Cl^-. Резюмируя, вместо (14.1) мы можем написать следующее выражение для потенциальной энергии взаимодействия данного иона со всеми другими ионами:

$$V'(r) = \alpha \frac{A}{r^m} + \beta \frac{B}{r^n}, \qquad (14.7)$$

где r — расстояние между ближайшими соседями. Постоянные α и β, которые учитывают взаимодействия со всеми соседями, как можно ожидать, не очень сильно отличаются от единицы. Их можно точно рассчитать для каждой данной кристаллической структуры. Если мы сложим все постепенно уменьшающиеся вклады в энергию взаимодействия от все более далеких соседей, то увидим, что в

сумме результат не очень сильно отличается от энергии взаимодействия только с одним соседним ионом.

Вычисление энергии связи кристалла можно производить точно таким же путем, как и вычисление энергии связи молекулы. Прежде всего, выразим коэффициент при члене, учитывающем отталкивание, в выражении (14.7) через расстояние d между двумя ближайшими соседями. (Ниже мы увидим, что равновесное расстояние d между ионами в кристалле несколько отличается от равновесного расстояния d_0 между ионами в двухатомной молекуле.) Дифференцируя выражение (14.7)

$$\frac{dV'}{dr}\Big|_{r=d} = 0,$$

находим

$$\beta B = \frac{m}{n}\alpha A d^{n-m}. \tag{14.8}$$

Подставив это значение в уравнение (14.7), получим

$$V'(r) = -\alpha\frac{A}{d^m}\left[\left(\frac{d}{r}\right)^m - \frac{m}{n}\left(\frac{d}{r}\right)^n\right]. \tag{14.9}$$

Это и есть энергия взаимодействия данного иона со всеми другими ионами. Минимальное значение этой энергии равно

$$V'(d) = -\alpha\frac{A}{d^m}\left(1 - \frac{m}{n}\right). \tag{14.10}$$

Энергия связи U на один моль будет равна

$$U = -N_0 V'(d),$$

где N_0 — число Авогадро. В моле имеется $2N_0$ молекул и ионов, но тогда надо ввести множитель 1/2 для того, чтобы не учитывать энергию взаимодействия данной пары ионов дважды. Поэтому энергия связи равна

$$U = \alpha N_0\frac{A}{d^m}\left(1 - \frac{m}{n}\right). \tag{14.11}$$

В случае одновалентного ионного кристалла, используя соотношение (14.2), получаем

$$U = \alpha N_0\frac{e^2}{d}\left(1 - \frac{1}{n}\right). \tag{14.12}$$

Это выражение в N_0 раз больше энергии связи молекулы, даваемой уравнением (14.6), с точностью до нового множителя α и несколько другого равновесного расстояния d между ионами вместо d_0. Постоянная α называется *постоянной Маделунга*; для структуры NaCl $\alpha = 1{,}748$, для CsCl $\alpha = 1{,}763$, для ZnS $\alpha = 1{,}638$.

Наш теоретический результат для энергии связи можно сравнить со значением 183 *ккал/моль* для NaCl, полученным в калориметрических измерениях. Число молекул в единице объема равно $1/2d^3$ (объем, приходящийся на один ион в структуре NaCl, равен d^3, а число молекул составляет 1/2 от числа ионов). Поэтому плотность равна

$$\rho = M/2d^3N_0,$$

где M — молекулярный вес. Подставляя значения $N_0 = 6{,}02 \times \times 10^{23}$ *моль*$^{-1}$; $\rho = 2{,}16$ *г/см*^{3}; $M = 58{,}4$ *г/моль*, мы находим, что $d = = 2{,}81 \cdot 10^{-8}$ *см*. Тогда при $n = 9$ мы получим из соотношения (14.12) значение $U = 184$ *ккал/моль*, что находится в очень хорошем согласии с экспериментальным значением. Именно это хорошее совпадение и оправдывает наше предположение о том, что в кристалле NaCl осуществляется ионная связь. Энергия связи на молекулу 184 *ккал/моль* $= 8{,}0$ *эв/молекула* несколько больше, чем энергия связи отдельной молекулы, вычисленная в предыдущем параграфе.

Сравнивая уравнения (14.3) и (14.8), мы видим, что равновесное расстояние между ионами в твердых телах должно несколько отличаться от равновесного расстояния между ионами в изолированной молекуле

$$d = d_0\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{1/(n-m)},$$

и действительно, оказывается, что d несколько больше, чем d_0. Так как силы отталкивания являются короткодействующими, то можно ожидать, что только взаимодействия с шестью ближайшими соседями будут давать вклад, и поэтому $\beta \approx 6$.

Постоянная Маделунга $\alpha = 1{,}748$ меньше, чем β, так как дальнодействующие кулоновские взаимодействия с положительно и отрицательно заряженными соседями частично взаимно уничтожаются, если принять во внимание также и воздействие далеких соседей. Поэтому

$$d \approx d_0\,(6/1{,}748)^{1/8} = 1{,}16\,d_0.$$

Из эксперимента мы имеем $d = (2{,}8/2{,}5)d_0 = 1{,}12\,d_0$, что снова находится в прекрасном согласии с теорией.

Двухвалентные ионные кристаллы должны иметь значительно большую энергию связи, чем одновалентные, так как для первых вместо уравнения (14.2) мы получаем

$$A = (2e)^2 = 4e^2.$$

Например, CaS имеет структуру NaCl и постоянную решетки приблизительно такую же, как и NaCl (с точностью до 1%), а поэтому

его энергия связи должна быть в 4 раза больше, или 732 *ккал/моль*. Экспериментальных значений не имеется, но большие значения энергий связи оксидов и сульфидов щелочноземельных металлов доказываются их более высокими точками плавления.

§ 14.4. Модуль упругости

Теперь мы хотим показать, что из нашей модели межатомных сил будет следовать справедливость закона Гука для твердых тел, а также вполне разумное значение модуля упругости. Для того чтобы показать это, рассмотрим некоторую *линейную* цепочку атомов в кристалле. Будем считать, что к концам цепочки приложены одинаковые по абсолютной величине растягивающие ее силы и что под действием этих сил расстояние между двумя соседними атомами цепочки изменяется от $r = d$ до $r = d + x$ (рис. 14.2).

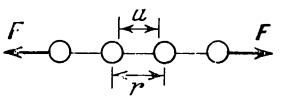


Рис. 14.2.

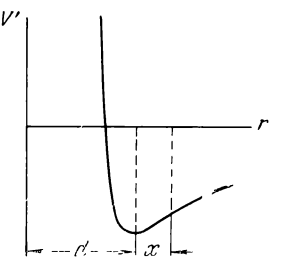


Рис. 14.3.

При увеличении расстояния между соседними атомами потенциальная энергия возрастает (рис. 14.3) и между атомами возникает сила притяжения. Для того чтобы вся цепочка атомов находилась в равновесии, внешние растягивающие силы должны уравновешивать эти силы притяжения между атомами. Поэтому прежде всего нам надо сосчитать силу с помощью выражения (14.9) для потенциальной энергии иона в кристалле.

Сила получается дифференцированием этого выражения для потенциальной энергии:

$$F(r) = \frac{dV'}{dr} = \alpha m A \left[\frac{1}{r^{m+1}} - \frac{d^{n-m}}{r^{n+1}}\right].$$

В частном случае одновалентного ионного кристалла $A = e^2$, $m = 1$ и

$$F(r) = -\alpha e^2 \left[\frac{1}{r^2} - \frac{d^{n-1}}{r^{n+1}}\right].$$

В этом выражении для силы мы произведем замену переменных (см. рис. 14.3)

$$r = d + x = d(1 + \varepsilon),$$

где

$$\varepsilon \equiv x/d$$

— *деформация*. Это не только микроскопическая деформация данного звена цепочки атомов, но также и макроскопическая деформация всей цепочки атомов, так как если мы увеличиваем расстояние между двумя соседними атомами в цепочке на 1%, то и длина всей цепочки также увеличивается на 1%. Выполняя указанную подстановку, мы получаем силу как функцию деформации в виде

$$F = -\frac{\alpha e^2}{d^2}\left[(1+\varepsilon)^{-2} - (1+\varepsilon)^{-n-1}\right]. \qquad (14.13)$$

Мы видим, что эта сила не является линейной функцией деформации, так что закон Гука мы не получаем. Следует, однако, заметить, что закон Гука справедлив только для малых деформаций, которые мы сейчас и рассмотрим. Если величина деформации мала, то будет законно разложить выражение для F в ряд по степеням ε (ряд Тейлора) и удержать в этом разложении только члены низшего порядка. Выполняя разложение в ряд Тейлора (или просто используя формулу бинома Ньютона), мы получаем

$$F \approx -\frac{\alpha e^2}{d^2}\left[1 - 2\varepsilon - 1 + (n+1)\varepsilon\right],$$

$$F \approx -\frac{\alpha (n-1) e^2}{d^2}\varepsilon. \qquad (14.14)$$

После того как мы получили таким образом закон Гука, можно ввести напряжение вместо силы и найти выражение для модуля упругости. Так как площадь поперечного сечения данной цепочки атомов равна d^2, то напряжение имеет вид

$$S \approx F/d^2.$$

Тогда

$$S \approx -\alpha\,(n-1)e^2\varepsilon/d^4,$$

где коэффициент при ε и есть модуль упругости. (Знак минус здесь возник потому, что мы рассматриваем вместо внешнего внутреннее напряжение, т. е. силу на единицу площади поперечного сечения, с которой материал сопротивляется приложенному внешнему напряжению, равному по абсолютной величине и противоположному по направлению внутреннему напряжению.) Оказывается, что полученное выражение для модуля упругости дает правильный порядок этой величины.

Приведенная выше схема вычислений будет одной и той же как для растяжения, так и для сжатия и не только показывает, почему будет справедлив закон Гука, но и дает качественную оценку модуля Юнга. Однако для получения количественных результатов эти

вычисления недостаточно точны. Причина этого заключается в том, что эти вычисления основаны на выражении для $V'(r)$, где r, как предполагалось, есть расстояние между двумя ближайшими соседними ионами. Если же приложено растягивающее напряжение, то расстояние между ионами в направлении действия напряжения увеличивается, однако в перпендикулярных направлениях расстояние между ионами не увеличивается на ту же самую величину. Более того, на деле межионные расстояния в этих перпендикулярных направлениях, вообще говоря, *уменьшаются*. Поэтому точное вычисление модуля Юнга чрезвычайно сложно.

Однако оказывается возможным произвести такое прямое вычисление в случае гидростатического давления, потому что в этом случае все межионные расстояния уменьшаются одинаково. Мы не будем проводить здесь этот расчет, а приведем результат для *модуля всестороннего сжатия* β (не следует путать с постоянной в (14.7)):

$$\beta = \gamma\,\alpha(n-1)e^2/d^4. \tag{14.15}$$

Мы получили то же выражение, что и в предыдущей формуле, за исключением числовой постоянной γ.

Значения γ определяются типом кристаллической структуры. Так, для NaCl $\gamma = 1/18$, для CsCl—$1/8\sqrt{3}$, для ZnS—$1/16\sqrt{3}$.

Возвращаясь к нашему примеру NaCl и используя значения постоянной Маделунга α, а также n и d, которые уже были приведены ранее, мы получаем из уравнения (14.15) значение $\beta = 2{,}9 \cdot 10^{11}$ *дин/см*^{2}, что согласуется с экспериментальным значением, если его экстраполировать к температуре $T = 0$. Разумеется, числовой множитель 1/18, который появляется при точном расчете, сильно отличается от единицы, однако наши грубые вычисления дают тем не менее правильную зависимость от α, n, e, d. (Численное значение модуля Юнга ненамного отличается от значения модуля всестороннего сжатия.) Более того, соотношение (14.15) дает на деле один из лучших способов для определения показателя степени n, так как модуль всестороннего сжатия согласно этому соотношению линейно зависит от n, в то время как энергия связи (14.12) содержит зависимость от n лишь в виде малой поправки.

Таким образом, наша простая модель находится в хорошем количественном согласии с двумя свойствами кристалла, которые на первый взгляд близко не связаны,— химической энергией связи и модулями упругости. Наша модель объясняет также закон Гука и тот факт, что для всех материалов модуль растяжения равен модулю сжатия. Эти два последних результата получаются просто потому, что мы использовали приближение первого порядка к закону взаимодействия атомов, а этот приближенный закон взаимодействия будет линейной и симметричной функцией смещения атомов из положений равновесия.

§ 14.5. Тепловые колебания

При любой температуре выше абсолютного нуля атомы твердого тела не будут оставаться в покое в их равновесных положениях, как это предполагалось до сих пор в нашем изложении, но подобно атомам газа будут участвовать в тепловом движении. И действительно, как и в случае газа, мы найдем, что средняя кинетическая энергия атома будет равна

$$\frac{1}{2}m\overline{v^2} = \frac{3}{2}kT.$$

Однако оказывается, что характер движения атомов в твердом теле будет совершенно отличен от характера движения атомов газа. В твердом теле атомы просто колеблются возле их положений равновесия, в то время как в газах атомы совершают длинные свободные перелеты, лишь случайно прерываемые столкновениями с другими атомами. В случае газов теоретический анализ проблемы упрощался, так как мы могли в качестве хорошего приближения полностью пренебречь взаимодействиями между атомами (если исключить из рассмотрения кратковременные соударения). В твердом теле нельзя пренебречь взаимодействиями — атомы все время «соударяются» с их соседями, но тем не менее задача делается совсем простой, если мы будем рассматривать колебания каждого атома относительно его фиксированного равновесного положения как независимые. В жидкости мы не можем использовать ни одного из этих упрощающих предположений — атомы расположены очень близко друг к другу и находятся в постоянном взаимодействии, но в то же самое время они двигаются и могут уходить очень далеко от их первоначальных положений. Именно поэтому мы и не рассматриваем жидкого состояния. В этом параграфе мы прежде всего оценим частоту колебаний атомов, а в последующих параграфах рассчитаем некоторые тепловые свойства твердого тела — его теплоемкость и коэффициент теплового расширения.

Для того чтобы оценить частоту колебаний, вернемся к рассмотрению соотношения (14.14), в котором мы заменим ε на x/d:

$$F \approx -\left[\frac{\alpha(n-1)e^2}{d^3}\right]x. \qquad (14.16)$$

Видно, что в нашем приближении сила взаимодействия между атомами имеет вид силы, вызывающей гармонические колебания, и поэтому мы можем для определения частоты колебаний использовать результаты, полученные для гармонического осциллятора. Напомним, однако, что более точный расчет модуля упругости приводит к появлению числового множителя, которым нельзя пренебрегать.

Более того, в данном случае нам приходится искать частоту колебаний отдельного иона в предположении, что все остальные ионы

находятся в их равновесных положениях, в то время как при вычислении модуля упругости предполагалось, что все межионные расстояния увеличиваются одинаково на одну и ту же долю. Дополнительная трудность возникает из-за того, что в действительности положения всех прочих ионов не фиксированы, а все эти ионы колеблются одновременно, так что расстояния внутри отдельных пар изменяются сложным образом. Поэтому мы удовлетворимся рассмотрением более простой задачи о вычислении частоты колебаний *двухатомной молекулы*. Эту задачу можно решить довольно точно, и мы получим результат, приведенный в § 4.4.

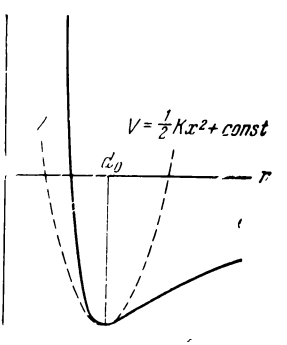


Рис. 14.4.

Для вычисления частоты колебаний молекулы надо использовать при выводе выражения для силы уравнение (14.4) вместо (14.9). В результате мы получим ту же самую формулу (14.13), но только теперь не будет множителя α и вместо d будет стоять d_0. После выполнения разложения в ряд Тейлора, мы вместо выражений (14.14) или (14.16) получим

$$F \approx -\left[\frac{(n-1)e^2}{d_0^3}\right] x = -Kx,$$

где

$$K \equiv \frac{(n-1)e^2}{d_0^3}. \qquad (14.17)$$

Сделанное нами приближение означает замену кривой потенциальной энергии (см. рис. 14.1, *б*) параболой (рис. 14.4), так что возвращающая сила будет линейной функцией смещения из положения равновесия, как и в случае гармонического осциллятора. Поэтому мы можем использовать формулу (4.10) для частоты колебаний гармонического осциллятора

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{K}{m}} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{(n-1)e^2}{md_0^3}}.$$

Если подставить сюда известные значения n и d_0 для случая NaCl и под m подразумевать приведенную массу, то получится

$$\nu = 1{,}13 \cdot 10^{13}\ сек^{-1}.$$

Это значение с точностью до 1% совпадает с экспериментальным, и таким образом наше использование потенциала Ми и его замена в случае малых колебаний на параболу полностью оправданы.

Возвращаясь к рассмотрению кристаллов, мы можем предположить, что частота колебаний атома в твердом теле будет грубо того же порядка величины. В действительности это упругое колебание связано с явлением распространения звука в кристалле, так как оно представляет собой смещение в среде. Его частота, однако, на несколько порядков превосходит наибольшую частоту, которую можно наблюдать акустическими методами. Однако частоту колебаний атома можно определить с помощью облучения ионных кристаллов светом. Так как ионы заряжены, то переменное электрическое поле световой волны вызовет их вынужденные колебания (рис. 14.5). Если частота света равна частоте свободных колебаний иона, то наступит «резонанс», амплитуда колебаний станет максимальной и будет наблюдаться максимальное поглощение света. Свет с частотой 10^{13} *сек*$^{-1}$ имеет длину волны

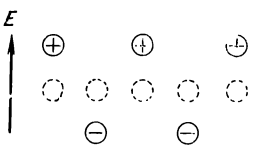


Рис. 14.5.

$$\lambda = c/\nu = 3 \cdot 10^{-3} \text{ см} = 30 \text{ мк}.$$

(1 *мк* $= 10^{-6}$ *м* $= 10^{-4}$ *см* $= 10^{4}$ Å.) Излучение с длиной волны в 30 *мк*, или 300000 Å, лежит в далекой *инфракрасной* области. Поэтому можно ожидать, что ионный кристалл будет иметь сильную полосу поглощения в инфракрасной области. Эта полоса (ее называют в литературе «остаточными лучами») действительно наблюдается для NaCl на длине волны 61 *мк*. Полученное нами выше значение в 30 *мк* совпадает с этим значением лишь по порядку величины, однако это совпадение все же еще раз подтверждает полезность нашей модели. Во всяком случае следует подчеркнуть, что расхождение возникает в первую очередь не из-за неправильности потенциала Ми, а вследствие нашей неспособности учесть одновременное движение всех ионов. Этот учет можно провести, если рассмотреть так называемые «нормальные» колебания атомов в кристалле, но здесь мы не будем этим заниматься. Действительно, предположения о том, что каждый ион колеблется около положения его равновесия с некоторой постоянной частотой, еще вполне достаточно для решения многих задач, даже если мы и встретились с некоторыми затруднениями при попытке точного вычисления этой эффективной частоты.

§ 14.6. Теплоемкость

Оценив частоту колебаний атома в твердом теле, вычислим теперь амплитуду этих колебаний при данной температуре T. Если мы еще примем, что смещение из положения равновесия мало́, т. е. что амплитуда колебаний мала, то можно использовать в качестве

приближения параболический потенциал, так что энергия будет зависеть от амплитуды точно таким же образом, как и в случае гармонического осциллятора (см. (4.2)),

$$E = {}^1/_2 KA^2.$$

В действительности полная энергия E данного атома не является постоянной, так как этот атом непрерывно обменивается энергией с его соседями. Нам нужна средняя внутренняя энергия $\overline{E}$, и мы вычислим ее с помощью распределения Больцмана (9.21):

$$\overline{E} = \frac{\int E e^{-E/kT}\, dv_x dv_y dv_z dx\, dy\, dz}{\int e^{-E/kT}\, dv_x dv_y dv_z dx\, dy\, dz}.$$

Так как для гармонического осциллятора

$$E = \frac{1}{2} m v_x^2 + \frac{1}{2} m v_y^2 + \frac{1}{2} m v_z^2 + \frac{1}{2} K x^2 + \frac{1}{2} K y^2 + \frac{1}{2} K z^2,$$

то мы получим (аналогично интегралам (9.24) в случае идеального газа) для каждого из членов $\overline{E}$

$$kT \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi} = \frac{1}{2} kT.$$

Но в данном случае такой же результат ${}^1/_2 kT$ получается и для каждого из членов ${}^1/_2 Kx^2 \ldots$, так как для них будут в точности такие же интегралы. Поэтому для гармонического осциллятора

$$\overline{E} = 3kT. \tag{14.18}$$

Это еще один пример *закона равнораспределения энергии*: на каждую степень свободы (компоненту радиуса-вектора положения или скорости) приходится средняя тепловая энергия ${}^1/_2 kT$ (в этом смысле здесь имеется шесть степеней свободы).

Полная *внутренняя энергия* одного моля атомов равна

$$U_T = N_0 \overline{E} = 3RT, \tag{14.19}$$

так как $R = N_0 k$. *Теплоемкость* одного моля (при постоянном объеме) оказывается равной

$$C = dU_T/dT = 3R = 6\ кал/(моль \cdot град) \tag{14.20}$$

для всех твердых тел. Это — классический закон Дюлонга и Пти, который был установлен сначала экспериментальным путем. Как и в

случае газа, теплоемкость твердых тел вследствие закона равнораспределения энергии не зависит от деталей закона взаимодействия между атомами и от их массы. (В частности, она не зависит от частоты колебаний атомов.) Однако теплоемкость твердого тела вдвое больше теплоемкости одноатомного идеального газа, так как в этом случае с повышением температуры увеличивается не только кинетическая, но и потенциальная энергия. (В газе потенциальная энергия взаимодействия приблизительно равна нулю, в то время как для гармонического осциллятора средняя потенциальная энергия равна средней кинетической.) Как и в случае идеального газа, теплоемкость рассматриваемого «идеального» твердого тела в расчете на один моль вещества не зависит от сорта материала.

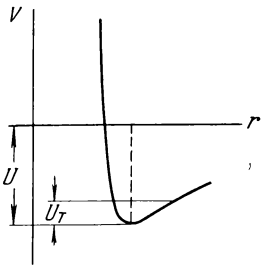


Рис. 14.6.

Теперь мы можем проверить реалистичность нашего предположения о том, что колебания атомов будут малыми. При комнатной температуре (300° К)

$$U_T = 3RT = 1800\ кал/моль = 1{,}8\ ккал/моль,$$

так что энергия теплового движения составляет только приблизительно 1% от энергии связи U (рис. 14.6). Поэтому амплитуда колебаний составляет лишь небольшую долю равновесного межатомного расстояния. Хотя наше предположение о малости колебания оправдывается, тем не менее закон Дюлонга и Пти не справедлив. К нашему удивлению он катастрофически нарушается не при более высоких температурах, когда амплитуда колебаний становится больше, а при очень низких температурах: теплоемкость всех веществ стремится к нулю при стремлении температуры T к нулю (рис. 14.7). Это нарушение закона равнораспределения рассматривалось в свое время как одно из наиболее обескураживающих противоречий принципу Больцмана, однако по иронии судьбы отнюдь не статистические принципы оказались в этом виноваты. В действительности это явление оказалось одним из первых обнаруженных нарушений классической механики. Правильную по существу теорию теплоемкости твердого тела при низких температурах

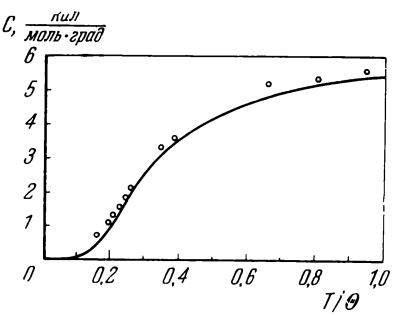


Рис. 14.7.

(рис. 14.7) гениально построил Эйнштейн еще в 1907 г., после того как идея квантов была выдвинута в другой связи Планком (см. в гл. 18 соответствующий расчет на основе квантовой механики).

§ 14.7. Коэффициент теплового расширения

Попытаемся теперь оценить величину коэффициента теплового расширения. Здесь, в первый раз в этой главе, мы увидим, что приближение первого порядка, в котором сила взаимодействия между атомами рассматривается как сила гармонического осциллятора, не будет достаточно хорошим. Причина заключается в том, что параболический потенциал вообще не дает никакого теплового расширения. Вследствие симметричности этого потенциала положение равновесия вообще не меняется, как бы ни была велика амплитуда колебаний. Поэтому, как бы ни были велики тепловые колебания, среднее расстояние между атомами не увеличивается. Верно, что коэффициент теплового расширения твердого тела весьма мал, но все же он не равен нулю точно, и поэтому необходимо рассмотреть приближение следующего порядка. Потенциал в действительности несимметричен (рис. 14.8), так что при увеличении амплитуды колебаний (и тепловой энергии) положение равновесия смещается вправо, что соответствует увеличению среднего расстояния между атомами.

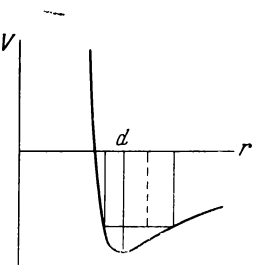


Рис. 14.8.

Для того чтобы учесть указанную асимметрию, мы продолжим разложение выражения (14.13) в ряд Тейлора и учтем члены порядка выше линейного по x гармонического члена. Если учесть первый ангармонический член в разложении силы, то получится

$$F \approx -K_1 x + K_2 x^2.$$

Коэффициент K_1 приближенно дается (с заменой d_0 на d) уравнением (14.17)

$$K_1 \approx (n-1)e^2/d^3.$$

Вычисление K_2 как коэффициента при следующем члене разложения составляет содержание задачи 14.16. Если учесть этот член, то окажется, что частицы бóльшую часть времени проводят на тем бóльших расстояниях между ними, чем выше средняя энергия.

В очень грубом приближении можно провести усреднение и переход к средним значениям следующим образом. Возьмем среднее по времени значение силы — оно должно равняться нулю, так как

частицы в среднем не имеют ускорения, иначе они ушли бы далеко из положений рановесия:

$$\bar{F} = 0 = -K_1\bar{x} + K_2\bar{x^2}.$$

Поэтому среднее смещение частицы равно

$$\bar{x} = K_2\bar{x^2}/K_1.$$

Если теперь для среднего по времени от квадрата смещения использовать значение, вытекающее из закона равнораспределения

$$\frac{1}{2} K_1 \bar{x^2} = \frac{1}{2} kT,$$

то мы получим

$$\bar{x} = kTK_2/K_1.$$

Разделив это выражение на d, мы получим деформацию, а разделив его далее на T, получим коэффициент теплового расширения

$$\alpha \approx kK_2/dK_1.$$

(Не следует путать коэффициент теплового расширения с постоянной Маделунга. Мы используем здесь одну и ту же букву, следуя общепринятым обозначениям.)

Подставив численные значения входящих в это выражение величин, мы находим, что оно дает значение для NaCl

$$\alpha = 4 \cdot 10^{-5}\ град^{-1},$$

совпадающее по порядку величины с экспериментальным. Классическая теория предсказывает, что α не зависит от температуры, и при высоких температурах это довольно хорошо оправдывается. Однако, так же как и теплоемкость, α обращается в нуль при $T = 0°K$, и этот факт можно объяснить только на основе квантовой механики.

Задачи

14.1. Вычислить энергии связи кристаллов и сравнить результаты с экспериментальными значениями (в *ккал/моль*) для следующих веществ:

a) LiCl (198) NaCl (183) KCl (164) RbCl, (160)

b) NaCl (183) NaBr (173) NaJ. (166)

14.2. Постоянная Маделунга для структуры CsCl равна 1,763. Вычислить энергию связи кристалла CsCl и сравнить с экспериментальным значением 155 *ккал/моль*.

14.3. Вычислить энергии связи AgCl и AgBr структуры NaCl и сравнить с соответствующими экспериментальными значениями 206 и 202 *ккал/моль*.

14.4. Постоянная Маделунга для кубической структуры ZnS равна 1,638. Вычислить энергию связи CuCl, который имеет эту структуру. Экспериментальное значение равно 222 *ккал/моль*.

14.5. Энергию связи и модуль упругости можно вычислить с помощью потенциала Ми (14.9) и в общем случае, а не только для ионных кристаллов, когда член, учитывающий притяжение, является кулоновским.

а) Показать, что для одноатомного кристалла энергия связи равна

$$U = \frac{1}{2} N_0 \alpha \frac{A}{d^m}\left(1 - \frac{m}{n}\right).$$

б) Показать, что модуль упругости равен

$$\beta = \gamma \frac{\alpha A m (n - m)}{d^{m+3}}.$$

14.6. Для щелочных металлов можно грубо получить потенциал Ми с $A = e^2$, $m = 1$, $n = 2$ (рассматривая квантовомеханически поведение электронов проводимости). Вычислить энергию связи и модуль всестороннего сжатия для металлического Na (объемноцентрированная кубическая структура), считая $\alpha \approx 6$ (см. задачу 14.5). Экспериментальные значения: 144 *ккал/моль* (из которых 118 *ккал/моль* равно энергии ионизации атома Na) и $0{,}5 \cdot 10^{11}$ *дин/см*^{2}. Для этой структуры множитель γ в задаче 14.5 должен равняться $1/8\sqrt{3}$.

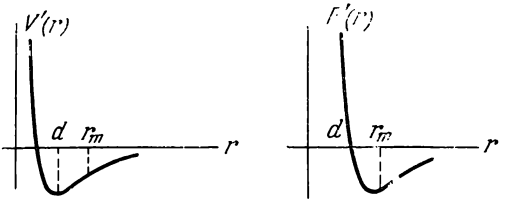


Рис. 14.9.

14.7. Можно показать, что для благородных газов потенциал притяжения между атомами обратно пропорционален шестой степени расстояния между ними. При температурах ниже 84 °К аргон переходит в твердое состояние с гранецентрированной кубической структурой.

а) Рассчитать энергию связи аргона, считая, что $m = 6$ и $n = 12$ (см. задачу 14.5). Так как потенциал U очень быстро убывает, то в члене, учитывающем притяжение, надо учесть вклады только от ближайших соседей; обосновать значение $n = 12$. Будет ли вклад члена, учитывающего отталкивание, в энергию связи больше или меньше, чем в случае NaCl? Используя экспериментальное значение $U = 0{,}9$ *ккал/моль*, вычислить постоянную A ($d = 3{,}84$ Å).

б) Рассчитать модуль всестороннего сжатия для аргона (задача 14.5). Для этой структуры множитель $\gamma = 1/9\sqrt{2}$. Использовать значение A из задачи 14.7а.

14.8. Потенциал Морса

$$V(r) = -\frac{c^2}{r} + \frac{e^2 b}{d_0^2} \exp\left(-\frac{r - d_0}{b}\right)$$

дает несколько лучшее представление межионного потенциала, чем потенциал Ми. Здесь d_0 — равновесное расстояние между ионами (в молекуле), b — другой параметр (расстояние).

а) Показать, что этот потенциал имеет минимум в точке $r = d_0$.

б) Найти выражение для $V(d_0)$. Зная вклад члена, учитывающего отталкивание, в это значение, оценить значение b.

в) Заменить силу взаимодействия между ионами приближенным выражением, линейным по $x = r - d_0$, и найти частоту малых колебаний около положения $r = d_0$.

14.9. Чему равна силовая константа в выражении для силы в молекуле HCl, если частота колебаний равна $9 \cdot 10^{13}$ *сек*$^{-1}$.

14.10. В соответствии с теорией плавления Герцфельда — Майера твердое тело начинает плавиться, когда амплитуда колебаний становится такой большой, что атомы удаляются друг от друга на расстояния, превышающие $r = r_m$. При r_m потенциальная энергия $V'(r)$ имеет точку перегиба, т. е. сила притяжения $F'(r) = -dV'(r)/dr$ начинает уменьшаться (рис. 14.9). Для твердого криптона в потенциале Ми $n = 6$, $m = 9$.

а) Вычислить r_m как функцию d.

б) Произвести разложение силы в ряд Тейлора и определить постоянный коэффициент при гармоническом члене.

в) Вывести выражение для температуры плавления T_m, приравнивая среднюю энергию осциллятора с амплитудой $(r_m - d)$ величине kT_m.

14.11. Справедлив ли закон Дюлонга и Пти для стекол? Почему?

14.12. Вычислить амплитуду колебаний в NaCl в точке его плавления (801 °C). Считать, что энергия зависит от амплитуды квадратично, как в случае гармонического осциллятора. Чему равно отношение амплитуды к расстоянию между ближайшими соседями?

14.13. Найти в справочниках значения удельной теплоемкости при комнатной температуре для следующих веществ: Na, Cu, Au, KCl — и сосчитать теплоемкость на один моль.

14.14. Для некоторых материалов закон Дюлонга и Пти нарушается уже при комнатных температурах (хотя и справедлив при более высоких температурах). Найти в справочниках удельные теплоемкости Be и C (алмаз) и сравнить со значением 6 *кал*/(*моль* ·*град*).

14.15. Найти в справочниках значения удельных теплоемкостей как можно большего числа элементов и составить таблицу их значений при температурах ниже и выше точки плавления. Сосчитать в процентах изменение при плавлении. Дать качественное объяснение малости этого изменения.

14.16. Произвести разложение в ряд Тейлора с точностью до членов x^2 выражения (14.13) для силы, полученной из потенциала Ми.

14.17. Используя те же самые значения постоянных, с помощью которых вычислялись энергия связи и модуль упругости, рассчитать коэффициент теплового расширения NaCl на основе результатов задачи 14.16.

Литература для справок

1. Киттель Ч., Введение в физику твердого тела, Физматгиз, 1962.

Глава 15

Дефекты в твердых телах

Многие свойства твердых тел, имеющие огромное практическое значение, зависят от того, в какой степени реальные твердые тела отклоняются от тех «идеальных» структур, которые рассматривались нами до сих пор. Употребляя слово «отклонения», мы подразумеваем нечто большее, чем простые малые колебания атомов около их положений равновесия. Имеются более серьезные отклонения от идеального правила: «один узел — один атом (или одна молекула)». Поэтому прежде всего мы опишем некоторые из этих отклонений, а затем рассмотрим более подробно, как изменяются при этом свойства тела.

Важно подчеркнуть, что понятие «отклонений от идеальности» (или «дефектов», как называются некоторые из них) не используются в уничижительном смысле. Вполне естественно, что обычно кристалл имеет такие отклонения от «идеальных» структур. Более того, в отдельных случаях эти неоднородности в структуре вызываются искусственным путем, так как их присутствие придает материалам новые важные свойства. Как мы увидим в дальнейшем, если тело находится в состоянии термодинамического равновесия при температуре выше абсолютного нуля, то в нем всегда имеется некоторое число дефектов каждого типа. Разумеется, не все тела находятся в термодинамическом равновесии, и, таким образом, число в действительности имеющихся дефектов может быть больше или меньше равновесного значения. Стали бы невозможны при отсутствии дефектов такие явления, как, например, диффузия вещества и пластическая деформация. От наличия дефектов зависят и другие явления, такие как, например, электропроводность и теплопроводность, причем степень влияния дефектов различна для разных материалов. Даже свойства твердых тел, рассмотренные в двух предыдущих главах, могут слегка измениться за счет косвенного влияния дефектов. Следовательно, хотя дефекты и кажутся случайным явлением, изучение их очень важно для подлинного понимания свойств реальных твердых тел.

§ 15.1. Типы дефектов

Наиболее важные типы дефектов, т. е. отклонений от правильной, бесконечной кристаллической структуры, можно свести в следующую схему:

Дефекты нарушения порядка	Дефекты химического состава
Точечные дефекты решетки { Вакантные узлы; Атомы в междоузлиях }	Примеси { Замещения; Внедрения }
Дислокации	
Границы зерен, поверхности	Преципитаты

Дефекты, названные нами дефектами нарушения порядка, не связаны с присутствием инородных атомов, в то время как дефекты химического состава как раз и означают, что вещество не является полностью химически чистым. В этой схеме, если просматривать ее сверху вниз, мы расположили дефекты в порядке возрастания их размеров. Дефекты решетки и примеси обусловлены отдельными атомами и являются *точечными* дефектами. Дислокации являются *линейными* дефектами. Границы зерен и поверхности представляют собой *поверхностные* дефекты, связанные с внутренними или внешними поверхностями, ограничивающими отдельные кристаллы. И наконец, вещества, образующие преципитаты (осадки), занимают определенную часть *объема* исследуемого кристалла.

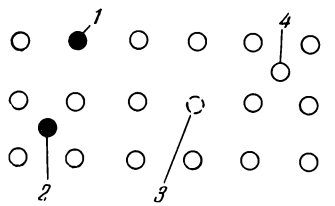


Рис. 15.1.

Дефекты химического состава представляют собой атомы, отличные от составляющих основной кристалл. Эти атомы или могут быть расположены внутри кристалла по одному и называться примесями, или же образовывать довольно большие агрегаты, называемые преципитатами. В последнем случае они обычно оказывают значительно меньшее влияние на свойства материала, так как в этом случае материал, по существу, представляет как бы механическую смесь различных материалов (один из которых присутствует в очень малом количестве). Дефекты в виде примесей (рис. 15.1) могут занимать нормальный атомный узел *1*, замещая атом основного вещества, который должен был бы там находиться, или могут занимать поло-

жение *2* в промежутке между атомами основной решетки, внедряясь в нее. Дефекты решетки представляют собой дефекты, аналогичные примесям, но образуемые не инородными атомами, а атомами основного вещества: вакантный узел (или вакансия) *3* представляет свободный узел, вообще не занятый никаким атомом; если же атом основного вещества, вместо того чтобы занять «правильный» нормальный узел, внедряется в пространство, промежуточное между узлами, то такой дефект решетки называют «атомом в междоузлии» *4*. Дислокации представляют собой неточечные нарушения упорядоченности решетки и будут рассмотрены в § 15.6. Границы зерен мы уже упоминали в § 13.1.

Дефекты химического состава неизбежно существуют в той или иной степени во всех веществах. Хотя ни один макроскопический образец вещества не является, строго говоря, чистым, иногда присутствующие химические примеси не влияют заметно на свойства материала. В других случаях, однако, они оказывают влияние, иногда отнюдь не пропорциональное их концентрации, на механические и электрические свойства образца. Например, огромные различия между железом, различными сталями и чугуном зависят от различия в концентрации углерода всего в несколько процентов. Далее, изменение концентрации мышьяка в германии всего на 1% может изменить величину электропроводности германия на несколько порядков — вся транзисторная техника зависит от подобных явлений. Однако, как ни важны явления, связанные с наличием химических примесей, мы не будем их рассматривать, так как их присутствие обычно предопределяется заранее независимо от того, попадают ли они в материал случайно или же внесены преднамеренно. Здесь же мы постараемся рассмотреть подробнее дефекты решетки и дислокации, которые так же важны и оказывают неизбежное и столь же важное влияние на свойства материалов.

Прежде всего, в твердых телах, так же как и в газах, происходит явление самодиффузии. Обычно коэффициент диффузии в случае твердых тел намного меньше, чем в случае газов, однако и он играет заметную роль при более высоких температурах, и явление диффузии обусловливает многие изменения, происходящие при закалке или старении материалов. В настоящее время все эти эффекты имеют огромное техническое значение, так как материалы подвергаются воздействию очень высоких температур в ядерных реакторах и в соплах реактивных двигателей. Диффузия инородных атомов играет роль в явлении коррозии и в других проблемах химических реакций и находит тебе практическое применение при «легировании» полупроводников заранее рассчитанными количествами химических примесей для получения полупроводниковых электронных устройств. Кроме того, ионные кристаллы, подобно жидким электролитам, обнаруживают ионную проводимость, которую

можно рассматривать как вынужденную диффузию заряженных ионов под действием приложенного внешнего электрического поля.

Все эти явления совершенно невозможно понять в рамках рассматривавшейся нами до сих пор модели кристалла, в которой атомам (или ионам) разрешаются только малые отклонения от их фиксированных положений равновесия. Один из видов «дефектов решетки» идеального кристалла, который позволил бы атомам «путешествовать» на далекие расстояния от их положений,— это передвижка атомов в *промежуточные* положения между узлами и перескакивание их из одного междоузлия в соседние. Второй вид — это введение некоторых незаполненных, вакантных узлов. Эти пустоты в полностью регулярном распределении атомов могут заполняться атомами при их перемещении. Удобно рассматривать движение именно *вакансий*, хотя более «реалистичным», возможно, и кажется представлять себе дело как перемещение соседнего атома в вакантный узел с последующим перемещением одного из следующих атомов на освободившееся место и т. д. (Предлагались некоторые другие механизмы миграции атомов, но они представляются нам менее вероятными.)

§ 15.2. Концентрация дефектов решетки

Рассмотрим прежде всего атомы в междоузлиях; обобщение на случай вакантных узлов будет очевидным. Для того чтобы объяснить диффузию с помощью представления об атомах в междоузлиях, мы должны прежде всего выяснить, сколько таких внедренных атомов может быть в кристалле. (Если в междоузлиях нет ни одного атома, то не будет никакой диффузии.) Статистическая механика дает на этот вопрос ответ, что, по крайней мере в состоянии термодинамического равновесия, число атомов в междоузлиях будет определяться, как всегда, *распределением Больцмана*.

Пусть на единицу объема имеется n атомов в междоузлиях и n_0 атомов в нормальных узлах. Допустим, что $n \ll n_0$. Тогда согласно распределению Больцмана вероятность найти некоторый атом в междоузлии, а не в нормальном узле, определяется экспоненциальной функцией, вид которой можно определить примерно таким же образом, как это делалось при выводе уравнения Саха (10.3): в состоянии термодинамического равновесия

$$\frac{n}{n_0} \sim e^{-w/kT}, \tag{15.1}$$

где w — разность энергий атома между положением в междоузлии и нормальным состоянием, т. е. работа, необходимая для перемещения атома из нормального состояния в междоузлие. В случае дефек-

тов решетки очень трудно вычислить множитель, стоящий перед экспонентой. Поэтому мы положим его равным единице, хотя, как обнаруживается экспериментально, он во многих случаях довольно велик, достигая в отдельных случаях, по-видимому, значения 100. Если $W = N_0 w$ — энергия на один моль (один моль чего бы то ни было, даже дефектов, означает просто количество объектов, равное числу Авогадро), то

$$\frac{n}{n_0} \approx e^{-W/RT}, \tag{15.2}$$

где $R = N_0 k$ — газовая постоянная в расчете на один моль.

Численное значение этого отношения сильно зависит от величины W, т. е. от того, насколько трудно переместить атом в междоузлие. Предположим сначала, что работа W по порядку величины сравнима с энергией связи, т. е. что атом так же трудно переместить в междоузлие, как и удалить вообще из кристалла. Тогда, при $W \approx \approx 200$ *ккал/моль*, $RT \approx 2$ *ккал/моль* для довольно высокой температуры в 1000°К

$$\frac{W}{RT} \approx 100, \quad \frac{n}{n_0} \approx e^{-100} \approx 10^{-43}.$$

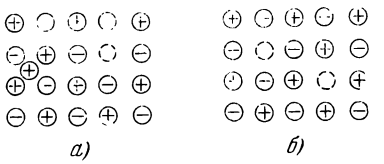
Таким образом, в этом случае число атомов в междоузлиях практически равно нулю. С другой стороны, если W составляет только 1/10 энергии связи, то

$$\frac{n}{n_0} \approx e^{-10} \approx 10^{-4},$$

т. е. получается хотя и малое, но уже не пренебрежимо малое число. (Если W будет равняться только 1/100 энергии связи, тогда n и n_0 будут величинами одного порядка и наше представление об идеальном кристалле с малым количеством дефектов окажется неверным.) Следовательно, для того чтобы диффузия (или ионная проводимость) осуществлялась через механизм мигрирующих атомов в междоузлиях, мы должны считать, что энергия W составляет примерно 1/10 энергии связи, но еще примерно в 10 раз больше энергии тепловых колебаний RT.

Число атомов в междоузлиях так же сильно зависит от T, как и от W. Если отношение n/n_0 равно 10^{-4} при температуре 1000 °К, то при 500 °К оно будет равно 10^{-8}, так что коэффициент диффузии будет в 10000 раз меньше. По этой причине явление диффузии обычно играет заметную роль только при сравнительно высоких температурах. (Мы еще раз повторяем, что в нашем изложении мы допустили целый ряд чрезмерных упрощений, в частности, отношение n/n_0 содержит множитель перед экспонентой, который не равен в точности 1, однако приведенные выше оценки порядка величин остаются в силе.)

В ионных кристаллах ситуация слегка изменяется, так как атомы в междоузлиях и вакантные узлы имеют электрический заряд. Разумеется, справедливо, что все ионы идеального кристалла также обладают электрическим зарядом, но вследствие того, что положительные и отрицательные заряды присутствуют в одинаковых количествах, кристалл в целом будет макроскопически нейтральным. Для того чтобы условие макроскопической нейтральности выполнялось бы и в случае, когда имеются дефекты, положительно и отрицательно заряженные дефекты должны присутствовать в равных количествах. Положительный ион (катион) в междоузлии, очевидно, представляет собой избыток положительного заряда, катионная вакансия, с другой стороны, представляет собой отрицательный заряд, так как положительный заряд в узле отсутствует. Аналогично вакансия отрицательного иона (аниона) представляет собой положительный заряд.



а) *б)*

Рис. 15.2.

Имеется несколько возможных способов обеспечить выполнение макроскопического условия нейтральности. Если имеются катионные вакансии и катионы в междоузлиях (рис. 15.2, *а*), то дефекты называются *дефектами по Френкелю*, по имени Я. И. Френкеля, предложившего подобный механизм в 1926 г. Пары анионная вакансия — анион в междоузлии также называются дефектами по Френкелю, хотя обычно такой вариант не осуществляется. Если имеются как катионные, так и анионные вакансии (рис. 15.2, *б*), то такие дефекты называются *дефектами по Шотки*, по имени В. Шотки (1930 г.). Возможны, в принципе, и пары катион — анион в междоузлиях, однако к настоящему времени ни в одном из реальных кристаллов они не были обнаружены.

Пусть в единице объема число дефектов решетки, представляющих избыток положительного заряда $+e$ (катионы в междоузлиях или анионные вакансии) равно n_+ и число дефектов с отрицательным зарядом $-e$ (анионы в междоузлиях или катионные вакансии) равно n_-. Тогда уравнение (15.1) для числа дефектов в состоянии термодинамического равновесия примет вид

$$\frac{n_+ n_-}{n_0^2} = e^{-w/kT} = e^{-W/RT}. \qquad (15.3)$$

(Здесь n_0 — плотность нормальных катионов или анионов, т. е. число молекул в единице объема, которая приближенно может считаться постоянной.) Вывод этого уравнения аналогичен выводу уравнения Саха (10.3) для плотности положительных и отрицательных ионов в газе. Величина w является энергией, необходимой для обра-

зования дефектной пары (междоузлие — вакансия или вакансия — вакансия) в идеальном кристалле, независимо от того, является ли эта пара парой Френкеля или парой Шотки. Разумеется, в данном случае множитель перед экспонентой отличается от соответствующего множителя в уравнении Саха, так как частицы уже не будут свободными.

Обычно, для того чтобы обеспечить выполнение условия макроскопической нейтральности, в случае одновалентных ионов полагают

$$n_+ = n_-, \tag{15.4}$$

так что

$$\frac{n_+}{n_0} = \frac{n_-}{n_0} = e^{-w/2kT} = e^{-W/2RT}. \tag{15.5}$$

В любом кристалле в принципе могут существовать одновременно дефекты по Френкелю и дефекты по Шотки. Однако, вероятно, энергия образования W будет в одном случае меньше, чем в другом, и поэтому дефекты с большей энергией образования будут присутствовать в меньшем числе, и обычно ими можно пренебречь. Уравнения (15.3) и (15.4) написаны таким образом, что их можно применять как для дефектов по Френкелю, так и для дефектов по Шотки, однако не одновременно к обоим этим видам. Для того чтобы одновременно рассматривать оба вида дефектов, надо ввести различные обозначения для плотностей анионов в междоузлиях и для катионных вакансий и записать уравнение типа (15.3) для пар Френкеля и для пар Шотки.

При некоторых условиях концентрация дефектов может быть значительно больше только что вычисленного равновесного значения. В качестве примера укажем на *радиационное повреждение*, происходящее при бомбардировке вещества, например, нейтронами высокой энергии. Соударяясь с атомами твердого тела, нейтроны выбивают их из нормальных узлов и перемещают в междоузлия. Радиационное повреждение может очень сильно изменить свойства твердого тела. Действительно, под действием достаточно большой дозы радиации материал может разрыхляться. Однако подвергнутый такому воздействию кристалл не находится в состоянии термодинамического равновесия, и его можно обычно вернуть в первоначальное состояние с помощью отжига. Отжигом называют нагревание вещества при высокой температуре в течение значительного времени. Поскольку, как мы видели ранее, атомы при высоких температурах могут перемещаться, отжиг позволяет им вернуться в положение равновесия.

Другим примером неравновесной концентрации дефектов является ионный кристалл, содержащий примесь в виде иона, валентность которого *не совпадает* с валентностями ионов основного крис-

талла. Дефект такого рода также влияет на выполнение условия макроскопической нейтральности (15.4) и на равновесные значения концентраций дефектов. Например, если добавить $CaCl_2$ к кристаллу NaCl, то ион Ca^{++} занимает один катионный узел, в то время как два иона Cl^- занимают два (каждый по одному) анионных узла (рис. 15.3). Таким образом, один катионный узел остается вакантным, и поэтому при добавлении примеси концентрация катионных вакансий увеличивается. Условие макроскопической нейтральности принимает вид

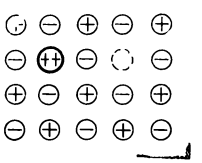


Рис. 15.3.

$$n_i + n_+ = n_-, \tag{15.6}$$

где n_i — концентрация примесных ионов Ca^{++}, каждый из которых имеет избыточный положительный заряд $+e$. Уравнение (15.3), выведенное выше для концентрации дефектов решетки n_+ и n_-, еще сохраняет силу. Если найти концентрации дефектов из уравнений (15.3) и (15.6), то вместо соотношения (15.5) мы получим новые зависимости. При низких температурах имеем $n_- \approx n_i$, в то время как при высоких температурах уравнение (15.5) будет приближенно справедливым (см. задачу 15.7). Граница между «низкими» и «высокими» температурами соответствует случаю, когда

$$e^{-W/2RT} \approx \frac{n_i}{n_0}.$$

§ 15.3. Диффузия

Как мы уже говорили, можно ожидать, что коэффициент самодиффузии в твердом теле будет пропорционален концентрации дефектов, так как атомы в идеальном кристалле не могут покидать их нормальные положения (по определению идеального кристалла). В действительности при вычислении коэффициента диффузии наиболее удобно рассмотреть дефекты как некоторые «меченые» атомы и вычислить сначала коэффициент диффузии для них. Опять-таки для определенности мы будем рассматривать атомы в междоузлиях.

В выражение для коэффициента диффузии кроме концентрации атомов в междоузлиях будет входить также еще одна величина. До тех пор пока атомы не перемещаются из одних междоузлий в другие, не будет никакой диффузии, независимо от того, сколько имеется (неподвижных) атомов в междоузлиях. Частота, с которой атом перескакивает из одного междоузлия в следующее, также определяется распределением Больцмана. Энергия атома, находящегося в междоузлии, имеет минимум (не абсолютный, когда атом находится в нормальном узле решетки, а относительный, когда нормальный узел недоступен для атома). Для того чтобы перейти в соседнее меж-

доузлие, атом должен «протиснуться» через область, где его энергия больше, скажем, на величину E/N_0 (рис. 15.4).

Атом пытается совершить этот «скачок» ν_0 раз в секунду, где ν_0 есть частота его колебаний. Вероятность того, что атом будет иметь благодаря флуктуациям избыток энергии, необходимой для преодоления «горба» потенциальной энергии между двумя соседними междоузлиями, будет равна $(-E/RT)$. Тогда частота «перескоков» или число успешных перескоков в секунду будет равным

$$\nu \approx \nu_0 e^{-E/RT}. \qquad (15.7)$$

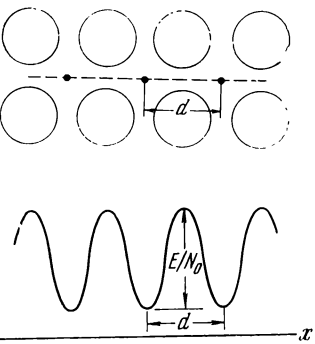


Рис. 15.4.

Энергия E называется *энергией активации* для данного процесса.

Мы уже видели (§ 14.5), что ν_0 будет порядка 10^{13} *сек*$^{-1}$. Если E — порядка 10 *ккал/моль* (т. е. примерно 1/20 энергии связи), то при температуре 1000 °К удачный перескок совершается примерно 1 раз на 100 колебаний. Частота перескоков имеет порядок 10^{11}*сек*$^{-1}$ и очень быстро убывает при понижении температуры. Так как при каждом перескоке атом проходит расстояние порядка постоянной решетки a, то его скорость будет величиной порядка

$$\bar{v} \approx a\nu \approx 10 \text{ м/сек} \quad \text{при} \quad T = 1000\,^\circ\text{К}. \qquad (15.8)$$

Разумеется, скорость его перемещения в некотором выделенном направлении будет значительно меньше этой, так как каждый перескок атом совершает в случайном направлении (рис. 15.5). Мы обозначили в (15.8) среднюю абсолютную скорость движения атома вдоль решетки через $\bar{v}$ для того, чтобы отличить ее от средней скорости $\overline{v}$ колебаний атома, находящегося в данном междоузлии, которая приближенно, равняется среднеквадратичной скорости колебательного движения и точно равна среднеквадратичной скорости, которую имел бы этот атом в газе при такой же температуре. Действительно, как мы уже отмечали при выводе соотношения (14.18), средняя кинетическая энергия одного атома в твердом теле равна $^3/_2\ kT$, так же как и в случае газа, так что

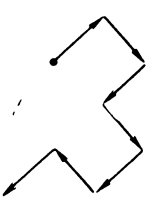


Рис. 15.5.

$$(\overline{v^2})^{1/2} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}.$$

Поэтому $\bar{v}$ в сотни раз больше, чем $\bar{\bar{v}}$, даже если взять наибольшее значение $\bar{\bar{v}}$.

Вычисление коэффициента диффузии D_d для дефектов (атомов в междоузлиях) можно провести точно таким же образом, как и в случае газа (§ 8.5). Предположим, что концентрация дефектов с одной стороны некоторой плоскости равна $n - \Delta n$, а с другой стороны равна $n + \Delta n$. Поток числа дефектов через единицу площади выбранной плоскости

$$J = {}^1/_2 \bar{\bar{v}} (n - \Delta n) - {}^1/_2 \bar{\bar{v}} (n + \Delta n) = - \bar{\bar{v}} \Delta n.$$

Так как с обеих сторон плоскости атомы совершают перескоки на расстояния, равные примерно a, то $\Delta n \approx a\, dn/dx$ и

$$J = - \bar{\bar{v}} a \frac{dn}{dx}.$$

Сравнивая это выражение с определением коэффициента диффузии (8.28), получаем

$$D_d \approx \bar{\bar{v}} a. \tag{15.9}$$

(В действительности мы опустили при вычислениях другой численный множитель, равный ${}^1/_6$, если мы рассматриваем простую кубическую структуру: атом в междоузлии может выбирать для перескока одно из шести возможных направлений и лишь одно из них будет «настоящим».) Формально уравнение (15.9) такое же, как и в случае газа (см. (8.29)), так как a соответствует средней длине свободного пробега L. Однако в кристалле диффузия будет значительно более медленной. Здесь не только «средняя длина свободного пробега» оказывается много меньшей, но также и атом сравнительно долгое время выжидает перед каждым перескоком, в то время как в газе столкновения между атомами длятся пренебрежимо малое время.

Переходя к вычислению коэффициента самодиффузии для данного материала, прежде всего заметим, что в нем могут двигаться только те атомы, которые оказываются в междоузлиях. Если бы мы действительно наблюдали за меченым атомом (скажем, за атомом радиоактивного изотопа), мы бы обнаружили, что он диффундирует с коэффициентом D_d, если находится в междоузлии. Однако доля времени, которую он проводит в междоузлии (вероятность того, что он оказывается в междоузлии), должна равняться концентрации атомов в междоузлиях, определяемой уравнением (15.2). Поэтому реальный коэффициент самодиффузии

$$D = D_d\, n/n_0. \tag{15.10}$$

Мы должны подчеркнуть, что в твердых телах диффузия осуществляется только через посредство диффузии дефектов. Именно поэтому в соотношение (15.10) и входит концентрация дефектов n/n_0.

Подставляя уравнения (15.7), (15.8) в (15.9), мы получаем

$$D_d \approx a^2 \nu_0 e^{-E/RT}, \tag{15.11}$$

а используя еще уравнение (15.2), имеем

$$D \approx a^2 \nu_0 e^{-(W+E)/RT}. \tag{15.12}$$

Можно ожидать, что множитель перед экспонентой будет приближенно равен

$$a^2 \nu_0 \approx (3 \cdot 10^{-8})^2 \cdot 10^{13} \approx 0{,}01 \ \ см^2/сек.$$

Для многих материалов значение $(W + E)/RT_m$ при температуре плавления T_m заключено в пределах между 10 и 20. (Как T_m, так и $W + E$ в кристаллах имеют тенденцию возрастать при увеличении энергии связи.) Поэтому для многих твердых тел в точке их плавления величина D будет иметь значения в пределах от 10^{-11} до 10^{-7} *см*^{2}/ *сек*.

Между прочим, при плавлении кристалла величина D увеличивается только на один порядок, в отличие от перехода жидкость — пар, когда ее изменение составляет несколько порядков. Это обстоятельство наводит на мысль попытаться описывать жидкость возле ее точки затвердевания как твердое тело с исключительно высокой концентрацией дефектов. В противоположном пределе, возле критической точки, мы уже предлагали (гл. 7) модель жидкости как очень плотного газа. Обе эти модели, каждая в своей области применимости, имеют некоторое значение для качественного описания жидкого состояния, однако ни одна из них не дает хороших количественных результатов.

§ 15.4. Ионная проводимость

В ионных кристаллах дефекты решетки несут электрический заряд и обусловливают электропроводность, коэффициент которой связан с коэффициентом диффузии соотношением Эйнштейна (10.12) так же, как и в случае ионизованных газов. Ионная проводимость не имеет большого практического значения. Она аналогична проводимости в полупроводниках (гл. 26), однако в материалах, употребляемых в полупроводниковых приборах, носителями заряда являются не ионы, а электроны. Тем не менее это явление представляет значительный интерес, так как именно с помощью его исследования была первоначально получена наибольшая информация о дефектах решетки, потому что наличие электрического заряда у дефектов позволяет управлять ими и наблюдать их так, как это невозможно для других сортов материалов. Измерения электропроводности являются одними из наиболее простых в эксперименте измерений, а влияние

примесей иной валентности на концентрации дефектов (см. (15.6)) дает нам в руки дополнительное средство управления экспериментом путем «легирования» исследуемого материала известным количеством примеси.

Переходя к рассмотрению условия применимости соотношения Эйнштейна, вспомним, что для выполнения условия макроскопической нейтральности в ионных кристаллах должно присутствовать по крайней мере два типа дефектов. В чистом кристалле числа дефектов этих двух типов будут равны (см. (15.5)). Тем не менее обычно один из этих дефектов дает пренебрежимо малый вклад в электропроводность (и в диффузию). Каждый из этих дефектов имеет свое значение энергии активации E_+ и E_-, и одно из этих значений, вероятно, будет заметно больше другого, что в соответствии с уравнением (15.7) ведет к значительно меньшей частоте перескоков. Так, например, если $E_+ > E_-$, то ток осуществляется главным образом дефектами с отрицательным зарядом и согласно уравнению (10.17) их подвижность $\mu_- = \left(-\frac{e}{kT}\right) D_-$. Согласно уравнению (10.16) $\sigma_- = n_-(-e)\mu_- = \frac{e^2}{kT} n_- D_-$. Используя уравнение (15.11), положив в нем $D_d = D_-$, получим

$$\sigma_- \approx \frac{e^2 a^2 \nu_0 n_0}{kT} \frac{n_-}{n_0} e^{-E_-/RT} = \sigma_0 \left(\frac{n_-}{n_0}\right) e^{-E_-/RT}. \qquad (15.13)$$

(Следует отметить, что коэффициент электропроводности σ_- пропорционален $n_- D_-$, где D_- — коэффициент диффузии дефектов. Тогда, согласно уравнению (15.10) проводимость пропорциональна общему коэффициенту самодиффузии D для того сорта ионов, которые наиболее подвижны.)

Численное значение коэффициента σ_0 при температуре 1000 °К приближенно равно

$$\sigma_0 \equiv e^2 a^2 \nu_0 n_0 / kT \approx 10^2 \ (ом \cdot см)^{-1},$$

т. е. мы получаем умеренно большое значение (по сравнению с графитом). И в этом случае мы опустили при выводе некоторые обстоятельства, учет которых дает дополнительный множитель, который может превышать 100. Однако следует вспомнить, что как относительная концентрация дефектов (n_-/n_0), так и экспоненциальный множитель $(-E_-/RT)$ много меньше единицы, так что, вообще говоря, ионные кристаллы являются довольно плохими проводниками.

Так же как и в § 15.2, следует различать две области температур при рассмотрении кристалла, содержащего примеси (а все кристаллы, хотя бы и в очень малой концентрации, содержат случайные примеси). При высоких температурах, в так называемой внутренней области, отношение (n_-/n_0) дается уравнением (15.5), так что урав-

нение (15.13) приобретает вид

$$\sigma_- \cong \sigma_0 e^{-(W/2+E_-)/RT}. \qquad (15.14)$$

С другой стороны, при низких температурах из уравнения (15.6) мы имеем $n_- \approx n_i$, где n_i/n_0 — концентрация примесей, так что

$$\sigma_- \cong \sigma_0 \frac{n_i}{n_0} e^{-\frac{E_-}{RT}}. \qquad (15.15)$$

Эти две области ясно видны на экспериментальной кривой (рис. 15.6) для кристалла NaCl обычной чистоты. Во внутренней области тангенс угла наклона прямой (в логарифмической шкале) равен $(^1/_2W + E_-)$, а при более низких температурах (ниже 550 °С) этот тангенс равен E_-. Отсюда ясно, каким образом, добавляя некоторое количество примесей, можно определить значения как W, так и E_- по отдельности.

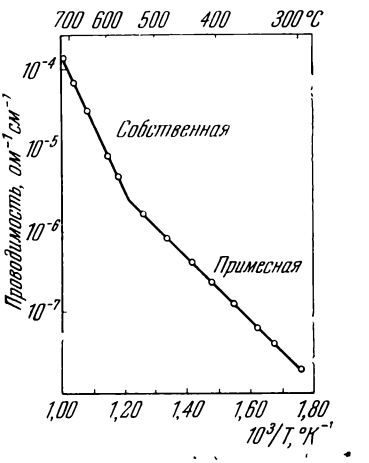


Рис. 15.6.

В качестве примера рассмотрим сначала NaCl. Дефекты по Шотки преобладают во всех галоидных соединениях щелочных металлов, а вакансия иона Na^+ в NaCl оказывается более подвижной, чем вакансия иона Cl^-, при всех температурах, вплоть до температуры плавления. Поэтому коэффициент электропроводности определяется соотношениями (15.14) и (15.15) во внутренней и в контролируемой примесями (или внешней) области соответственно. С помощью измеренных значений тангенсов угла наклона прямых для NaCl найдены следующие значения:

$$^1/_2W = 23 \text{ ккал/моль} = 1{,}0 \text{ эв/молекула},$$
$$E_- = 20 \text{ ккал/моль} = 0{,}9 \text{ эв/молекула}.$$

В AgCl преобладают катионные дефекты по Френкелю, причем ион Ag^+ в междоузлии является более подвижным. В этом случае, однако, ситуация будет несколько более сложной: при высоких температурах ионы Ag^+ в междоузлиях (n_+) обусловливают бо́льшую часть проводимости. При понижении температуры и при приближении к контролируемой примесями области концентрация вакансий иона Ag^+ сравнивается с концентрацией примесей, как и в случае NaCl: $n_i \approx n_-$. Концентрация ионов в междоузлиях в то же самое время уменьшается в соответствии с уравнением (15.3): при любой

температуре, если увеличивается концентрация вакансий, то уменьшается концентрация ионов в междоузлиях, так как их произведение постоянно. Поэтому сначала проводимость падает ниже «внутренней» линии, когда концентрация более подвижных ионов в междоузлиях уменьшается. При еще более низких температурах вклад от ионов в междоузлиях, несмотря на их большую подвижность, становится пренебрежимо малым и проводимость описывается линией «вакансий» (см. (15.15)), как и в случае NaCl. Экспериментальные значения, полученные для AgCl, таковы:

$$^1/_2W = 16 \text{ ккал/моль} = 0{,}7 \text{ эв/молекула},$$
$$E_- = 9 \text{ ккал/моль} = 0{,}4 \text{ эв/молекула},$$
$$E_+ = 2 \text{ ккал/моль} = 0{,}1 \text{ эв/молекула}.$$

Меньшие значения энергий в AgCl по сравнению с NaCl соответствуют тому, что температура плавления AgCl ниже.

§ 15.5. Пластическая деформация

Другой пример практически важного явления, которое нельзя объяснить на основе модели идеального кристалла, дает *пластическая деформация*. Для большинства кристаллов закон Гука выполняется только для деформаций, не превышающих 0,1%. При деформациях выше этой деформация увеличивается быстрее, чем растет напряжение, и появляется *остаточная деформация*, т. е. при снятии напряжения образец не полностью возвращается к своим первоначальным размерам (рис. 15.7). Если деформация больше так называемого предела пропорциональности, за которым появляется остаточная деформация, ее называют пластической деформацией в противоположность упругой. Пластическая деформация в кристаллах обычно происходит в виде «скольжения», при котором деформация сводится к сдвигу в определенных направлениях кристаллической структуры, даже если напряжение приложено в другом направлении (рис. 15.8, фото VII).

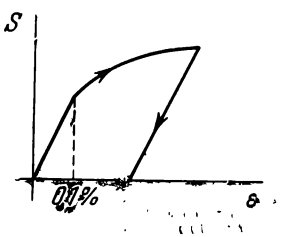


Рис. 15.7.

Легко представить себе, каким образом может происходить такое скольжение даже в идеальных кристаллах. Необходимо только сдвинуть одну плоскость атомов вдоль другой, соседней плоскости (рис. 15.9). Так как в кристаллической решетке это легче сделать в определенных направлениях, то этим и объясняется наличие некоторых преимущественных направлений «скольжения». Вся трудность, однако, заключается в том, что количественные результаты,

получаемые на основе такого предположения, будут совершенно неверными.

Если использовать такую модель, то легко оценить предел пропорциональности с помощью известных межатомных сил. Потенциальная энергия кристалла изменяется при сдвиге двух плоскостей, показанном на рис. 15.9, следующим образом: пока нет никакого сдвига, она минимальна; при смещении она начинает увеличиваться и проходит через максимум, после чего уменьшается и достигает следующего минимума, когда смещение будет равняться d, т. е. когда

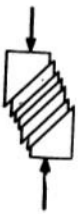


Рис. 15.8.

Рис. 15.9.

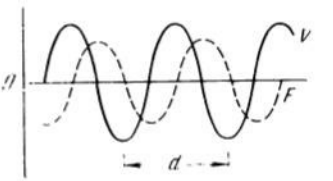
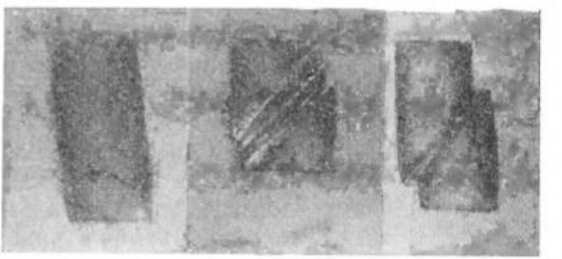


Рис. 15.10.

одна плоскость сдвинется относительно другой «на один атом» (рис. 15.10). Соответствующая сила показана на рис. 15.10 пунктирной линией. Для любой более или менее разумной формы кривой потенциальной энергии сила будет максимальна, когда относительное смещение будет порядка $d/4$. Если сила, приложенная извне к кристаллу, превосходит это значение, то возникает пластическая деформация. Следовательно, деформация в пределе пропорциональности должна быть равной $(d/4)/d$, т. е. иметь порядок 25%.



VII. Цилиндрические образцы монокристалла при сжатии. Скольжение происходит вдоль одной, нескольких и многих плоскостей скольжения.

В действительности наблюдаемая деформация в пределе пропорциональности имеет порядок 0,1%. Другими словами, если рассмотреть напряжение $S = G\varepsilon$, то в пределе пропорциональности это напряжение должно быть около $G/4$, в то время как экспериментальное значение составляет примерно $G/1000$. Таким образом, осуществить пластическую деформацию несравненно легче, чем это предсказывается нашей моделью.

§ 15.6. Дислокации

Еще один тип дефектов в кристаллах — дислокации предложили сначала теоретически, для того чтобы объяснить явление сдвига. Легче всего пояснить понятие дислокации, если представить себе, что в кристалле удаляется часть целой плоскости атомов, как показано схематически на рис. 15.11. Удалена часть плоскости, перпендикулярной плоскости чертежа (рис. 15.11, *б*). Дислокация представляет область решетки, искаженную по сторонам отсутствующей плоскости (рис. 15.11, *в*). Дефект решетки в данном случае представляет

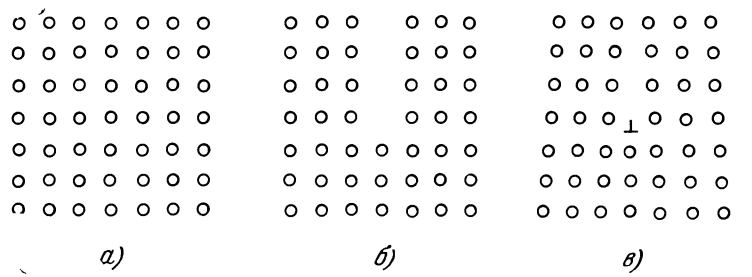


Рис. 15.11.

линию, а не точку, как в случае примесей, вакансий или атомов в междоузлиях. Эта линия перпендикулярна плоскости чертежа на рис. 15.11, *в* и обозначена знаком $\perp$. Можно представить себе, что движение линии дислокации («толщиной» всего в один атом) налево или направо будет относительно легким, так как в данном случае должна совершать сдвиг только линия атомов, а не вся плоскость атомов, как это рассматривалось в предыдущем параграфе. Более того, если дислокация движется в кристалле направо, то происходит скольжение на один атом налево (рис. 15.12). (Если бы дислокация двигалась налево, то ступенька на рис. 15.12 оказалась бы с левой стороны.) Следовательно, можно предположить, что скольжение происходит путем движения в кристалле многих дислокаций, причем для движения каждой из них требуется сравнительно небольшая сила.

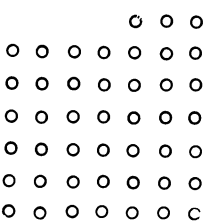
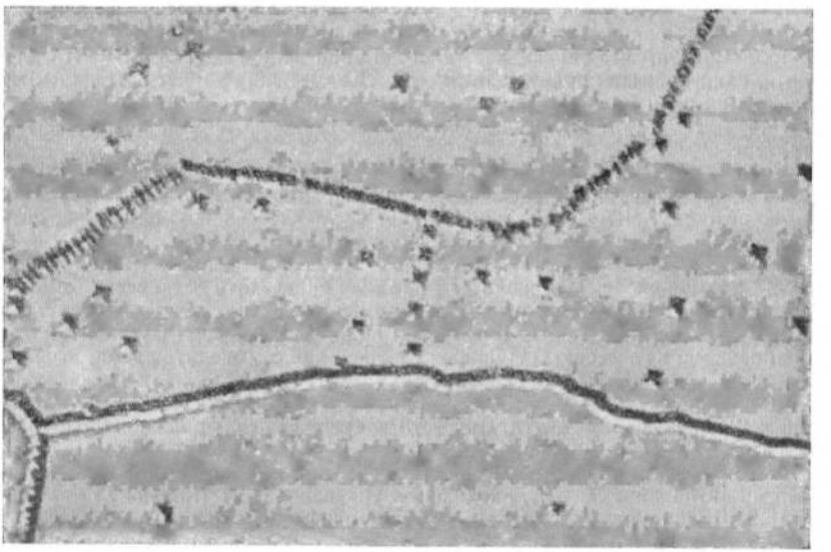


Рис. 15.12.

Математическая теория дислокаций весьма сложна, и здесь мы ее не будем вообще рассматривать.

Вначале дислокации были просто гипотетическим понятием, но недавно их удалось наблюдать с помощью довольно прямых методов. Сильно увеличенная фотография (фото VIII) показывает ямки. образовавшиеся после травления поверхности кристалла фторида

лития. Каждая ямка указывает место выхода дислокации на поверхность кристалла. Однако во многом еще остается загадкой сам процесс образования дислокаций Можно сделать оценку и получить результат, что энергия в расчете на длину диаметра одного атома, необходимая для образования дислокации, будет того же порядка величины, что и энергия образования вакансии. Так как



VIII. Протравленная поверхность кристалла LiF (увеличено примерно в 500 раз) Каждая ямка травления указывает на наличие дислокации.

длина дислокаций в миллион раз больше размеров атома, то согласно принципу Больцмана равновесное число дислокаций практически должно равняться нулю. Вероятно, некоторые дислокации растут в кристалле в процессе его выращивания (и фактически могут даже обусловливать механизм роста кристалла), но их можно создавать в уже готовых кристаллах, прилагая внешнее напряжение, причем процесс их образования еще не понят полностью.

Аналогично «точечным дефектам» (примеси и дефекты решетки) дислокации оказывают огромное влияние на свойства реальных кристаллов. Например, внутреннее трение колеблющегося твердого тела по крайней мере частично обусловлено затухающими колебательными движениями дислокаций. Даже если мы в первую очередь интересуемся явлениями в идеальном кристалле, нужно иметь в виду, что дефекты могут очень сильно изменить интересующие нас явления при постановке экспериментов с реальными кристаллами.

Задачи

15.1. Пусть кристалл кубической структуры содержит примеси замещения с концентрацией 0,1% (обычная концентрация примеси в «химически чистом» веществе). Чему равно среднее расстояние между атомами примеси, измеренное в единицах расстояния между атомами основного вещества? *Указание*: в каждом кубе, содержащем тысячу атомов, имеется в среднем один атом примеси.

15.2. Очень чистый германий, используемый при изготовлении полупроводниковых устройств, содержит лишь 10^{-7}% примесей, которые влияют на электропроводность. Чему равно среднее расстояние между примесными атомами?

15.3. Считая, что справедлив классический закон Дюлонга и Пти, определить, каким образом присутствие примесей замещения влияет на теплоемкость в расчете на один моль? Почему?

15.4. Рассмотреть диффузию вакансии в гранецентрированной кубической структуре.

а) Если вакансия находится в некоторой вершине элементарной ячейки, то каково минимальное число «перескоков», необходимое ей для перемещения в соседнюю вершину? Чему равно минимальное число «перескоков» для перемещения ее в вершину, лежащую по диагонали боковой грани куба?

б) Чему равны соответствующие вероятности перемещения в эти две вершины за минимальное число «перескоков»? *Указание*: определить долю всех возможных «перескоков», которая приводит к нужному перемещению.

15.5. Тонкая напыленная пленка AgBr находится между двумя металлическими пленками из серебра. С помощью уравнения (8.32) оценить время, необходимое атомам Ag для диффузии сквозь пленку AgBr, если толщина последней равна 10^{-4} *см* и температура равна 150 °C. Коэффициент диффузии Ag в AgBr при этой температуре равен 10^{-10} *см*^{2}/*сек*. Провести такую же оценку для слоя AgBr толщиной в 1 *см*.

15.6. Провести оценки в условиях задачи 15.5 для комнатной температуры. «Энергия активации» $W + E$, входящая в уравнение (15.12), равна 18 *ккал/моль*.

15.7. Решив уравнения (15.3) и (15.6), определить концентрации дефектов (n_-/n_0) и (n_+/n_0) как функции концентрации примесей (n_i/n_0). Получить приближенные выражения для случаев больших и малых значений (n_i/n_0).

15.8. Чему равна частота «перескоков» вакансии иона Na^+ и NaCl при: а) температуре плавления (801 °C)? б) комнатной температуре? в) температуре сжижения азота (78 °K)?

15.9. Рассчитать подвижность вакансий ионов Na^+ в NaCl при температуре плавления, при комнатной температуре, при температуре сжижения азота.

15.10. Чему будет равна при комнатной температуре проводимость кристалла NaCl, который содержит 10^{-4} двухвалентных катионных примесей?

15.11. Экспериментальное значение коэффициента диффузии K в KCl при температуре 600 °C равно $2 \cdot 10^{-10}$ *см*^{2}/*сек*, а экспериментальное значение коэффициента электропроводности равно $3 \cdot 10^{-6}$ (*ом·см*)$^{-1}$. Проверить, насколько хорошо выполняется соотношение Эйнштейна. Предложить механизм, который объяснял бы расхождения с этим соотношением.

Литература для справок

1. Френкель Я. И., Кинетическая теория жидкостей, Изд. АН СССР, 1945.
2. Киттель Ч., Введение в физику твердого тела, Физматгиз, 1962.
3. Зейтц Ф., Современная теория твердого тела, Гостехиздат, 1949.

Квантовая механика

Как мы видели, рассмотрение взаимодействия атомов в соответствии с законами классической механики приводит к пониманию многих свойств вещества как в газовом, так и в твердом состоянии. Однако до сих пор мы не рассматривали внутреннюю структуру самих атомов. Из опытов Резерфорда по рассеянию мы знаем, что атомы состоят из массивных положительно заряженных ядер, окруженных электронами. При рассмотрении плазмы мы видели, что электрон может вырваться из атома и взаимодействовать с оставшимся положительным ионом. В ряде типов кристаллов их наблюдаемые свойства объяснялись взаимодействием положительных и отрицательных ионов. Однако стабильность атома или иона пока не была объяснена. Можно было бы предположить, что эта стабильность последует из развитой в гл. 5 теории планетарного движения; эта возможность будет разобрана в гл. 18 и окажется неудовлетворительной. Классическая механика предсказывает эллиптические орбиты определенного вида для электронов, движущихся в кулоновском поле ядер. В гл. 18 мы увидим, что эти орбиты хотя и могут быть использованы для наглядного пояснения структуры атома, но, будучи понимаемыми буквально, приводят к непреодолимым трудностям.

Правильное описание поведения электронов во всех возможных ситуациях требует существенно новой физической теории — квантовой механики. В квантовой механике сохраняются некоторые черты, роднящие ее с классической механикой, и для достаточно тяжелых частиц она приводит к тем же результатам. Однако основные идеи и математические методы квантовой механики являются совершенно иными. В ее наиболее «физической», не абстрактной, форме квантовая механика представляет собой волновую теорию. Кажущийся парадокс использования волновой теории для описания частицы будет разрешен в гл. 20. Перед этим мы изложим некоторые аспекты волнового поведения электронов и введем волновую теорию нужного для объяснения этих явлений вида. Мы также попробуем иллюстрировать эту задачу, рассматривая параллельную или, если хотите, обратную проблему, а именно, некоторые корпускулярные свойства света, который классически описывается электромагнитными волнами. В самом начале мы дадим формальную теорию распространения волн (гл. 16), для того чтобы развить необходимый математический аппарат.

Глава 16

Волновое уравнение

В этой главе мы выведем математическое уравнение, описывающее распространение волн, и получим некоторые решения этого уравнения. Все это послужит нам основой для последующего обсуждения квантовой механики. Однако для того чтобы придать этой математической задаче физический смысл, мы сначала рассмотрим звуковые волны. Математически задача о звуковых волнах совершенно идентична задаче о волнах света и даже о квантово-механических волнах «частиц». С физической же точки зрения наше рассмотрение звуковых волн будет полностью классическим, не имеющим к квантовой механике никакого отношения. Фактически этим рассмотрением мы как бы завершим нашу классическую теорию сплошных сред (твердых или газообразных.)

Мы уже получили описание деформаций в твердых телах (сжатие, растяжение и сдвиг) и в газах (сжатие или расширение) на основе макроскопического уравнения состояния и связали параметры этих деформаций (модули упругости) с микроскопическими взаимодействиями между атомами, из которых состоит вещество. Однако наш подход был чисто статическим; предполагалось, что вещество находится в равновесии с приложенными к нему внешними силами. Если же внешняя сила прикладывается очень быстро, то в веществе возникает движущийся импульс или волна деформации, способные перемещаться внутри вещества. И если внешняя сила периодически меняется со временем, то в среде будет распространяться п е р и о д и ч е с к а я волна, которая и является звуком. В этой главе математическое описание волнового движения будет развито на основе макроскопической точки зрения.

В случае кристалла волны можно рассматривать и с микроскопической точки зрения, описывая колебания атомов относительно их равновесных положений. Это, конечно, дало бы значительно более корректное описание колебательного движения атомов, чем то, которое мы излагали, поскольку в нашей упрощенной трактовке предполагалось, что атом движется в потенциальной яме, образованной другими, считающимися неподвижными атомами, в то

время как в действительности все атомы движутся одновременно. Мы не станем, однако, излагать это микроскопическое описание коллективного движения атомов, поскольку, как мы уже говорили, подробное математическое описание волновых процессов нам нужно в первую очередь для приложений к квантовой механике, в которую этот математический аппарат переносится почти без изменений. Необходимо еще раз подчеркнуть, что настоящая глава является чисто классической. В ней не содержится ничего, выходящего за рамки применения второго закона Ньютона в новой физической ситуации.

§ 16.1. Колеблющаяся струна

Типичнейшим примером волнового движения является колебание натянутой струны, например гитарной. Так как этот пример волнового движения наиболее нагляден, то мы и начнем с него наш анализ. Допустим, что струна является идеально гибкой и однородной и растянута постоянной силой F. Выберем систему координат так, чтобы покоящаяся струна лежала на оси x, и предположим, что колебания происходят в одной плоскости, в плоскости xy. Пусть переменная Ψ описывает смещение струны вдоль оси y от ее положения равновесия. В общем случае величина Ψ будет различной в каждой точке x и для каждого момента времени t. Нашей целью является получение уравнения движения $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ для каждого малого элемента струны. Если мы рассмотрим малый элемент длины dx струны, то его масса будет равна

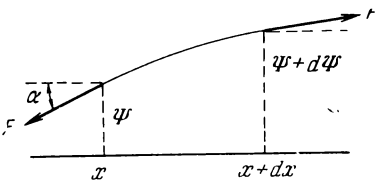


Рис. 16.1.

$$dM = \mu dx, \tag{16.1}$$

где $\mu = M/L$ представляет собой линейную плотность, а M и L — соответственно полную массу и длину струны. Ускорение в направлении y равно.

$$a_y = \ddot{\Psi}. \tag{16.2}$$

Теперь нам остается только вычислить силу F_y в y-направлении, которая вызывает движение. На рис. 16.1 видно, что сила на одном конце элемента струны равна $F \sin \alpha$. Здесь нам придется допустить, что смещение Ψ, а следовательно, и угол α *малы*, достаточно малы, чтобы использовать приближение $\sin \alpha \approx \operatorname{tg} \alpha$. Тогда

$$\sin\alpha \approx \operatorname{tg} \alpha = d\Psi/dx \equiv \Psi'(x),$$

где штрихом обозначена производная от Ψ по координате. Очевидно, что при этом упрощающем допущении y-компонента силы будет изменяться вдоль струны пропорционально ее наклону, $F_y = F\Psi'(x)$, даже если полный вектор силы имеет постоянную абсолютную величину F.

Однако для уравнения движения нам нужна не компонента F_y, а суммарная сила, действующая на элемент струны (рис. 16.1). Суммарная сила dF_y в y-направлении равна разности значений F_y на обоих концах элемента:

$$dF_y = F[\Psi'(x + dx) - \Psi'(x)].$$

Теперь, предполагая элемент dx малым, можно использовать разложение функции $\Psi'(x + dx)$ в ряде Тейлора:

$$\Psi'(x + dx) = \Psi'(x) + \frac{d\Psi'(x)}{dx} dx + \ldots = \Psi'(x) + \Psi''(x)\, dx + \ldots$$

Тогда для суммарной силы получим

$$dF_y \approx F\Psi''(x)\, dx, \tag{16.3}$$

т. е. что она пропорциональна *второй* производной от Ψ. Теперь мы можем записать y-компоненту уравнения движения для элемента струны. Комбинируя уравнения (16.1) — (16.3), получим

$$F\Psi''dx = \mu dx\ddot{\Psi}.$$

Так как Ψ является функцией *двух независимых переменных* x и t, то дифференцирование по пространственной и временной координатам надо изобразить частными производными. Поэтому окончательно уравнение движения струны можно записать в виде

$$u^2 \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}, \qquad u \equiv \sqrt{\frac{F}{\mu}}. \tag{16.4}$$

Это уравнение называется *волновым уравнением*. Оно представляет собой *уравнение в частных производных*, в котором связываются между собой частные производные функции Ψ, подобно тому как в обыкновенном дифференциальном уравнении связываются друг с другом обычные производные функции одной переменной. Нахождение решения уравнения (16.4) сводится к отысканию такой функции $\Psi(x, t)$, производные от которой удовлетворяют этому уравнению. Заметим, что введенная в (16.4) новая константа u имеет размерность скорости. Ниже мы увидим, что u представляет собой скорость распространения волны.

Анализ дифференциального уравнения в частных производных является гораздо более трудной математической задачей, чем анализ обыкновенного дифференциального уравнения. Тут нельзя написать чего-то аналогичного содержащему две произвольные константы «общему решению» обыкновенного дифференциального уравнения вто-

рого порядка. В действительности можно найти решения волнового уравнения, содержащие две *произвольные функции*. Вместо этого мы получим бесконечный набор решений определенного частного вида и увидим, что этого вполне достаточно для всех практических целей. В таком подходе важно иметь в виду, что уравнение является *линейным*, т. е. что оно не содержит никаких квадратов и высших степеней Ψ и ее производных. Поэтому, так же как и в обыкновенном линейном дифференциальном уравнении, сумма двух и более решений также является решением. С нелинейными уравнениями работать очень трудно. Наше уравнение получилось линейным именно за счет того, что мы предположили смещение малым. Если бы мы оставили $\sin\alpha$, не заменяя его на $\operatorname{tg}\alpha$, то получить уравнение мы бы смогли без труда и здесь. Но решать это уравнение было бы гораздо сложнее.

§ 16.2. Решения волнового уравнения

Для того чтобы получать решения уравнения, допустим, что каждый элемент струны движется вверх и вниз гармонически во времени, но с амплитудой и фазой, зависящими от координаты. Таким образом, мы будем искать решения в форме

$$\Psi(x,\ t) = \psi(x)\, e^{i\omega t} \tag{16.5}$$

Эта функция напоминает комплексную форму решения уравнения для гармонического осциллятора (без затухания), обсуждавшегося в § 4.3. Величина ω представляет собой круговую частоту. Различие состоит в том, что теперь амплитуда $\psi(x)$ зависит от координаты x, вместо того чтобы быть константой A. Для того чтобы убедиться в том, что функция вида (16.5) может удовлетворять волновому уравнению, надо вычислить производные от $\Psi(x, t)$ и подставить их в уравнение (16.4). Так как

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \psi''(x)\, e^{i\omega t}, \qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -\omega^2\psi(x)\, e^{i\omega t},$$

то это пробное решение будет удовлетворять волновому уравнению, если $\psi(x)$ удовлетворяет обыкновенному дифференциальному уравнению

$$\psi''(x) + k^2\,\psi(x) = 0,\ k \equiv \omega/u. \tag{16.6}$$

Уравнение такого типа называется *уравнением Гельмгольца*. Формально оно идентично уравнению для гармонического осциллятора, так как в нем вторая производная от функции, плюс сама функция, помноженная на положительную константу, равна нулю. Тем самым мы свели задачу об отыскании решений уравнения (16.4) в частных производных к более простой задаче об отыскании решений обыкно-

венного дифференциального уравнения (16.6), которому должна удовлетворять амплитудная волновая функция. Частота ω совершенно произвольна. Она не определяется уравнением движения (дальше мы увидим, что именно будет ее определять). Но если частота ω выбрана, то k полностью определено, так как величина u определяется из физических соображений через массу и натяжение струны.

Решения уравнения (16.6) можно сразу же написать по аналогии с решениями уравнения для гармонического осциллятора. Мы будем рассматривать действительные решения

$$\psi(x) = \sin kx, \quad \psi(x) = \cos kx$$

или комплексные решения

$$\psi(x) = e^{\pm ikx} = \cos kx \pm i \sin kx.$$

Рассмотрим сначала решения последнего вида, для которых согласно уравнению (16.5) полное решение нашего волнового уравнения будет иметь вид:

$$\Psi(x,t) = e^{i(\omega t \pm kx)} = e^{ik(ut \pm x)}.$$

Для того чтобы эти комплексные решения интерпретировать, надо брать либо действительную, либо комплексную часть (поскольку обе части удовлетворяют дифференциальному уравнению по отдельности). Например, действительная часть равна

$$\Psi(x,\ t) = \cos(\omega t \pm kx) = \cos k(ut \pm x).$$

В фиксированный момент времени Ψ ведет себя как $\cos kx$; при фиксированной координате Ψ ведет себя как $\cos \omega t$ (рис. 16.2). Таким образом, мы видим, что ω и k соответствуют *частоте и длине волны*:

$$\omega = 2\pi\nu, \quad k = 2\pi/\lambda. \tag{16.7}$$

Смысл величины u можно усмотреть из 2-й формы $\cos k(ut \pm x)$ нашего решения. Пусть мы наблюдаем за определенным значением смещения, например за пиком волны, в котором косинус равен единице, т. е. аргумент под косинусом равен нулю. Тогда в произвольный момент времени t положение пика определяется соотношением $ut \pm x = 0$ или, что то же, $x = \pm ut$. При верхнем знаке пик движется со скоростью u налево, а при другом выборе знака — с той же скоростью u направо. Скорость u называется *фазовой скоростью* волны. Фазовая скорость определяется физическими условиями ($\sqrt{F/\mu}$ для струны). Постоянная ω произвольна, но если она задана, то величина k определяется соотношением $k = \omega/u$. Следовательно, при любой частоте, с которой волна может распространяться вдоль струны, длина волны определяется частотой

$$u = \omega/k = \lambda\nu. \tag{16.8}$$

Такого рода волны названы *бегущими волнами*, чтобы отличать их от стоячих волн, которые мы рассмотрим в следующем параграфе.

На первый взгляд кажется, что мы получили колоссальное множество решений нашей задачи, так как синусы и косинусы (или комплексные экспоненты) можно смешивать в любых комбинациях,

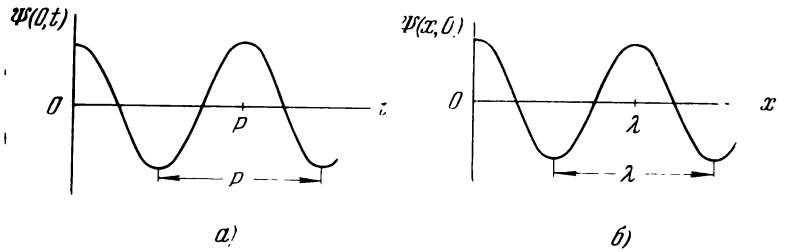


Рис. 16.2.

а частота произвольна. Причина, из-за которой мы получили так много решений, состоит в том, что задача еще не полностью определена. Если же сформулировать конкретную физическую задачу, то описывающие ее математические уравнения должны будут иметь единственное решение.

§ 16.3. Граничные условия

Для задания конкретной физической ситуации необходимо описать условия на концах струны, задав какие-то *граничные условия*. Например, наиболее обычной является ситуация, когда концы закреплены, так что они не могут двигаться. Это значит, что смещение Ψ равно нулю на концах ($x = 0$, $x = L$) во все моменты времени. Математически это выражается соотношениями

$$\Psi(0, t) = \Psi(L, t) = 0. \tag{16.9}$$

Из всех решений волнового уравнения теперь надо отобрать те, которые удовлетворяют также и уравнению (16.9). Тогда $\Psi(x)$ будет удовлетворять уравнению Гельмгольца. Здесь удобнее воспользоваться действительными решениями

$$\Psi(x, t) = (A \sin kx + B \cos kx) \cos \omega t = \psi(x) \cos \omega t.$$

Согласно первому граничному условию $\Psi(0, t) = B \cos \omega t = 0$, так что $B = 0$. Далее, из второго условия следует, что $\Psi(L, t) = (A \sin kL) \cos \omega t = 0$, так что либо $A = 0$, либо $\sin kL = 0$. Поскольку при $A = 0$ $\Psi(x, t) \equiv 0$, то такое решение описывает покоящуюся струну, что не очень интересно. Другая возможность, $\sin kL = 0$, требует, чтобы $kL = \pi n$ с $n = 1, 2, 3, \ldots$ В этом

случае мы получаем бесконечно много решений:

$$\Psi = \Psi_n = A_n \cos \omega_n t \sin k_n x = A_n \cos \omega_n t \, \psi_n(x), \tag{16.10}$$

где

$$\psi_n = \sin k_n x, \quad k_n = \pi n/L, \quad \omega_n = u k_n, \quad n = 1, 2, 3,$$

и каждый множитель A_n является произвольной константой.

Все решения (16.10) удовлетворяют как волновому уравнению (16.4), так и граничным условиям (16.9). Эти решения описывают *стоячие волны* на струне. Так как $k_n = 2\pi/\lambda_n$, то мы имеем $\lambda_n = 2L/n$, так что длина струны должна равняться целому числу полуволн (рис. 16.3). Теперь уже струна может колебаться лишь с определенными частотами и соответствующими им длинами волн.

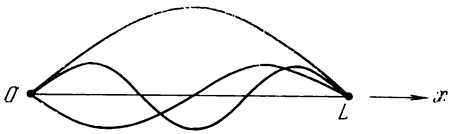


Рис. 16.3

И все же еще возможно бесконечное количество различных движений. Для того чтобы выделить именно то движение, которое будет происходить, необходимо наложить какие-то *начальные условия* при $t = 0$. Допустим, что мы придали струне деформацию определенной формы $\Psi(x, 0) = f(x)$ и высвобождаем ее в покое, так что $\dot{\Psi}(x, 0) = 0$. Второе условие выполняется автоматически, поскольку мы выбрали решения вида $\cos\omega t$. Если бы мы хотели придать струне начальную скорость, то пришлось бы включить и решения вида $\sin \omega t$, но у нас сейчас нет нужды в таком усложнении задачи. Если начальной формой является одна из функций $A_n \sin k_n x = f(x)$, то мы просто бы выбрали соответствующее решение. Но такая ситуация практически маловероятна. Более реалистичной является начальная конфигурация, типа изображенной на рис. 16.4, когда струна оттянута силой, приложенной к одной точке струны. Так как волновое уравнение линейно, то и другие более сложные начальные конфигурации струны могут быть получены суммированием решений

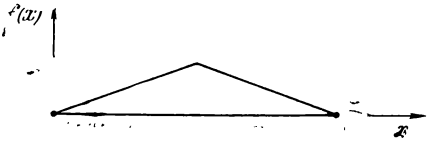


Рис. 16.4.

$$\Psi(x, t) = \sum_{j=1}^{N} A_j \sin k_j x \cos \omega_j t,$$

$$\Psi(x, 0) = \sum_{j=1}^{N} A_j \sin k_j x.$$

Действительно, можно надеяться, что, устремляя N к бесконечности и используя бесконечный ряд решений, можно удовлетворить произвольному граничному условию:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{\infty} A_j \sin k_j x = \sum_j A_j \psi_j. \tag{16.11}$$

Можно показать, что при довольно общих условиях такие ряды, называемые *рядами Фурье*, сходятся и являются дважды дифференцируемыми функциями. В следующем параграфе мы увидим, как вычисляются соответствующие коэффициенты A_j.

Теперь наш обзор методов получения решений волнового уравнения стал полным. Эти методы можно сравнить с решением задачи о движении частицы. В последнем случае физическая ситуация описывается обыкновенным дифференциальным уравнением. То единственное решение, которое описывает реально происходящие события, отбирается из бесконечного числа решений уравнения наложением начальных условий на скорость и координату. В отличие от этого, в непрерывной среде вроде струны физическая ситуация описывается дифференциальным уравнением в частных производных, которое должно быть дополнено какими-то граничными условиями, чтобы сделать описание полным. Единственное решение получается наложением начальных условий на скорость и положение в каждой точке среды (которые задаются функциями, а не числами).

Для дальнейших приложений часть того, что мы сделали, полезно рассмотреть с другой, несколько более абстрактной и изощренной точки зрения. Перепишем уравнение Гельмгольца (16.6) в виде

$$d^2\psi/dx^2 = \alpha\psi \quad (\alpha \equiv -k^2). \tag{16.12}$$

Для полноты конкретизации задачи добавляются граничные условия $\psi(0) = \psi(L) = 0$ (ср. с (16.9)). В результате «допустимые» решения задачи оказываются равными

$$\psi = \psi_n \equiv \sin k_n x \tag{16.13}$$

и соответствующими

$$\alpha = \alpha_n \equiv -k_n^2.$$

Допустимые значения α_n называются *собственными значениями*, а соответствующие им решения — *собственными функциями*. Изощренным способом подхода к этой «задаче на собственные значения» является такой: некий *дифференциальный оператор* d^2/dx^2 переводит функцию ψ в некоторую другую функцию. Если эта другая функция равна $\alpha\psi$, т. е. с точностью до константы α совпадает с ψ, то такая функция является собственной, а α является ее собственным значением. Дискретность набора собственных функций (16.13) возникает за счет наложения граничных условий. Начальным

условиям можно удовлетворить, разложив начальную конфигурацию струны в бесконечный ряд по собственным функциям (16.11). Такое абстрактное описание решения уравнения Гельмгольца мы привели не потому, что оно проливает новый свет на колебания струны, но потому, что эти свойства не являются особенностью уравнения Гельмгольца, а, как можно показать, применимы ко всем уравнениям такого рода, возникающим в физике. Мы будем иметь случай рассмотреть некоторые другие уравнения такого типа в квантовой механике. Заметьте, что для колеблющейся струны собственные значения связаны с возможными длинами стоячих волн в струне, а соответствующие волновые функции описывают форму струны в этой частной вибрационной моде.

§ 16.4. Ряды Фурье

В этом параграфе мы объясним более детально, каким образом реально проводится разложение в ряд уравнения (16.11). Нам этими результатами воспользоваться не придется, но сам метод крайне важен для физических задач.

Прежде всего заметим, что функции $\sin k_j x$ обладают следующим интересным свойством, с помощью которого и вычисляются искомые коэффициенты:

$$\int_0^L dx \sin k_j x \sin k_k x = \begin{cases} 0, & j \neq k, \\ \frac{L}{2}, & j = k. \end{cases}$$

Это соотношение легко доказать (задача 16.4), если переписать подынтегральное выражение в виде

$$\sin k_j x \sin k_k x = \frac{1}{2} [\cos (k_j - k_k) x - \cos (k_j + k_k) x],$$

$$\sin^2 k_j x = \frac{1}{2} [1 - \cos^2 k_j x].$$

Если интеграл от произведения двух функций по области их определения исчезает, то эти функции называются *ортогональными*. Набор функций типа $\{\sin \kappa_j x\}$, каждая из которых ортогональна всем остальным, называется *ортогональным набором*. Удобно определить новый набор функций

$$\varphi_j (x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_j x,$$

так что

$$\int_0^L dx \varphi_j (x) \varphi_k (x) = \begin{cases} 0, & j \neq k, \\ 1, & j = k. \end{cases} \tag{16.14}$$

Функции φ_j называются *нормированными* нормировочным множителем $\sqrt{2/L}$, а набор $\{\varphi_j\}$ называется *ортонормированным набором*, что означает, что он является и ортогональным, и нормированным. Мы можем попытаться разложить начальную конфигурацию $f(x)$ по функциям этого ортонормированного набора по аналогии с уравнением (16.11):

$$f(x) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \varphi_j(x) \tag{16.15}$$

Пользуясь ортонормальными свойствами набора $\{\varphi_j\}$, можно легко вычислить коэффициенты c_j. Для вычисления коэффициента c_k умножим обе части (16.15) на φ_k^* и проинтегрируем обе части, интегрируя ряд почленно:

$$\int_0^L dx\, f(x)\varphi_k^*(x) = \int_0^L dx \sum_{j=1}^{\infty} c_j \varphi_j(x)\, \varphi_k^*(x) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \int_0^L dx\, \varphi_j(x)\, \varphi_k^*(x) = c_k.$$

Вследствие ортонормированности φ_j единственным неисчезающим членом в правой части будет c_k, так что

$$c_k = \int_0^L dx\, f(x)\, \varphi_k^*(x). \tag{16.16}$$

Если вычислить таким способом коэффициенты ряда Фурье, то решение

$$\Psi(x,\ t) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \varphi_j(x)\, e^{i\omega_j t} \text{ (действительная часть)}$$

будет удовлетворять дифференциальному уравнению, граничным условиям и начальным условиям. (Для того чтобы строго обосновать справедливость этого решения, надо получить утвердительный ответ на ряд вопросов, касающихся сходимости, дифференцируемости, интегрируемости и т. д.; здесь достаточно сказать, что это можно сделать для всех встречающихся на практике случаев. Таким образом, начальным условиям можно удовлетворить, вычислив надлежащим образом коэффициенты c_j.)

Набор собственных функций уравнения Гельмгольца (с соответствующими граничными условиями) представляет собой ортонормированный набор. Другие функции можно выразить линейными комбинациями (бесконечного числа) этих собственных функций примерно так же, как произвольный вектор можно выразить в виде линейной комбинации ортонормированных базисных векторов. По-

этому набор ортонормированных функций называется *базисом* «векторного пространства функций». Говорят, что на данный ортонормированный набор функций «натягивается» определенное пространство функций, а именно, все функции, которые могут быть представлены как линейные комбинации этих базисных функций. Сделанное выше утверждение теперь можно иными словами высказать так: на собственные функции уравнения Гельмгольца можно натянуть пространство функций, которое достаточно обширно, чтобы содержать в себе все функции, обычно встречающиеся в физических задачах. Причина, по которой мы привели это общее утверждение, состоит в том, что можно показать, что для обширного класса дифференциальных уравнений их собственные функции образуют такого типа ортонормированный набор (хотя сами функции вовсе не обязательно синусы). Мы увидим, что эти математические идеи особенно важны для понимания квантовой механики (гл. 20).

§ 16.5. Волны в трех измерениях

Перед тем как расстаться с задачей о волнах, мы хотим показать, каким образом ее можно обобщить на случай *трехмерной среды* и применить это обобщение к рассмотрению распространения звуковых волн. Для струны возвращающая сила связана с изменением смещения через натяжение F, а инертные свойства описываются линейной плотностью μ, что дает для скорости распространения волны выражения $u = \sqrt{F/\mu}$. Для трехмерного твердого тела соответствующая возвращающая сила связана с изменением смещения (деформацией) через модуль сдвига G, а инертные свойства зависят от плотности ρ. Поэтому для волнового уравнения в тех же приближениях получится фазовая скорость $u = \sqrt{G/\rho}$. А для волн сжатия, очевидно, вместо G появится модуль Юнга E. Для волн сжатия в жидкости или газе, где напряжение может быть только гидростатическим давлением, появится модуль всестороннего сжатия β. Все эти выражения для фазовой скорости с точностью до безразмерного численного множителя можно получить просто из теории размерности, поскольку только перечисленные выше комбинации модулей упругости и плотности имеют нужную размерность скорости. Первые две волны называются *поперечными*, так как для них смещения перпендикулярны направлению распространения волны; последние две волны называются *продольными*, так как для них направления смещений и распространения волны совпадают. Обобщение волнового уравнения для смещения Ψ имеет вид

$$u^2\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)=\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}\,. \tag{16.17}$$

Это уравнение можно записать в сокращенных обозначениях:

$$u^2\nabla^2\Psi = \ddot{\Psi},$$

где ∇ — тот же самый векторный дифференциальный оператор, который в уравнении (1.4) был нами использован для записи градиента скалярной функции. Здесь символ ∇^2 означает $\nabla\cdot\nabla$ и называется оператором *Лапласа* (*лапласиан*).

Это волновое уравнение можно свести к трехмерному уравнению Гельмгольца

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = 0, \qquad k \equiv \omega/u, \tag{16.18}$$

подстановкой $\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)\, e^{i\omega t}$. Уравнение Гельмгольца имеет решение вида

$$e^{ik_x x}, \quad e^{ik_y y}, \quad e^{ik_z z}.$$

Они описывают волны в направлениях x, y или z. Более общее решение уравнения Гельмгольца дается выражением

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \tag{16.19}$$

Соответствующее решение волнового уравнения имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} = e^{ik(ut - \mathbf{s}\mathbf{r})}, \qquad \mathbf{k} = k\mathbf{s} = k_x\mathbf{e}_x + k_y\mathbf{e}_y + k_z\mathbf{e}_z.$$

В данный момент t волна имеет одинаковую фазу во всех точках, для которых выполняется соотношение $\mathbf{s}\mathbf{r} = \text{const}$. Такое решение описывает *плоскую волну*, распространяющуюся в произвольном направлении $\mathbf{s}$, потому что в данный момент фаза имеет одно и то же значение в каждой точке плоскости $\mathbf{r}\mathbf{s} = \text{const}$, перпендикулярной единичному вектору $\mathbf{s}$ (или $\mathbf{k}$) (ср. рис. 13.13).

Можно найти и ряд других форм решения уравнения (16.18). В частности, представляет интерес решение, обладающее сферической симметрией. Допустим, что существует решение $\psi(r)$, зависящее только от $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, но не от остальных сферических координат θ и φ. Тогда, перейдя к сферическим координатам, мы получим

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{\partial\psi}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial\psi}{\partial r}\frac{x}{r},$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + x\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) = \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{x^2}{r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right),$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = \frac{3}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{r^2}{r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) =$$

$$= \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2\partial\psi}{r\partial r} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}.$$

Отсюда уравнение Гельмгольца (16.18) для сферически симметричного случая может быть записано в виде

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial \psi}{\partial r}\right) = -k^2\psi. \tag{16.20}$$

Легко проверить, что функция

$$\psi(r) = \frac{e^{-ikr}}{r} \tag{16.21}$$

удовлетворяет этому уравнению. Это решение называется *сферической волной*, поскольку в нем поверхностями постоянной фазы являются сферы ($r = \text{const}$). Эта волна распространяется во все стороны со сферически симметричным фронтом и с амплитудой, спадающей как $1/r$ (рис. 16.5). Как мы увидим в этом же параграфе несколько ниже, такое спадание необходимо для сохранения энергии. Решение (16.21) описывает излучение волны точечным источником.

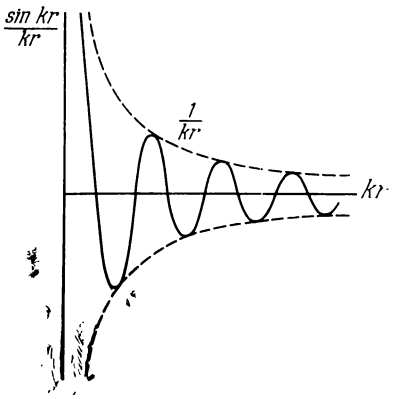


Рис. 16.5.

Для более детального изучения энергии волны вернемся сначала к стоячим или бегущим волнам в струне. В любой из этих волн каждая точка струны движется вверх и вниз по простому гармоническому закону. Например, в фиксированной точке x бегущей волны, описываемой решением

$$\Psi(x, t) = A\sin(\omega t - kx),$$

мы можем записать— $kx = \varphi = \text{const}$. Решение же $A\sin(\omega t + \varphi)$ совпадает с решением для гармонического осциллятора (уравнение (4.6)). Отсюда средняя кинетическая энергия $d\bar{T}$, приходящаяся на элемент dx струны, равна

$$d\bar{T} = \frac{1}{2}(dM)\,\overline{v^2} = \frac{1}{2}(\mu dx)\,A^2\omega^2\overline{\cos^2(\omega t + \varphi)}.$$

так как $v = \dot{\Psi} = A\omega\cos(\omega t + \varphi)$. Поскольку среднее значение функции $\cos^2$ равно $^1/_2$, то мы можем записать линейную *плотность* кинетической *энергии* струны в виде

$$d\bar{T}/dx = {}^1/_4\,A^2\omega^2\mu.$$

Средняя кинетическая энергия гармонического осциллятора равна половине его полной энергии (см. задачу 4.2), так что плотность полной энергии равна

$$dE/dx = {}^1/_2 A^2\omega^2\mu.$$

В бегущей волне эта энергия распространяется в x-направлении со скоростью $u = \omega/k$. Например, положение максимума кинетической энергии (узел) или максимума потенциальной энергии (пучность) движется вместе с волной со скоростью u.

В трехмерном случае плотность энергии также пропорциональна квадрату амплитуды волны, но энергия и масса теперь уже относятся не к единице длины, а к единице объема. Для плоской волны плотность энергии равна

$$dE/dV = {}^1/_2 A^2\omega^2\rho, \tag{16.22}$$

где ρ — масса на единицу объема. Эта энергия распространяется в направлении движения волны. Поток энергии (т. е. мощность), протекающей через единичную площадку, параллельную фронту волны (или, что то же, перпендикулярную направлению распространения волны), равен

$$I = u\,dE/dV, \tag{16.23}$$

где u — скорость распространения (доказательство этого соотношения примерно такое же, как и ведущее к соотношению (7.3) доказательство для потока частиц). Поток энергии через единичную площадку называется *интенсивностью* волны. Этот поток пропорционален квадрату амплитуды. Теперь мы отчетливо видим, почему в (16.21) амплитуда сферической волны должна убывать как $1/r$: полная энергия, протекающая через окружающую источник сферу радиуса r, пропорциональна площади этой сферы, т. е. r^2 и интенсивности I. Таким образом, для того чтобы полный поток энергии не зависел от r, интенсивность I должна быть пропорциональной $1/r^2$. Приведенные аргументы и вытекающая из них пропорциональность интенсивности квадрату амплитуды сохраняют силу для любых видов волн (не только для звуковых волн) при условии, что поглощение энергии средой, через которую распространяется волна, пренебрежимо мало.

§ 16.6. Звуковые волны

Для того чтобы применить только что развитую волновую теорию к каким-либо физическим явлениям, рассмотрим распространение звука. Сначала будем считать среду, в которой распространяется звук, идеальным газом, ибо большинство звуков, которые мы слышим, доходят до нас через воздух. Скорость распространения

звука равна

$$u = \sqrt{\beta/\rho}, \tag{16.24}$$

где β — сжимаемость и ρ — плотность газа. В § 12.3, пользуясь уравнением $PV = RT$, мы нашли, что сжимаемость равна

$$\beta_T = P.$$

Здесь индекс T означает постоянство температуры. Далее, согласно (7.6) плотность идеального газа дается соотношением

$$\rho = \frac{M}{RT} P.$$

Подставляя эти величины в (16.24), находим, что давление сокращается и получается следующий результат:

$$u = \sqrt{\frac{RT}{M}},$$

где M — средний молекулярный вес.

Эта, впервые выведенная Исааком Ньютоном, формула приводит к обескураживающему результату: получаемая по этой формуле скорость звука оказывается на 15% меньше экспериментальной. Позднее эта трудность была разрешена Лапласом, который отметил, что температура в волне в действительности не остается однородной, поскольку последовательные сжатия и разрежения происходят очень быстро, а теплопроводность газа очень низка. На самом деле газ в каждой точке расширяется и сжимается *адиабатически*. Поэтому нам следует использовать *адиабатическую сжимаемость* β_S вместо изотермической β_T для описания связи между изменениями давления и объема. (Для средней плотности ρ мы по-прежнему можем пользоваться законами идеального газа, так как эти изменения предельно малы.) Адиабатическая сжимаемость получается подстановкой определения

$$\beta = -V \frac{dP}{dV}$$

в уравнение адиабаты для идеального газа

$$PV^\gamma = \text{const}.$$

Дифференцируя это уравнение, найдем

$$\frac{dP}{dV} = -\gamma \frac{P}{V}. \tag{16.25}$$

Отсюда

$$\beta_S = \gamma P$$

и

$$u = \sqrt{\gamma RT/M}. \tag{16.26}$$

Для использования уравнения (16.26) нам надо знать значение γ для воздуха. Из вывода уравнения адиабаты идеального газа следует, что γ равно отношению C_P/C_V теплоемкостей при постоянном давлении и постоянном объеме. Для идеального газа еще справедливо соотношение $C_P - C_V = R$ и для двухатомных газов $C_V = {}^5/_2\, R$, $C_P = {}^7/_2\, R$ и $\gamma = {}^7/_5$. Экспериментальное значение γ для воздуха очень близко к этой теоретической величине (1,402). Отсюда при 273°K (0°C) уравнение (16.26) дает $u = 332$ *м/сек* в очень хорошем согласии с экспериментальным значением.

Интересно взглянуть на соотношение (16.26) с несколько другой точки зрения. Разделив в нем числитель и знаменатель на число Авогадро, мы можем записать скорость звука в форме

$$u = \sqrt{\gamma kT/m}.$$

Сравним это выражение с (9.18), дающим среднюю скорость $\bar{v}$ молекулы в газе:

$$\bar{v} = \sqrt{8kT/\pi m}.$$

Это сравнение показывает, что для любого идеального газа при любой температуре (или давлении) скорость распространения звуковой волны будет немного меньше средней скорости хаотического движения молекул

$$u \approx \frac{3}{4}\bar{v}.$$

Ей и трудно быть больше, так как именно посредством движения молекул передается информация о локальных сжатиях в газе соседним элементам объема. Этот факт связан с теми очень резкими возмущениями, которые производят в газе тела, движущиеся со *сверхзвуковыми* скоростями. Такого рода возмущения, называемые *ударными волнами*, обладают совершенно иными свойствами, чем звуковые волны. В авиации они являются источником «звукового барьера» для полета со сверхзвуковыми скоростями. Согласно (16.26) звуковой барьер не зависит от давления. Тем не менее он зависит от высоты, так как температура или средняя скорость молекул убывает с высотой. На высотах 10 000 *м* скорость u может быть примерно на 10% меньше, чем на уровне моря.

Переносимая звуковой волной *мощность* получается комбинированием уравнений (16.22) и (16.23):

$$I = {}^1/_2 uA^2\omega^2\rho.$$

Более удобная форма этого результата получится, если мы заменим максимальное смещение A на максимальный перепад давления (ΔP). Сжимаемость связывает (ΔP) с относительной деформацией dV/V:

$$dP = -\beta\, dV/V,\ (\Delta P) = \beta\, \Delta V/V,$$

причем в плоской волне объемная относительная деформация равна линейной. Последняя же согласно определению (12.1) равна величине $d\psi/dx$, которая может быть вычислена через смещение

$$\psi = A \sin kx$$

и оказывается равной

$$d\psi/dx = Ax \cos kx.$$

Максимальная относительная деформация, следовательно, равна $Ak = 2\pi A/\lambda$, так что

$$A = \Delta P/\beta k.$$

Подставив это выражение в I и вспомнив, что $\omega/k = u$ (16.8) и $\beta = u^2\rho$ (16.24), получим окончательно

$$I = \frac{1}{2}\frac{(\Delta P)^2}{u\rho}. \qquad (16.27)$$

Обычно в акустической волне максимальный перепад давления составляет малую долю атмосферного давления ($1{,}013 \cdot 10^6$ *дин/см*^{2}), так что сделанное при выводе уравнения допущение о малости амплитуды хорошо выполняется. Акустические перепады давления измеряются в *микробарах* (*мкбар*), причем 1 *мкбар* = 1 *дин/см*^{2} ($\approx 10^{-6}$ *атм*); интенсивность обычно выражается в *вт/см*^{2}. Самый слабый звук, воспринимаемый человеческим ухом (а это — очень чувствительный детектор) соответствует перепаду давления 0,0003 *мкбар* Для воздуха в стандартных условиях $\rho = M/V = (29/22{,}4) \cdot 10^3 = 1{,}29 \cdot 10^{-3}$ *г/см*^{3} и $u = 332$ *м/сек* $= 3{,}32 \cdot 10^4$ *см/сек*. Подставляя эти значения в уравнение (16.27), мы найдем, что соответствующая интенсивность равна $I \simeq 10^{-9}$ *эрг/(см*^{2}*сек)* $= 10^{-16}$ *вт/см*^{2}. Самый громкий звук, который ухо может переносить, имеет примерно в 10^{12} раз большую интенсивность и соответствует в 10^6 раз большему перепаду давлений (300 *мкбар* = 0,0003 *бар* $\approx$ 0,0003 *атм*). Из-за того, что интенсивность звука варьируется в таких колоссальных пределах, ее обычно выражают в логарифмической шкале.

Прохождение звука через *жидкости* также представляет значительный интерес из-за важности подводной акустики (звуковые локаторы и т. д.). Для воды сжимаемость равна примерно 2,2 *дин/см*^{2}, а плотность близка к 1 *г/см*^{3}. Отсюда для скорости звука получается значение 1500 *м/сек*, т. е. в четыре с лишним раза больше

скорости звука в воздухе. В жидкой фазе обе величины, как β, так и ρ, больше чем в газообразной, но различие по β обычно больше и тем самым скорость звука выше. Мощность звукового потока в жидкости по-прежнему дается уравнением (16.27), так как при его выводе газовые законы нигде не использовались. При одинаковой передаваемой мощности перепад давления в акустической волне будет в воде значительно больше, чем в воздухе. Акустические волны в *твердых телах* интересны главным образом со стороны стоячих волн, описывающих вибрации стержней, мембран и пр. В практических инженерных ситуациях анализ этих стоячих волн может оказаться крайне сложным из-за сложности граничных условий для объектов неправильной формы.

Для физики стоячие волновые вибрации в твердых телах интересны главным образом при ультразвуковых частотах, в диапазоне, выше доступного человеческому уху (т. е. выше 20 *кгц*). Как уже отмечалось в этой главе, колебания в виде стоячих волн с микроскопической точки зрения соответствуют колебаниям атомов твердого тела, причем такая модель (модель Дебая) количественно описывает тепловые колебания лучше, чем модель, в которой каждый атом колеблется в своей собственной потенциальной яме (модель Эйнштейна, как это было предположено в § 14.5). Интересно сравнить энергию этих тепловых колебаний с энергией обычного звука. Из уравнения (14.9) мы видим, что эта тепловая энергия при комнатной температуре равна $3RT \approx 2000$ *кал/моль*. Так как для плотных твердых тел типичны молярные объемы порядка $V = M/\rho \approx 20$ *см*^{3}*/моль*, то соответствующая плотность энергии составит 100 *кал/см*$^3 \approx 400$ *дж/см*^{3}. А для интенсивности $I \approx 10^{-4}$ *вт/см*^{2} самого громкого терпимого ухом звука при типичной для твердых тел скорости $u \approx 500$ *м/сек* плотность энергии оказывается равной всего лишь $10^{-4}/5 \cdot 10^3 \cdot 10^2 = 2 \cdot 10^{-10}$ *дж/см*^{2}, т. е. в 10^{12} раз меньше, чем для тепловых колебаний. Причина, из-за которой мы не слышим тепловых колебаний горячего тела, состоит в том, что подавляющее число собственных гармоник этих колебаний лежит в ультразвуковой области, доходя, как это было отмечено в гл. 14, до частот порядка 10^{13} *сек*$^{-1}$. То, как эта колебательная энергия распределена по различным гармоникам, т. е. *частотный спектр* твердого тела, является в настоящее время одной из важных и актуальных проблем физики твердого тела. На высоких частотах за счет дискретной структуры колеблющейся среды имеет место *дисперсия*. (Дисперсия означает, что скорость распространения зависит от частоты или длины волны.) К счастью, для нашего восприятия музыки в области слышимых частот дисперсия отсутствует. Иначе бы, находясь на расстоянии от музыкантов, слушатель слышал низкие тоны раньше (или позже) высоких.

Развитая здесь теория распространения волн на самом деле применима не только к упругим деформациям, но и к обширному кругу

других физических явлений. В частности, она описывает распространение света и других видов излучения. (В этом случае тем, что «смещается», является электрическое или магнитное поле.) Распространение волнового фронта в общем случае может быть описано через «лучи», светящие в направлении s, перпендикулярном волновому фронту. Свойства среды полностью описываются фазовой скоростью u. Эта скорость может в среде меняться от точки к точке, что приводит к явлению *рефракции*, а может зависеть от частоты, что приводит к появлению *дисперсии*. Во всех случаях, когда апертура волны сравнима с длиной волны, возникают интерференциальные эффекты, ведущие к *дифракции*. Все эти эффекты являются общими для волн любой природы. Особенно специфичным свойством волнового движения является дифракция. Именно открытие дифракции позволило волновой теории света в начале девятнадцатого столетия одержать победу над корпускулярной теорией.

Задачи

16.1. Вывести дифференциальное уравнение в частных производных, применимое при больших смещениях натянутой струны. *Указание*: не заменяйте $\sin\alpha$ на $\operatorname{tg}\alpha$, а выражайте $\sin\alpha$ через $d\Psi/dx$.

16.2. Показать, что любая функция вида

$$\Psi(x, t) = f(\xi), \quad \xi \equiv x + ut,$$

является решением волнового уравнения, если f — произвольная дважды дифференцируемая функция. Заметьте, что при замене u на $-u$ получается другое решение. Дайте интерпретацию этих решений.

16.3. Показать, что суперпозиция двух синусоидальных бегущих волн равной амплитуды, распространяющихся в противоположных направлениях, дает стоячую волну.

16.4. Показать, что набор функций $\{\sin k_j x\}$ образует ортогональную систему.

16.5. Пусть $f(x) = (H/L)x$ в интервале $0 \leqslant x \leqslant L$. Разложить эту функцию в ряд Фурье по синусам, вычислив коэффициенты c_k. Построить график для суммы первых двух членов ряда, чтобы увидеть, насколько быстро частичные суммы ряда приближаются к $f(x)$.

16.6. Пусть начальное смещение струны описывается параболой $f(x) = x(L - x)/100L$ в интервале $0 \leqslant x \leqslant L$. Разложить $f(x)$ в ряд Фурье по синусам. Сравнить коэффициент при нулевом члене ряда с $f(L/2)$. Построить график функции $f(x)$ и первого члена ряда.

16.7. Струна банджо имеет плотность $3{,}7 \cdot 10^{-3}$ *г/см* и длину 65 *см*. Какое натяжение настроит ее на ноту «ля» первой октавы (440 *гц*)? Чему будет равна скорость u?

16.8. Найти изменение температуры газа, вызванное его сжатием от P_0 до P_1. *Указание*: исключить V из уравнения для адиабаты и из уравнения состояния. Чему равно ΔT при малых $\Delta P = P - P_0$? Чему равно ΔT для волны мощностью 10^{-4} *вт/см*^{2} в воздухе при нормальных условиях?

16.9. Вычислить du/dT из уравнения (16.26). Насколько изменится скорость звука при изменении температуры 20 °C на один градус?

16.10. Скорость звука в He при 0 °C равна 970 *см/сек*. Вычислить γ для He и сравнить с теоретическим значением.

16.11. Пусть 20-*ваттный* усилитель подает звук в громкоговоритель с эффективностью 1%. Громкоговоритель излучает звук изотропно в телесный угол π стерадиан (т. е. в 1/4 полной сферы). До какого расстояния можно слышать этот звук?

16.12. В воде и в воздухе распространяются плоские волны с одной и той же интенсивностью. Найти отношение перепадов давления.

16.13. Вычислить амплитуду смещения A в звуковой волне с частотой 1 *кгц* и интенсивностью 10^{-4} *вт/см*^{2} для воды и для воздуха.

16.14. В звуковой волне в воде возникает *кавитация*, если полное давление становится отрицательным, т. е. если перепад давлений ΔP превышает среднее давление P. Рассчитать интенсивность I и амплитуду A при $\Delta P = 2$ *атм*.

16.15. Доказать уравнение (16.23).

Литература для справок

1. Горелик Г., Колебания и волны. Введение в акустику, радиофизику и оптику, Физматгиз, 1959.
2. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М., Фейнмановские лекции по физике, т. 3, т. 4, «Мир», 1965.

Глава 17

Частицы света

Открытие в начале девятнадцатого столетия интерференции и дифракции света доказало, что свет — явление волновое. После этого корпускулярная теория света была отброшена. Открытие в двадцатом столетии ряда новых эффектов, в частности, комптоновского рассеяния света и фотоэмиссии электронов (фотоэффект), «доказало», что свет имеет корпускулярную природу (т. е. обладает свойствами частиц). На этот раз, однако, на основании данных открытий уже нельзя было прийти к прямолинейному выводу об отбрасывании волновой теории света, потому что опыты по дифракции можно производить и в двадцатом столетии. Правильный вывод, который и был сделан, состоит в переходе к новой теории, в которой каким-то образом комбинируются и волновые и корпускулярные представления. Эти теоретические представления были развиты в течение первой четверти девятнадцатого столетия усилиями ряда ученых от Планка и Эйнштейна до Шредингера и Гейзенберга. Они составляют основу современной квантовой механики.

В этой главе комптон-эффект и фотоэффект описываются и анализируются как столкновения с участием световых частиц — ф о т о н о в. Может показаться, что это не имеет особого смысла — рассматривать свет один раз как частицу, а другой раз как волну. И это правильно, в таком рассмотрении смысла нет. Причина состоит в том, что в повседневном языке выражение «имеет смысл» обычно означает подчинение законам классической механики, между тем как здесь мы имеем дело с процессами, не подчиняющимися этим законам. Необходимо было создать новую механику — квантовую, законам которой подчиняются эти явления. Приняв новую механику за основу, уже можно получить эти явления согласованно и строго, так что все описание будет «иметь смысл». Мы, однако, отложим изложение формализма теории до того, как некоторые следствия из нее будут проанализированы и сравнены с экспериментом.

§ 17.1. Комптон-эффект

Наиболее недвусмысленным (хотя и не первым исторически) проявлением корпускулярной природы света является комптон-эффект, в котором фотон претерпевает упругое столкновение с покоящимся электроном. В этом столкновении, которое может быть проанализировано обычным образом (гл. 6) на основе сохранения импульса и энергии, падающий фотон теряет часть своей энергии, передавая ее электрону. Как мы увидим, этот эффект поддается наблюдению не с видимым светом, а лишь при гораздо более коротких длинах волн, т. е. в случае рентгеновских лучей или γ-излучения. Комптон-эффект является одним из процессов, ответственных за ослабление пучка рентгеновских лучей или γ-лучей при его прохождении через вещество. Таким образом мы рассматриваем столкновение (рис. 17.1)

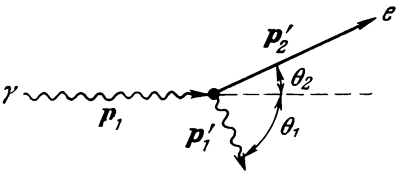


Рис. 17.1.

$$\gamma + e \to \gamma' + e',$$

в котором падающий фотон с импульсом $\mathbf{p}_1$ сталкивается с покоящимся электроном ($\mathbf{p}_2 = 0$), после чего движется дальше с импульсом $\mathbf{p}_1'$, передав электрону импульс $\mathbf{p}_2'$

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2'.$$

Для того чтобы записать условие сохранения энергии, необходимо воспользоваться релятивистским выражением (3.17)

$$E = \sqrt{(cp)^2 + (mc^2)^2}, \tag{17.1}$$

где m представляет собой массу покоя частицы. Фотон всегда движется со скоростью света c (потому что он и *есть* свет), а частица, всегда имеющая скорость c, должна обладать *нулевой массой покоя*. Из уравнения (3.18)

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

видно, что при $v = c$ знаменатель в правой части обращается в нуль. Следовательно, чтобы оставить энергию конечной, числитель тоже должен обратиться в нуль, так что масса оказывается точно равной нулю. Для частицы с нулевой массой покоя энергия и импульс связаны очень простым соотношением, которое получается, если положить $m = 0$ в уравнении (17.1),

$$E = cp. \tag{17.2}$$

Электрон, разумеется, имеет ненулевую массу покоя. Поэтому условие сохранения энергии имеет вид

$$cp_1 + m_2c^2 = cp_1' + \sqrt{(cp_2')^2 + (m_2c^2)^2}. \qquad (17.3)$$

Разрешим теперь уравнения для энергии и импульса, исключив из них все переменные, относящиеся к электрону, после чего мы сможем увидеть, что произойдет с фотоном (после того как это будет сделано, мы, конечно, сможем определить и импульс отдачи электрона, равный $\mathbf{p}_2' = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1'$). Возводя в квадрат соотношение $\mathbf{p}_2' = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1'$ между импульсами, получим

$$p_2'^2 = p_1^2 + p_1'^2 - 2\mathbf{p}_1\mathbf{p}_1' = p_1^2 + p_2'^2 - 2p_1p_1'\cos\theta_1.$$

Возведение же в квадрат соотношения (17.3) для энергии с предварительным перенесением в левую часть слагаемого cp_1' дает

$$(cp_1)^2 + (cp_1')^2 + (m_2c^2)^2 - 2c^2p_1p_1' + 2m_2c^3(p_1 - p_1') = (cp_2')^2 + (m_2c^2)^2.$$

После подстановки сюда значения $p_2'^2$ из предыдущего равенства почти все сокращается, и у нас остается соотношение

$$m_2c(p_1 - p_1') = p_1p_1'(1 - \cos\theta).$$

Опустив индексы, результат для импульса p' фотона, рассеянного на угол θ, можно записать в виде

$$\frac{1}{p'} - \frac{1}{p} = \frac{1}{mc}(1 - \cos\theta), \qquad (17.4)$$

где m — масса электрона, а p — начальный импульс фотона. При переходе от импульсов к *энергиям* $E = cp$ выражение (17.4) примет форму

$$\frac{1}{E'} - \frac{1}{E} = \frac{1}{mc^2}(1 - \cos\theta) \qquad (17.5)$$

или с заменой $\Delta E \equiv E - E'$

$$\frac{\Delta E}{E'} = \frac{E}{mc^2}(1 - \cos\theta).$$

Таким образом, конечная энергия E' фотона оказывается меньше начальной и зависящей от угла θ рассеяния фотона. Потеря энергии ΔE (отнесенная к конечной энергии фотона E') зависит от угла рассеяния θ так, как это изображено на рис. 17.2, возрастая от нуля при пролете полностью мимо ($\theta = 0$) до удвоенной начальной энергии фотона E (отнесенной к энергии покоя электрона mc^2) при рассеянии точно назад ($\theta = \pi$). Итак, относительное уменьшение энергии рассеянного фотона зависит от угла рассеяния и велико только тогда, когда начальная энергия фотона сравнима с энергией покоя элек-

трона. Так как энергия покоя электрона равна $mc^2 = 0{,}511$ *Мэв* = 511000 *эв* (ср. § 6.3), то изменение энергии ничтожно, за исключением тех случаев, когда и энергия фотона E имеет тот же порядок. Именно поэтому эффект изменения энергии наблюдается либо с рентгеновскими лучами (типичные энергии 0,05 ÷ 0,25 *Мэв*) либо с γ-лучами (типичные энергии 0,1 ÷ 2 *Мэв*).

Только что сделанный из требований сохранения энергии и импульса вывод говорит лишь об условиях, при выполнении которых рассеяние *может* иметь место; но этот вывод ничего не говорит о том, с какой вероятностью этот процесс *будет* происходить. На последний вопрос (вычисление *поперечного сечения* столкновения) мы здесь не будем давать полного ответа, хотя, как можно показать, это сечение поддается вычислению. Результат такого вычисления дает величину, имеющую порядок сечения рассеяния на *электроне радиуса*:

$$e^2/mc^2 = 2{,}8 \cdot 10^{-13} \text{ см}.$$

Это число называется «классическим радиусом электрона» *).

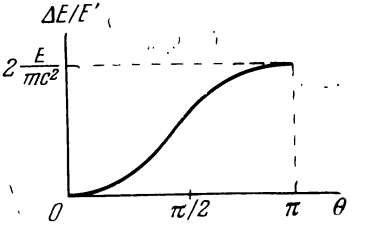


Рис. 17.2.

Если мы желаем рассматривать свет в одних случаях как пучок частиц (фотонов) с энергией E и импульсом p, а в других случаях как волны с частотой ν и длиной волны λ, то существенно иметь строго определенную связь между обоими способами описания, так как в противном случае наши взгляды на природу не будут внутренне непротиворечивыми. Эта связь состоит в том, что энергия фотона пропорциональна частоте волны

$$E = h\nu, \tag{17.6}$$

где h — универсальная константа, называемая *постоянной Планка* (поскольку она впервые была введена Максом Планком в связи с излучением черного тела, о чем мы расскажем позднее). Отсюда следует, что импульс фотона связан с длиной волны соотношением

$$p = h/\lambda, \tag{17.7}$$

так как $p = E/c$ и $\nu = c/\lambda$. Введя величины $\omega = 2\pi\nu$, $k = 2\pi/\lambda$, получим

$$E = \hbar\omega, \qquad p = \hbar k,$$

*) Представление о классическом радиусе электрона сейчас отвергнуто. Вплоть до предельных достижимых расстояний 10^{-15} *см* у электрона не обнаружено внутренней структуры. (*Прим. ред.*)

где $\hbar = h/2\pi$. Постоянная $\hbar$ (читается h с чертой или h перечеркнутое) часто употребляется вместо h, когда это дает возможность исключить из формулы множитель 2π. Численное значение константы h должно определяться экспериментально. Наряду с другими экспериментами это значение может быть определено следующим образом из опытов по комптоновскому рассеянию.

Подставим соотношение $p = h/\lambda$ в (17.4)

$$\lambda' - \lambda = (1 - \cos\theta)\, h/mc. \qquad (17.4')$$

Это уравнение дает длину волны рассеянного излучения, предсказываемую на основе корпускулярных представлений о столкновении и связи (17.7) между волновой и корпускулярной картинами. Величина h/mc называется *комптоновской длиной волны* электрона. Ее значение, определенное из опытов по комптоновскому рассеянию рентгеновских лучей с известными длинами волн, равно

$$h/mc = 0{,}0243 \text{ Å}. \qquad (17.8)$$

Подставив сюда $m = 0{,}91 \cdot 10^{-27}$ *г* и $c = 3 \cdot 10^{10}$ *см/сек*, получим

$$h = 6{,}663 \cdot 10^{-27} \text{ эрг·сек} \quad \text{или} \quad \hbar = 1{,}054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг·сек}.$$

Не мешает подчеркнуть, что анализ комптон-эффекта на основе волновой теории света оказывается неработоспособным. Классически электромагнитная волна может заставить электрон совершать синхронные колебания, а колеблющийся электрон может переизлучать свет на той же самой частоте. Появление света низшей частоты может быть понято только на основе корпускулярных представлений. Такое расхождение приводит к недоуменному вопросу: откуда вы знаете, какой теорией надо пользоваться? Ответ состоит в том, что существует одна корректная теория — квантовая электродинамика, которая дает правильные ответы в отношении всех известных экспериментов с фотонами и электронами. Этой теорией, однако, очень трудно пользоваться. Поэтому стоило бы иметь возможность производить простые вычисления на основе корпускулярной и волновой картин. Распознавание того, какую из них надо использовать, частично определяется интуицией и более точными знаниями, но, как правило, корпускулярная картина применима для высоких энергий (короткие длины волн), а волновая картина — для низких энергий (большие длины волн). Например, в том же комптон-эффекте корпускулярные представления существенны только при высоких энергиях фотонов, так как при низких энергиях (низких по сравнению с энергией покоя электрона) результат будет таким же, как и в волновой картине (отсутствие измеримого сдвига длины волны). И обратно, при дифракции света волновые представления существенны только при больших длинах волн, так как для коротких волн (коротких сравнительно с

величиной апертуры) корпускулярные представления приводят к тому же результату (отсутствие заметной дифракции). Как мы увидим, подобные критерии применимы и к другим эффектам, которые нам предстоит обсудить.

§ 17.2. Рождение электронно-позитронных пар

Другим механизмом, за счет которого пучок γ-лучей ослабляется при его прохождении через вещество, является *рождение электронно-позитронных пар*. Такого рода события состоят в том, что фотон может *аннигилировать* (рис. 17.3), т. е. поглотиться с одновременным рождением электрона и *позитрона* (позитрон — частица с той же массой, что и отрицательный электрон, но с положительным зарядом — «положительный электрон»)

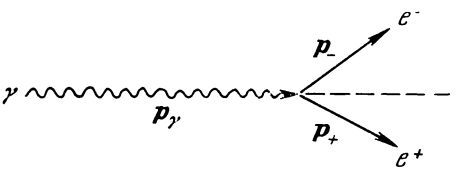


Рис. 17.3.

$$\gamma \to e^- + e^+.$$

Законом сохранения энергии требуется выполнение равенства

$$E_\gamma = cp_\gamma = \sqrt{(cp_-)^2 + (m_-^2)^2} + \sqrt{(cp_+)^2 + (mc^2)^2}. \qquad (17.9)$$

При $p_- = p_+ = 0$ правая часть этого равенства имеет наименьшее возможное значение

$$E_\gamma = 2mc^2 = 1{,}02 \ Мэв.$$

Если же электрон и позитрон обладают каким-то импульсом, то и энергия фотона должна быть соответственно большей. Таким образом, значения энергий покоя частиц создают абсолютную *пороговую* энергию, ниже которой процесс вообще не может происходить.

Может показаться, что γ-кванты с энергией, превышающей пороговую энергию 1,02 *Мэв*, могут аннигилировать, порождая пары в пустом пространстве даже при отсутствии какого-либо вещества. Тогда даже вакуум был бы не вполне прозрачен для таких γ-квантов. На самом деле такой процесс идти не может, ибо в нем не будет сохраняться импульс. Из уравнения (17.9) для сохранения энергии следует, что $p_\gamma > p_- + p_+$ (если бы масса m равнялась нулю, то могло бы быть и $p_\gamma = p_- + p_+$, но в действительности $m > 0$). С другой стороны, баланс импульса

$$\mathbf{p}_\gamma = \mathbf{p}_- + \mathbf{p}_+$$

дает

$$p_\gamma \leqslant p_- + p_+,$$

так как сторона треугольника всегда меньше, чем сумма двух других сторон (рис. 17.4). Поэтому рождение пар в вакууме происходить не может. Но если поблизости оказывается тяжелое атомное ядро, то оно может взять на себя избыток импульса, почти не беря энергии ($E = p^2/2M$), и процесс уже сможет произойти. Тем самым рождение пар представляет собой важный механизм поглощения γ-квантов с энергиями выше 1,02 *Мэв* в веществе, причем вклад за счет этого процесса растет с ростом энергии. При меньших энергиях поглощение идет исключительно за счет комптон-эффекта и фотоэффекта (§ 17.3).

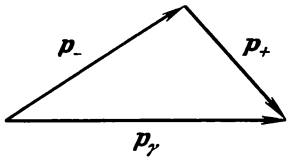


Рис. 17.4.

Может происходить и обратный рождению пар процесс, в котором позитрон и электрон *аннигилируют* с образованием фотона вблизи ядра, которому передается избыток импульса.

Однако гораздо более вероятным является образование в процессе аннигиляции двух фотонов, уносящих весь импульс (см. задачу 17.4). (Без всякого участия постороннего вещества может происходить и процесс, обратный только что описанному, но он крайне маловероятен, так как двум фотонам трудно столкнуться друг с другом из-за малости соответствующего сечения, вследствие чего этот процесс никогда не наблюдался).

§ 17.3. Фотоэффект и поглощение гамма-излучения

Третьим процессом, за счет которого пучок фотонов ослабевает при прохождении через вещество, является *фотоэффект*. И в этом процессе, как и при рождении пар, фотон полностью аннигилирует, т. е. поглощается, а не просто рассеивается, как в комптон-эффекте, но фотон здесь поглощается электроном, находящимся в каком-то веществе, и этот электрон берет на себя всю энергию фотона (рис. 17.5). Закон сохранения энергии требует равенства

Рис. 17.5.

$$E_\gamma + mc^2 = \sqrt{(cp)^2 + (mc^2)^2}. \qquad (17.10)$$

И здесь, как и в случае рождения пар, одновременное сохранение энергии и импульса не может иметь места, но избыточный импульс может быть передан близлежащему ядру.

Перечисленные три процесса совместно обусловливают взаимодействие γ-квантов с веществом. Вычисление сечений этих процессов является трудной задачей, которая тем не менее была решена с достаточной точностью. Комптоновское рассеяние и рождение пар важны лишь при высоких энергиях, в частности, рождение пар лишь при $E > 1$ *Мэв*.

Для того чтобы связать сечения только что обсужденных трех процессов с проникающей способностью γ-квантов, вернемся к анализу, произведенному в § 6.4. Пусть начальный пучок фотонов падает на слой вещества толщины dx (рис. 17.6). Некоторые фотоны поглотятся за счет рождения пар и фотоэффекта, а некоторые рассеются за счет комптон-эффекта. В любом случае число фотонов *пучка*, прошедших через слой, будет меньше, чем число исходных частиц. Согласно уравнению (6.11) вероятность выхода фотона из пучка равна

$$d\Pi = n\sigma dx,$$

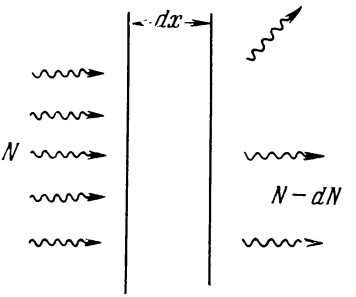


Рис. 17.6.

где n — число рассеивающих центров в единице объема, а σ — полное интегральное сечение. («Полное» здесь означает сумму отдельных сечений трех процессов, а «интегральное» означает, что сечения проинтегрированы по всем значениям угла рассеяния.) Таким образом, если в слой вошли N фотонов, то при прохождении через слой dx доля dN/N будет потеряна, где

$$dN/N = -d\Pi = -n\sigma dx \tag{17.11}$$

(ср. уравнение (8.4)). Интегрируя (17.11), получим

$$N = N_0 e^{-n\sigma x}, \tag{17.12}$$

где N — число фотонов, проникших на глубину x, а постоянная интегрирования N_0 — исходное число фотонов при $x = 0$. Мы можем также выразить результат через *интенсивность* пучка γ-квантов. Так как интенсивность определяется энергией, переносимой пучком за единицу времени через площадку единичной площади (ср. (16.23)) и так как каждый фотон переносит «квант» энергии $E_\gamma = h\gamma$, то интенсивность равна

$$I = Nh\nu/At, \tag{17.13}$$

где A — площадь, сквозь которую фотоны проходят за время t. Это означает, что интенсивность равна произведению $h\nu$ на поток

фотонов через единичную площадку. Вследствие этой пропорциональности между I и N уравнение (17.12) можно переписать так:

$$I = I_0 e^{-\mu x}, \qquad \mu \equiv n\sigma. \tag{17.14}$$

Величина μ (в $см^{-1}$) называется *коэффициентом поглощения*. Уравнение (17.14) выражает тот очень важный факт, что все электромагнитные излучения экспоненциально ослабляются по мере прохождения сквозь вещество, так что вдвое большая толщина не поглощает вдвое больше излучения (хотя для тонких слоев это приближенно справедливо, как можно увидеть, разлагая экспоненту в степенной ряд). В действительности, если данный слой пропускает 1/10 часть падающего излучения, то слой двойной толщины пропускает лишь 1/100.

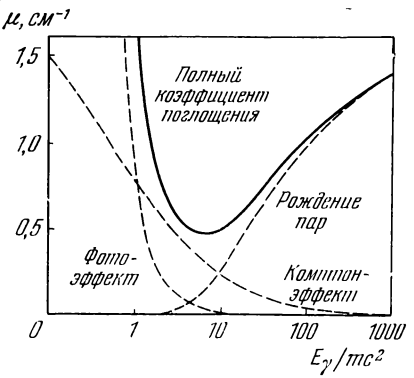


Рис. 17.7.

Коэффициент поглощения μ может быть измерен экспериментально посредством пропускания пучка сквозь поглотители различной толщины и измерения интенсивности на выходе. Фактически это — важный экспериментальный метод измерения энергии γ-лучей, так как μ зависит от энергии фотона, а также и от рода поглощающего вещества. Зависимость полного коэффициента поглощения от энергии для Pb показана на рис. 17.7 вместе с индивидуальными вкладами каждого из трех процессов. Значение эффекта Комптона постепенно убывает с энергией, а значение рождения пар возрастает. При низких энергиях резко доминирующим становится фотоэффект. При еще более низких энергиях становится существенным четвертый эффект— когерентное рассеяние рентгеновских лучей. Кроме того, в определенной области энергий небольшая часть фотонов поглощается атомными *ядрами*. Этого поглощения мы не будем касаться вплоть до гл. 29.

Относительная важность различных процессов сильно зависит от рода вещества. Поскольку атомное ядро участвует в рождении пар и фотоэффекте (обеспечивая сохранение импульса) поперечное сечение этих процессов относительно сложным образом зависит от типа рассеивающих атомов, в частности, от их атомного номера Z. (Атомные сечения этих процессов пропорциональны, соответственно, Z^2 и Z^5.) Эффект Комптона, с другой стороны, может наблюдаться для свободных электронов, так что его атомное сечение рассеяния просто равно числу Z электронов в атоме, умноженному на попереч-

ное сечение для одного электрона:

$$\sigma = Z\sigma_e. \tag{17.15}$$

Поскольку фотоэффект зависит от Z^5, он наиболее важен для тяжелых элементов; вот почему Pb используется для защиты от γ и рентгеновских лучей. Для легких элементов в основном более важным является эффект Комптона. В Pb эффект Комптона является доминирующим в области энергий от 1 до 10 mc^2 (рис. 17.7), а в Al, например, от 0,1 до 30 mc^2 (от 50 *кэв* до 15 *Мэв*).

В качестве простого численного примера оценим коэффициент поглощения для Al в области, где комптоновское рассеяние является определяющим. Чтобы вычислить число n атомов на единицу объема, вспомним, что плотность ρ равна nm, где m — масса атома, равная его молекулярному весу M, деленному на число Авогадро N_0. Поэтому

$$n = \rho N_0/M. \tag{17.16}$$

Используя уравнения (17.14), (17.15) и (17.16), мы получим коэффициент поглощения для комптоновского рассеяния

$$\mu = \rho\sigma_e N_0 Z/M. \tag{17.17}$$

Как установлено в § 17.1, «радиус» электрона составляет примерно $3\cdot10^{-13}$ *см* (или примерно в 100 000 раз меньше радиуса атома), так что

$$\sigma_e \approx 10^{-25}\ см^2 \approx 0{,}1\ барн,$$

где 1 *барн* $= 10^{-24}$ $см^2$ — общепринятая единица для поперечных сечений. Подставляя $\rho = 2{,}7$, $N_0 = 6\cdot10^{23}$, $Z = 13$ и $M = 27$ в уравнение (17.17), получим

$$\mu \approx 0{,}1\ см^{-1} \text{ для Al.}$$

Следует ожидать, что этот результат будет справедливым при энергиях порядка 1 *Мэв*. Для вычисления длины волны γ-кванта с энергией 1 *Мэв* учтем, что $E_\gamma = h\nu = hc/\lambda$, откуда

$$\lambda = \frac{hc}{E_\gamma} = \frac{6{,}6\cdot10^{-27}\cdot3\cdot10^{10}}{10^6\cdot1{,}6\cdot10^{-12}} \approx 10^{-10}\ см = 0{,}01\ \text{Å}.$$

Опытное значение μ при $\lambda = 0{,}01$ равно 0,16 *см*, что придает нам некоторую уверенность в нашей модели. По поводу уравнения (17.17) интересно отметить, что для всех элементов масса примерно равна $M \approx A$ — массовому числу, а для легких элементов $A \approx 2Z$. Так

что для комптоновского рассеяния на легких элементах можно записать $\mu/\rho \approx {}^1/_2\sigma_e N_0 \approx 0{,}1$ *см*^{2}/*г*.

Величина μ/ρ, называемая *массовым коэффициентом поглощения*, приблизительно одна и та же для всех легких элементов, хотя и зависит от энергии γ-лучей. Экспериментально при $\lambda = 0{,}01$ Å $\mu/\rho \approx \approx 0{,}058 \pm 0{,}001$ *см*^{2}/*г* для C, Al, Fe, Cu и Sn (и 0,071 для Pb). Из-за общеупотребительности величины μ/ρ, толщину рассеивателя в уравнении (17.14) часто выражают в единицах $x\rho$ *г*/*см*^{2}.

Заметим, что фотоны с длиной волны 0,01 Å способны «видеть» внутреннюю структуру атомов, диаметр которых имеет порядок 1 Å, в том смысле, что эти фотоны рассеиваются на индивидуальных электронах. Этот факт иллюстрирует важное общее правило, состоящее в том, что излучение, зондирующее структуру, должно иметь длину волны, меньшую размеров этой структуры. Это именно та необходимость, в силу которой люди, для того чтобы исследовать все меньшие и меньшие объекты, создают установки для получения зондирующих частиц со все более и более высокими энергиями (с более короткими длинами волн). Другой крайний случай представляет собой излучение с длинами волн, большими по сравнению с размерами атома, такими, например, как видимый свет (5000 Å). В этом случае излучение рассеивается атомом в целом. Так как атом имеет размеры порядка $3 \cdot 10^{-8}$ *см*, то ожидаемое поперечное сечение будет иметь порядок 10^{-5} *см*, или примерно в 10^{10} раз больше, чем поперечное сечение для электронов. В соответствии с уравнением (17.14) примерно во столько же раз увеличится коэффициент поглощения. Равенство коэффициента поглощения γ-лучей величине 0,1 *см*$^{-1}$ означает, что через толщину в 10 *см* проходит $e^{-1} \approx 1/3$ начальной интенсивности. Поэтому легкие элементы, подобные алюминию, довольно хорошо пропускают γ-лучи. Однако видимый свет с коэффициентом поглощения приблизительно в 10^9 раз большим уменьшается в $1/e$ раз на толщине в несколько ангстрем, так что он проникает лишь на несколько атомных слоев. Так объясняется непрозрачность алюминия. Почему прозрачны для видимого света некоторые другие вещества, такие как стекло, кварц, алмаз и т. д., может быть понято лишь на основе более тонких деталей структуры, что мы рассмотрим в гл. 25. Не обращая внимания на эти тонкости, мы можем ожидать больших поперечных сечений взаимодействия для фотонов с длиной волны в видимой области. Мы в дальнейшем будем концентрировать ваше внимание на фотон-электронном взаимодействии, которое имеет место в этой области низких энергий. Это интересно как для практики, так и для теории: в этой области работают многие важные технические приборы; кроме того, много заключений о структуре атомов было получено из изучения их реакции на более длительную бомбардировку фотонами низкой энергии. В следующем параграфе мы расскажем о фотоэффекте в этой области низких энергий.

§ 17.4. Фотоэмиссия электронов

Из рассмотренных нами трех эффектов: комптоновского рассеяния, рождения пар и фотоэффекта — лишь последний имеет место для фотонов низких энергий вплоть до ультрафиолетовой и видимой областей электромагнитного спектра. Как мы установили, в фотоэффекте участвует атом в целом, поскольку это необходимо для сохранения импульса. Особенно это сказывается, когда длина волны велика по сравнению с размерами атома. Действительно, в твердых металлах электроны принадлежат большому числу взаимодействующих друг с другом атомов. (Подобным коллективным взаимодействием всех электронов мы объясняли когерентное рассеяние или брэгговское отражение рентгеновских лучей. Впрочем, там картина была более очевидной, поскольку мы рассматривали волновую картину электромагнитного излучения.) Тем не менее общий результат фотоэффекта сводится к тому, что внутрь входит фотон, а вылетает электрон, так что для наших текущих целей не будет слишком большим упрощением сказать, что фотон выбивает электрон.

При более внимательном подходе к этой области низких энергий можно заметить два различия. Во-первых, электрон можно рассматривать нерелятивистски: для видимого (зеленого) света энергия фотона, которая передается электрону, равна всего лишь около 2 *эв*, т. е. мала по сравнению с энергией покоя электрона 511 000 *эв*. Во-вторых, при очень низких энергиях электрон не может, безусловно, рассматриваться как полностью «свободный» и покоящийся. В частности, электроны в атомах газа или твердого тела *связаны* в атоме, по существу, в том же смысле, как атомы связаны в твердом теле. Для того чтобы эти электроны удалить, нужно совершить работу. Далее мы увидим, что энергия связи электрона в изолированном атоме (называемая энергией ионизации) варьируется от нескольких электрон-вольт до порядка 100 *эв*, для наиболее прочно связанных электронов в тяжелых атомах, и что энергия связи для наиболее слабо связанных электронов в металле (называемая работой выхода) равна также нескольким электрон-вольтам. Когда связанный электрон поглощает фотон, часть энергии фотона используется для преодоления энергии связи и удаления электрона из атома или твердого тела и лишь остаток проявляется как кинетическая энергия электрона.

С учетом всех этих видоизменений уравнение (17.10) принимает вид

$$E_\gamma + mc^2 + \frac{p_0^2}{2m} - V_0 = mc^2 + \frac{p^2}{2m},$$

где p_0 и V_0 — соответственно импульс и потенциальная энергия электрона внутри вещества. Вводя обозначение $W \equiv V_0 - \frac{p_0^2}{2m}$ для

работы выхода или энергии ионизации, будем иметь

$$E_\gamma = \frac{p^2}{2m} + W,$$

где $p^2/2m$ — кинетическая энергия свободного электрона (рис. 17.8). После вылета электрона его полная энергия равна кинетической $E = p^2/2m$. Далее, E_γ связана с частотой света (в его волновом аспекте) уравнением (17.7)

$$E_\gamma = h\nu,$$

так что электрон вылетает с энергией E, равной

$$E = h\nu - W. \qquad (17.18$$

В действительности в случае вырывания электронов из твердого тела эта энергия E является *максимально* возможной. Вылетают электроны и с более низкой энергией. Некоторые из них были более сильно связаны или имели меньшую кинетическую энергию, другие же теряют некоторую энергию при столкновениях во время вылета. Однако наивысшая энергия испущенных электронов подчиняется соотношению (17.18).

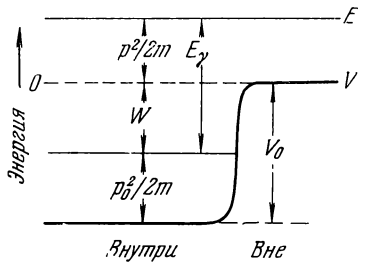


Рис. 17.8.

Это соотношение может быть проверено экспериментально при облучении вещества светом частоты ν и измерении задерживающего электрического потенциала, который препятствует всем электронам улетать прочь. Этот потенциал равен максимальной энергии E, с которой вылетают электроны. Соотношение между E и ν хорошо подтверждаются при той же величине h, какая была указана в § 17.1. Кроме того, *энергия* электрона не зависит от *интенсивности* света I, а определяется лишь частотой (т. е. энергией фотона) — результат, совершенно непостижимый на основе волновых представлений о свете. Это проиллюстрировано на рис. 17.9, где изображены зависимости фототока J от задерживающего потенциала Ф для света различной интенсивности I (*а*), максимальной энергии электрона E от частоты ν света (*б*), фототока насыщения от интенсивности I света для различных частот (*в*). Исторически идея фотонов была предложена (Эйнштейн, 1905 г.), для того, чтобы объяснить эти эксперименты. С точки зрения этой идеи данные соотношения вполне естественны: энергия электрона зависит от энергии фотона (частоты света), а электрический ток зависит от потока фотонов (интенсивность света).

Фотоэлектрическая эмиссия важна практически, так как фотокатодные трубки (фотодиоды) являются одним из наиболее употребительных видов *детекторов* видимого и ультрафиолетового света. В этих приборах эмиттирующая поверхность заряжается отрицательно, а испущенные электроны собираются анодом. Анодный ток пропорционален интенсивности света (для данной частоты), так как число выбитых электронов пропорционально числу падающих

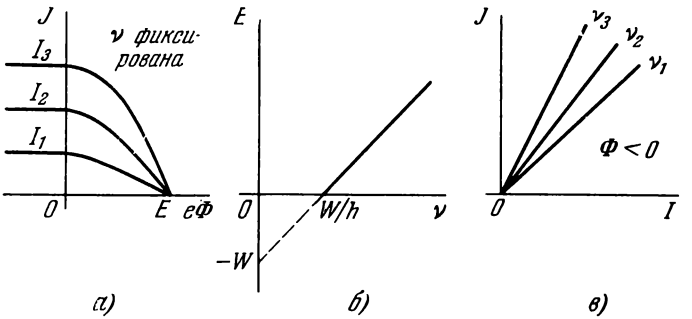


Рис. 17.9.

фотонов. Подчеркнем, что максимальная энергия электрона не зависит от интенсивности и связана с частотой света, но число электронов связано с интенсивностью (а также с частотой). Согласно уравнению (17.18) ток не может быть получен при частоте $\nu < W/h$, так как электроны не смогут покинуть вещество с положительной кинетической энергией (т. е. не могут выйти вообще). Налагаемое этим ограничение делает бесполезными фотоэлементы для большей части инфракрасного спектра, так как все известные вещества имеют работу выхода более чем 1 *эв*, соответствующую длине волны около 12 000 Å.

Рассмотренные нами эффекты успешно объясняют взаимодействие с электронами фотонов высокой энергии, а также в действительности, и с низкими энергиями вплоть до области 1 *эв*. (Тот же подход применим к взаимодействию фотонов с другими заряженными частицами, такими как мезоны и протоны.) При наличии более низких частот, например для радиоволн и промышленных частот, обычно удовлетворительным является волновой метод. Область фотонных энергий, *несколько* меньших чем энергия связи электронов, представляет особый интерес, поскольку она говорит кое-что о квантовой механике электронов. Эта та самая область, которой мы будем заниматься в дальнейшем.

Задачи

17.1. Найти наибольшую потерю энергии фотоном при комптоновском рассеянии γ-лучей с энергией 1,33 *Мэв* (излучение Co^{60}).

17.2. Вычислить энергию фотона рентгеновских лучей с длиной волны 0,25Å, D-линии натрия (5890 Å), радиоволны 1440 *кгц* и переменного тока частоты 60 *гц**). Вычислить длину волны рентгеновских лучей с энергией 1,22 *Мэв*.

17.3. Показать, что при фотоэффекте импульс не может сохраняться без того, чтобы его избыток не передавался ядру.

17.4. Допустим, что покоящиеся позитрон и электрон аннигилируют друг с другом, рождая два γ-кванта. Найти энергию и возможные направления движения γ-квантов.

17.5. Рождение пар может иметь место в поле электрона, так же как и в поле ядра (хотя этот процесс не очень важен для поглощения γ-лучей). Показать, что энергетический порог этого процесса для γ-лучей равен $4\,mc^2$. *Указание*: при пороговой энергии все три частицы движутся вместе.

17.6. *Полутолщина* $x_{1/2}$ определяется как толщина поглотителя, которая уменьшает интенсивность падающего пучка γ-лучей на половину первоначальной величины. Показать, что $x_{1/2} = (\ln 2)/\mu$.

17.7. Поперечное сечение поглощения γ-лучей для свинца равно 0,153 *барн*. Сколько сантиметров Pb нужно для снижения интенсивности до 1/16 первоначальной величины?

Литература для справок

1. Борн М., Атомная физика, «Мир», 1965.
2. Глесстон С., Атом. Атомное ядро. Атомная теория. Развитие современных представлений об атоме и атомной энергии, ИЛ, 1961.

---

*) В США промышленный ток имеет частоту 60 *гц*, в отличие от принятой в нашей стране частоте 50 *гц*. (*Прим. ред.*)

Глава 18

Излучение и поглощение света

В предыдущей главе мы показали, что в определенных обстоятельствах при взаимодействии со свободным электроном свет должен описываться как частица — фотон, а не как волна. (Или хотя бы тогда, когда электрон свободен после взаимодействия). Теперь мы рассмотрим взаимодействие между светом и связанным электроном. Между прочим, основание для концентрации внимания на взаимодействии между светом и материей, а не на беспрепятственном распространении света в вакууме, состоит в том, что свет может наблюдаться лишь тогда, когда он с чем-нибудь взаимодействует; чистое распространение света в пространстве может быть описано одинаково хорошо и как распространение волны, и как полет частиц. При описании взаимодействия со связанными электронами свет снова будет трактоваться как частицы энергии $E_\gamma = h\nu$, *но его корпускулярная природа не нуждается в излишнем подчеркивании. Вместо этого следует сконцентрировать внимание на воздействии излучения и поглощения фотонов на возможные механические состояния связанных электронов. Будет обнаружено, что (при некоторых обстоятельствах) состояния электронов не могут быть описаны классической механикой, точно так же как классическая теория электромагнитных волн оказывается неспособной описывать свет.*

Поглощение фотона, которое будет обсуждаться, подобно уже описанному фотоэффекту, за исключением того, что электрон, который этот фотон поглощает, вместо того чтобы покинуть свободный атом или твердое тело, остается связанным, но «возбужденным», т. е. электрон будет иметь бóльшую энергию, чем до этого, но все же меньшую, чем та, которая требуется для удаления его на бесконечность. Излучение фотона является обратным процессом: возбужденный электрон теряет часть своей энергии и создает фотон. Сохранение энергии требует, чтобы энергия электрона при излучении фотона уменьшалась на ту же величину, что и энергия $h\nu$, *уносимая фотоном. Следовательно, из наблюдения свойств спектров излучения (излучаемая интенсивность как функция частоты) можно сделать заключение об энергии электрона. В отличие от свободного электрона, который был рассмотрен классически (хотя и релятивист-*

ски), связанный электрон, как мы увидим, способен изменять свою энергию лишь дискретными «квантами». Механической теорией, которая предназначена для расчета этих квантов (здесь нерелятивистская теория), является «квантовая механика». Излучение света электронами сначала будет обсуждаться для электронов в изолированных атомах, таких как атомы газа, а потом уже для электронов в конденсированных фазах, таких как жидкость или твердое тело.

§ 18.1. Спектр и энергетические уровни атома водорода

Спектр излучения газа (т. е. распределение интенсивности света в зависимости от частоты) является *линейчатым* спектром; в нем световая энергия концентрируется в узких областях частот (или длин волн) (рис. 18.1), по крайней мере пока излучают индивидуальные атомы, а не молекулы. Линейчатыми эти спектры называются потому, что когда изображение освещенной щели разлагается призмой или решеткой, то видны яркие линии различных цветов. Распределение этих ярких линий для большинства атомов образует очень запутанную картину, но для простейшего атома водорода эта картина достаточно проста. Длины волн этих линий могут быть описаны очень точно следующей формулой:

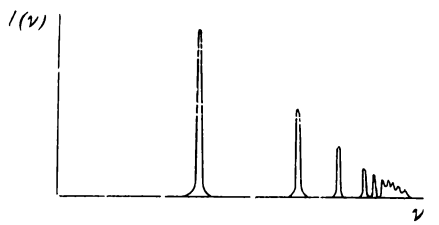


Рис. 18.1.

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right), \quad n,\ m = 1,\ 2,\ 3\ldots,\ m > n. \qquad (18.1)$$

Постоянная R называется *постоянной Ридберга*, и ее экспериментальное значение равно

$$R = 109\,700\ см^{-1}.$$

При $n = 2$ различные значения m дают серию линий в видимой области спектра, называемую *серией Бальмера* (фото IX). Для $m = 3, 4, 5, 6$ получаются известные длины волн красной, зеленой, голубой и фиолетовой линий водорода. При $n = 1$, $m = 2, 3, 4, \ldots$ получается *серия Лаймана* для ультрафиолетового излучения.

Так называемая *альфа линия Лаймана* ($n = 1$, $m = 2$) с $\lambda = 1216$ Å оказывается очень интенсивной в космическом пространстве, но она сильно поглощается атмосферой Земли. Все атомы могут поглощать те частоты (и только те), которые они могут испускать.

Излученный фотон частоты ν уносит энергию (уравнение (17.6)) $E_\gamma = hc/\lambda$. Связывая это соотношение между энергией фотона и дли-

ной световой волны с экспериментальным выражением для допустимых длин волн (18.1), мы получим

$$E_\gamma = hcR\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right). \tag{18.2}$$

Для того чтобы *энергия сохранялась*, энергия фотона должна быть равна разности между энергией E' электрона до излучения и его энергией E после излучения:

$$E_\gamma = E' - E = \frac{hcR}{n^2} - \frac{hcR}{m^2}.$$

Мы можем записать

$$E_\gamma = E_m - E_n, \tag{18.3}$$

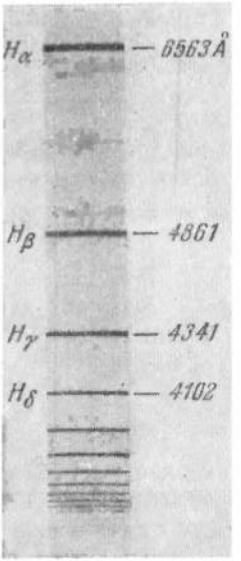
если определим E_n как

$$E_n \equiv -hcR/n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{18.4}$$

Естественно предположить, что

$$E' = E_m, \quad E = E_n.$$

Это приводит нас к заключению, что электрон может иметь бесконечно много различных значений энергии E_n, но не любую произвольную энергию. Возможные значения энергии электрона образуют дискретный набор, нумеруемый целым числом n. Сохранение энергии требует этих ограничений на возможные энергетические состояния электрона для того, чтобы объяснить наблюдаемый спектр фотонов, излучаемых водородом с энергиями $h\nu$.



IX. Серия Бальмера в спектре излучения атома водорода.

Постоянная hcR должна иметь размерность энергии; если подставить в уравнение (18.4) измеренное значение этой постоянной, то мы получим

$$E_n = -\frac{13{,}6}{n^2}\ эв. \tag{18.5}$$

Эти энергии могут быть показаны на *диаграмме энергетических уровней*, на которой вдоль вертикальной оси отложены значения энергии (а вдоль горизонтальной — ничего). Наименьшей возможной энергией является E_1, которая лежит на 13,6 *эв* ниже $E = 0$ (рис. 18.2). Уровень E_2 ниже нуля лишь на $^1/_4$ этого расстояния и т. д. Наинизший уровень E_1 называется *основным состоянием*, а все другие — *возбужденными состояниями*. Мы видим, что имеется бесконечное количество связанных возбужденных состояний, т. е. состояний с энергиями $-13{,}6\ эв < E < 0$. Изменения энергии электрона или

переходы между состояниями, в результате которых излучаются фотоны, могут быть символически изображены на той же диаграмме стрелками, проведенными из начального состояния электрона к конечному. Длина стрелки равна энергии фотона (hc/λ). Переходы, которые дают наиболее интенсивные линии в сериях Лаймана и Бальмера, на рисунке показаны вместе с их длинами волн в ангстремах. Аналогичные серии переходов на уровни E_3 и E_4 называются, соответственно, сериями Пашена и Брэкетта. Они лежат в инфракрасной области. Переходы в противоположном направлении соответствовали бы поглощению света тех же длин волн.

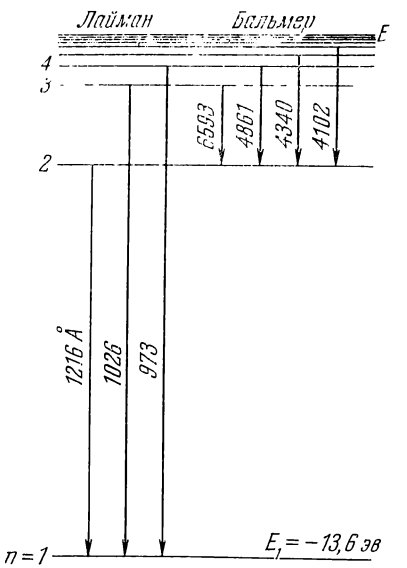


Рис. 18.2.

§ 18.2. Атом Бора

Квантовомеханическая теория, которая предсказывает эти допустимые энергетические уровни для атома водорода, будет изложена в гл. 21, но здесь стоит сравнить и противопоставить данные результаты предсказаниям классической механики. Атом водорода состоит из электрона и протона, которые притягиваются друг к другу посредством кулоновской силы с потенциалом $V = -e^2/r$, поскольку заряд электрона $-e$, а протона $+e$. (В системе МКСА здесь будет дополнительный размерный множитель $4\pi\varepsilon_0$, и этот множитель будет встречаться во всех последующих расчетах, так что e^2 будет заменяться на $e^2/4\pi\varepsilon_0$ во всех случаях *).) Протон в 1836 раз тяжелее, чем электрон, поэтому подобно Солнцу в планетной системе он остается почти в покое, в то время как электрон обращается вокруг него. Электронные орбиты являются как раз теми самыми, которые мы вычислили для закона сил, обратно пропорциональных квадрату расстояния с $K = e^2$, так что мы можем пользоваться всеми предыдущими результатами (§ 5.3). В частности, полная энергия на орбите с большой полуосью a (уравнение (5.12)) равна

$$E = -K/2a = -e^2/2a.$$

*) Так же обстоит дело в международной системе СИ. (*Прим. ред.*)

Если согласно уравнению (18.4) допустимы лишь энергии $E_n = -hcR/n^2$, то только соответствующие значения

$$a = a_n = \frac{e^2}{2hcR} n^2$$

дают возможные орбиты. Каждой допустимой энергии E_n будет соответствовать допустимая классическая орбита с большой полуосью a_n. Поучительно вычислить *момент импульса* для допустимых орбит. В общем случае полная энергия может быть записана (уравнение (5.4)) следующим образом:

$$E = \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r},$$

где L — момент импульса (являющийся интегралом движения, подобно E). Для данной энергии E, L будет наибольшим для круговой орбиты, и мы можем начать с этого случая. Тогда $\dot{r} = 0$, $r = a$ и

$$E = \frac{L^2}{2ma^2} - \frac{e^2}{a} = -\frac{e^2}{2a}, \quad L^2 = me^2a$$

(ср. с уравнением (5.7)). Вставляя сюда допустимые значения a, мы получим допустимые значения L:

$$L = \left(\frac{me^4}{2hcR}\right)^{1/2} n, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Момент импульса может принимать лишь значения, которые равняются константе, умноженной на целое число. Если вычислить ее с помощью измеренных значений других мировых констант, то эта константа окажется равной

$$\left(\frac{me^4}{2hcR}\right)^{1/2} = 1{,}054 \cdot 10^{-27}\ г \cdot см^2 сек^{-1}.$$

Эта константа имеет точно такое же численное значение, как и $\hbar$ $(= h/2\pi) = 1{,}054 \cdot 10^{-27}$ *эрг·сек*. Это численное равенство не является случайным, справедливым только для системы единиц СГС, так как размерность $г \cdot см^2 сек^{-1}$, как легко показать, совпадает с *эрг·сек*. Следовательно, мы нашли, что

$$L = n\hbar, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{18.6}$$

Этот простой результат может быть взят за основу полуклассической теории атома Бора. Хотя эта теория в действительности не корректна, ее все же полезно напомнить, так как из нее просто и наглядно можно получить правильные значения уровней энергии атома водорода (обратив изложенные выше аргументы). Подставив $L = n\hbar$ в выражение $a = L^2/me^2$ для круговой орбиты, получим

$$a_n = a_0 n^2, \qquad a_0 = \hbar^2/me^2. \tag{18.7}$$

Величина a_0 называется боровским радиусом электрона. Тогда для энергии $E = -e^2/2a$ будем иметь

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \qquad (18.8)$$

Постоянная Ридберга дается в виде комбинации других фундаментальных констант путем сравнения уравнений (18.4) и (18.8):

$$R = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c}. \qquad (18.9)$$

Действительно, если *квантование момента импульса* (уравнение (18.6)) принять всерьез за основу теории Бора, то из нее

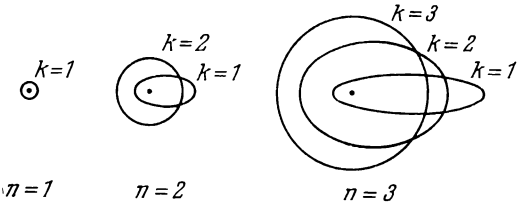


Рис. 18.3.

могут быть сделаны некоторые дальнейшие правильные выводы. Мы получим энергию n-го уровня при условии, что для *круговой* орбиты данной энергии момент импульса должен быть равен $L = n\hbar$. Другие *эллиптические* орбиты той же энергии, но с меньшим моментом импульса также возможны (ср. рис. 5.8). Они имеют ту же большую полуось, но больший эксцентриситет. Если мы потребуем, чтобы для этих орбит момент импульса также равнялся целому числу, умноженному на $\hbar$, то для каждой энергии E_n получится в точности n возможных орбит с моментами импульса:

$$L = k\hbar, \quad k = 1, 2, 3, \ldots, n \ (k \leqslant n). \qquad (18.10)$$

Та из них, для которой $k = n$, является круговой, а другие будут более эксцентричными (рис. 18.3), так что при $n = 1$ имеется только одна орбита с энергией E_1, при $n = 2$ имеется две орбиты с энергией E_2 и т. д.

Тот факт, что в действительности имеется n энергетических состояний (орбит) с одной и той же энергией E_n, принято описывать словами: n-й уровень имеет *n-кратное вырождение*. Чтобы разделить вырожденные уровни на диаграмме энергетических уровней, уровни для различных k обычно смещают вдоль горизонтали (рис. 18.4). Уровни для $k = 1, 2, 3$ и т. д. обозначаются также буквами s, p, d, f, g и т. д. соответственно (после f в алфавитном поряд-

ке). Эти обозначения являются последствием старой спектроскопической терминологии, но так как они повсюду используются, причем не только в отношении атомных и молекулярных состояний, но также для ядер и других элементарных частиц, то с ними нужно познакомиться. Вырожденные уровни слегка расщепляются (как говорят «вырождение снимается»), если принять во внимание релятивистские и другие малые эффекты (как частично будет сделано позднее). Тогда энергии фотонов при переходах из состояний с одним значением n в состояние с другим n слегка различаются в зависимости от величины k, и существование эксцентрических орбит обнаруживается по тонкой структуре спектральных линий излучения.

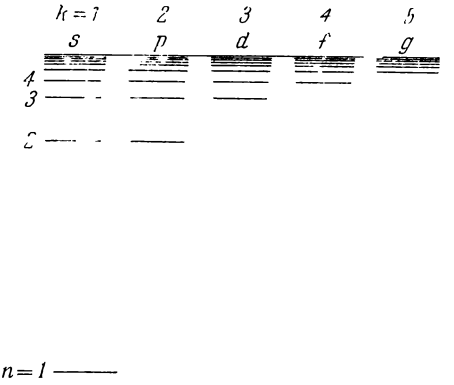


Рис. 18.4.

§ 18.3. Возбуждение и ионизация водородоподобных систем

Теория Бора с полным успехом может быть применена не только к водороду, но также к другим одноэлектронным системам, таким как ионы He^+, Li^{++}, Be^{+++} и т. д., называемые *водородоподобными ионами*. Эти системы различаются лишь тем, что в них электрон движется вокруг ядер с зарядом $+Ze$, где Z — *атомный номер*, равный 2 для He, 3 для Li и т. д. Для этих ионов надо всюду в приведенные выше результаты подставить Ze^2 вместо e^2. Радиус a_n уменьшается на множитель $1/Z$, а энергия E_n умножается на Z^2 для каждого целого значения n. Все эти результаты согласуются с экспериментом. Спектр He^+ просто подобен спектру H, за исключением того, что все разности энергий (и частоты фотонов) увеличиваются в 2^2, так что соответствующие длины волн укорачиваются в 4 раза.

Энергии $E = 0$ соответствует энергия, при которой электрон может быть удален на бесконечность. Для атома или иона разность $0 - E_1 = -E_1$ ($E_1 < 0$) называется *ионизационным потенциалом*. При $E > 0$ электрон находится на незамкнутой гиперболической орбите и переход его на одну из этих незамкнутых орбит («свободный электрон») представляет собой фотоэлектрический эффект, который был рассмотрен ранее. Наблюдаемый ионизационный потенциал для H равен 13,6 *эв*, а для He^+ — $4 \cdot 13{,}6 = 54{,}4$ *эв*

Размер атома H в основном состоянии дается боровским радиусом $a_0 = \hbar^2/me^2 = 0{,}53$ Å.

Диаметр в 1 Å приближенно наблюдается в экспериментах по рассеянию или же по расстоянию между атомами H в молекулах. Ион He^+ имеет вдвое меньшие размеры.

Если поглощаемый фотон имеет энергию меньшую, чем ионизационный потенциал, то происходит возбуждение атома; при больших энергиях фотона наблюдается фотоэффект и атом ионизуется. Возбуждение или ионизация может произойти и в результате столкновений с другими электронами или с атомами, а не только с фотонами. После возбуждения атомный электрон переходит опять в основное состояние с излучением света. Электронные столкновения приводят к появлению искровых, дуговых и газоразрядных спектров; столкновения с атомами ответственны за излучение света пламенем.

Доля электронов, находящихся в возбужденном состоянии при тепловом равновесии, определяется распределением Больцмана. Так, число атомов в состоянии $E_n \sim \exp[-(E_n - E_1)/kT]$. Для атома H величина $(E_n - E_1)$ не меньше чем 10,2 *эв*; так как при комнатной температуре kT равно лишь 0,025 *эв*, то число возбужденных атомов очень мало́, за исключением случая высоких температур. В газовом разряде или плазме электроны. часто имеют более высокую температуру, чем атомы (они не находятся в равновесном состоянии), и электроны вызывают заметное возбуждение, даже если атомы не нагреваются чрезмерно от стенок трубки. Когда атомы возбуждаются при столкновениях с электронами, то электроны могут терять лишь дискретные доли энергии, соответствующие разностям между энергетическими уровнями атома; этот эффект также наблюдается (Франк — Герц, 1914 г.). Современные результаты такого рода эксперимента показаны на рис. 18.5. В этом опыте электроны ускоряются внешним электрическим полем в парах ртути. При столкновении с атомом электрон может передавать ему энергию, не меньшую 4,9 *эз*, что соответствует переходу атома ртути на первый возбужденный уровень. Последовательные максимумы и минимумы на кривой рис. 18.5 разделены как раз промежутком 4,9 *эв*.

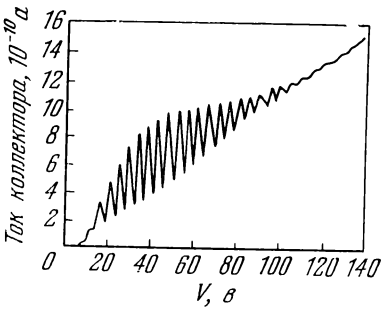


Рис. 18.5.

Подчеркнем, однако, опять, что хотя классическая теория электронных орбит может быть доведена до такого уровня, что может

дать достаточно согласованную картину наблюдаемых явлений, она в действительности не является удовлетворительной. Квантование момента импульса введено в теоретическую схему совершенно неестественным образом. Кроме того, теория сталкивается с безнадежными трудностями при попытке применить ее к атомам с более чем одним электроном. Поэтому обсуждение атомных спектров мы пока прекращаем до тех пор, пока не будет изложена корректная квантомеханическая теория.

§ 18.4. Излучение черного тела

Спектр светового излучения раскаленного твердого тела дает второй пример, в котором квантование электронных энергетических уровней приводит к наблюдаемым эффектам. Электроны нагретого твердого тела испускают непрерывный спектр частот (энергий фотонов), а не дискретные линии спектра, но тем не менее мы увидим, что форма спектра не может быть понята, если только сами электронные энергетические уровни не образуют дискретный набор. Здесь мы будем иметь дело с гармонической осцилляторной силой вместо закона силы, обратно пропорциональной квадрату расстояния, и распределение уровней энергии E_n будет иметь характерные отличия; но ограничение счетным числом состояний электронов будет аналогичным.

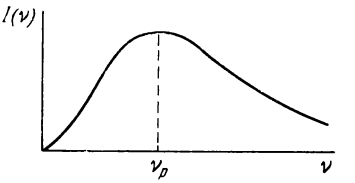


Рис. 18.6.

Излучение, которое мы будем рассматривать, создает раскаленная докрасна сковорода или волосок электрической лампочки накаливания, доведенной до белого каления. Даже батареи центрального отопления, которые много холоднее, испускают инфракрасное излучение (ощущаемое как тепло). Измеряемый спектр такого *теплового излучения* является непрерывным с одиночным широким пиком (рис. 18.6). Найдено, что этот пик соответствует частоте ν_p, которая пропорциональна абсолютной температуре T, и что полная интенсивность пропорциональна четвертой степени температуры (закон Стефана):

$$\nu_p \sim T, \quad \int_0^\infty I d\nu = \sigma T^4, \tag{18.11}$$

$$\sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-5} \ эрг \cdot см^{-2} \ сек^{-1} \ град^{-4}.$$

Тот факт, что излучение сдвигается к более коротким длинам волн и делается ярче, когда температура возрастает, делает цвет нагре-

того тела хорошим указателем температуры. Например, мастера по закалке стали могут оценить температуру в пределах около 100° С по визуальному наблюдению цвета. Однако полная интенсивность и спектральное распределение зависят в сильной степени от вещества и, в частности, от поверхности вещества.

Можно абстрагироваться от частных особенностей вещества, если рассматривать излучение, которое испускается внутренностью полости (рис. 18.7), целиком окружающей вещество при температуре T. Это излучение в полости находится в равновесии со стенками полости и может быть описано заданием плотности энергии (энергией на единицу объема) $dU/dV \equiv u$, как функции частоты излучения. Интенсивность $I(\nu)$ пропорциональна $u(\nu)$ точно так же, как для плоских волн (уравнение (16.23)), хотя здесь волны распространяются по всем направлениям. (Здесь, конечно, мы обозначили через u плотность энергии, а не скорость распространения волн, которая равна c.) То, что распределение энергии $u(\nu)$ не зависит от материала стенок полости, следует из свойств транзитивности *равновесия*: если излучение находится в равновесии с одним веществом, которое находится в равновесии со вторым веществом (т. е. имеет ту же температуру), то излучение будет в равновесии со вторым веществом и, следовательно, количество излучения зависит лишь от температуры. Излучение в полости можно рассматривать как *фотонный газ*, который находится в равновесии с удерживающими его стенками. Подобно любому газу из атомов, его свойства не зависят от свойств сосуда. Действительно, можно показать на основе очень общих (термодинамических) законов, что

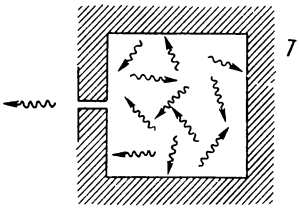


Рис. 18.7.

$$u = \nu^3 f(\nu/T), \tag{18.12}$$

где f — некоторая функция, которую нужно определить. Уравнение (18.12) называется *законом Вина*.

Оба свойства, упомянутых в уравнениях (18.11), следуют непосредственно из закона Вина. Дифференцируя уравнение (18.12) по ν и приравнивая производную нулю, будем иметь

$$\frac{du}{d\nu}\bigg|_{\nu=\nu_p} = 0 = 3\nu^2 f + \frac{\nu^3}{T} f', \quad 3f\left(\frac{\nu_p}{T}\right) + \frac{\nu_p}{T} f'\left(\frac{\nu_p}{T}\right) = 0.$$

Решение этого уравнения будет иметь вид $\nu_p/T = \text{const}$, где const определяется конкретным видом функции f. Кроме того, ин-

тегрируя уравнение (18.12) по ν, получим закон Стефана:

$$\int_0^\infty I d\nu \sim \int_0^\infty u d\nu = \int_0^\infty \nu^3 f\left(\frac{\nu}{T}\right) d\nu = T^4 \int_0^\infty \left(\frac{\nu}{T}\right)^3 f\left(\frac{\nu}{T}\right) d\left(\frac{\nu}{T}\right) = \text{const}\, T^4.$$

Наконец, можно спросить, каким образом излучение в полости можно наблюдать, если оно предполагается содержащимся целиком внутри полости. Ответ состоит в том, что это излучение не будет слишком сильно видоизменяться, если в стенке полости сделать маленькое отверстие для «подглядывания». Излучение, которое выходит из отверстия, является типичным излучением, содержащимся внутри полости. Между прочим, это излучение из полости называется также *излучением черного тела*, поскольку оно излучается из отверстия, «поверхность» которого является идеально черной в том смысле, что она будет поглощать все излучения, которые на него падают. Окошко из любого вещества в этом отверстии действовало бы как фильтр, который бы в той или иной степени видоизменял излучение из полости, так что поверхность конкретного горячего тела является лишь приближением к идеальному черному телу.

§ 18.5. Энергетические уровни гармонического осциллятора

Для того чтобы определить явную форму функции $u(\nu)$ (или функции f в законе Вина), нужно проделать статистический анализ фотонного газа, такой же, какой был проделан для обычного газа, чтобы получить его уравнение состояния. Однако для наших настоящих целей будет более удобно рассмотреть вещество, с которым излучение полости находится в равновесии. Фотоны в полости непрерывно излучаются и поглощаются веществом стенок. Так как $u(\nu)$ не зависит от этого вещества, то мы можем для описания стенок использовать любую подходящую модель. Допустим (следуя Планку), что электроны стенок являются гармоническими осцилляторами частоты $\nu = \omega/2\pi$, $\omega = \sqrt{K/m}$. Предположим, что имеются осцилляторы со всевозможными частотами и что каждый из них находится в равновесии с фотонами соответствующих частот. Данная модель не является в действительности близким отражением реальной электронной структуры твердого тела, но, как указывалось, это обстоятельство не является существенным.

Интуитивно очевидно, что для любой данной частоты ν средняя энергия $\overline{E}_\nu$ осциллятора и плотность энергии $u(\nu)$ фотонов, которые находятся с ними в равновесии, будут возрастать совместно:

$$u(\nu) \sim \overline{E}_\nu.$$

Действительно, коэффициент пропорциональности может быть вычислен приравниванием скорости излучения радиации колеблющимися электронами к скорости поглощения радиации, с которой они находятся в резонансе. Приведем этот результат:

$$u = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\overline{E}_\nu, \tag{18.13}$$

хотя мы и не нуждаемся в явном виде данного коэффициента пропорциональности для наших дальнейших рассуждений. Множитель ν^2, как будет видно, следует из закона Вина. Важным моментом является вычисление средней энергии $\overline{E}_\nu$.

Средняя энергия уже была вычислена по классической теории; для одномерного гармонического осциллятора (§ 14.6) было получено

$$\overline{E}_\nu = kT \tag{18.14}$$

(не зависит от ν) согласно закону о равномерном распределении энергии по степеням свободы. Этот результат приводит к бессмыслице, если его распространить на высокие частоты: плотность энергии будет определяться *законом Рэлея — Джинса*

$$u = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT \tag{18.15}$$

в соответствии с законом Вина, если $f(x) \sim 1/x$. При низких частотах закон Рэлея — Джинса согласуется с экспериментом, но $u(\nu)$ будет расти с ростом частоты (рис. 18.8), так что полная энергия полости окажется бесконечной. Этот парадокс даже получил специальное название *ультрафиолетовой катастрофы*. К счастью, эта «катастрофа» не имеет места в действительности.

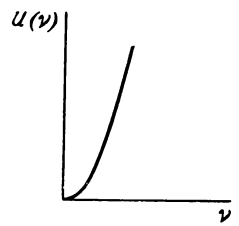


Рис. 18.8.

Корректные вычисления зависят от признания того, что при испускании осциллятором с собственной частотой колебаний ν фотона энергии $h\nu$ для сохранения энергии электрон должен совершить переход, при котором его энергия внезапно уменьшается как раз на эту величину. Простейшее предположение (сделанное Максом Планком в 1900 г., до того как была изобретена квантовая механика) состояло в том, что гармонический осциллятор имеет энергетические уровни

$$E_n = nh\nu. \tag{18.16}$$

Таким образом, при переходе $E_n \to E_{n-1}$ рождается фотон энергии $E_n - E_{n-1} = nh\nu - (n-1)h\nu = h\nu$. Если допустимыми уровнями являются только эти дискретные значения энергии, то

средняя энергия может быть вычислена путем использования *распределения Больцмана*, но только нужно взять сумму вместо интеграла. Существенная модификация имеет место не в методах вычисления средних, а в дискретности энергетических состояний:

$$\bar{E}_n = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-\frac{E_n}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{kT}}} = \frac{\sum n\hbar\nu e^{-\frac{n\hbar\nu}{kT}}}{\sum e^{-\frac{n\hbar\nu}{kT}}}. \qquad (18.17)$$

Здесь мы провели оценку статистического среднего значения E_n, при которой каждое значение E_n входит с весом, определяемым множителем Больцмана $\exp(-E_n/kT)$, дающим вероятность данного энергетического состояния; знаменателем является нормировочный множитель.

Хотя эти бесконечные ряды выглядят довольно непривлекательно, суммирование может быть проведено в замкнутой форме с помощью «трюка», который иногда можно использовать, при рассмотрении экспоненциальных функций. С обозначением $\beta = 1/kT$, уравнение (18.17) запишется следующим образом:

$$\bar{E}_\nu = \frac{\Sigma n\hbar\nu e^{-n\hbar\nu\beta}}{\Sigma e^{-n\hbar\nu\beta}} = -\frac{d}{d\beta}\ln\Sigma e^{-n\hbar\nu\beta} = -\frac{d}{d\beta}\ln\sum_{n=0}^{\infty}(e^{-\hbar\nu\beta})^n.$$

Используя формулу для суммы геометрической прогрессии получим

$$\bar{E}_\nu = -\frac{d}{d\beta}\ln\frac{1}{1-e^{-\hbar\nu\beta}} = \frac{\hbar\nu e^{-\hbar\nu\beta}}{1-e^{-\hbar\nu\beta}} = \frac{\hbar\nu}{e^{\hbar\nu\beta}-1},$$

так что

$$\bar{E}_\nu = \frac{\hbar\nu}{e^{\frac{\hbar\nu}{kT}}-1}. \qquad (18.18)$$

Тогда

$$u = \frac{\frac{8\pi\hbar\nu^3}{c^3}}{e^{\frac{\hbar\nu}{kT}}-1}. \qquad (18.19)$$

Эта функция распределения энергии, называемая *законом излучения Планка*, хорошо согласуется с экспериментом (и не противоречит закону Вина). Для низких частот $\hbar\nu \ll kT$,

$$e^{\frac{\hbar\nu}{kT}} \approx 1 + \frac{\hbar\nu}{kT}, \quad \bar{E} \approx kT.$$

Плотность энергии u согласуется с вычисленной классически (уравнения (18.14) и (18.15)) и находится в соответствии с экспериментом в пределе низких частот. С другой стороны, в пределе высоких частот, $h\nu \gg kT$,

$$\bar{E}_\nu \approx h\nu e^{-\frac{h\nu}{kT}} \tag{18.20}$$

и согласно уравнению (18.13)

$$u \approx \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} e^{-\frac{h\nu}{kT}},$$

так что u стремится к нулю с возрастанием ν, как это и должно быть. Между этими крайними областями лежит максимум при частоте, которая определяется из (18.19) путем решения (трансцендентного) уравнения, общая форма которого приведена в (18.12).

Результат для частоты ν_p, соответствующей пику распределения интенсивности, имеет вид

$$h\nu_p = 5kT. \tag{18.21}$$

Из этого соотношения мы можем найти, например, что при $T = 6000\,^\circ\mathrm{K}$ $\lambda_p = c/\nu_p = 4700$ Å. Температура поверхности Солнца приблизительно равна 6000° К, и с этим предположительно связан тот факт, что наш глаз наиболее чувствителен к зеленому свету. Мы также найдем, что для $T = 2000^\circ$ К $\lambda_p = 14\,000$ Å (инфракрасная часть спектра). Вот почему лампа накаливания является таким неэффективным источником видимого света.

§ 18.6. Теплоемкость твердых тел

В этом отступлении мы воспользуемся вычисленной нами средней энергией *квантованного осциллятора* для того, чтобы внести ясность в пункт, который мы оставили «повисшим в воздухе» в § 14.6, а именно в тот факт, что удельная теплоемкость твердых тел всегда исчезает, когда температура приближается к абсолютному нулю. Вспомним, что если атом в кристалле рассматривать как трехмерный гармонический осциллятор частоты ν, то его средняя энергия равна

$$\bar{E} = 3\bar{E}_\nu.$$

Полная тепловая энергия (уравнение (14.19)) моля атомов равна

$$U_T = N_0\bar{E}$$

и

$$C_V = dU_T/dT.$$

Используя выражение (18.18), только что выведенное для квантового осциллятора, получим

$$U_T = 3N_0 \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} = 3RT \frac{\frac{h\nu}{kT}}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1},$$

$$C_V = \frac{3N_0 h\nu}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1\right)^2} \frac{h\nu}{kT} e^{\frac{h\nu}{kT}} = 3R \frac{\left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 e^{\frac{h\nu}{kT}}}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1\right)^2}. \qquad (18.22)$$

Здесь опять при $kT \gg h\nu$ будем иметь

$$\bar{E}_\nu \approx kT, \quad U_T \approx 3RT, \quad C_V \approx 3R$$

в соответствии с законом Дюлонга и Пти. Но при низких температурах (уравнение (18.20)) $kT \ll h\nu$ и

$$\bar{E}_\nu \approx h\nu e^{-\frac{h\nu}{kT}}.$$

Причина того, что средняя энергия столь мала, заключается в том, что осциллятор не может иметь энергию kT, потому что в этой области энергий нет разрешенных энергетических состояний; первое возбужденное состояние лежит много выше, так что осциллятор бóльшую часть времени находится в основном состоянии. Тогда тепловая энергия и молярная теплоемкость при низких температурах равны

$$U_T \approx 3N_0 h\nu e^{-\frac{h\nu}{kT}} = 3RT \frac{h\nu}{kT} e^{-\frac{h\nu}{kT}},$$

$$C_V \approx 3R \left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 e^{-\frac{h\nu}{kT}}, \qquad (18.23)$$

— результат, впервые полученный Эйнштейном.

Полученное значение C_V стремится к нулю, когда T стремится к нулю, как то и должно быть (рис. 18.9). Если колебания решетки рассматривать более корректно, как волны (ср. § 16.6), то квантовые вычисления (Дебай) дают при малых температурах $C_V \sim T^3$, что лучше согласуется с экспериментом. (См. рис. 18.9, сплошная кривая.) Уравнение (18.22) дает хорошее соответствие с экспериментальными данными вплоть до значений, приблизительно меньших $^1/_3$ классической величины, но при более низких температурах уравнение (18.23) предсказывает много меньшие значения теплоемкости.

Переход от классического поведения к квантовому происходит в области $kT \approx h\nu$ (расстояние между энергетическими уровнями)

т. е. когда

$$T \approx T_E = \frac{\hbar\omega}{k} = \frac{\hbar}{k}\sqrt{\frac{K}{m}}. \qquad (18.24)$$

Так что, к примеру, закон Дюлонга и Пти при понижении температуры должен быть справедлив до более низких температур для Pb, чем для Al (предполагая, что силовые константы K приблизительно одни и те же), так как атомы Pb много тяжелее, что и имеет место в действительности.

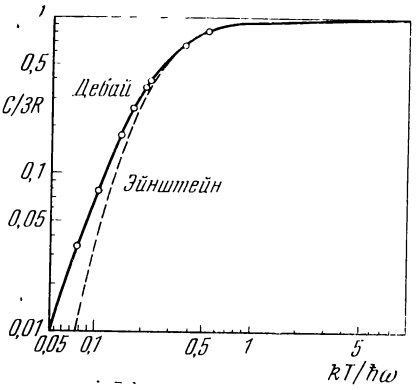


Рис. 18.9.

Резюмируя наиболее важные результаты, о которых шла речь в этой главе, подчеркнем, что связанная частица (в противоположность свободной) может приобретать лишь энергии, которые принадлежат к совокупности дискретных энергетических уровней. Среди этих уровней есть наинизший, называемый основным состоянием. Эти выводы нами получены для двух важных законов сил: обратно пропорциональной квадрату расстояния (рис. 18.10, *а*) и гармонической (рис. 18.10, *б*). Далее,

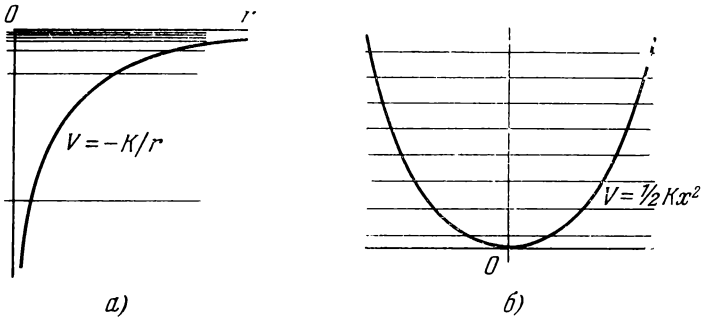


Рис. 18.10.

мы покажем, что это заключение верно и в общем случае (гл. 20). Энергии основных состояний соответственно равны

$$E_1 = -K/2a_0 = -mK^2/2\hbar^2$$

и

$$E_0 = 0.$$

Для гармонического осциллятора значение

$$E_1 = h\nu = \hbar\sqrt{K/m}$$

дает энергию первого возбужденного состояния. Полные схемы энергетических уровней изображены на рис. 18.10 вместе с кривыми потенциалов и даются соответственно формулами

$$E_n = E_1/n^2$$

и

$$E_n = nE_1.$$

(Квантовомеханическая теория гармонического осциллятора дает

$$E_n = (n + {}^1/_2)\, h\nu. \qquad (18.25)$$

Расстояния между энергетическими уровнями остаются равными $h\nu$, так что единственное различие состоит в том, что энергия основного состояния равна ${}^1/_2 h\nu$ вместо 0.) Мы приняли эти схемы энергетических уровней с таким расчетом, чтобы фотоны, порождаемые при переходах (с сохранением энергии) между электронными состояниями, согласовались бы с экспериментальными спектрами излучения. Дискретные уровни не имеют обоснования в классической механике, и позднее мы сформулируем совершенно новую теорию — квантовую механику, чтобы объяснить их происхождение.

Задачи

18.1. Показать, что момент импульса имеет ту же размерность, что и постоянная Планка.

18.2. Найти скорость электрона на первой боровской орбите ($n = 1$). Выразить результат через отношение v/c.

18.3. μ-мезон может быть связан с протоном, образуя «атом» в точности так же, как электрон. Масса мезона равна 207 электронным массам, в то время как его заряд тот же, что и у электрона. Найти боровский радиус и ионизационный потенциал для этого атома.

18.4. Применяя условие квантования момента импульса $L = n\hbar$, найти допустимые энергетические уровни жесткого ротатора с моментом инерции I. Вычислить частоту света, излучаемого при переходе $n \to n - 1$; вычислить частоту для молекулы H_2, предполагая расстояние между ядрами равным 1 Å.

18.5. Вычислить длины волн для серии Пашена.

18.6. В уравнении (18.8) в действительности должна быть использована приведенная масса. Вычислить приведенную массу для водорода и дейтерия и найти результирующий сдвиг красной линии (в Å).

18.7. Какая доля атомов H будет находиться в первом возбужденном состоянии при 300 °K и при 3000 °K?

18.8. Какова длина волны, соответствующая максимуму в спектре излучения черного тела при 300 °K?

18.9. Допустим, что газовый шар радиуса 1 *м* имеет температуру 1 000 000 °K. Вычислить полную мощность излучения и длину волны, соответствующую максимуму мощности, предполагая, что излучение находится в равновесии с газом.

(В термоядерном реакторе давление газа поддерживается низким, так что равновесие между атомами и фотонами не будет достигаться.)

18.10. Оценить температуру $T_E = \frac{\hbar}{k}\sqrt{\frac{K}{m}}$, выше которой удельная теплоемкость Al приближается к своему классическому значению, выбрав разумную величину для силовой константы K.

18.11. Позитрон и электрон могут образовать связанную водородоподобную систему, называемую позитронием. Вычислить энергетические уровни позитрония. Если аннигиляция электронно-позитронной пары происходит в основном состоянии позитрония, то как сильно изменится энергия γ-лучей по сравнению с вычисленной в задаче 17.

18.12. Частица массы m движется по круговой орбите в простом осцилляторном потенциальном поле $V = {}^1/_2 Kr^2$. В случае упругой радиальной силы $F = -Kr$ и центростремительного ускорения $a = -v^2/r$ (круговое движение) мы имеем

$$Kr = mv^2/r.$$

Наложив условие Бора

$$L = mvr = n\hbar,$$

вычислить разрешенные уровни энергии.

18.13. Вычислить разрешенные энергетические уровни для круговых орбит атома водорода тем же способом, что и в предыдущей задаче.

18.14. Выражение, даваемое уравнением (18.3), не является полностью корректным, если учитывать кинетическую энергию $p^2/2M$ отдачи атома. Вместо него мы получим

$$h\nu + p^2/2M = E_m - E_n.$$

Выразить $h\nu$ через $E_m - E_n$ и M. Вычислите длину волны света, испущенного при переходе из состояния с $n = 3$ в состояние с $n = 2$ в атоме водорода с учетом и без учета отдачи.

Литература для справок

1. Борн М., Атомная физика, «Мир», 1965.
2. Зоммерфельд А., Строение атома и спектры, т. 1, 2, Гостехиздат, 1956.
3. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М., Фейнмановские лекции по физике, т. 3, «Мир», 1965.

Глава 19

Электронные волны

Свет при определенных обстоятельствах, таких как дифракция на отверстии, может быть понят лишь как волновое явление. Однако другие эксперименты не могут быть объяснены иначе, как трактовкой света в виде корпускул-фотонов (гл. 17). Это явное выражение природного дуализма наводит на мысль о том, что и электроны, которые «нормально» рассматриваются как частицы, должны бы при подходящих обстоятельствах проявлять волновые свойства. (Мы постарались подойти к этому предположению так, чтобы оно казалось естественным; когда же оно было впервые сделано де Бройлем в 1924 г., то выглядело довольно диким.) Действительно, можно надеяться, что соотношения $E = h\nu$ и $p = h/\lambda$, которые связывают энергию и импульс фотона с частотой и длиной световой волны, могут быть обращены так, чтобы представлять частоту и длину волны электрона с энергией E и импульсом p:

$$\nu = E/h, \quad \lambda = h/p.$$

Остается единственный вопрос, являются ли предсказываемые волновые свойства действительно наблюдаемыми. Ответ гласит: да (Дэвиссон и Джермер, 1927 г.; Томсон, 1928 г.). Действительно, эти волновые свойства электрона (или других микроскопических частиц, таких как нейтрон или протон) не только реализуют философски привлекательный дуализм, но также дают ключ для понимания неклассического квантования уровней энергии электрона, которое было обсуждено в гл. 18.

§ 19.1. Электронная оптика

Прежде чем излагать квантовую теорию электрона, мы сначала, не умаляя ее глубоких революционных аспектов, отметим, что возможность описания явления в терминах распространения волн и, с другой стороны, в терминах траекторий частиц не обязательно приводит к безнадежным противоречиям. В случае света около 100 лет, пока были известны лишь явления *геометрической оптики*, только субъективное предпочтение могло определить выбор между описанием в терминах распространения волнового фронта или пути

луча (всюду нормального к волновому фронту). Перед 1900 г. теория механики частиц, в которой траектории частиц выступали как нормали к «волновым фронтам», была детально развита (Гамильтон, Якоби и др.). Аналогично геометрической оптике для света эта теория представлялась всего лишь элегантным и могущественным формализмом, который был полностью эквивалентен законам движения Ньютона.

Формулировка механики Гамильтона — Якоби слишком сложна, чтобы излагать ее здесь. Тем не менее полезно рассмотреть простой пример траектории частицы, в котором аналогия с геометрической оптикой была бы прозрачной. Рассмотрим (нерелятивистский) электрон, движущийся в потенциальном поле V с полной энергией E:

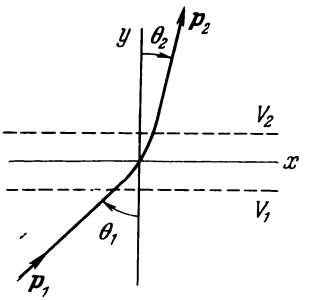


Рис. 19.1.

$$E = \frac{p^2}{2m} + V = \text{const}.$$

Допустим, в частности, что имеется узкая переходная область (рис. 19.1), где на электрон действует сила $-dV/dy$, и что V имеет постоянные значения V_1 ниже и V_2 выше переходной области, причем $V_2 < V_1$. Электрон ускоряется в направлении оси y, но не в направлении оси x, так что p_x остается постоянной, а p возрастает. Так как $p_x = p \sin \theta$, то как видно из рис. 19.1

$$p_1 \sin\theta_1 = p_2 \sin\theta_2. \tag{19.1}$$

Это уравнение для траектории электрона можно сравнить с соотношением, которое описывает путь светового луча согласно геометрической оптике, когда луч проходит из среды с показателем преломления n_1 в среду с показателем преломления $n_2 > n_1$. В оптике это соотношение представляет собой закон *Снеллиуса*:

$$n_1 \sin\theta_1 = n_2 \sin\theta_2. \tag{19.2}$$

Чтобы вывести заключение о соответствии между траекторией частицы и геометрической оптикой, надо сравнить уравнения (19.1) и (19.2), предположив, что «показатель преломления» для электрона пропорционален его импульсу:

$$n \sim p. \tag{19.3}$$

Так как $p = \sqrt{2m(E - V)}$, то показатель преломления «среды» может быть описан как функция координат соотношением

$$n \sim \sqrt{2m(E - V)}. \tag{19.4}$$

Этот простой пример дает грубое доказательство правильности уравнения (19.4) для произвольно изменяющегося потенциала V: любой произвольный потенциал можно аппроксимировать как предел последовательности ступенчатообразных изменений потенциалов в направлении, перпендикулярном тонким переходным слоям. Поэтому показатель преломления для электрона изменяется с координатой (так как V изменяется с координатой), так же как в *неоднородной преломляющей среде*. Кроме того, «среда» обладает *дисперсией*, так как в любой заданной точке показатель преломления зависит от энергии E электронов (аналогично изменению n с частотой света). Эта оптическая теория электронных лучей имеет очень большое практическое применение в *электронной оптике*, которая постоянно используется для проектирования линз для электронных пушек в катодно-лучевых трубках, электронных микроскопах и т. д.

§ 19.2. Дифракция электронов

Оптическая теория электронов полностью эквивалентна классической ньютоновской траектории частиц, и какую точку зрения принять — это только вопрос удобства для решения рассматриваемой задачи. Тем не менее, если принять оптическую теорию действительно всерьез и рассматривать «длину волны» электрона, то, как и в оптике, $\lambda = \lambda_0/n$. Поэтому нужно будет принять, что

$$\lambda \sim {}^1/_n \sim {}^1/_p,$$

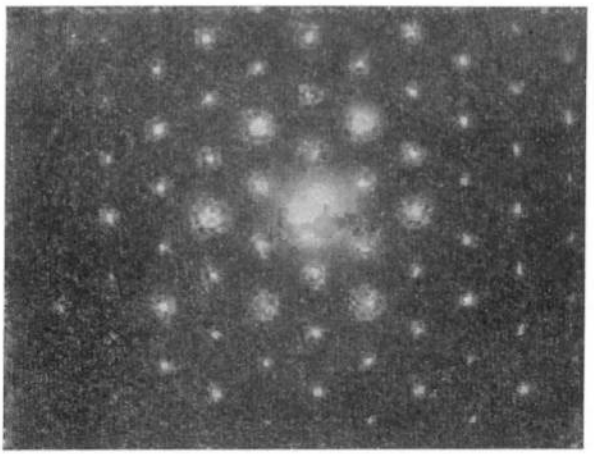
где вторая пропорция вытекает из уравнения (19.3). Фактически мы можем формально записать

$$\lambda = h/p. \tag{19.5}$$

Коэффициент пропорциональности представляет собой нечто, что должно быть определено экспериментально, так как его величина не предсказывается приведенным выше рассмотрением.

Напомним, что геометрическая оптика является пределом для случая коротких длин волн, когда свет отбрасывает резко очерченные тени, и что существенно волновые явления, такие как дифракция, могут наблюдаться лишь с волнами больших длин. Далее, из уравнения (19.5) видно, что если бы коэффициент пропорциональности был точно равен нулю, то «длина волны» электрона была бы просто искусственной конструкцией (всегда равной нулю) и классическая теория (геометрическая оптика) была бы всегда справедлива, но если h отлично от нуля, то для достаточно медленных движений (низкая энергия) электронов должны наблюдаться какие-то дифракционные эффекты.

Дифракция электронов наблюдалась, и измеренное значение h в уравнении (19.5) оказалось той же самой постоянной Планка. (Ср. уравнение (17.7).) Тот факт, что h не нуль, означает, что классическая механика перестает быть справедливой; факт, что h мало́, означает, что эту несостоятельность классической механики трудно наблюдать. Поэтому она не была замечена вплоть до настоящего столетия. Чтобы понять, насколько мало́ h, вспомним, что h (или скорее $\hbar$) является наименьшей единицей момента импульса.



X. Дифракция электронов на кристалле графита (гексагональная симметрия, ср. фото VI, *в*).

Мельчайшая частица, которая может быть видима (в оптический микроскоп), имеет радиус около 10^{-4} *см*; такая частица с моментом импульса $\hbar$ вращалась бы с угловой скоростью около одного оборота за каждые 20 лет.

Чтобы увидеть, каковы реальные длины электронных волн, перепишем уравнение (19.5) в форме

$$\lambda = h/\sqrt{2m(E-V)}. \tag{19.6}$$

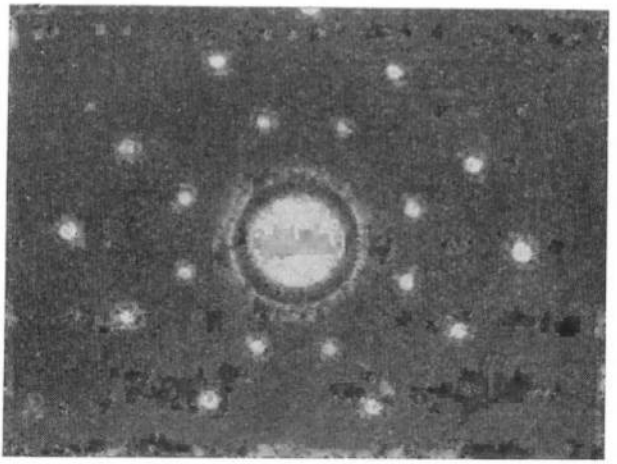
Теперь положим $E = 0$, т. е. выберем нулевое значение V так, чтобы оно соответствовало покоящемуся электрону. Так как $V = -e\Phi$, где Φ — электростатический потенциал, мы имеем

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2me}}\frac{1}{\sqrt{\Phi}} = 12{,}3\,\frac{1}{\sqrt{\Phi}}\text{Å} \qquad (\Phi \text{ в вольтах}). \tag{19.7}$$

Если потенциал Φ является потенциалом, ускоряющим электрон, то Φ равен кинетической энергии электрона в электрон-

вольтах. Практически очень трудно сформировать электронный пучок с Ф меньшим, чем примерно 100 *в*, из-за пространственного заряда и температурных эффектов. Поэтому наибольшая длина волны электрона в пучке, который может быть легко получен, имеет порядок 1 Å.

Дифракция света была открыта в процессе его исследования довольно поздно из-за того, что его длина волны мала (5000 Å). Дифракция электронов (фото X, для сравнения с фото XI) была также



XI. Дифракция нейтронов на кристалле NaCl (симметрия четвертого порядка, ср. фото VI, *а*).

открыта поздно из-за того, что длина волны электронов еще короче. Однако это открытие было сделано лишь 15 лет спустя после открытия дифракции света той же длины волны, т. е. рентгеновских лучей. Экспериментальный метод наблюдения дифракции электронов подобен методу наблюдения дифракции рентгеновских лучей: электронный пучок дифрагирует на кристалле. Для наблюдения пучка, проходящего сквозь кристалл, требуется очень тонкий образец: в случае рентгеновских лучей поперечное сечение эффектов (таких как фотоэффект), отличных от когерентного рассеяния (т. е. дифракции), относительно мало, в то время как для электронного пучка поперечное сечение ионизации велико и пучок является слабо проникающим.

Дифракционные эксперименты Дэвиссона и Джермера дали недвусмысленное подтверждение волновой природы электрона. А уже когда реальность электронных волн является установленной, их существование дает, наконец, прочную основу для

понимания квантования уровней энергии электрона (ср. уравнение (18.8)). Дискретный набор электронных состояний вытекает из волновой теории электрона точно таким же образом, как из волновой теории колеблющейся струны вытекает существование дискретного набора возможных состояний колебаний — различные гармоники. Грубое применение идеи электронной волны к атому водорода позволяет предсказать правильные значения энергетических уровней. Допустим, что электрон имеет импульс p на круговой орбите радиуса r. Если электрон имеет длину волны λ, то существование хорошо определенной волны требует, чтобы окружность орбиты была бы в точности равна целому числу длин волн:

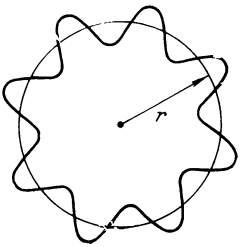


Рис. 19.2.

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

(рис. 19.2). Так как

$$\lambda = h/p,$$

то

$$rp = L = n\hbar.$$

Как мы уже видели согласно уравнению (18.6), из этого квантового условия для момента импульса получаются правильные энергетические уровни. Более точная формулировка волновой теории электрона и некоторые выводы из нее будут даны в следующей главе, а в гл. 21 она будет применена более строго к атому водорода.

§ 19.3. Принцип неопределенностей Гейзенберга

Прежде чем переходить к изложению формальной теории, мы можем рассмотреть следствия корпускулярно-волновых эффектов, которые имеют очень глубокие и далеко идущие философские аспекты, а именно, принцип неопределенностей Гейзенберга. Этот принцип утверждает, что существуют принципиальные ограничения на точность, с которой могут быть сделаны физические измерения, или неизбежная неопределенность в результатах наблюдений. Это означает не только существование обычных практических пределов ошибок измерений, которые при достаточных усилиях или при расходовании достаточного количества денег на инструменты могут быть уменьшены до любого заданного уровня (т. е. могут быть сделаны близкими к нулю). Неопределенность, упоминаемая здесь, гораздо более глубока и является неотъемлемой частью фундаментальных законов природы. Пусть измеряется x-координата частицы с точностью Δx и одновременно измеряется x-компонента ее импульса с точностью до Δp. Тогда принцип неоп-

ределенностей устанавливает, что при их *одновременном измерении минимальные* ошибки измерения связаны соотношением

$$\Delta x\, \Delta p \approx \hbar. \tag{19.8}$$

Этот принцип не накладывает никаких ограничений на точность Δx, с которой может быть измерена координата (если отвлечься от чисто практических вопросов); ограничение состоит в том, что чем более точно мы пытаемся измерить координату, тем бóльшая неопределенность будет вноситься в *одновременное* значение импульса, и наоборот. Квантомеханические законы природы налагают принципиальные ограничения на информацию, которую можно получить о частицах.

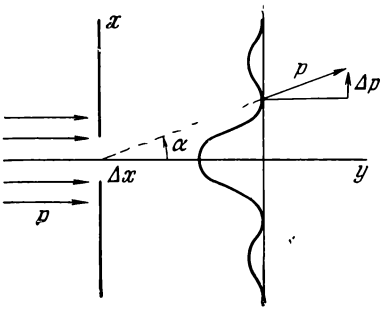


Рис. 19.3.

Связь принципа неопределенности с корпускулярно-волновыми эффектами, которые были рассмотрены ранее, может быть хорошо проиллюстрирована на ряде примеров. Так можно определить координату x пучка электронов, движущихся в направлении y с импульсом p, посредством пропускания их через щель (рис. 19.3). Если ширина щели равна Δx, то неопределенность этого измерения x равна Δx, так как не известно, через какую часть щели проходит данный электрон. Пусть перед прохождением через щель электрон имеет x-компоненту импульса, точно равную нулю. Тогда после прохождения щели, т. е. в результате измерения координаты x, пучок претерпевает дифракцию. Некоторые из электронов будут уходить за пределы геометрической тени от щели и тем самым приобретут некоторую x-компоненту Δp импульса, величина которой определяется шириной дифракционной картины. Если для определенности назвать «шириной» дифракционной картины угол α в направлении на первый минимум интенсивности, то, как и при дифракции света, будет иметь место равенство $\sin\alpha = \lambda/\Delta x$ (рис. 19.4). Далее, так как Δp является соответственно x-компонентой импульса, то $\sin\alpha = \Delta p/p$ (рис. 19.3). Наконец, используя

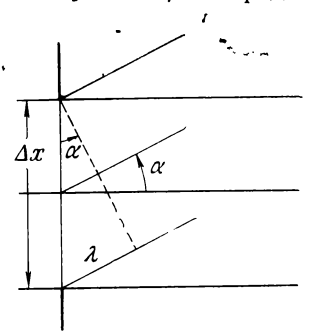


Рис. 19.4.

соотношение $\lambda = h/p$ из уравнения (19.5), получим

$$\Delta x \, \Delta p \approx h.$$

(Так как мы интересуемся только порядком величины, то можно написать $\Delta x \, \Delta p \approx \hbar$.) Следовательно, при попытке определить координату частицы, заставив ее пройти сквозь щель, мы неизбежно вносим неопределенность в значение импульса из-за дифракции волны, причем этот эффект тем больше, чем уже щель.

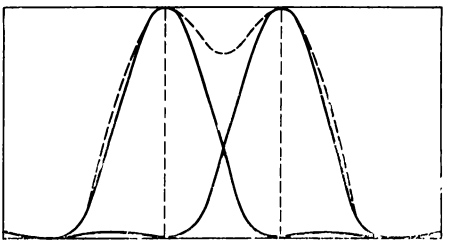


Рис. 19.5.

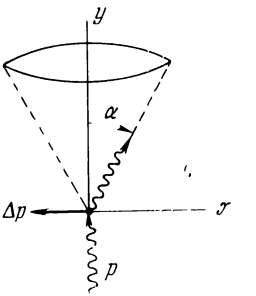


Рис. 19.6.

Другим альтернативным подходом к измерению координаты небольшой частицы является наблюдение света, рассеянного частицей, с помощью микроскопа. Теперь неопределенность Δx координаты частицы обусловливается размером дифракционной картины света, которая будет тем меньше, чем короче длина волны.

В микроскопии в отдельных случаях используется ультрафиолетовый свет; были попытки использовать рентгеновский микроскоп, и в принципе ничто не запрещает использовать γ-лучи. (Этот так называемый *гамма-микроскоп* является гипотетическим прибором для целей настоящего примера.) Когда фотон рассеивается внутрь микроскопа, частица отскакивает, и если она первоначально находилась в покое, то после этого приобретает x-компоненту импульса Δp неопределенной величины, обусловленной изменением импульса фотона. Разрешающая способность микроскопа, как можно показать, равна $\Delta x \approx \lambda/\sin\alpha$ (рис. 19.5). Если p — импульс фотонов, падающих в направлении оси y (рис. 19.6), то максимальная x-компонента импульса фотонов, которые рассеиваются внутрь микроскопа, равна $p\sin\alpha$, так что согласно закону сохранения импульса $\Delta p = p \sin \alpha$. Снова используя соотношение $p = h/\lambda$, получим

$$\Delta x \, \Delta p \approx h.$$

При локализации частицы посредством рассеяния на ней света короткой длины волны одновременно неизбежно вносится неопределенность импульса за счет передачи импульса от фотона. Этот эффект тем больше, чем короче длина волны света.

§ 19.4. Измеримость в квантовой механике

В обоих приведенных выше примерах имеет место *взаимодействие с наблюдателем*, которое никак не может быть уменьшено ниже определенных пределов из-за двойственной корпускулярно-волновой природы как «частицы» (например, электрона), так и света, который с ней взаимодействует. С классической точки зрения электрон не испытывал бы никакой дифракции, так что щель безнаказанно можно было бы сделать как угодно узкой; и передаваемый светом импульс не мог бы приходить пакетами (фотонами), так что и при сколь угодно малой длине волны импульс можно было бы уменьшить до нужных пределов уменьшением интенсивности света. Однако с квантовомеханической точки зрения сам акт произведения наблюдения координаты возмущает импульс частицы и наоборот, так что достигаемая точность этих одновременных измерений демонстрирует взаимосвязь, описываемую принципом Гейзенберга (19.8).

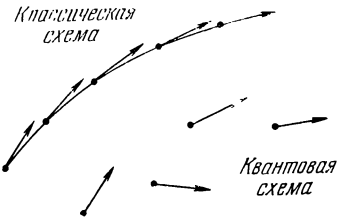


Рис. 19.7.

Это неуничтожимое возмущение поведения частицы актом измерения ведет к пересмотру ряда концепций, безоговорочно принимавшихся в классической механике. Например, для придания эмпирического смысла понятию *траектории* частицы надо, чтобы было в принципе возможно производить сколь угодно точные измерения как координат, так и скоростей в сколь угодно близких друг к другу точках (рис. 19.7). Это соответствует тому, что мы подразумеваем, говоря, что мы *видим* макроскопическую частицу, движущуюся по определенной траектории. Для того чтобы распространить понятие траектории на микроскопические частицы, необходимо, чтобы такие серии наблюдений были бы возможны. Но из принципа неопределенностей следует, что это не так. Некоторые философы встают на ту точку зрения, что говорить о «траектории» электрона не имеет смысла. Действительно, возникает даже сомнение, можно ли придать точный смысл самому понятию «частица», так чтобы это понятие совпадало с соответствующими макроскопическими концепциями.

Квантовая механика, особенно в отношении результатов, выражаемых принципом неопределенностей, оказала колоссальное

влияние на современную философию, главным образом подчеркиванием возможности *экспериментальной проверяемости*, как требования того, чтобы утверждение имело смысл. Но принцип неопределенностей часто играет также и полезную практическую роль. Если им разумно пользоваться, то он дает возможность очень просто производить ряд оценочных квантовомеханических вычислений. Для макроскопической частицы его значение, конечно, ничтожно. Даже частица радиуса 10^{-4} *см*, если ее координата определена с точностью до 10^{-6} *см*, имеет неопределенность в скорости всего лишь 1 *мм* в столетие. Этот пример опять показывает, что величина $\hbar$ очень мала с макроскопической точки зрения. Однако когда мы переходим к электрону или даже к атому, то ограничения, налагаемые принципом неопределенностей, становятся жесткими. Мы могли бы, например, вычислить неопределенность скорости электрона, заключенного внутри области размером с боровский радиус (так что неопределенность ее координаты равна величине этого радиуса). Полагая $\Delta x = a_0 = \hbar^2/me^2$, $\Delta p = m\Delta v$, с помощью соотношения

$$\Delta x \Delta v \approx \hbar$$

мы находим, что

$$\frac{\Delta v}{c} = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}. \tag{19.9}$$

Таким образом, измерение скорости электрона привело бы к результату, который с заметной вероятностью мог бы быть любым, начиная от нуля и до нескольких процентов от скорости света со средним значением около $c/137$. В дальнейшем мы столкнемся с рядом аналогичных примеров.

Выше принцип неопределенности был обсужден как следствие экспериментов (в нашем случае двух, а на самом деле большего числа), в которых явно выступал как волновой аспект электрона, так и корпускулярный аспект фотона. Этот принцип может быть также получен как строгое следствие из квантовомеханической теории, которая будет изложена в дальнейшем. Мы не собираемся приводить этот вывод в деталях, но, представив данный принцип в несколько иной форме, мы наглядно поясним, что он зависит исключительно от волновых свойств. Вспомнив, что $p = h/\lambda = \hbar k$, $\Delta p = \hbar \Delta k$, принцип неопределенности можно записать в виде

$$\Delta x \, \Delta k \approx 1. \tag{19.10}$$

Эта формула содержит только координату и волновое число. Никакие свойства частиц или физические константы в нее не входят. Фактически можно доказать математически, что это соотношение справедливо для любого типа волн и без всякой связи с квантовой механикой. Например, для строго синусоидальной волны

$\sin kx$ с точно определенным волновым числом k ($\Delta k = 0$) эта волна простирается однородно вдоль всей оси x, так что $\Delta x = \infty$ (рис. 19.8). С другой стороны, если волновое возмущение локализовано в области Δx, то оно, очевидно, не может быть представлено одиночной синусоидальной волной (рис. 19.9). Вместо этого функция должна быть представлена математически в виде ряда Фурье,

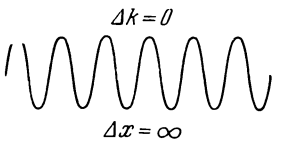


Рис. 19.8.

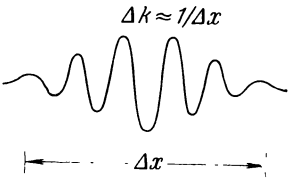


Рис. 19.9.

в котором, как можно показать, суммирование распространено на последовательность функций $\sin kx$ в области Δk значений k такой, что $\Delta k \gtrsim 1/\Delta x$. (В действительности надо использовать не сумму, а интеграл, называемый интегралом Фурье, поэтому мы не можем здесь доказать эту математическую теорему.)

Далее, так как наше соотношение является просто математическим следствием волновой теории, то оно должно соблюдаться в той же форме и для временно́й части волны:

$$\Delta t\, \Delta\omega \gtrsim 1. \tag{19.11}$$

Это аналогичное математическое соотношение можно обратно превратить в физическое утверждение, используя связь между частицами и волнами: $E = h\nu = \hbar\omega$. Таким образом,

$$\Delta t\, \Delta E \gtrsim \hbar. \tag{19.12}$$

Это соотношение таким же способом, как и предыдущее, зачастую используется для произведения грубых физических оценочных вычислений распределения состояния по энергиям из известной неопределенности во времени, которое частица находится в этом состоянии, и наоборот.

* * *

Мы надеемся, что теперь подготовили почву для изложения формализма квантовой теории тем, что мы подчеркнули важность волнового аспекта как для электрона, так и для света. Хотя мы начали наше обсуждение квантовых явлений с описания фотонов и хотя исторически корпускулярная картина света была понята раньше волновой картины электрона, мы все же ограничимся изложением квантовой теории электронов, а не фотонов. Основанием для этого

ограничения служит то, что электроны часто можно трактовать нерелятивистски, в то время как фотоны всегда являются релятивистскими (поскольку они всегда имеют скорость c). Нерелятивистская квантовая механика является сравнительно простой и завершенной теорией подобно классической теории относительности, но объединение этих двух великих переворотов в наших основных понятиях о Вселенной, как и подозревалось, оказалось задачей, бросающей вызов человеческому разуму. Поэтому в последующих главах мы ограничимся изложением строгого (хотя и неполного) квантовомеханического формализма для нерелятивистского электрона (или для других частиц с ненулевой массой покоя).

Задачи

19.1. Пучок электронов с энергией 100 *эв* падает на вещество под углом $\theta_1 = 30°$ к нормали. Вычислить угол преломления пучка θ_2, если потенциальная энергия внутри вещества меньше на $V_0 = 20$ *в* (рис. 19.10, ср. с рис. 17.8). (Этот эффект нужно принимать во внимание в экспериментах по дифракции электронов.)

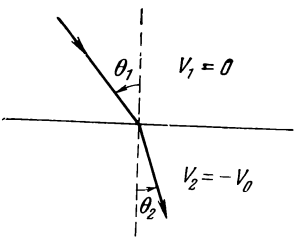


Рис. 19.10.

19.2. Какова энергия электрона, длина волны которого имеет порядок диаметра ядра, скажем 10^{-12} *см*?

19.3. При какой энергии (и длине волны) электрон и фотон имели бы одну и ту же энергию при одинаковых длинах волн?

19.4. Какова длина волны протона с энергией 100 *эв*?

19.5. Какова энергия нейтрона, имеющего длину волны 2 Å? При какой температуре его энергия при тепловом равновесии имела бы эту величину?

19.6. Пусть электрон заключен в области порядка 1 Å. Чему равна неопределенность его импульса? Какой энергии это соответствует? (Это примерно энергия связи электрона в атоме.)

19.7. Пусть электрон заключен в области порядка 10^{-12} *см*. Чему равна неопределенность его импульса? Какой энергии это соответствует. (Эта величина намного превышает ядерную энергию связи, так что внутри ядер электронов нет.)

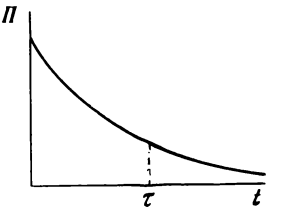


Рис. 19.11.

19.8. Пучок электронов с длиной волны 10^{-3} *см* проходит сквозь щель шириной 10^{-2} *см*.

а) Каковы импульс и энергия электронов пучка?

б) Чему приблизительно равен угол расхождения пучка, обусловленный дифракцией на щели?

в) При какой температуре хаотическая тепловая энергия kT равнялась бы энергии электрона из пучка (*а*)? (Приблизительно это — наинизшая температура, которая когда-либо достигалась, так что этот эксперимент был бы предельно трудным.)

19.9. Начальная скорость электрона равна 10^8 *см/сек*. Рассмотреть результат наблюдения его положения с точностью 10^{-7} *см*, производимого через каждые 10^{-3} *сек*, для того чтобы попытаться вычертить траекторию электрона.

19.10. Время, в течение которого система находится в возбужденном состоянии, связано с неопределенностью (размазанностью) ее энергии уравнением (19.12). Если Π является вероятностью пребывания в возбужденном состоянии, то $\Pi = e^{-\frac{t}{\tau}}$, где τ — время жизни (рис. 19.11). О том, что система была возбуждена, можно узнать только по наблюдению испускания ею излучения, так что $\Delta t \approx \tau$. Неопределенность энергии ΔE обнаруживается по размазанности энергии излученных фотонов.

а) Типичное время жизни возбужденного состояния атома порядка 10^{-8} *сек*. Найти минимальную ширину спектральной линии в ангстремах в области видимого спектра.

б) Импульсы рубинового лазера (6300 Å) длятся миллисекунды. Найти ширину линии лазера в ангстремах и в герцах (число колебаний в секунду).

в) Типичные времена жизни возбужденных ядер имеют порядок 10^{-12} *сек*. Найти неопределенность (в *Мэв*) энергии испускаемых γ-лучей.

19.11. Параллельный пучок электронов с энергией 40 *кэв* дифрагирует на щели шириной 0,6 μ. Под каким углом обнаружится первый минимум дифракционной картины? (Подобный эксперимент был выполнен Мёлленштедтом и Иёнсоном.)

Литература для справок

1. Борн М., Атомная физика, «Мир», 1965.
2. Гейзенберг В., Физические принципы квантовой теории, ГТТИ, 1932.
3. Блохинцев Д. И., Основы квантовой механики, «Высшая школа», 1961.

Глава 20

Волновая механика

На основе того, что было рассказано об электронных волнах, мы теперь в состоянии точно сформулировать волновую теорию электрона (или другой частицы), которая образует новый базис для механики, взамен ньютоновского закона движения $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$. *Мы видели, что понятие ускорения* $\mathbf{a}$ *частицы вдоль ее траектории не может быть сохранено в его классическом смысле в квантовой механике — ведь даже «траектория» не имеет смысла — и сила* $\mathbf{F}$ *будет играть малую роль. Описание окружения частицы дается вместо этого потенциальной энергией* V, *что и подчеркивалось ранее. Только одно сохраняется — это масса* m, *которая останется одной из существенных характеристик частицы. Мы уже знаем достаточно относительно электронных волн, так что требуемое волновое уравнение можно написать немедленно. Раз уж эта теория сконструирована, ее справедливость будет зависеть от согласия между предсказываемыми ею результатами и экспериментом. Без каких-либо исключений она успешно заменила (или включила) классическую механику во всей области атомной, молекулярной и макроскопической физики. (В какой мере она в свою очередь будет заменена или видоизменена, для того чтобы включить в себя описание явлений при очень высоких энергиях в физике элементарных частиц, в настоящее время не известно.)*

§ 20.1. Уравнение Шредингера

Для того чтобы выписать волновое уравнение для электрона, мы напомним одномерное волновое уравнение (16.4)

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = u^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}, \qquad \Psi = \Psi(x, t)$$

и его пространственную часть (уравнение (16.6))

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \qquad k \equiv \frac{\omega}{u},$$

получаемую подстановкой временно́й зависимости в форме $\exp(-i\omega t)$,

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\, e^{-i\omega t}.$$

Так как $k = 2\pi/\lambda$ и, как мы видели в уравнении (19.6), $\lambda = h/\sqrt{2m(E-V)}$, то отсюда следует, что

$$k = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}.$$

Подставляя эту величину в уравнение (16.6), получим нерелятивистское волновое уравнение для электрона

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = 0, \tag{20.1}$$

так называемое *стационарное уравнение Шредингера*. Это уравнение описывает, как мы увидим, все стабильные состояния электронов или других частиц и охватывает всю область эффектов, которую мы намереваемся анализировать. Подчеркнем опять, что, хотя форма уравнения довольно естественно может быть выведена из рассмотренных нами экспериментов с электронной волной, его общая справедливость основана на непротиворечивом согласии следствий из него с экспериментальными фактами, которые пока вообще не рассматривались. (Заметим, что k не является постоянной, за исключением случая свободного электрона, так как V изменяется с изменением x. Будет ли справедливым это уравнение, когда V является быстро изменяющейся функцией координат, может быть решено лишь по его успеху в предсказании экспериментальных результатов.)

Хотя мы намерены ограничить наше внимание стационарным уравнением Шредингера, для полного обоснования квантовой теории необходимо иметь также временно́е уравнение. Наш подход, основанный на аналогиях, в этом отношении недостаточен. Для нерелятивистского свободного электрона

$$E = p^2/2m$$

или, заменяя $E = \hbar\omega$ и $p = \hbar k$,

$$\omega = \left(\frac{\hbar}{2m}\right)k^2 = \left(\frac{\hbar k}{2m}\right)k.$$

Это соотношение не сводится к простой пропорциональности

$$\omega^2 = u^2k^2, \quad \omega = uk,$$

которая получается в обычном волновом уравнении. Очевидно, что надо получить уравнение, содержащее только *первую* производную по времени, но вторую производную по координате, так как каждое дифференцирование экспоненциальных функций привносит в них множитель ω или k (крайне релятивистское уравнение может быть одного и того же порядка по x и t, так как $E = cp$).

Стационарное уравнение может быть записано следующим образом:

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi.$$

Ясно, что это уравнение получается из уравнения

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi \tag{20.2}$$

подстановкой

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

Последнее уравнение в частных производных, которое называется *временны́м уравнением Шредингера*, является основным уравнением полной квантовомеханической теории. Но так как мы не будем заниматься какими-либо вычислениями, которые требуют его использования, в дальнейшем у нас не будет нужды на него ссылаться. Все рассматриваемые нами физические эффекты можно понять в терминах решения стационарного уравнения, например $\exp(ikx)$. Распространение волны описывается решением временно́го уравнения, подобным $\exp[i(-\omega t + kx)]$, но фазовая скорость этой волны не имеет непосредственного физического смысла. В частности, она не равна скорости частицы, которая связана с *длиной* волны: $v = p/m = h/m\lambda = \hbar k/m$.

§ 20.2. Вероятностная интерпретация $|\psi|^2$

Решение стационарного уравнения Шредингера для данной потенциальной функции V, которая описывает физическую ситуацию, является теперь просто математической задачей получения решений $\psi(x)$ дифференциального уравнения. Однако для того чтобы иметь точное решение физической задачи, существенно не только получить математическую функцию $\psi(x)$, но также иметь какие-то точные предписания о связи ψ с физическими величинами, т. е. мы должны знать, каков смысл ψ. Такого рода определенного предписания для интерпретации ψ пока недостает, хотя мы сделали молчаливое, но ясно сформулированное допущение, что там, где распространяются волны, как-то распространяются и электроны. Например, в эксперименте по дифракции электрона было предположено, что дифракционная картина волны будет определять интенсивность распределения дифрагирующего электронного пучка в том же смысле, как дифракционная картина световой волны может быть интерпретирована как распределение интенсивности потока фотонов. Но вопрос о том, что произойдет, когда единичный электрон пройдет через щель, т. е. каким образом будет опреде-

ляться место «приземления» электрона с помощью ψ, пока еще не рассматривался.

Интерпретация ψ, что теперь признается почти всеми, состоит в следующем:

$$|\psi(x)|^2 dx$$

есть вероятность того, что если сделано измерение x-координаты частицы, то результат измерения должен быть числом, заключенным между x и $x + dx$. Коротко говоря, это утверждение состоит в том, что $|\psi(x)|^2 dx$ есть вероятность *наблюдения* электрона в интервале между x и $x + dx$, так что сама $|\psi|^2$ есть *плотность вероятности*. Подобно любой вероятностной функции она должна быть *нормирована:*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1, \tag{20.3}$$

так как вероятность нахождения частицы в *какой-то* точке оси равна единице. (Нормировка просто выполняется путем умножения решения уравнения Шредингера на соответствующий постоянный нормировочный множитель.) Если $|\psi|^2$ есть плотность вероятности, то как интерпретировать саму волновую функцию ψ? Ответ состоит в том, что ψ совсем не имеет никакой интерпретации, т. е. физический смысл придается не ψ, а лишь $|\psi|^2$. Заметим, что плотность вероятности аналогична плотности энергии или интенсивности классической волны, так как она также пропорциональна квадрату амплитуды (уравнение (16.22)).

Интерпретация волновой функции установлена нами несколько громоздким путем, но сделать именно так было важно, так как эта интерпретация может разрешить парадокс относительно трактовки электрона и как волны и как частицы. Если в данном эксперименте определяется, находится ли электрон внутри элемента пространства Δx, эксперимент может иметь лишь два различных результата: либо электрон находится в этом месте, либо же нет. Вероятность того, что он будет найден здесь, предсказывается выражением

$$\int_{x}^{x+\Delta x} |\psi|^2 dx.$$

Хотя волновая функция «размазана», электрон ни в каком смысле не является размазанным. Когда над ним произведено измерение, то он либо наблюдается полностью, либо не регистрируется совсем. Часть электрона не наблюдается, и в этом смысле он является частицей. Волной является волновая функция ψ, квадрат которой описывает вероятность различных возможных результатов

эксперимента. В этом толковании опять подчеркивается важность придания эмпирического смысла только таким утверждениям, которые могут быть проверены.

Вопрос о том, где находится электрон, когда его никто не наблюдает, не имеет смысла и об этом бесполезно спрашивать. Пока наблюдение не произведено, волновая функция может быть размазана по пространству согласно решению уравнения Шредингера. Когда же электрон обнаружен, то тем самым найдено, что он находится в определенной области и, следовательно, волновая функция изменена актом наблюдения в полном соответствии с принципом неопределенностей.

Формально плотность вероятности $|\psi|^2$ идентична функции распределения, рассматриваемой в кинетической теории, но значение, приписываемое этой функции, совсем другое. Классическая функция распределения имеет смысл как сберегающее труд понятие, используемое для того, чтобы иметь дело с большими числами частиц. Но не подвергается сомнению, что в принципе можно вообразить, что каждая частица следует по своей собственной траектории. Напротив, в квантовой механике распределение вероятности предполагает, что это есть все, что можно знать, независимо от того, какая бы воображаемая работа здесь ни была проделана, и что траектория частицы не имеет никакого смысла. Кое-кто (в частности, Эйнштейн) высказывал надежду, что квантовая теория в данной трактовке, в конце концов, окажется лишь промежуточной теорией, приближением вроде кинетической теории. Все еще предпринимаются серьезные попытки дать квантовой теории другую интерпретацию. Большинство физиков, однако, примирились с использованием техники и результатов квантовой теории в вероятностной трактовке и не затрудняют себя вопросом о том, где находятся электроны, когда их нельзя видеть.

§ 20.3. Физические величины как операторы

Мы обсудили физический смысл, приписываемый волновой функции ψ или, скорее, квадрату $|\psi|^2$ ее абсолютного значения. Вернемся теперь к тем множителям в уравнении Шредингера, которые умножаются или «действуют» на ψ. При обсуждении их мы увидим, что ψ содержит информацию не только о положении частицы, но также о ее других физических свойствах, таких как импульс, кинетическая энергия и т. д. Если мы запишем уравнение в форме

$$E\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi$$

и сравним его с классическим уравнением

$$E = T + V,$$

то окажется, что дифференциальный оператор $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ должен быть как-то отождествлен с кинетической энергией T. Потенциальная энергия, с другой стороны, в большинстве случаев является просто «оператором умножения», т. е. функцией, умноженной на ψ и тем самым превращающей ψ в новую функцию $V(x)\psi(x)$. Позднее в этой главе мы найдем, что физические величины, отличные от кинетической энергии, такие как импульс $\mathbf{p}$ и момент импульса $\mathbf{L}$, также представлены в квантовой теории дифференциальными операторами.

Физики фактически принимают как постулат идею о том, что *каждой измеримой физической величине соответствует квантово-механический оператор*. Эта идея, не имеющая аналога в классической механике частицы, может дать нечто, если ее должным образом использовать. Что это означает в терминах физических измерений, будет исследовано в этом параграфе и более детально в § 20.7.

В дальнейшем операторы будем обозначать буквами, напечатанными «прямым рубленым шрифтом». Так что T, $\mathbf{p}$, $\mathbf{L}$ суть операторы, соответствующие T, $\mathbf{P}$ и $\mathbf{L}$ (кинетической энергии, импульсу и моменту импульса). Для одномерного движения мы уже нашли, что

$$\mathsf{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}. \tag{20.4}$$

Допустим, что мы знаем волновую функцию $\psi(x)$ частицы. Будет ли нам тогда известно численное значение, которое получилось бы, к примеру, при измерении кинетической энергии частицы? Или же, если ответ на этот вопрос отрицателен, каковы возможные результаты такого измерения и какова вероятность того, что данная величина кинетической энергии будет наблюдаться при реальном измерении? Ясно, что если ψ_1 была бы собственной функцией (§ 16.3) оператора T, такой, что ψ_1 удовлетворяла бы уравнению

$$\mathsf{T}\psi_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = T_1\psi_1,$$

где T_1 — константа (собственное значение), то уравнение приняло бы вид

$$\psi(E - V - T_1) = 0.$$

Это уравнение может быть удовлетворено лишь тогда, когда кинетическая энергия $T \equiv E - V$ будет равна T_1.

Другими словами, волновая функция дает единственное значение кинетической энергии, если она является собственной функцией,

принадлежащая оператору T, и измерение кинетической энергии может иметь лишь один результат, а именно, собственное значение. Это и есть основное допущение квантовой механики, состоящее в том, что это также имеет место в случае любого оператора, соответствующего физической переменной, при условии, что волновая функция является собственной функцией данного оператора. Следующий постулат состоит в том, что *единственно возможными результатами измерений физической величины являются собственные значения соответствующего оператора*. Этот постулат подтверждается успехом квантовой механики в предсказании результатов, согласующихся с экспериментом. Вопрос о том, какие собственные значения могут ожидаться при измерении физической величины, когда волновая функция не является собственной функцией соответствующего оператора, будет исследован в § 20.7.

Введя оператор T кинетической энергии, перейдем теперь к оператору полной энергии, называемому *оператором Гамильтона*, который определяется так:

$$\mathsf{H} = \mathsf{T} + \mathsf{V} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x). \tag{20.5}$$

Очевидно, что задача о решении стационарного уравнения Шредингера

$$\mathsf{H}\psi = E\psi \tag{20.6}$$

есть не что иное, как задача о собственных значениях оператора H. Мы будем теперь решать это уравнение для некоторых простых случаев.

§ 20.4. Свободная частица

Простейшую возможную волновую функцию имеет *свободная частица*, т. е. частица, движущаяся в отсутствие какого-либо потенциала. При $V = 0$ уравнение Шредингера (уравнение (20.1)) принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

или

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \tag{20.7}$$

Это обычное уравнение Гельмгольца — дифференциальное уравнение для гармонического осциллятора.

Уравнение (20.7) имеет точно такой же вид, как и уравнение для смещения натянутой струны (уравнение (16.6)). Общее реше-

ние этого уравнения имеет вид

$$\psi = A \cos kx + B \sin kx, \tag{20.8}$$

где A и B могут быть комплексными числами.

Частное решение получается при $B = iA$:

$$\psi = Ae^{ikx}.$$

Так как $\sqrt{2mE}$ является величиной импульса p свободной частицы, мы можем равным образом записать

$$\psi = Ae^{\frac{ipx}{\hbar}}. \tag{20.9}$$

Заметим, что, так как

$$\psi'(x) = \frac{ip}{\hbar}\psi(x)$$

или

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} = p\psi,$$

то оператор, соответствующий x-компоненте импульса, должен иметь вид

$$\mathsf{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}. \tag{20.10}$$

Как видно, это частное решение, даваемое выражением (20.9), является собственной функцией не только оператора Гамильтона (т. е. решением уравнения Шредингера), но также и оператора импульса p_x. Поэтому данная частная волновая функция описывает частицу, которая имеет точное значение импульса p в положительном направлении оси x, в том смысле, что если будет сделано измерение импульса частицы, то всегда получится данный результат. Аналогично волновая функция $\psi = Ae^{-\frac{ipx}{\hbar}}$ описывает частицу с импульсом p в отрицательном направлении x. Из уравнений (20.4) и (20.10) мы видим, что *операторы* импульса и кинетической энергии связаны тем же соотношением, что и классические величины:

$$\mathsf{T} = \frac{\mathsf{p}^2}{2m}.$$

Функция, даваемая выражением (20.9), является комплексной. Важно допустить такого рода комплексное решение, так как мы только что видели, что это есть волновая функция частицы с определенным импульсом p. Поначалу идея комплексной волновой функции может показаться обескураживающей, но так как единственной величиной, имеющей физический смысл, является квадрат

ее абсолютного значения $|\psi(x)|^2$, который всегда действителен и положителен, то никаких трудностей не возникает. В случае волновой функции, соответствующей определенному импульсу p (уравнение (20.9)), мы получим фактически, что

$$|\psi|^2 = |Ae^{\frac{ipx}{\hbar}}|^2 = |A|^2.$$

Эта величина не только действительна, но и не зависит от x. Поэтому все положения x равновероятны в согласии с принципом неопределенностей ($\Delta x = \infty$ при $\Delta p = 0$). Заметим, что нет необходимости каким-либо образом ограничивать E или p в волновой функции свободной частицы, так как здесь не требуется удовлетворения граничным условиям. Энергетические уровни свободной частицы, другими словами, не квантуются. В этом отношении она аналогична бегущей волне на струне.

§ 20.5. Частица в ящике

Второй пример, который мы рассмотрим, это движение частицы между двумя стенками с координатами $x = 0$ и $x = L$, которые мы представим математически посредством потенциала (рис. 20.1): $V(x) = 0$ при $0 \leqslant x \leqslant L$;

$$V(x) = \infty \text{ при } x > L \text{ или } x < 0.$$

В промежутке между 0 и L частица подобна свободной, но ее движение ограничено этой областью. При $V(x) = \infty$ единственным решением уравнения Шредингера является решение $\psi = 0$. Так как $\psi(x)$ должна быть непрерывной, то волновая функция в области $0 \leqslant x \leqslant L$ должна удовлетворять граничным условиям $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Наша задача теперь формально идентична задаче о нахождении стоячих волн в струне длины L (гл. 16). Так как $V = 0$ при $0 \leqslant x \leqslant L$, то наше уравнение будет таким же, как для свободной частицы:

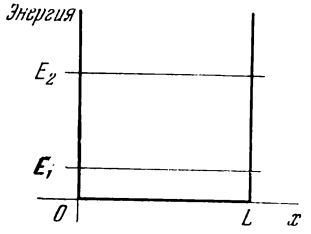


Рис. 20.1.

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Решения этой задачи уже были получены в уравнении (16.10) или (16.13):

$$\psi_n(x) = A_n \sin k_n x, \quad k_n = n\pi/L, \quad n = 1, 2, 3... \qquad (20.11)$$

Для данной волновой функции мы можем также записать решение в форме

$$\psi_n = A_n \sin k_n x = \frac{1}{2} i A_n [e^{-ik_n x} - e^{+ik_n x}].$$

Стоячая волна тогда будет выражена разностью двух собственных функций оператора импульса, соответствующих собственным значениям $\pm p_n$, где $p_n = \hbar k_n = \hbar n\pi/L$. Значение этого факта будет детально рассмотрено в § 20.7, но и теперь мы можем интуитивно видеть, что присутствие двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях, соответствует классическому движению назад и

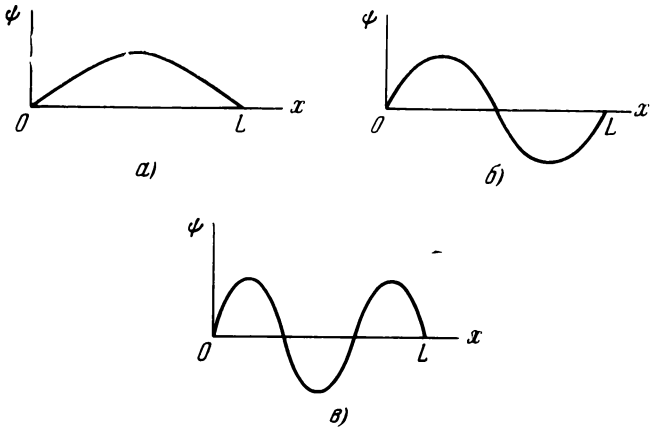


Рис. 20.2.

вперед частицы, которая находилась бы в этом потенциальном ящике, отражаясь от стенок.

Так как

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad \text{или} \quad E = \hbar^2 k^2/2m,$$

то дозволенные энергетические уровни таковы:

$$E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2 n^2, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{20.12}$$

Только волновые функции, соответствующие этим энергиям, допустимы в промежутке между $x = 0$ и $x = L$. Если величина L становится очень большой, энергетические уровни сближаются друг с другом до тех пор, пока в пределе $L \to \infty$ мы не возвращаемся к результатам для свободной частицы — непрерывности допустимых энергий. С другой стороны, при малых L энергии и импульсы широко разделены. На наинизшем энергетическом уровне частица может иметь x-компоненту импульса, равную p_1 или $-p_1$. При неопределенности x-компоненты импульса, равной $\Delta p = 2p_1 = 2\pi\hbar/L$, мы видим, что Δp велико, когда $\Delta x = L$ мало, в соответствии с принципом неопределенностей Гейзенберга.

Из выражения для E_n можно видеть, что волновая функция, соответствующая наинизшей энергии или *основному состоянию*, не имеет узлов ($n = 1$), ближайшее высшее энергетическое состояние (или первое возбужденное состояние) имеет один узел ($n = 2$), второе возбужденное состояние — два узла ($n = 3$) и т. д. (рис. 20.2). Эти качественные свойства выполняются для более сложных потенциальных функций и легко видеть почему: чем больше узлов, тем быстрее меняется волновая функция и тем больше ее кривизна или вторая производная. Так как вторая производная волновой функции пропорциональна кинетической энергии, то это означает, что волновая функция с большим числом узлов на единицу длины соответствует более высокой энергии.

§ 20.6. Потенциальная яма

Мы увидели, как граничные условия $\psi(0) = \psi(L) = 0$ приводят к квантованию энергетических уровней. Теперь посмотрим, что произойдет, если потенциальные стенки при $x = 0$ и $x = L$ будут не бесконечными, а конечными (рис. 20.3). Выберем произвольную постоянную в потенциальной энергии так, чтобы $V = 0$ при $x < 0$ и $x > L$. При $0 \leqslant x \leqslant L$ потенциал отрицателен (прямоугольная потенциальная «яма») $V = -V_0$, и мы предположим, что в этой потенциальной яме имеется связанная частица с отрицательной полной энергией $0 > E > -V_0$ (рис. 20.3). (См. дискуссию о связанных частицах в потенциальной яме в гл. 3.) При $0 \leqslant x \leqslant L$ уравнение Шредингера принимает форму

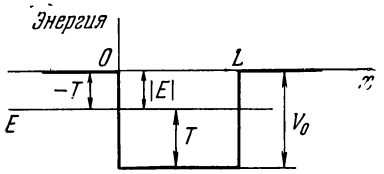


Рис. 20.3.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V)\psi = (V_0 - |E|)\psi$$

или

$$\psi'' + k_1^2\psi = 0, \quad k_1^2 = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}. \tag{20.13}$$

Это уравнение имеет ту же форму, что и в двух предыдущих примерах. Общее решение согласно уравнению (20.8) имеет вид

$$\psi = A\cos k_1 x + B\sin k_1 x. \tag{20.14}$$

В областях $x < 0$ и $x > L$ кинетическая энергия, очевидно, отрицательна:

$$T \equiv E - V = -|E|.$$

В классической механике кинетическая энергия $T \equiv {}^1/_2 mv^2$ никогда не может быть отрицательной, или, другими словами, частица никогда не может проникать в область $x < 0$ или $x > L$. Казалось бы, то же самое можно ожидать и в волновой механике, т. е. что $\psi = 0$ при $x < 0$ или $x > L$, что означало бы обращение в нуль вероятности нахождения частицы в этих областях. Однако мы придем к другим заключениям. В квантовой механике кинетическая энергия согласно уравнению (20.1) равна

$$T \equiv E - V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\frac{d^2\psi}{dx^2}}{\psi}, \tag{20.15}$$

и вполне возможно, что этот член окажется отрицательным, т. е. ψ'' будеть иметь тот же знак, что и ψ.

Определяя k_2 как

$$k_2^2 = 2m\frac{|E|}{\hbar^2},$$

уравнение Шредингера при $x < 0$ и $x > L$ можно записать следующим образом:

$$\psi'' - k_2^2\psi = 0. \tag{20.16}$$

Решение этого уравнения, очевидно, равно

$$\psi = Ce^{-k_2x} + De^{+k_2x}.$$

При $x > 0$ мы должны положить $D = 0$, для того чтобы могло быть удовлетворено условие нормировки (20.3). Если D было бы не равно нулю, то ψ и плотность вероятности $|\psi|^2$ стремились бы к бесконечности при увеличении x, что физически невозможно. Следовательно,

$$\psi = Ce^{-k_2x}, \qquad x > L. \tag{20.17}$$

При $x < 0$ по тем же самым основаниям $C = 0$:

$$\psi = De^{k_2x}, \qquad x < 0. \tag{20.18}$$

Мы видим, что хотя волновая функция полностью не исчезает в запрещенных классически областях $x < 0$ и $x > L$, но она спадает экспоненциально с быстротой, определяемой константой $k_2 \equiv \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$. Проникновение в данные области поэтому в значительной степени ограничено расстоянием порядка k_2^{-1}.

Тем не менее имеется конечная вероятность того, что частица будет наблюдаться в области, где ее кинетическая энергия отрицательна. Что это означает? Принцип неопределенностей помогает нам найти выход из этой дилеммы, так как при локализации

частицы в промежутке $\Delta x \approx k_2^{-1}$ в областях, меньших 0 или больших $x = L$, импульс становится неопределенным на величину $\Delta p \approx \hbar/\Delta x \approx \hbar k_2$, и неопределенность энергии будет равна

$$\Delta E \approx (\Delta p)^2/2m \approx \hbar^2 k_2^2/2m = |E|.$$

При $\Delta E \approx |E|$ мы не можем более говорить, что кинетическая энергия отрицательна. Так решается парадокс: для того чтобы наблюдать частицу в запрещенных классически областях, ей сообщается в процессе измерения достаточная энергия, чтобы сделать ее свободной частицей. Однако нельзя сказать, что классическая и квантовомеханическая ситуации идентичны. Волновая функция ψ может проникать сквозь потенциальный «барьер», внутри которого T отрицательна, и выходить с другой его стороны (рис. 20.4). Этот волномеханический «туннельный» эффект наблюдается для электронов в туннельных диодах, в приборах с «тонкими пленками» и для α-частиц при α-распаде. Классически это прохождение сквозь область отрицательной кинетической энергии, конечно, не может происходить.

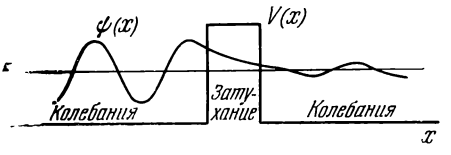


Рис. 20.4.

Вернемся к частице в прямоугольной потенциальной яме. Из решений, даваемых уравнениями (20.14), (20.17) и (20.18), мы теперь знаем, как ведет себя волновая функция при всех x. Однако до сих пор четыре константы A, B, C и D не были определены и энергия E не была ограничена каким-либо образом. Каковы ограничения на волновую функцию? У нас нет теперь условия $\psi = 0$ при $x = 0$ и $x = L$, но мы должны потребовать, чтобы кинетическая энергия была везде конечной, хотя и не обязательно непрерывной. Если T конечна, то ψ'' также должна быть конечной (20.15), что в свою очередь требует непрерывности ψ' наряду с ψ. Совпадение ψ и $d\psi/dx$ при $x = 0$ и $x = L$ дает четыре уравнения, а нормировочный интеграл (20.3) — пятое, связывающее константы A, B, C и D и энергию E. Эта система уравнений будет определять все пять величин, включая энергию. Оказывается, что система имеет более чем одно решение, если яма достаточно глубока и широка, что приводит к нескольким дозволенным

Рис. 20.5.

энергетическим уровням. Детали не будут нами рассматриваться подробно, но из предыдущих аргументов ясно, что решением с низшей энергией будет то, которое имеет наименьшую кривизну или не имеет узлов. Первое возбужденное состояние будет иметь один узел и т. д. (рис. 20.5). Когда V_0 увеличивается, экспоненциальные хвосты делаются все меньше и меньше до тех пор, пока при $V_0 = \infty$ они не исчезают, так что мы возвращаемся к нашему предыдущему результату для бесконечных стенок.

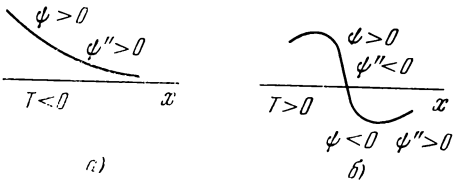


Рис. 20.6.

Лишь если V является кусочно-постоянной функцией, решения уравнения Шредингера могут быть записаны в виде простых синусоидальных и экспоненциальных функций от x. Для более сложных потенциальных функций получение решения сопряжено с более трудными вычислениями. Часто эти решения могут быть получены только численно. Однако качественные свойства решения будут оставаться одними и теми же для всех потенциальных ям. Это можно увидеть из уравнения (20.15). В классически недоступной области, где T отрицательно, $d^2\psi/dx^2$ будет всегда иметь тот же знак, что и сама ψ (т. е. $d^2\psi/dx^2$ положительна там, где ψ положительна). Вы можете видеть, что если ψ всюду положительна, то это возможно, лишь если ψ стремится к нулю (рис. 20.6, *а*). С другой стороны, всюду, где T положительна, уравнение Шредингера дает нам, что знак $d^2\psi/dx^2$ противоположен знаку самой ψ, т. е. там, где ψ положительна, она вогнута, а там, где ψ отрицательна, она выгнута (рис. 20.6, *б*). Волновая функция поэтому осциллирует там, где $E - V > 0$. Независимо от того, какова форма данного потенциала $V(x)$, мы имеем следующий общий результат: если $T = E - V(x)$ положительна лишь в конечной области, волновая функция осциллирует в этой области и стремится к нулю вне ее. Кроме того, как мы доказали ранее, чем меньше кривизна $\psi(x)$ (или чем меньше узлов) в области осцилляций, тем ниже энергия.

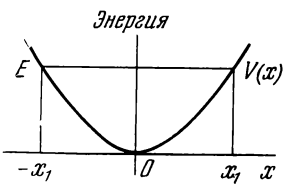


Рис. 20.7.

В качестве примера потенциала, который не является кусочно-постоянным, возьмем простой гармонический потенциал

$$V = {}^1/_2 Kx^2.$$

Если $V(x_1) = E$ (рис. 20.7), то волновая функция будет иметь

осциллирующий характер в области от $-x_1$ до x_1; она будет затухать при $|x|>x_1$ в классически недоступной области, где $T<0$. Волновая функция основного состояния будет вести себя, как показано на рис. 20.8, *а*, в то время как высоко возбужденные состояния будут иметь форму, представленную на рис. 20.8, *б*. Детальные вычисления показывают, что дозволенными энергетическими уровнями являются следующие:

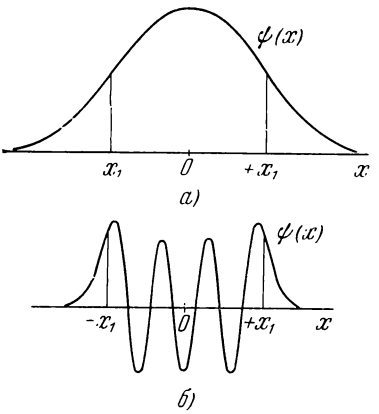


Рис. 20.8.

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{K}{m}},$$

$$n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots,$$

в то время как волновая функция n-го уровня является произведением затухающего члена $\exp(-\text{const}\,x^2)$ на полином n-й степени от x. Так как $\sqrt{K/m}=\omega$ есть собственная частота классического осциллятора, то это есть тот самый результат, который уже приводился ранее (уравнение (18.25)).

§ 20.7. Средние значения результатов измерений

Вернемся к вопросу о том, какие значения приписывать физическим переменным, когда волновая функция не является собственной функцией соответствующего оператора. Мы обсуждали вероятный результат измерения координаты в § 20.2. «Оператор» координаты является, конечно, просто оператором умножения, но для всех волновых функций, которые мы рассматривали перед этим,

$$x\psi \neq \text{const}\,\psi,$$

т. е. ψ не являлась собственной функцией оператора x. В этом случае мы не можем предсказать точно результат измерения координаты. Мы лишь знаем вероятность $|\psi(x)|^2dx$ того, что частица будет наблюдаться в интервале от x до $x+dx$. Если мы неоднократно измерим координаты частиц с идентичными волновыми функциями, то распределение измеренных координат будет согласоваться с $|\psi(x)|^2$. Среднее значение результатов измерений будет тогда равно так называемому *математическому ожиданию* x, определен-

ному равенством

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\, |\psi|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^* x \psi,$$

ψ^*—функция комплексно сопряженная ψ. (Заметим, что это вполне согласуется со способом нашего вычисления средних с помощью функции распределения в кинетической теории.)

Последнее выражение для $\bar{x}$ было записано потому, что оно имеет общее значение для любой физической переменной G, соответствующей оператору $\mathbf{G}$, т. е. величина

$$\bar{G} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^* \mathbf{G} \psi \tag{20.19}$$

является математическим ожиданием G. То, что данный способ вычисления среднего измеряемой величины G является правильным, должно быть проверено экспериментально. Это и было сделано. Если ψ_1 является собственной функцией $\mathbf{G}$:

$$\mathbf{G}\psi_1 = G_1 \psi_1,$$

то $\bar{G}$ легко вычисляется:

$$\bar{G} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_1^* \mathbf{G} \psi_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_1^* G_1 \psi_1 = G_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\psi_1|^2 = G_1.$$

Математическое ожидание оказывается здесь равным собственному значению, как это и должно быть, если каждое измерение G дает G_1, в соответствии со сказанным в § 20.3.

В качестве другого примера вычисления среднего значения мы теперь найдем $\bar{p}_x$ в состоянии с волновой функцией, рассмотренной в § 20.5, и даваемом уравнением (20.11):

$$\psi = \begin{cases} A \sin k_n x, & 0 \leqslant x \leqslant L, \\ 0, & x < 0 \text{ или } x > L. \end{cases}$$

Волновая функция нормирована, если $A = \sqrt{2/L}$, что было показано в уравнении (16.4). Мы имеем

$$\bar{p}_x = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^* \mathbf{p}_x \psi = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx} = \frac{2}{L} \frac{\hbar}{i} k_n \int_0^L dx \sin k_n x \cos k_n x =$$

$$= \frac{\hbar k_n}{iL} \int_0^L dx \sin 2k_n x = -\frac{\hbar}{2iL} [\cos 2k_n L - \cos 0] = 0.$$

Заметим, что $\cos 2k_nL = 1$, так как $2k_nL = n(2\pi)$ (уравнение (20.11)). Среднее значение p_x, как видно, равно нулю. Однако мы знаем, что собственное значение энергии $E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$ (уравнение (20.12)), чему соответствует

$$p_x^2 = \left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2 \quad \text{или} \quad p_x = \pm\frac{n\pi\hbar}{L}.$$

Это должно означать, что измерения дают с равной вероятностью как $p_x = -n\pi\hbar/L$, так и $p_x = +n\pi\hbar/L$ при среднем значении $\bar{p}_x = 0$. Это рассмотрение подтверждается тем фактом, что $\psi(x)$ представляет собой линейную комбинацию e^{ik_nx} и e^{-ik_nx}:

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin k_nx = \frac{1}{2i}\sqrt{\frac{2}{L}}\left[e^{ik_nx} - e^{-ik_nx}\right],$$

как было показано в § 20.5. Так как

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}e^{\pm ik_nx} = \pm k_n\hbar e^{\pm ik_nx} = \pm\frac{n\pi\hbar}{L}e^{\pm ik_nx},$$

то мы видим, что ψ есть линейная комбинация (с равными амплитудами) двух собственных функций оператора p_x, принадлежащих собственным значениям $\pm n\pi\hbar/L$.

Предыдущий пример является частным случаем следующего общего квантовомеханического результата. Пусть $\{\psi_n\}$ — набор ортонормированных функций квантовомеханического оператора $\mathbf{G}$, соответствующего физической величине G:

$$\mathbf{G}\psi_n = G_n\psi_n.$$

Тогда любая волновая функция ψ_n может быть записана как линейная комбинация (возможно, с бесконечным числом членов) собственных функций ψ_n:

$$\psi = \sum_n a_n\psi_n$$

(здесь некоторые собственные значения G_n, соответствующие собственным функциям ψ_n, могут быть численно равны). Интерпретация, даваемая коэффициентам a_n, такова: $|a_n|^2$ представляет собой вероятность того, что измерение физической величины G будет давать собственное значение G_n. Пока ни один эксперимент не противоречит этой интерпретации. Вычислив среднее значение, мы получим

$$\bar{G} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\psi^*(x)\,\mathbf{G}\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sum_n a_n^*\psi_n^*(x)\,\mathbf{G}\sum_m a_m\psi_m(x) =$$

$$= \sum_n\sum_m a_n^*a_mG_m\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\psi_n^*(x)\,\psi_m(x) = \sum_n a_n^*a_nG_n = \sum_n |a_n|^2\,G_n.$$

Здесь мы использовали уравнение (16.14), согласно которому для ортонормированной системы интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_n^*(x)\,\psi_m(x)$$

равен нулю при $n \neq m$ и единице при $n = m$. Ясно, что интерпретация $|a_n|^2$, как вероятности того, что измерение G будет давать G_n, полностью согласуется с приведенным выше результатом для средних значений измерений:

$$\overline{G} = \sum_n |a_n|^2 G_n.$$

§ 20.8. Волновая механика в трех измерениях

Мы ввели волновую механику в одном измерении для того, чтобы отделить новые физические идеи по возможности полностью от чисто математических трудностей. Большинство физических задач, разумеется, даже приближенно не являются одномерными. Чтобы рассматривать движение в мире с тремя пространственными измерениями, например движение электрона в поле ядра, мы должны развить трехмерную волновую механику. Так как мы нашли, что $\mathsf{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ является оператором x-компоненты импульса, то можно ожидать, что оператор *вектора импульса* будет иметь вид

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla. \tag{20.20}$$

Он приводит к оператору кинетической энергии

$$\mathsf{T} = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2, \tag{20.21}$$

где ∇^2 является тем же оператором, который введен в уравнении (16.7). Трехмерное уравнение Шредингера запишется следующим образом:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \tag{20.22}$$

Волновая функция, описывающая частицу, является теперь функцией всех трех пространственных координат, и соответственно ее вероятностная интерпретация должна быть к этому приспособлена. Выражение $|\psi|^2\,dx\,dy\,dz$ понимается как вероятность того, что частица, если она наблюдается, будет найдена в элементе объема $dx\,dy\,dz$, находящемся в окрестности точки (x, y, z). Другими словами, $|\psi|^2$ является теперь вероятностью, отнесенной к единице

объема, а не к единице длины. Эта интерпретация требует того, чтобы $\psi(\mathbf{r})$ была нормирована следующим образом:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz\, |\psi(\mathbf{r})|^2 = 1. \tag{20.23}$$

Среднее значение физической величины G, определяемое выражением

$$\bar{G} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi^* \mathbf{G} \psi, \tag{20.24}$$

заменяет выражение (20.19) для одномерного случая.

В одномерных задачах момент импульса частицы не имеет значения. Однако из классической механики (гл. 3) мы знаем, что при движении в трех измерениях момент импульса является важной величиной, и, судя по правилам квантования Бора (гл. 18), мы можем ожидать, что он будет иметь еще большее значение в волновой механике. Классическое соотношение

$$\mathbf{L} = [\mathbf{rp}]$$

наводит на мысль, что квантовомеханический оператор момента импульса должен быть равен

$$\mathbf{L} = [\mathbf{rp}] = \left[\mathbf{r} \frac{\hbar}{i} \nabla\right], \tag{20.25}$$

т. е.

$$\mathsf{L}_z = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \text{ и т. д.}$$

При движении в центральном потенциале $V(|\mathbf{r}|) = V(r)$, таком как кулоновский потенциал, выгодно работать со сферическими координатами r, θ, φ (рис. 20.9). Их связь с прямоугольными координатами дается соотношениями:

$$x = r \sin\theta \cos\varphi,\ y = r \sin\theta \sin\varphi,\ z = r \cos\theta. \tag{20.26}$$

Если компоненты $\mathbf{L}$ выразить в сферических координатах, то окажется, что они не зависят от r. В результате для L_x и L_y получаются довольно сложные комбинации производных по θ и φ, точный вид которых может быть получен с помощью уравнений (20.25) и (20.26). Но нас он здесь интересовать не будет. Однако выражение для L_z является вполне простым:

$$\mathsf{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \tag{20.27}$$

Можно также показать, что

$$\mathsf{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \qquad (20.28)$$

Волновые функции с определенным полным моментом импульса должны удовлетворять уравнению

$$\mathsf{L}^2\psi_l(\mathsf{r}) = L_l^2\psi_l(\mathsf{r}),$$

где L_l^2 являются собственными значениями. Мы не собираемся решать это уравнение, а просто обсудим некоторые необходимые требования, которым должно удовлетворять любое приемлемое решение. Одно из требований состоит в том, чтобы ψ была конечна (более точно, чтобы $\iiint dxdydz\,|\psi|^2 = 1$). Решения приведенного выше уравнения обнаруживают сильную тенденцию расходиться при $\theta = 0$ и $\theta = \pi$. Оказывается, что не расходятся только те решения, для которых константа L_l^2 принимает избранные значения $l\,(l+1)\hbar^2$, где l — неотрицательные целые числа: $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$ Мы видим опять, что момент импульса квантуется, но здесь уже это не предположение, как в теории Бора, а следствие необходимых физических ограничений математической формы волновой функции. (Наш результат слегка отличается от того, что дает теория Бора, которая не вполне корректна. Теория Бора дает значения $l^2\hbar^2$ вместо $l\,(l+1)\hbar^2$.)

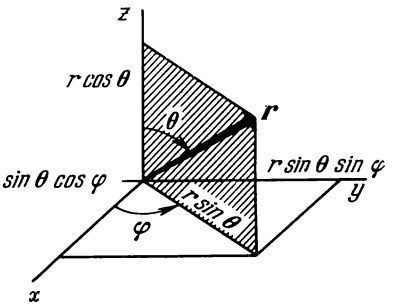


Рис. 20.9.

Квадрат полного момента импульса может принимать значения

$$L^2 = L_l^2 = l\,(l+1)\,\hbar^2. \qquad (20.29)$$

Какие значения *одной из компонент* момента импульса, например L_z, возможны при заданном значении l? Ответ может быть найден путем решения задачи на собственные значения:

$$\mathsf{L}_z\psi_m = L_{zm}\psi_m.$$

Постоянную L_{zm} принято обозначать через $m\hbar$, так что, используя уравнение (20.27), будем иметь

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_m}{\partial\varphi} = m\hbar\psi_m. \qquad (20.30)$$

Решение этого уравнения, очевидно, есть функция $\psi_m = C(r, \theta)e^{im\varphi}$, где $C(r, \theta)$ — произвольная функция от r и θ. Требование, чтобы вол-

новая функция была однозначной, т. е. чтобы она не изменялась при возрастании φ на 2π или на величину, кратную 2π, удовлетворяется лишь в том случае, если m является целым числом. Так как $L_z^2 < L^2$, то, следовательно, $m^2 < l(l+1)$. Поскольку m и l — целые числа, то максимальное значение m равно l, а минимальное значение $-l$. Другими словами z-компонента L может принимать лишь значения $m\hbar$, где m есть любое из $2l+1$ целых чисел: $-l, -l+1, \ldots, 0, \ldots l-1, l$. На рис. 20.10 продемонстрировано квантование L_z для $l=3$. Можно также показать, что если ψ является собственной функцией оператора L_z, так что эта компонента момента импульса имеет определенное значение $m\hbar$, то ψ не может быть в то же самое время собственной функцией L_x или L_y, т. е. другие компоненты не имеют определенных значений, хотя их средние значения, конечно, могут быть вычислены. Аналогично, если ψ является собственной функцией L_x, то собственные значения будут целыми, кратными $\hbar$, но теперь ψ не может быть собственной функцией ни оператора L_z, ни L_y. Этот вид симметрии, конечно, должен иметь место, так как обозначение оси буквой «z» является совершенно произвольным.

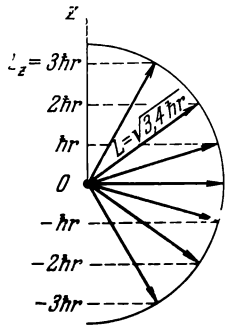


Рис. 20.10.

Имея выражение для оператора момента импульса в сферических координатах, мы можем сделать то же самое для оператора кинетической энергии. Здесь мы опустим алгебру и просто приведем результат:

$$\mathsf{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\mathsf{L}^2}{2mr^2}. \quad (20.31)$$

Мы уже доказали (уравнение (16.20)), что при отсутствии угловой зависимости оператор $-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2$ определяется первым членом только что приведенного выражения. Этот результат полезно сравнить с классическим (уравнение (3.27) или (3.28)):

$$T = \frac{1}{2m}p_r^2 + \frac{L^2}{2mr^2}, \quad \text{где } p_r = m\dot{r}.$$

Член $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}$, очевидно, соответствует кинетической энергии, обусловленной радиальным движением, в то время как $\mathsf{L}^2/2mr^2$ соответствует кинетической энергии углового движения.

§ 20.9. Постулаты квантовой механики

В этой главе мы ввели основные идеи квантовой механики, которые являются определяющими для всей современной физики. Дадим сводку этих основных принципов ввиду их огромной важности, а также имея в виду, что для читателя они не являются привычными.

Фундаментальные постулаты волновой механики:

1. Состояние физической системы *) определяется волновой функцией $\psi(x, y, z)$, которая должна быть однозначной, непрерывной, обладающей непрерывной первой производной и нормируемой:
$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi^* \psi = 1.$$

2. Любой наблюдаемой величине G в квантовой механике соответствует оператор $\mathbf{G}$.

3. Возможными результатами измерения физической величины G являются лишь собственные значения G_n соответствующего оператора $\mathbf{G}$: $\mathbf{G}\psi_n = G_n\psi_n$.

4. Среднее значение (математическое ожидание для серии измерений в идентичных системах) наблюдаемой величины G, когда система находится в состоянии, соответствующем волновой функции ψ (нормируемой), равно $\bar{G} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz\, \psi^* \mathbf{G} \psi$. Рецепт для нахождения квантовомеханического оператора, соответствующего данной физической величине, крайне прост: если классическая величина является функцией координаты $\mathbf{r}$ и импульса $\mathbf{p}$, то квантовомеханический оператор является той же функцией, но с заменой импульса $\mathbf{p}$ на оператор $\mathbf{p}$. Несколько простых примеров, иллюстрирующих эти рецепты, даны ниже.

Классическая величина	Квантовомеханический оператор	Классическая величина	Квантовомеханический оператор
$\mathbf{r}$	$\mathbf{r}$	$\mathbf{L} = [\mathbf{rp}]$	$\mathbf{L} = \left[\mathbf{r} \frac{\hbar}{i} \nabla\right]$
$\mathbf{p}$	$\frac{\hbar}{i} \nabla$	$E = \frac{p^2}{2m} + V(r)$	$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)$

Согласно третьему постулату возможными значениями энергии системы являются лишь собственные значения E_n оператора энергии

*) Точнее — бесспиновой частицы. Для других физических систем волновая функция может зависеть от иного числа других переменных. (*Прим. ред.*)

(оператора Гамильтона) H: $\mathsf{H}\psi_n = E_n\psi_n$, т. е. собственные значения, получаемые при решении уравнения Шредингера. Мы уже видели (§§ 20.5, 20.6), как наложение соответствующих граничных условий, согласующихся с ограничениями на волновую функцию и перечисленных в первом постулате, может привести к *дискретному* энергетическому спектру или квантованию энергии. Независимо от того, как сложна физическая система, программа нахождения допустимых энергетических состояний всегда одна и та же. Сначала мы выписываем оператор Гамильтона системы, а затем решаем уравнение Шредингера. В гл. 21 мы увидим, что собственные значения оператора Гамильтона для атома водорода в точности совпадают с энергетическими уровнями (уравнение (18.5)), выведенными из наблюдения спектра излучения водорода.

Задачи

20.1. Пронормировать (по образцу уравнения (20.3)) основное состояние волновой функции ψ_1, для частицы в ящике (уравнение (20.11)).

20.2. Для волновой функции задачи (20.1) вычислить вероятность нахождения частицы в интервалах между: а) $x = 0$ и $x = L/2$, б) $x = L/4$ и $x = {}^3/_4L$. Каково среднее значение величины x?

20.3. Повторить задачу (20.2) с волновой функцией ψ_8 (уравнение (20.11)).

20.4. В случае прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины (см. рис. 20.3) волновая функция определяется уравнениями (20.14), (20.17) и (20.18). Выписать уравнения, решения которых определяют постоянные A, B, C и D, а также собственные значения энергии.

20.5. Показать, что функции

$$\psi_1(x) = C_1 \exp(-x^2\sqrt{mK}/2\hbar), \psi_2(x) = C_2 x\psi_1(x)$$

удовлетворяют уравнению Шредингера с потенциалом $V(x) = {}^1/_2Kx^2$. Каковы здесь собственные значения энергии? Вычислить среднее значение x^2 для этих двух случаев.

20.6. Вычислить интервал между энергетическими уровнями гармонического осциллятора с частотой 440 *гц*.

20.7. Коммутатор операторов p и x определяется как $\mathsf{px} - \mathsf{xp}$. Его обозначают через $[\mathsf{p}, \mathsf{x}]$. Вычислить результат действия этого оператора на произвольную волновую функцию ψ.

20.8. Вычислить энергию основного состояния нейтрона, заключенного в одномерном ящике длины 10^{-12} *см*. (Это приближенно диаметр ядра.)

20.9. Доказать, что выражения (20.25) и (20.27) для L_z идентичны. *Указание*: начните с уравнения (20.27) и вспомните, что

$$\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi}.$$

20.10. Вывести выражения для L_x и L_y в сферических координатах.

Литература для справок

1. Бом Д., Квантовая теория, «Наука», 1965.
2. Блохинцев Д. И., Основы квантовой механики, «Высшая школа», 1961.
3. Гейзенберг В., Физические принципы квантовой теории, ГТТИ, 1932.

Часть четвертая

Электронная структура материи

В нескольких последних главах были введены законы квантовой механики. Одолев это введение, мы теперь в состоянии применить квантовую теорию для изучения электронной структуры атомов, молекул и твердых тел.

В квантовой механике не имеет смысла пытаться вычислить точные «траектории» или орбиты электронов в атоме. Принцип неопределенностей запрещает такие попытки. Единственно, на что можно надеяться, это корректно вычислить (и тем самым «объяснить») электронные энергетические уровни, выводимые из наблюдения спектров излучения. Мы найдем, что это действительно можно сделать. Точно так же как и в случае прямоугольной потенциальной ямы, допустимые дискретные энергетические уровни естественным образом вытекают из граничных условий, которые должны быть наложены на волновую функцию.

Однако тонкие детали наблюдаемого спектра могут быть поняты лишь после введения электронного «спина». Это означает, что в дополнение к орбитальному моменту импульса **L** *электрон, оказывается, имеет собственный момент импульса, как если бы он вращался вокруг своей оси. Идея спина, вводимая впервые в ч. IV, занимает весьма фундаментальное положение в современной физической теории и имеет бесчисленное количество важных практических следствий.*

Мы также поймем, как электроны распределяются по возможным энергетическим уровням и как атомы комбинируются в агрегатные состояния, такие как твердые тела. Отсюда естественным образом получается периодичность химических свойств элементов. Поскольку сложность изучаемых систем велика, некоторые соображения по необходимости будут иметь качественный характер. Действительно, точные теоретические расчеты большинства этих эффектов все еще не проделаны. Мы просто покажем, что идеи квантовой механики, развитые в ч. III, будут способны давать согласованную картину всех этих более сложных систем.

Глава 21

Атом водорода

Атом водорода образует простейшую атомную систему и в качестве таковой он играл решающую роль в истории современной физики как пробный камень для атомных теорий. Водород имеет единственный отрицательно заряженный электрон, обращающийся вокруг положительного заряженного ядра, называемого протоном, и его относительно простой спектр излучения может быть понят на основе представлений о допустимых энергетических уровнях, даваемых формулой (уравнение (18.5))

$$E_n = -13{,}6\frac{1}{n^2}\,эв, \qquad n = 1,\ 2,\ 3, \ldots$$

Любая корректная теория электронной структуры материи должна объяснить, почему эти и только эти энергетические уровни энергии являются дозволенными. Мы видели, что простая теория Бора (*гл. 18*) *дает эти уровни, но лишь при проделанном без какого-либо обоснования квантовании момента импульса* (*уравнение* (*18.10*)):

$$L = k\hbar; \quad k = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots$$

Теперь мы увидим, что уравнение Шредингера предсказывает тот же самый энергетический спектр, что и теория Бора. Это потребует довольно длинных математических выкладок. Кроме того, мы также увидим, что квантование момента импульса в волновой механике естественным образом возникает из требования конечности волновой функции.

§ 21.1. Уравнение Шредингера для атома водорода

В гл. 3 мы показали, что классическая задача двух тел идентична задаче об отдельном теле с «приведенной массой», движущемся в стационарном центральном силовом поле. Расстояние от силового центра соответствует расстоянию между телами. Подобный результат может быть доказан квантовомеханически. Так как масса протона m_p в 1836 раз больше массы электрона m_e, то приведенная масса очень близка к массе электрона; настолько близка, что мы будем в

дальнейшем игнорировать эту разность масс. Однако эта разность является реальной. Благодаря этому «тяжелый водород», или дейтерий, с массой ядра примерно вдвое большей, чем у обычного водорода, имеет слегка отличный энергетический спектр, точно соответствующий изменениям, вносимым приведенной массой (задача 18.6).

Потенциальная энергия электрона в кулоновском поле ядра равна

$$V(r) = -Ze^2/r, \tag{21.1}$$

где Ze — заряд ядра. Для водорода, конечно, $Z = 1$, но мы будем и в дальнейшем писать Z, так как результат для $Z > 1$ будет представлять интерес при обсуждении более тяжелых элементов и происхождения рентгеновских лучей. Тогда уравнение Шредингера согласно (20.22) и (20.31) будет иметь вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{1}{2mr^2}\mathbf{L}^2\psi-\frac{Ze^2}{r}\psi=E\psi. \tag{21.2}$$

Мы можем попытаться упростить это уравнение способом, аналогичным классической процедуре, использованной в § 5.2. Если волновая функция ψ соответствует состоянию с определенным моментом импульса, то согласно уравнению (20.29) мы будем иметь

$$\mathbf{L}^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi.$$

Данное выражение, если подставить его в уравнение Шредингера, приведет нас к обыкновенному дифференциальному уравнению по r, так как это уравнение не содержит производных по θ и φ. Если теперь записать волновую функцию $\psi(r, \theta, \varphi)$ в форме

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\,Y(\theta, \varphi), \tag{21.3}$$

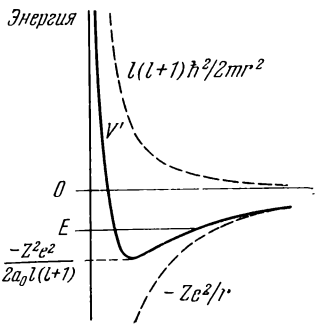


Рис. 21.1.

то ясно, что множитель $Y(\theta, \varphi)$ сокращается. В результате получается уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{dR}{dr}+\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}-\frac{Ze^2}{r}\right]R=ER. \tag{21.4}$$

Это уравнение, подобное уравнению (5.4), содержит постоянный момент импульса $L^2 = l(l+1)\hbar^2$. Те решения уравнения (21.4) с отрицательной энергией, которые удовлетворяют соответствующим граничным условиям при $r = 0$ и $r = \infty$, будут давать допустимые энергии электрона в атоме водорода.

Можно показать, что низшими энергетическими состояниями являются те, которым соответствуют малые квантовые числа l,

определяющие момент импульса. Это легче увидеть, объединив кинетическую энергию углового движения с потенциальной энергией в одно выражение—«эффективный потенциал» $V'(r)$ (сплошная линия на рис. 21.1) для радиального движения, подобно тому как это было сделано в (5.5):

$$V'(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} = \frac{e^2}{r}\left[-Z + \frac{l(l+1)a_0}{2r}\right], \qquad (21.5)$$

где $a_0 \equiv \hbar^2/me^2$ есть боровский радиус (уравнение (18.7)). Мы легко можем определить значение r, соответствующее минимуму этого потенциала:

$$0 = \frac{d}{dr}V'(r) = \frac{e^2}{r^2}\left[Z - \frac{l(l+1)a_0}{r}\right]$$

или

$$r = \frac{a_0 l(l+1)}{Z}. \qquad (21.6)$$

«Дно» эффективной потенциальной ямы поэтому определяется равенством (рис. 21.1)

$$V'\left(\frac{a_0 l(l+1)}{Z}\right) = \frac{Ze^2}{a_0 l(l+1)}\left[-Z + \frac{l(l+1)a_0}{2a_0 l(l+1)Z^{-1}}\right] = -\frac{Z^2e^2}{2a_0 l(l+1)}.$$

Так как полная энергия должна превосходить $V'(r)$ на кинетическую энергию радиального движения, то ясно, что

$$E > -\frac{Z^2e^2}{2a_0 l(l+1)} = -\frac{13{,}6\,Z^2}{l(l+1)}\ эв. \qquad (21.7)$$

Максимально возможная энергия связи $|E|$, как видно отсюда, быстро убывает с возрастанием l. Поэтому основное состояние волновой функции следует искать среди решений уравнения Шредингера с $l = 0$.

§ 21.2. Волновые функции и энергетические уровни при $l = 0$

Если мы определим γ через

$$\gamma \equiv \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar}} = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar}} \qquad (21.8)$$

и положим $l = 0$, то уравнение Шредингера (21.4) можно будет записать в форме

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2Z}{a_0 r}R = \gamma^2 R. \qquad (21.9)$$

Посмотрим сначала, какие выводы мы можем сделать из вида этого уравнения при очень больших r.

При очень больших r два члена, содержащих множитель $1/r$, могут быть опущены, и в этом случае дифференциальное уравнение сильно упрощается:

$$d^2R/dr^2 \approx \gamma^2 R.$$

Это уравнение имеет ту же самую математическую форму, что и уравнение (20.16). Общее решение этого приближенного уравнения при $r \to \infty$ имеет вид

$$R \approx Ae^{-\gamma r} + Be^{\gamma r}.$$

Эта волновая функция, очевидно, не нормируема, если только B не стремится к нулю, так как иначе она будет бесконечно расти с ростом r. Поэтому нам приходится принять, что волновые функции атома водорода асимптотически стремятся при больших r к $Ae^{-\gamma r}$. Отсюда нельзя сделать заключения, что A является строго постоянной, а лишь, что ее изменение в зависимости от r является медленным для больших r сравнительно с функцией $e^{-\gamma r}$.

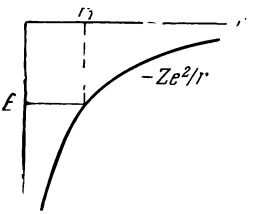


Рис. 21.2.

Посмотрим теперь на уравнение (21.9) при очень малых значениях r в области, где кинетическая энергия $T = E - V$ положительна. Это область $0 \leqslant r \leqslant r_1$, причем r_1 определяется следующим равенством (рис. 21.2):

$$E = -Ze^2/r_1 \quad \text{или} \quad r_1 = Ze^2/|E|.$$

Ясно, что данная область, где волновая функция является осциллирующей (ср. § 20.6), тем меньше, чем больше энергия связи $|E|$, т. е. она будет наименьшей для основного состояния атома. Мы можем, однако, ожидать, что радиальная волновая функция, соответствующая основному состоянию, не будет иметь узлов. Если мы попытаемся заключить внутри той же минимальной области r_1 волновую функцию с одним или большим числом узлов, то она будет более искривленной, что приведет к повышению энергии. Действительно, можно утверждать, что, чем больше узлов будет иметь функция R, тем меньше должна быть $|E|$ и тем больше r_1. Мы увидим, что это действительно справедливо. Также справедливо, что в атоме водорода возможен бесконечный (но дискретный) ряд энергетических уровней. Это имеет место, потому что $V(r)$ спадает так медленно, что всегда можно вставить в яму еще одну осцилляцию, т. е. еще один узел путем достаточного увеличения r_1 (при уменьшении $|E|$). Для потенциала с конечной глубиной и шириной это невозможно, и там имеется лишь конечное число связанных уровней.

Так как потенциал имеет форму r^{-1}, то возникает искушение попытаться искать решение уравнения Шредингера в виде полинома по r, умноженного на $e^{-\gamma r}$. Такого рода решение будет иметь корректное поведение $e^{-\gamma r}$ при очень больших r; и если полином будет иметь степень d, то он сможет иметь d нулей, т. е. узлов. Итак, наше пробное решение имеет вид

$$R_n = \sum_{i=0}^{n-1} C_i r^i e^{-\gamma r}, \qquad n \geqslant 1, \tag{21.10}$$

где C_i являются константами. Функция R_n имеет $d = n - 1$ узлов. Возьмем первую и вторую производные от R_n (уравнение (21.10)) и подставим полученные выражения в уравнение Шредингера (21.9):

$$\frac{d^2R_n}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR_n}{dr} + \frac{2Z}{a_0 r} R_n = \gamma^2 R_n.$$

Это даст соотношения, которым должны удовлетворять коэффициенты C_n, для того чтобы R_n действительно было решением. В результате получим

$$\sum_{i=0}^{n-1} C_i e^{-\gamma r}\left\{r^{i-1}\left[\frac{2Z}{a_0} - 2\gamma(i+1)\right] + r^{i-2} i(i+1)\right\} = 0. \tag{21.11}$$

Для того чтобы определить значения C_i, при котором это уравнение справедливо для всех r, надо переписать данное уравнение, объединив все коэффициенты при каждой степени r. Сумма всех последних членов в уравнении (21.11) может быть переписана следующим образом, если заменить индекс i на $j + 1$ (т. е. переменив индекс суммирования):

$$\sum_{j=-1}^{n-2} C_{j+1} e^{-\gamma r} r^{j-1}(j+1)(j+2).$$

Так как член с $j = -1$ исчезает из-за множителя $j + 1$, то суммирование в действительности начинается с $j = 0$. Так как согласно уравнению (21.10) также и $C_n = 0$, то мы можем расширить суммирование по j на пределы от $j = n - 1$ до $j = n - 2$. Заменив $\sum_{i=-1}^{n-2}$ на $\sum_{j=0}^{n-1}$ и подставив снова i вместо индекса j, получим для суммирования последних членов уравнения (21.11) выражение

$$\sum_{i=0}^{n-1} C_{i+1} e^{-\gamma r} r^{i-1}(i+1)(i+2).$$

Мы теперь можем объединить оба члена, так как индексы при C_i и степени r у них одни и те же. Уравнение (21.11) можно тогда переписать так:

$$\sum_{i=0}^{n-1} D_i r^{i-1} e^{-\gamma r} = 0,$$

где

$$D_i \equiv C_i 2\left[\frac{Z}{a_0} - \gamma(i+1)\right] + C_{i+1}(i+1)(i+2). \qquad (21.12)$$

Если эта сумма исчезает при *всех* значениях r, то каждый из коэффициентов D_i должен равняться нулю

$$D_i = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, n-1, \qquad (21.13)$$

или согласно уравнению (21.12)

$$C_{i+1} = C_i \frac{2\left[\gamma(i+1) - \frac{Z}{a_0}\right]}{(i+1)(i+2)}. \qquad (21.14)$$

Это *рекуррентная формула* для коэффициентов полинома (21.10). С ее помощью C_1 выражается через C_0, C_2 — через C_1 и, следовательно, через C_0 и т. д. Все коэффициенты C_i для $i > 0$ выражаются через C_0. Само C_0 вычисляется с помощью нормировочного интеграла (20.23), так что общее решение уравнения (21.10) полностью определено.

При очень больших значениях i из уравнения (21.11) вытекает, что

$$C_{i+1}/C_i \approx 2\gamma/i.$$

Найденное отношение коэффициентов было бы точным для коэффициентов разложения в бесконечный ряд функции $e^{2\gamma r}$. Поэтому мы не можем допустить, чтобы i становилось бесконечным, так как тогда функция R вела бы себя при больших r подобно функции $e^{2\gamma r}e^{-\gamma r} = e^{\gamma r}$, что, очевидно, недопустимо. Мы можем допустить в наших выражениях для R_n посредством рядов сколь угодно большие, но конечные целые значения n.

Тот факт, что ряды должны обрываться на некотором конечном числе n, приводит, как мы теперь видим, к определенным дозволенным значениям энергии, соответствующим каждому значению n. Наш полиномиальный множитель R_n оканчивается на r^{n-1}, т. е. коэффициент C_n исчезает:

$$C_n = 0, \qquad (21.15)$$

где n, как мы только что доказали, должно быть конечным. Если мы положим $i = n - 1$ в нашем выражении для D_i (уравнение (21.12)),

то найдем, что согласно уравнению (21.13)

$$0 = D_{n-1} = C_{n-1}\,2\left[\frac{Z}{a_0} - \gamma n\right] + C_n n\,(n+1).$$

Так как $C_n = 0$ (уравнение (21.15)), а $C_{n-1} \neq 0$ согласно предположению, то, следовательно,

$$\gamma = \gamma_n = Z/na_0. \tag{21.16}$$

Вспомнив определение γ (уравнение (21.8)), мы видим, что это условие означает следующее:

$$E = E_n = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2ma_0^2 n^2} = -\frac{e^2 Z^2}{2a_0 n^2} = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{13{,}6Z^2}{n^2}\,эв, \tag{21.17}$$

где n — любое конечное целое число, большее или равное единице (см. уравнение (21.10)), $n = 1, 2, 3, \ldots$

Это точно те же энергетические уровни, к которым мы пришли в теории Бора. Однако способ, которым были получены эти энергетические уровни, здесь совершенно иной. Квантование, как и в наших предыдущих примерах из волновой механики, следует из граничных условий на волновую функцию. Мы потребовали, чтобы ψ исчезала при $r = \infty$, и это привело к требованию, чтобы ряды для R_n представляли собой конечные полиномы. Это в свою очередь приводит к тому, что допустимым уровням энергии, как собственным значениям E_n, соответствуют собственные функции R_n. Боровские правила по сравнению с этими выглядят более произвольными. Но истинная мощь волновой механики, однако, не так очевидна, пока мы не перейдем к сложным системам, таким как атом с более чем одним электроном. Для таких систем теория Бора не может предсказать правильные значения энергетических уровней, в то время как волновая механика дает наблюдаемые уровни во всех случаях, когда математическая задача может быть решена с достаточной точностью. Как вы можете себе представить после прослеживания до конца простейшего случая ($l = 0$) для атома водорода, эти математические задачи чрезвычайно трудны.

Рассмотрим некоторые детали волновой функции основного и первого возбужденного состояний. Для основного состояния, $n = 1$, мы согласно уравнению (21.15) имеем $C_1 = 0$ и согласно уравнению (21.10)

$$R_1 = C_0 e^{-\gamma_1 r} = C_0 e^{-\frac{Zr}{a_0}}. \tag{21.18}$$

Как и следовало ожидать, эта волновая функция не имеет узлов. Для первого возбужденного состояния $n = 2$, $C_2 = 0$ (уравнение

(21.15)) и согласно уравнению (21.14) с $i = 0$ и уравнению (21.16) с $n = 2$

$$C_1 = C_0 \frac{2\left[\gamma_2 - \frac{Z}{a_0}\right]}{1 \cdot 2} = -C_0 \frac{Z}{2a_0}.$$

Это приводит в соответствии с уравнением (21.10) к выражению

$$R_2 = C_0 \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}. \tag{21.19}$$

Волновая функция здесь имеет один узел при $r = 2a_0/Z$. При $n = 3$ мы получили бы два узла, при $n = 4$ — три узла и т. д.

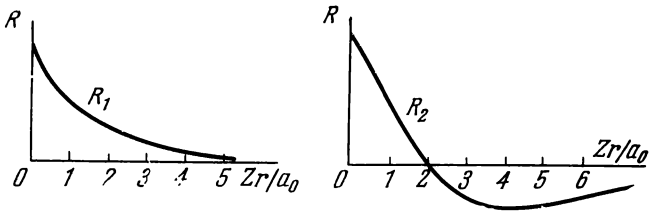


Рис. 21.3.

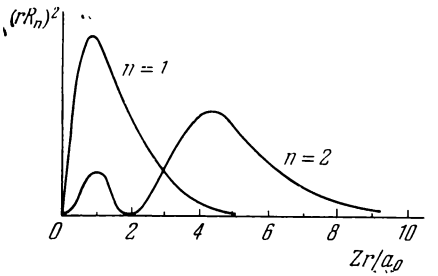


Рис. 21.4.

Для каждой функции постоянная C_0 определяется нормировочным интегралом (20.23), который для сферически симметричной волновой функции $\psi = R(r)$ может быть записан в форме

$$\int_0^\infty 4\pi r^2 dr \, |R|^2 = 1. \tag{21.20}$$

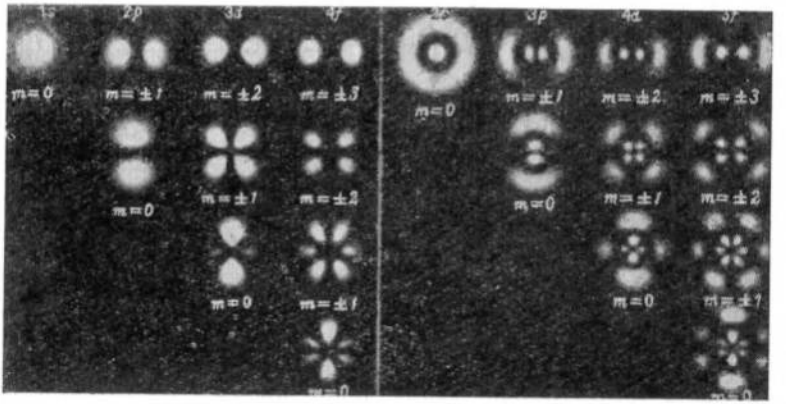
Функции R_1 и R_2 представлены на рис. 21.3.

Так как $|\psi|^2$ представляет собой вероятность на единицу объема, то вероятность нахождения электрона между r и $r + dr$ должна

равняться

$$4\pi r^2 dr\,|\psi|^2.$$

Для того чтобы определить наиболее вероятное радиальное расстояние для электрона, нам надо, таким образом, откладывать на графике функции $r^2R_n^2$, а не просто R_n^2. На рис. 21.4 (см. также фото



XII. Иллюстрация электронной плотности вероятности для низко лежащих энергетических состояний в атоме водорода.

XII) показана радиальная плотность вероятности $(rR_n)^2$ для электрона в состояниях с $n = 1$ и $n = 2$ в атоме водорода. Ясно, что при $n = 2$ электрон в среднем уходит дальше от протона ($\bar{r}$ больше), и это означает, что он менее прочно связан $\left(\bar{V} \sim \overline{\left(\frac{1}{r}\right)}\ \text{меньше}\right)$.

§ 21.3. Волновые функции и энергетические уровни при $l \geqslant 0$

В волновом уравнении (21.4) появляется дополнительный член $\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]R$. Так как этот член также представляет собой простую степень r, то и здесь можно ожидать, что решение будет иметь форму полинома по r, умноженного на $e^{-\gamma r}$. Так оно и оказывается. Имеется лишь та разница, что членом наинизшей степени полинома будет теперь r^l. Следовательно, чем больше l, тем меньше становится R при малых r и тем меньше вероятность найти электрон вблизи начала отсчета (т. е. ядра). Этот результат, согласующийся с картиной классических орбит, может быть понят качественно с помощью вида эффективного потенциала $V'(r)$ (см. рис. 21.1). Когда отталкивающая часть потенциала $V'(r)$, равная $l(l+1)\hbar^2/2mr^2$, увеличивается,

то электрон отталкивается все дальше по мере того, как точка пересечения V' и E движется в сторону больших r. Действительно, дно потенциальной ямы определяется выражением $a_0 l(l+1)/Z$ (уравнение (21.6)), так что среднее расстояние между электроном и ядром приблизительно пропорционально l^2.

Разрешенные энергетические уровни можно получить так же как и для $l = 0$ из требования того, чтобы решение имело вид степенного ряда по r с конечным числом членов. Дадим здесь конечный результат:

$$E_n = -\frac{e^2 Z^2}{2a_0 n^2}, \qquad n = l+1,\ l+2, \ldots \tag{21.21}$$

Эти энергетические уровни являются теми же самыми, как и при $l = 0$, но с ограничением $n \geqslant l+1$. Если E_n считать заданным, то это ограничение следует непосредственно из нашего результата для минимума $V'(r)$ (уравнение (21.7)):

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0 n^2} > -\frac{Z^2 e^2}{2a_0 l\,(l+1)}$$

или

$$n^2 > l\,(l+1).$$

Если n и l оба являются положительными целыми числами, то это требование в соответствии с уравнением (21.21) означает, что $n \geqslant l+1$.

Поэтому мы видим, что в основном состоянии имеется лишь одна волновая функция. Для этой функции $l = 0$ и $n = 1$, так что она не зависит от θ и φ, а ее радиальная часть не имеет узлов. Только выбирая волновую функцию как можно более гладкой, ее можно сконцентрировать в области, очень близкой к ядру, где потенциальная энергия велика и отрицательна. Для первого возбужденного состояния получатся уже две волновые функции, одна из которых (с $l = 0$ и $n = 2$) не зависит от θ и φ, но имеет один узел в радиальной части, а другая (с $l = 1$, $n = 2$) зависит от углов, но не имеет узлов в радиальной части. При $n > 2$ волновые функции еще более размножаются, причем пики величины $|\psi|^2 r^2$ с увеличением n сдвигаются все дальше и дальше от ядра, что приводит ко все меньшим и меньшим энергиям связи.

Если мы изобразим дозволенные энергетические уровни для $l = 1, 2, 3, \ldots$ согласно уравнению (21.21), то получим схему уровней, приведенную на рис. 21.5. Эта схема, конечно, идентична рис. 18.4, полученному из теории Бора, так как теория Бора способна давать для атома водорода правильные энергетические уровни. Может ввести в заблуждение то обстоятельство, что s-уровнями являются те, у которых $k = 1$, но $l = 0$; p-уровнями, у которых $k = 2$, но $l = 1$, и т. д. Так как квадрат момента импульса в волновой механике равен $l\,(l+1)\,\hbar^2$, а в теории Бора он равен $k^2\hbar^2$, то результаты будут отличаться, как бы ни сопоставлять друг с другом k и l. К сожалению,

обычно принимается $k = l + 1$, а не $k = l$. Однако источник такого рода расхождений не существен, так как квантовое число k никогда не встречается в волновой механике и надобности в его использовании нет вообще. Используются обычно буквы s, p, d и т. д.; они соответствуют $l = 0$, 1, 2 и т. д.

Мы видели, что наложение граничных условий на решения уравнения для собственных значений приводит, вообще говоря, к дискретному (счетному) набору собственных функций с соответствующими собственными значениями. Например, мы уже упоминали собственные значения оператора H для задачи об атоме водорода (уравнение (21.21)), собственные значения L^2 (уравнение (20.29)) и собственные значения L_z (уравнение (20.30)). В каждом случае собственные значения и собственные функции нумеруются набором целых чисел n, l и m соответственно для трех только что упомянутых случаев. Эти целые числа называются *квантовыми числами*. Может случиться, что волновая функция характеризуется более чем одним квантовым числом, если она одновременно является собственной функцией более одного оператора. Мы уже встречались с таким случаем: в центральном силовом поле, в котором сохраняется момент импульса, собственные функции энергии можно выбрать так, что они одновременно являются собственными функциями оператора момента импульса (т. е. энергия и момент импульса являются интегралами движения). Тогда для однозначного задания волновой функции должны быть заданы все три числа: n, l и m. В одномерных задачах, как мы показали, в случае частицы в ящике (§ 20.3) и гармонического осциллятора (§ 21.6) достаточно одного квантового числа — энергии.

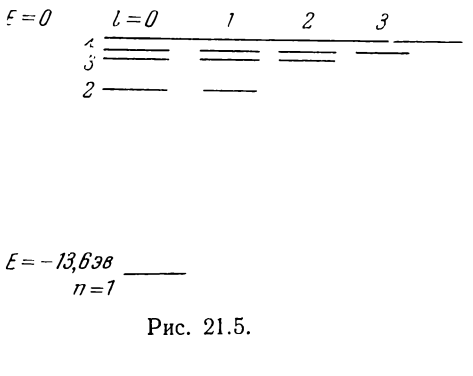


Рис. 21.5.

В задаче об атоме водорода три квантовых числа n, l, m имеют специальные наименования. Квантовое число n называется *главным квантовым числом*. Собственное значение L^2 характеризуется числом l, называемым *азимутальным* или орбитальным *квантовым* числом. Целое число m, которое определяет собственные значения L_z, называется *магнитным квантовым числом* по причинам, которые будут указаны ниже. Иногда оно называется орбитальным магнитным квантовым числом и обозначается через m_l, для того чтобы отличить его от спинового магнитного квантового числа m_s, которое будет введено в § 22.3 следующей главы.

Чтобы определить волновые функции атома водорода, необходимо задать все три числа, и волновую функцию нужно записывать как $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$. В § 21.2 мы явно рассматривали лишь те волновые функции, которые имели l и m равными нулю: $l = m = 0$. Они зависят лишь от радиальных функций R, так что

$$\psi_{n00} \sim R_n.$$

Может оказаться, что различным волновым функциям соответствуют одинаковые численные значения энергии. Мы встретились с таким случаем в задаче об атоме водорода: согласно уравнению (21.21) его энергетические уровни зависят только от главного квантового числа n, так что собственные функции ψ_{nlm} и $\psi_{nl'm'}$, имеющие одно и то же n, но различные азимутальные и магнитные квантовые числа, принадлежат одному и тому же энергетическому уровню. Такая ситуация называется *вырождением*. Вырожденным энергетическим уровнем называется такой, которому соответствует более одной волновой функции. Так, вырожденными являются все уровни атома водорода, кроме наинизшего. (Это утверждение будет несколько видоизменено, после того как мы обсудим спин электрона в § 22.3.) Говорят также о «вырожденных собственных функциях», когда собственные функции относятся к одному и тому же уровню энергии. Мы видели, что в одномерных задачах для связанных состояний вырождение не возникает. Но для несвязанных частиц вырождение может иметь место и при одномерном движении. Для свободного электрона обе волновые функции $\exp(ikx)$ и $\exp(-ikx)$ относятся к одному и тому же значению энергии $\hbar^2k^2/2m$.

Все центральные поля $V(r)$ обладают тем свойством, что собственные значения энергии для них не зависят от квантового числа m, поскольку сила, будучи сферически симметричной, не выделяет никакого z-направления. Поэтому энергетические уровни должны не зависеть от компоненты момента количества движения вдоль произвольно выбранной оси z, так что уровни будут вырождены по различным значениям m. Но независимость энергии от l, которую мы обнаружили для уровней атома водорода, имеет место только для r^{-1}, т. е. для кулоновского потенциала. При иной зависимости потенциала от r вырождение по l снимается, так что волновые функции с различными l при одних и тех же числах n уже не имеют одной и той же энергии. Например, электрон в тяжелом атоме (содержащем много других электронов) чувствует кулоновское поле ядра, искаженное электрическими полями остальных электронов, и энергетические уровни в этом случае зависят как от n, так и от l. Мы рассмотрим энергетические уровни тяжелых атомов в следующей главе (см. рис. 22.1). Если нарушается сферическая симметрия центрального потенциала, то снимается вырождение и по m. Такого рода возмущения потенциала можно достигнуть наложением вдоль оси z слабого

внешнего магнитного поля, за счет которого обсуждавшиеся нами энергетические уровни расщепляются, как мы увидим в следующей главе, на систему подуровней. Квантовое число m именно потому и называется магнитным, что магнитное поле расщепляет уровни с различными значениями m.

Резюме. Уравнение Шредингера предсказывает для атома водорода те же уровни, что и теория Бора. Однако в теории Шредингера энергетические уровни возникают как естественное следствие наложенных на волновую функцию граничных условий. Но по-настоящему превосходство шредингеровской волновой механики становится очевидным при переходе к более сложным атомным системам, где эта теория опять-таки предсказывает правильные энергетические уровни, в то время как теория Бора терпит фиаско. К сожалению, из-за математических трудностей нам приходится ограничиться лишь качественным, а не количественным обсуждением атомов с более чем одним электроном.

Задачи

21.1. Пронормировать волновые функции с $l = 0$, $n = 1$ и $n = 2$ (уравнения (21.18) и (21.19)).

21.2. Вычислить средние значения потенциальной энергии $-e^2/r$ (см. (20.24)) для двух состояний, соответствующих волновым функциям в задаче 21.1.

21.3. Вычислить средние значения радиальной координаты r электрона для двух волновых функций задачи 21.1. Выразить ответ через боровский радиус a_0.

21.4. Показать, что $\psi = Cre^{-r/2a_0}\cos\theta$ является собственной функцией оператора L^2, и определить квантовое число l. Показать, что эта функция удовлетворяет также уравнению Шредингера (21.2) для атома водорода. Чему равно собственное значение энергии?

21.5. Пронормировать волновую функцию в задаче 21.4.

21.6. Вычислить средние значения величин а) r, б) $-e^2/r$, в) L_z, г) p_z с волновыми функциями двух предыдущих задач.

21.7. Найти волновую функцию R_3 для электрона в атоме водорода с квантовыми числами $l = 0$, $n = 3$. Изобразить $(R_3 r^2)^2$ как функцию r. Где находится ее максимум (наиболее вероятное расстояние электрона от ядра)?

21.8. Показать, что две волновые функции $\psi = Cre^{-r/2a_0}\, e^{\pm i\varphi}\sin\theta$ удовлетворяют уравнению Шредингера (21.2) для атома водорода. Определить квантовые числа n и l. В чем состоит основное различие между этими волновыми функциями и волновой функцией в задаче 21.4?

21.9. Видимый спектр простирается приблизительно от 3800 Å до 7700 Å. Найти все переходы в атоме водорода, которые вызываются фотонами видимой части спектра.

21.10. Сравнить переход $n = 2 \to n = 1$ в атоме водорода с переходом $n = 4 \to n = 1$ в однократно ионизованном атоме гелия. Вычислить энергии фотонов при этих двух переходах, учитывая приведенную массу, но пренебрегая отдачей атомов.

Литература для справок

1. Бом Д., Квантовая теория, «Наука», 1965.
2. Гайтлер В., Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956.
3. Блохинцев Д. И., Основы квантовой механики, «Высшая школа», 1961.

Глава 22

Многоэлектронные атомы

Можно ожидать, что задача о вычислении энергетических уровней в атоме со многими электронами окажется исключительно трудной. Даже в классической механике динамика систем, содержащих более двух частиц, столь сложна, что для вычисления их траекторий приходится прибегать к численным методам. (Хорошим примером является Солнечная система.) Несмотря на это, однако, в задаче о многоэлектронном атоме удается сделать такие упрощения, за счет которых можно получить ряд хотя бы качественно справедливых выводов: ядро атома обладает большим зарядом и очень большой массой по сравнению с отдельным электроном и поэтому является естественным центром атома. В покоящейся изолированной системе частиц центр масс не движется (гл. 3). Так как в ядре в среднем с точностью до $2 \cdot 10^{-4}$ сосредоточена почти вся масса атома, то оно все время находится столь близко к центру масс, что ядерным движением можно полностью пренебречь. Таким образом, можно считать, что электроны движутся вокруг неподвижного ядра. Далее, поскольку в многоэлектронном атоме силы между ядром и электроном превышают силы между электронами, то представляется разумным (в первом приближении) пренебречь электрон-электронным взаимодействием. В этом «одноэлектронном приближении» каждый электрон движется независимо в общем кулоновском потенциале ядра. Это приближение действительно приводит к значительным упрощениям *).*

§ 22.1. Одноэлектронное приближение

Вообще говоря, система из Z электронов должна описываться Z-компонентной волновой функцией ψ (1, 2, 3,..., Z), где под 1 подразумеваются координаты 1-й частицы, под 2 — координаты 2-й

*) Авторы дают переупрощенную картину. На самом деле в «одноэлектронном приближении» (метод Хартри — Фока) кулоновские поля остальных электронов также учитываются. Их влияние называется экранированием, так как они снижают эффект действия поля ядра на больших расстояниях. Тем не менее приближение остается одночастичным, так как считается, что действие остальных электронов сводится к созданию постоянного самосогласованного поля. (*Прим. ред.*)

частицы и т. д. Уравнение Шредингера для многокомпонентной волновой функции формально идентично одноэлектронному уравнению (26.6), но многоэлектронный оператор Гамильтона является суммой операторов кинетических и потенциальных энергий каждого электрона. Вероятностная интерпретация, связанная с $|\psi|^2$, является аналогичной интерпретации функции распределения частиц, кратко обсуждавшейся в конце гл. 9. Так $|\psi(1, 2, 3, \ldots)|^2$ дает общую вероятность нахождения частицы 1 с координатами 1, частицы 2 с координатами 2, частицы 3 с координатами 3 и т. д. В действительности предыдущее утверждение до некоторой степени нуждается в небольшом уточнении. Следует сказать, что $|\psi(1, 2, 3, \ldots)|^2$ дает вероятность нахождения одного из электронов в точке 1, одного в точке 2, одного в точке 3 и т. д. Так как электроны являются совершенно *неразличимыми*, то никаким образом нельзя узнать, является ли частица в точке 1 1-м, 2-м или 3-м электроном. В действительности мы должны вообще отказаться от попыток идентифицировать индивидуальные электроны. Следствия этой неразличимости будут использованы в следующем параграфе, а также в гл. 26.

Для системы невзаимодействующих частиц общая вероятность нахождения какой-либо одной частицы в точке 1, а другой—в точке 2 и т. д. должна просто равняться произведению независимых одночастичных вероятностей нахождения одной частицы в точке 1, а другой частицы в точке 2. Соответствующая многокомпонентная волновая функция равняется поэтому просто произведению одночастичных, каждая из которых удовлетворяет одночастичному уравнению Шредингера:

$$\psi(1, 2, 3, \ldots, Z)=\psi(1)\psi(2)\ldots\psi(Z).$$

Уравнение Шредингера для одного электрона, движущегося в кулоновском поле ядра, уже было решено (гл. 21). Разрешенные энергетические уровни будут определяться уравнением (21.17)

$$E_n = -13{,}6Z/n^2 \text{ эв}. \tag{22.1}$$

Если между Z электронами отсутствовало бы взаимодействие, то каждый из них занял бы один из энергетических уровней, даваемых этим уравнением. Поэтому *состояние многоэлектронного атома в* одноэлектронном приближении будет полностью определено, если мы сможем указать, сколько из этих Z электронов заполняют каждый из дозволенных одноэлектронных энергетических уровней. Наинизшим энергетическим состоянием или основным состоянием, очевидно, должно было бы быть состояние, в котором каждый из Z электронов занимал бы одноэлектронный энергетический уровень с $n = 1$; $E_1 = -13{,}6\ Z^2$ *эв*. Тогда $|E_1|$ был бы равен энергии, необходимой для освобождения электрона из этома, т. е. *ионизационному*

потенциалу, пропорциональному Z^2. На самом деле такого возрастания ионизационного потенциала с ростом Z не наблюдается.

Например, для Hg с $Z = 80$ (см. табл. 2) мы должны были бы ожидать ионизационного потенциала, равного $13{,}6 \cdot 80^2 = 87\,000$ *эв*. В действительности измеренное значение составляет около 10 *эв* (см. табл. 3). Это огромное расхождение частично устраняется, если принять во внимание *принцип запрета Паули* (§ 22.2), согласно которому лишь *один* электрон может занимать любое данное одноэлектронное энергетическое состояние. Это означает, что не все 80 электронов Hg могут быть помещены на уровень с $n = 1$, а большинство из них должно располагаться на высших энергетических уровнях, так что 80-й электрон удалить из атома много легче. При применении принципа Паули мы должны принять во внимание тот до сих пор не учитываемый факт, что электрон обладает собственным *спиновым моментом* (§ 22.3), величина которого входит в характеристику состояния электрона. Сделав этот пересмотр, мы найдем (§ 22.4), что последний электрон в Hg будет находиться на энергетическом уровне, соответствующем $n = 6$. Предсказываемый ионизационный потенциал станет теперь равным $87\,000/6^2 = 2400$ *эв*. Хотя согласие становится лучше, эта величина все еще остается сильно отличной от экспериментального значения 10 *эв*. Количественное согласие может быть получено, лишь если принять во внимание электрон-электронные силы отталкивания, которые не учитываются в одноэлектронном приближении.

Мы только что видели, что одноэлектронное приближение, при котором взаимное отталкивание электронов не учитывается, неспособно давать количественные результаты для многоэлектронной задачи. Тем не менее одноэлектронное приближение годится, как очень удобная отправная точка. Мы можем все же выразить состояние тяжелого атома путем установления того, сколько электронов находится на каждом из этих одноэлектронных энергетических уровней, приняв во внимание спин электрона и принцип Паули, т. е. установить *числа заполнения* для каждого одноэлектронного состояния. Мы должны только помнить важный факт, что энергетические уровни, соответствующие этим состояниям, сдвинуты по сравнению со значениями, вычисленными нами для атома водорода (гл. 21), поскольку имеется взаимное отталкивание электронов. Это отталкивание будет принято во внимание в § 22.4.

§ 22.2. Принцип запрета Паули

Рассмотрим двухэлектронную систему в одноэлектронном приближении, введенном в предыдущем параграфе, т.е. в приближении, в котором силы отталкивания между электронами не учитываются. Пусть a означает набор квантовых чисел (n, l, m) одного электрона, а

b — соответствующие квантовые числа другого. Волновую функцию первого из этих электронов обозначим через ψ_a, а волновую функцию другого—через ψ_b. Двухчастичная волновая функция, соответствующая тому, что частица 1 (с координатами, сокращенно обозначаемыми через 1) занимает состояние a, а частица 2 занимает состояние b, должна была бы представлять собой произведение $\psi_a(1)\,\psi_b(2)$. Однако мы не знаем, что именно частица 1 находится в состоянии a; в этом состоянии равным образом может находиться и частица 2. В таком случае двухэлектронная волновая функция была бы равна $\psi_a(2)\,\psi_b(1)$. Как же тогда должна быть записана корректная двухчастичная волновая функция $\psi(1, 2)$, выраженная через одночастичные функции ψ_a и ψ_b?

Так как эти две частицы неразличимы, то мы должны потребовать, чтобы при формальной перестановке частиц не происходило бы никаких видимых изменений. Следовательно, плотность вероятности $|\psi(1, 2)|^2$ должна быть равна плотности вероятности с переставленными местами частицами $|\psi(2, 1)|^2$ или

$$\psi(2, 1) = \pm\psi(1, 2). \tag{22.2}$$

Ни функция $\psi_a(1)\,\psi_b(2)$, ни функция $\psi_a(2)\,\psi_b(1)$ не обладают требуемой уравнением (22.2) симметрией. Поэтому мы должны попытаться сконструировать волновую функцию, которая описывала бы одну частицу в состоянии a и одну в состоянии b, но вместе с тем имела бы необходимую симметрию по отношению к перестановке частиц. Так как $\psi_a(2)\,\psi_b(1)$ получается из $\psi_a(1)\,\psi_b(2)$ перестановкой координат 1 и 2, и наоборот, то ясно, что сумма этих двух функций

$$\psi_a(1)\,\psi_b(2) + \psi_a(2)\,\psi_b(1)$$

не изменяется при перестановке координат и поэтому удовлетворяет уравнению (22.2) со знаком плюс. Легко видеть, что разность

$$\psi_a(1)\,\psi_b(2) - \psi_a(2)\,\psi_b(1)$$

аналогично удовлетворяет уравнению (22.2) со знаком минус. Поэтому эти две комбинации одночастичных волновых функций являются единственно приемлемыми для неразличимых частиц, удовлетворяющих уравнению (22.2).

Линейную комбинацию $\psi_a(1)\,\psi_b(2) - \psi_a(2)\,\psi_b(1)$ называют *антисимметричной*, а $\psi_a(1)\,\psi_b(2) + \psi_a(2)\,\psi_b(1)$ — *симметричной* по отношению к перестановке частиц. Априори неясно, какая из этих двух возможностей должна быть использована для электронов. В действительности эмпирически найдено (как мы увидим ниже), что волновые функции для электронов (и для многих других частиц, таких как протоны и нейтроны) являются *антисимметрич-*

ными по отношению к перестановке двух частиц. Так что двухэлектронная волновая функция в одноэлектронном приближении равна

$$\psi(1, 2) = \psi_a(1)\,\psi_b(2) - \psi_a(2)\,\psi_b(1). \qquad (22.3)$$

С другой стороны, для описания совокупности фотонов, π-мезонов и других мезонов следует использовать симметричные волновые функции.

Посмотрим теперь, чему равна вероятность нахождения обоих электронов в одном и том же состоянии, т. е. при $a = b$. Согласно уравнению (22.3):

$$\psi(1, 2) = \psi_a(1)\,\psi_a(2) - \psi_a(2)\,\psi_a(1) \equiv 0.$$

Отсюда мы заключаем, что вероятность существования двух электронов в одном и том же состоянии тождественно равна нулю. В этом состоит содержание принципа запрета Паули: *два электрона не могут находиться в одном и том же квантовомеханическом состоянии.* Так как мы доказали, что мы знаем все, что только можно знать о частице, если знаем ее волновую функцию, то это означает, что волновые функции двух электронов не могут быть идентичными. Мы видели, что в случае центрального потенциала зависимость волновой функции от φ имеет вид $e^{im\varphi}$ (20.30) и определяется квантовым числом m. Аналогично при заданном m число l определяет зависимость волновой функции от θ (уравнения (20.28) и (20.29)) и при заданном l зависимость от r определяется числом радиальных узлов или числом n, поскольку $n - (l + 1)$ дает это число узлов. Поэтому три квантовых числа n, l и m полностью определяют зависимость волновой функции электрона от пространственных координат. (Однако оказывается, что электрон имеет еще одну степень свободы — направление его «*собственного момента импульса*» или «*спина*»; видоизменения, требуемые введением этой новой переменной будут обсуждены в следующем параграфе.)

Принцип Паули в его наиболее общей форме выражается утверждением, что многочастичная волновая функция является *антисимметричной*, т. е. меняет знак при перестановке любых двух частиц. Слова о том, что электроны, протоны и нейтроны подчиняются принципу Паули, эквивалентны утверждению, что они имеют антисимметричные волновые функции. В одночастичном приближении задачи многих частиц мы видели, что из принципа Паули следует, что две частицы не могут занимать одно и то же одночастичное состояние, и в этом состоит смысл наименования его принципом «запрета». Все наше последующее рассмотрение будет основываться на одночастичном приближении, но важно видеть, каким образом принцип Паули возникает как фундаментальное следствие неразличимости элементарных частиц. На такие частицы, как фотоны и мезоны, которые не

подчиняются принципу Паули, налагается сходное ограничение: их волновые функции должны быть симметричными. Это ограничение, однако, не влечет за собой какого-либо «запрета» в одночастичном приближении.

§ 22.3. Спин электрона

Тот факт, что электрон обладает собственным моментом импульса, как если бы он вращался вокруг своей оси, был впервые установлен Уленбеком и Гаудсмитом (1926 г.) из наблюдения расщепления некоторых спектральных линий на «*спиновые мультиплеты*». Каким образом спин электрона создает это расщепление, мы будем обсуждать в следующей главе. Здесь достаточно сказать, что наблюдаемое расщепление согласуется с представлениями об операторе спинового момента импульса $\mathbf{S}$, квадрат которого, действуя на любую электронную волновую функцию ψ дает следующее равенство:

$$\mathbf{S}^2\psi = s(s+1)\hbar^2\psi, \tag{22.4}$$

где $s = 1/2$. Уравнение (22.4) формально является тем же самым, что и уравнение (20.29), за исключением того, что s всегда равно 1/2. Как и в случае орбитального момента импульса, оказывается (это не очевидно и вам придется поверить нам на слово), что данная компонента $\mathbf{S}$, скажем $\mathbf{S}_z$, может иметь лишь собственные значения $m_s\hbar$ с m_s, имеющим минимальное значение — s (т. е. — 1/2) и максимальное значение + s (т. е. + 1/2). Возможные собственные значения $\mathbf{S}_z$ подобно собственным значениям $\mathbf{L}_z$ отличаются на целое число $\hbar$, что ограничивает m_s двумя значениями — 1/2 и 1/2. Так как s всегда равно 1/2, то зависимость волновой функции от спиновой координаты определяется значением m_s. При заданной пространственной зависимости волновой функции, характеризуемой числами n, l и m, нужно задать лишь значение m_s, для того чтобы состояние электрона было определено единственным образом.

Мы ввели спин как оператор, для того чтобы сохранить соответствие с нашей общей трактовкой квантовомеханических наблюдаемых как операторов. Здесь в дальнейшем, однако, мы не будем интересоваться точной математической формой оператора $\mathbf{S}$ и явным видом зависимости ψ от спиновой переменной или, что то же, от квантового числа m_s. Достаточно представлять себе, что каждое состояние электрона зависит в дополнение к квантовым числам, обсуждавшимся в § 21.3, еще от квантового числа m_s, которое может принимать лишь два возможных значения $\pm$ 1/2. Наглядная интерпретация этого квантового числа состоит в том, что электрон обладает собственным спиновым моментом, z-компонента которого может принимать значения $m_s\hbar$, т. е. $+\hbar/2$ или $-\hbar/2$. Часто эти два состояния описываются словами «спин вверх» и «спин вниз», соответ-

ственно, подразумевая, что электрон имеет z-компоненту спинового момента в $+z$-направлении или $-z$-направлении, соответственно. Для каждого из рассмотренных ранее состояний мы должны теперь дополнительно учитывать, направлен спин вверх или вниз.

Наблюдаемые следствия существования спина электрона, некоторые из которых и привели впервые к выдвижению концепции спина, будут рассмотрены более детально ниже. Здесь мы можем отметить те изменения развитой нами теории, которые вызываются влиянием спинового квантового числа m_s. Во-первых, рассмотренные в предыдущем параграфе требования на симметрию волновой функции и принцип Паули должны быть видоизменены. Мы должны теперь понимать символы a и b как сокращенные обозначения для четырех квантовых чисел n, l, m, m_s вместо трех; и перестановка 1 и 2 должна включать спиновую переменную, так же как и три пространственные переменные r, θ, φ. Тем самым уравнение (22.2) должно быть справедливым, когда все координаты электрона, включая спиновую, переставляются. Далее, принцип Паули, выраженный уравнением (22.3), будет теперь содержать утверждение, что *два электрона в атоме не могут иметь один и тот же набор квантовых чисел* n, l, m, m_s. Вполне может случиться, что два электрона обладают одной и той же пространственной волновой функцией, если антисимметрия всего состояния является следствием различия значений m_s. Например, два электрона могут иметь в основном состоянии волновую функцию, задаваемую выражением (21.18), при условии, что спин одного из них направлен вверх ($m_s=+1/2$), а спин другого — вниз ($m_s=-1/2$). Во всех одноэлектронных состояниях, описанных ранее, принцип Паули позволяет находиться двум электронам с противоположными спинами.

Существование спина влияет также на появление вырождения. Энергия электрона в ряде случаев может не зависеть от ориентации его спинового момента m_s, так же как она не зависит от z-компоненты орбитального момента m в центральном потенциальном поле. Все состояния атома водорода являются дублетами: у каждой пространственной волновой функции имеется одно состояние со спином вверх и другое — со спином вниз. Даже основное состояние с $l=0$ и $m=0$ является вырожденным, так как m_s может быть равным как $+1/2$ так и $-1/2$. Состояния электрона в одномерных задачах также вырождены в соответствии с двумя возможными ориентациями спина. Однако при наложении слабого магнитного поля спиновое вырождение, подобно орбитальному по m, снимается. Вытекающее отсюда расщепление энергетических уровней в магнитном поле проявляется в спектрах излучения. Впредь, когда мы будем упоминать о *состоянии* электрона, мы будем подразумевать его пространственную волновую функцию плюс ориентацию его спина. Говоря же о *волновой функции*, мы будем обычно иметь в виду лишь ее пространственную

часть, которая зависит от переменных r, θ, φ или x, y, z. Так что каждой волновой функции соответствуют два состояния — со спином вверх и вниз.

Энергетический уровень является вырожденным, если ему соответствует более чем одно состояние.

Имеется тесная связь между спином частицы и симметрией ее состояний. Все частицы, которые имеют спин 1/2, удовлетворяют принципу Паули, т. е. имеют антисимметричные состояния. Отмеченные выше частицы, имеющие симметричные состояния, не подчиняющиеся принципу Паули, имеют спин 0 или 1. Эта связь простирается очень далеко, так что целый спин всегда ассоциируется с симметричными состояниями, а полуцелый спин (1/2, 3/2 и т. д.) ассоциируется с антисимметричными состояниями. Однако для наших целей достаточно отметить, что электроны, протоны и нейтроны имеют спин 1/2 и подчиняются принципу Паули.

§ 22.4. Оболочечная структура атомов

Попытаемся вообразить, что случится, если прибавлять электроны по одному до тех пор, пока вокруг ядра не окажется Z электронов, так что оно превратится в нейтральный атом. Если бы между электронами не было взаимодействия, то каждый из них двигался бы независимо от остальных в потенциале $V = -Ze^2/r$, что означало бы, что дозволенными энергетическими уровнями являются как раз те, которые были уже вычислены для случая одного электрона (21.1). Без принципа Паули основное состояние этой атомной системы имело бы энергию $-Z^2 \cdot 13{,}6$ *эв*. Однако согласно принципу Паули это невозможно. При $n = 1$ мы будем иметь $l = 0$ (21.21) и, следовательно, $m = 0$ (§ 20.8), так что согласно принципу Паули лишь два электрона, соответствующих двум возможным значениям m_s, могут занимать этот уровень.

При бóльших значениях n энергетические уровни могут содержать более двух электронов. При двух значениях m_s и $2l + 1$ значениях m (§ 20.8) очевидно, что на один и тот же энергетический уровень можно поместить $2(2l + 1)$ электронов с одним и тем же значением l. Поскольку при заданном n число l может принимать значения 0, 1, 2, ..., $n - 1$ (21.21), то полное число различных комбинаций трех квантовых чисел l, m и m_s при данном n должно равняться сумме n членов:

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2[1 + 3 + 5 + \ldots + 2n-1] =$$

$$= 2\,\frac{n[1 + (2n-1)]}{2} = 2n^2.$$

Таким образом можно поместить 2 электрона на уровень с $n = 1$ (как мы уже видели), 8 — на уровень $n = 2$, 18 — на уровень $n = 3$, 32 на уровень $n = 4$ и т. д. Такая схема означает, что мы будем иметь атомы с заполненными уровнями, т. е. с *замкнутыми оболочками* при $Z = 2$, $Z = 2 + 8 = 10$, $Z = 10 + 18 = 28$, $Z = 28 + 32 = 60$ и т. д.

Такие атомы с замкнутыми оболочками должны очень сильно отличаться от атомов с числом электронов Z на один или два бо́льшим. Добавляемые один или два электрона должны заполнять следующую высшую оболочку (большее n), и энергия связи самого крайнего электрона, т. е. ионизационный потенциал, должна быть много меньше, чем для атомов с замкнутыми оболочками. Можно также ожидать, что атомы с одним электроном сверх замкнутой оболочки, такие как с $Z = 3$ и $Z = 11$, будут иметь много общего между собой. В частности, можно ожидать, что они будут иметь сходные химические свойства и сходные оптические свойства, поскольку, как мы увидим ниже, именно внешние электроны являются в основном ответственными за химические и оптические свойства. В отношении атомов с двумя электронами сверх замкнутых оболочек также можно ожидать, что они будут обладать сходными свойствами и т. д. Это приводит к определенной периодичности элементов.

Такая периодическая структура была давно известна химикам, которые годами исследовали это сходство элементов. Элементы с замкнутыми оболочками представляют собой тесно связанные структуры, относительно невосприимчивые к влиянию других атомов. Это — инертные или благородные газы: He, Ne, Ar, Kr и Xe. Они химически инертны и имеют высокие ионизационные потенциалы. Атомы с одним электроном сверх замкнутой оболочки являются щелочными металлами: Li, Na, K, Rb и Cs. Они имеют низкие ионизационные потенциалы. Эти атомы легко отдают внешние, слабо связанные «валентные» электроны другим атомам. Они с особенной готовностью отдают этот электрон водороду или галогенам F, Cl, Br и I, которые имеют атомную структуру, состоящую из заполненной оболочки минус один электрон.

Две первые замкнутые оболочки соответствуют $Z = 2$ (He) и $Z = 10$ (Ne), как мы и предсказывали. Однако следующими благородными газами являются не те, которые стоят в нашем перечне, с $Z = 28$ (Ni) и $Z = 60$ (Nd). Вместо этого далее следуют Ar с $Z = 18$, Kr с $Z = 36$ и Xe с $Z = 54$. Как можно понять это несоответствие? Ответ заключается в несостоятельности одноэлектронного приближения, а именно в *эффекте экранирования* остальных электронов. Ясно, что энергетические уровни не могут правильно описываться формулой $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} 13{,}6$ *эв* (22.1), если принять во внимание эффекты взаимодействия электронов друг с другом. Например,

электрон в третьей оболочке будет ощущать кулоновское поле ядра ослабленным или «экранированным» электронами двух внутренних оболочек. Можно было бы предположить, что энергетический уровень этого электрона будет лучше описан при замене Z^2 на $(Z-10)^2$ в формуле для E_n. В действительности экранировка не полная, так как волновая функция электрона в третьей оболочке частично проникает во внутренние оболочки. Из наблюдения рентгеновских лучей (гл. 23) следует, что наилучшее приближение для энергетического уровня $n=3$ получается при подстановке $(Z-8{,}2)^2$ вместо Z^2. Это, очевидно, поднимает энергетический уровень намного выше значения, даваемого формулой

$$E_3 = -13{,}6\frac{Z^2}{3^2}\ эв.$$

Имеются также важные различия в энергетических уровнях внутри группы электронов с одним и тем же значением n, в отличие от сделанного нами ранее предположения. Электроны с большим орбитальным моментом экранируются более эффективно, чем электроны с малым моментом. Качественно это может быть понято из рассмотрения зависимости $V'(r)$ от l (уравнение (21.5) и рис. 21.1), где показано, что чем больше значение l, тем дальше в среднем уходит электрон от ядра. Тот же эффект с классической точки зрения представлен на рис. 18.4. Электроны с большими l будут поэтому ощущать меньший эффективный заряд ядра, что повышает их энергетические уровни по сравнению с электронами, имеющими малые l при том же самом значении n. Теперь мы можем изобразить схему энергетических уровней для типичного многоэлектронного атома (рис. 22.1) и сравнить ее с соответствующей схемой уровней (рис. 21.5) для водорода. Ясно, что такая перегруппировка энергетических уровней может привести к отличию оболочечной структуры от той, которую мы получили раньше. Например, уровень с $n=3$, $l=2$ достигает или даже превышает уровень с $n=4$, $l=0$. Аналогично уровень $n=4$, $l=2$ может подняться выше уровня $n=5$, $l=0$; уровни с $n=4$, $l=3$ и $n=5$, $l\geqslant 2$ могут подняться выше уровня $n=6$, $l=0$ и т. д.

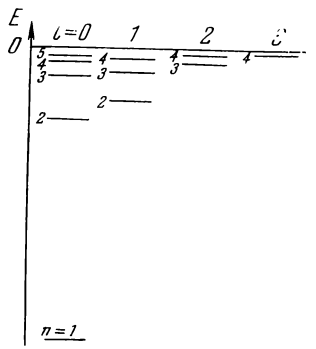


Рис. 22.1.

Если это произойдет, то первые две оболочки останутся неизменными и по-прежнему будут содержать 2 и 8 электронов соответственно: благородные газы He ($Z=2$) и Ne ($Z=10$). Однако третья

оболочка состоит из подуровней $l = 3$, $n = 0$ и $n = 1$, $l = 1$ и содержит всего лишь $2 + 6 = 8$ электронов. Этим объясняется, почему аргон ($Z = 18$) является благородным газом. Четвертая оболочка будет состоять из подуровней $n = 3$, $l = 2$ и $n = 4$, $l = 0$ и $l = 1$, соответственно, с 10, 2 и 6 электронами. Всего эта оболочка будет содержать 18 электронов. Прибавляя сюда 18 электронов из предыдущей оболочки, мы получим, что очередному благородному газу должно соответствовать $Z = 36$. И действительно, криптон ($Z = 36$) является благородным газом. Пятая оболочка состоит из электронных уровней $n = 5$, $l = 0$ и $l = 1$, а также и $n = 4$, $l = 2$, на которых подобно четвертой оболочке могут разместиться 18 электронов. Поэтому, когда пятая оболочка заполнена, мы получим $Z = 54$, т. е. благородный газ ксенон. Щелочными металлами с одним электроном сверх замкнутых оболочек являются Li ($Z = 3$), Na ($Z = 11$), K ($Z = 19$), Rb ($Z = 37$) и Cs ($Z = 55$).

Аналогично галогенами с замкнутыми оболочками минус один электрон являются: F ($Z = 9$), Cl ($Z = 17$), Br ($Z = 35$) и I ($Z = 53$).

С помощью соображений такого рода можно понять всю периодическую систему элементов (см. табл. 2) на основе принципа Паули и перегруппировки водородоподобных энергетических уровней за счет частичного экранирования ядра электронами внутренних оболочек.

§ 22.5. Периодическая система

Если бы мы могли приписать определенное значение чисел n, l, m и m_s каждому электрону в атоме, то электронное состояние было бы полностью определено. Однако, как мы видели, квантовые числа m и m_s не влияют на энергетические уровни (пренебрегая малыми магнитными эффектами, обсуждаемыми ниже). По этой причине удобнее описывать электронную конфигурацию, подсчитывая, сколько электронов занимают каждый энергетический уровень в соответствии с возможными комбинациями квантовых чисел n и l. Кроме того, принято выражать n его числовыми значениями, а l — буквами алфавита, как уже отмечалось в связи с уравнением (18.5). Этот код очень прост: уровни $l = 0$, 1, 2, 3, 4, 5,... обозначаются через s, p, d, f, g, h, ... в алфавитном порядке после f. Историю происхождения первых четырех букв мы поймем при обсуждении оптических спектров атомов (гл. 23).

Число электронов с одним и тем же набором чисел n и l дается верхним индексом. Так $1s^2$ обозначает наличие электронов на уровне $n = 1$ и $l = 0$ (s-уровень) и тем самым описывает конфигурацию гелия, в то время как $1s^22s^1$ описывает конфигурацию лития ($Z = 3$) с одним электроном на уровне $n = 2$, $l = 0$, «прибавленным» к оболочке гелия. (В действительности, когда есть лишь один электрон с

данными n и l, индекс 1 обычно опускается.) Благородный газ неон ($Z = 10$) в основном состоянии имеет конфигурацию $1s^2 2s^2 2p^6$, аргон ($Z = 18$) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ и т. д. Конфигурация всех встречающихся в природе элементов перечислена в табл. 3.

При заполнении атомных оболочек и формировании различных элементов, как видно из табл. 3, уровни $n + 1$, l всегда выше уровней n, l и поэтому заполняются позднее. Далее, как было объяснено в § 22.4, уровень n, $l+1$ всегда выше уровня n, l за счет большего экранирования электронами с высшими орбитальными моментами. Однако эти закономерности не являются достаточными, для того чтобы определять порядок, в котором заполняются уровни при наличии экранирования.

Простое правило, которое дает возможность запомнить этот порядок, состоит в следующем: уровень $n + 1$, $l - 1$ заполняется непосредственно после уровня n, l. Например, это правило дает последовательность (табл. 3) $3d$, $4p$, $5s$, ведущую от Sc ($Z = 21$) до Sr ($Z = 38$). После $5s$ ($l = 0$) это правило становится неприемлемым, поскольку нет уровня с $l = -1$. Мы тогда начнем снова с низшего, все еще не заполненного уровня n, l, в данном случае с $4d$, так как уровня $3f$ нет.

Следующая последовательность — это $4d$, $5p$, $6s$. Затем мы опять останавливаемся и снова начинаем с $4f$, получая последовательность $4f$, $5d$, $6p$, $7s$. Затем начинаем с $5f$, так как уровня $4g$ уже нет. Хотя это правило и является полезным для желающих уметь восстановить общую форму периодической системы по памяти, но оно не имеет глубокого смысла.

В частности, имеются небольшие отклонения от общего порядка, устанавливаемого этим правилом. Эти отклонения возникают за счет того, что порядок следования энергетических уровней до некоторой степени зависит от того, сколько электронов эти уровни занимают. Так Ca ($Z = 20$) имеет $4s$-уровень ниже (пустого) $3d$-уровня, в то время как для Zn ($Z = 30$) с заполненным $3d$-уровнем порядок следования становится обратным (см. табл. 3). Этот эффект объясняет одновалентность металлов Cu, Ag, Au в группе IB периодической системы и двухвалентность металлов Zn, Cd, Hg в группе IIB. У Cu уровни $4s$ и $4d$ столь близки, что Cu временами проявляет валентность 2 вместо 1.

Другая менее заметная аномалия аналогичного сорта встречается у Cr, Nb и Pt. Это правило также временно нарушается, начиная с La ($Z = 57$), у которого один электрон занимает уровень $5d$, перед тем как заполнится оболочка $4f$, что ведет к образованию редких земель; аналогичное нарушение имеет место у Ac, где один электрон заполняет уровень $6d$ до заполнения $5f$-оболочки. Однако порядок снова возвращается к нормальному, когда p-оболочка заполняется, образуя благородный газ.

§ 22.6. Квантовые числа состояния электрона

Мы классифицировали конфигурацию электронов в многоэлектронных атомах с помощью чисел заполнения для энергетических уровней с различными n, l, и на основе этой конфигурации сумели понять главные особенности периодической системы. В действительности, однако, мы не можем практически подвинуться далее и определить значения m и m_s для каждого электрона, поскольку одноэлектронные состояния не являются точными собственными функциями оператора Гамильтона, если принять во внимание электрон-электронное взаимодействие (экранирование). Тем не менее, для того чтобы классифицировать состояние атома более точно, кое-что можно сказать и о моменте импульса электронов. Использование этой классификации оправдывается тем, что она приводит к наблюдаемым эффектам, которые обнаруживаются в основном в оптических спектрах атомов (гл. 23).

Эмпирическое обоснование введения следующих квантовых чисел вытекает из того факта, что наблюдаемые энергетические уровни с заданными n, l сами расщепляются на относительно близко сгруппированные подуровни, переходы между которыми приводят к появлению спектральных линий, описываемых в следующей главе. Энергетические разности или расщепление уровней возникают из-за того, что вращение электрического заряда создает магнитный дипольный момент, подобно замкнутому контуру с током. Этот магнитный диполь может взаимодействовать с приложенным магнитным полем, как уже отмечалось ранее.

Кроме того, магнитный диполь, создаваемый орбитальным моментом, может взаимодействовать с магнитным диполем, создаваемым спином электрона.

За счет этих двух эффектов электронная конфигурация может расщепляться на подуровни, которые обусловливают тонкую структуру оптических спектров. Хотя электронная конфигурация, задаваемая числами n, l, и определяет грубые свойства оптических спектров и периодичность химических свойств элементов, тонкие детали спектров зависят от магнитных эффектов, связанных с моментом электрона. Так как нереально пытаться установить значения m и m_s для каждого электрона, то мы должны искать другие пути описания момента импульса электронов в атоме.

Цель данного параграфа состоит в том, чтобы изложить некоторые такие приближенные способы описания момента импульса.

Знание квантовых чисел l и s каждого электрона, конечно, не дает еще нам возможности сказать, каким образом векторы индивидуальных орбитальных моментов и векторы спинов, складываясь, создают *полный момент импульса* системы в целом. Мы можем, однако, определить оператор $\mathbf{J}$ полного момента импульса системы

Z электронов посредством соотношения

$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^{Z} (\mathbf{L}_i + \mathbf{S}_i), \tag{22.5}$$

где $\mathbf{L}_i$ и $\mathbf{S}_i$ — соответственно, операторы орбитального момента и спина i-го электрона. Можно строго показать, что изолированная система частиц всегда будет иметь волновую функцию ψ, которая является собственной функцией J^2. Этот квантовомеханический результат аналогичен сохранению момента импульса для системы частиц в классической механике. Поэтому полный момент является важной физической величиной. Он квантуется обычным образом (ср. уравнения (20.29) и (22.4)) как момент импульса:

$$J^2\psi = J(J+1)\hbar^2\psi, \tag{22.6}$$

где J — целые числа 0, 1, 2, ... и т. д. для четного числа электронов и полуцелые 1/2, 3/2 и т. д. для нечетного числа электронов. Если J известно, то мы имеем некоторую информацию о том, каким образом складываются индивидуальные моменты. Но если даже эта векторная сумма задана, то остается еще много различных путей, с помощью которых индивидуальные векторы могут скомбинироваться так, чтобы давать один и тот же результирующий вектор.

Одна из возможностей состоит в том, что орбитальный момент и спин каждого индивидуального электрона складываются, образуя определенную величину в том смысле, что волновая функция ψ системы является собственной функцией каждого из операторов J_i, определяемых соотношением

$$\mathbf{J}_i = \mathbf{S}_i + \mathbf{L}_i, \tag{22.7}$$

т. е.

$$J_i^2\psi = j(j+1)\hbar^2\psi, \qquad j = 1/2,\ 3/2,\ 5/2,\ \ldots \tag{22.8}$$

Эти моменты в свою очередь складываются и образуют полный момент системы в целом: $\mathbf{J} = \sum \mathbf{J}_i$. Такая возможность называется *j — j-связью*.

Другая возможность состоит в том, что все индивидуальные спины складываются, создавая полный спин, удовлетворяющий уравнению

$$S^2\psi = S(S+1)\hbar^2\psi, \tag{22.9}$$

где $S = 0, 1, 2, 3, \ldots$ для четного Z и $S = 1/2, 3/2, 5/2, \ldots$ для нечетного Z и где

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^{Z} \mathbf{S}_i. \tag{22.10}$$

Далее, все индивидуальные орбитальные моменты, складываясь одновременно, дают определенное значение момента системы в целом:

$$\mathbf{L}^2\psi = L\,(L+1)\,\hbar^2\psi, \tag{22.11}$$

где $L = 0, 1, 2, \ldots$ и

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^{Z} \mathbf{L}_i. \tag{22.12}$$

Наконец, $\mathbf{L}$ и $\mathbf{S}$, складываясь, дают вектор (оператор) полного момента импульса $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Эта возможность известна как $L - S$-*связь* или связь Рассела — Саундерса.

Сложение моментов в квантовой механике представляет собой очень трудную задачу и требует довольно громоздкой операторной

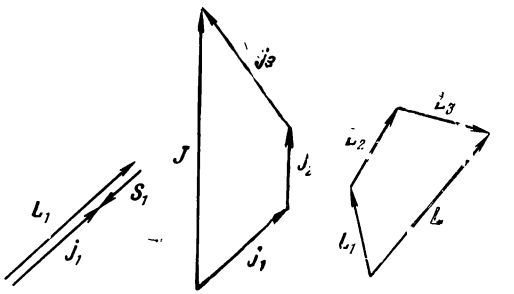


Рис. 22.2.

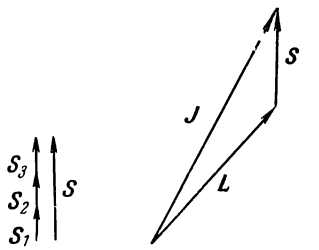


Рис. 22.3.

алгебры. Трудности возникают частью из того факта, что, хотя абсолютное значение $|\mathbf{L}|$ вектора момента импульса равно $[l\,(l+1)]^{1/2}\hbar$ (уравнение (20.29) и рис. 20.10), максимальное значение какой-либо компоненты $\mathbf{L}$ (скажем, $\mathbf{L}_z$) равно $l\hbar$. Простейшая модель, называемая *векторной моделью*, в которой момент выступает как обычный вектор, часто полезна для наглядного представления реальной квантовомеханической ситуации. В этой модели длина вектора момента $|\mathbf{L}|$ берется равной $l\hbar$, а не $[l(l+1)]^{1/2}\hbar$ и аналогично для J и S. Если использовать векторную модель с осторожностью, то можно получать очень просто правильные квантовомеханические результаты. В рамках этой модели j — j-связь может быть проиллюстрирована рис. 22.2, где $\mathbf{L}_1$ и $\mathbf{S}_1$, складываясь, дают $\mathbf{j}_1$ и т. д., а $\mathbf{j}_i$, складываясь, дают полный момент $\mathbf{J}$. На рис. 22.3 изображена схема L — S-связи с $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 + \mathbf{L}_3$, $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$ и $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Схемы j — j- и L — S-связей преиставляют собой совершенно различные способы сложения векторов и приводят к различным результатам. Какой из этих двух способов является лучшим

приближением к истине — зависит от деталей взаимодействия между частицами. Обычно выбор между ними делается эмпирически путем сравнения предсказаний этих схем с экспериментом.

При использовании векторной модели существенно соблюдать следующее правило (которое может быть получено из квантовой теории оператора момента). При сложении каких-либо двух векторов момента они могут быть параллельны. В этом случае модуль их суммы равен сумме модулей отдельных векторов. Или же они могут быть антипараллельными, и тогда модуль их суммы равен разности их

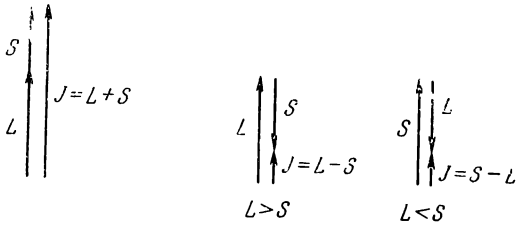


Рис. 22.4.

модулей. Остающимися возможностями для векторной суммы являются лишь те, значения которых лежат между этими двумя предельными и отличаются друг от друга на целое кратное $\hbar$. Так, например, при j — j-связи, если $l = 1$, j может быть равно либо 3/2, либо 1/2, так как s всегда равно 1/2; аналогично, если $l=2$, j может быть равным или 5/2, или 3/2. При L — S-связи, если $l_1 = 2$ и $l_2 = 3$, то L может равняться 5, 4, 3, 2 или 1; если l_1 и l_2 оба равны 1, возможными значениями L будут 2, 1 или 0. В случае двух спинов единственно возможными значениями S являются 1 (спины параллельны) или 0 (спины антипараллельны), так как s_1 и s_2 всегда равны 1/2. Таким образом, если $L = 2$ и $S = 1$, то J может принимать значения 3, 2 или 1. Правило векторного сложения с очевидностью показывает, что при L и S заданных J не может ни превышать максимального значения $L+S$, ни быть меньше, чем $|L-S|$ (рис. 22.4). Он может принимать любое промежуточное значение, отличающееся от предельных на целое число. При объяснении этих правил сложения моментов мы использовали векторную модель, для того чтобы сделать операторы более наглядными. Эти правила могут быть также интерпретированы просто как законы сложения *квантовых чисел*, и именно так они действительно вводятся в квантовомеханической теории. Именно из-за того, что в действительности мы имеем дело с квантовыми числами, и возникают ограничения значений сумм целыми или полуцелыми числами.

В общем случае волновая функция ψ системы не является точной собственной функцией операторов $\mathbf{L}^2$, $\mathbf{S}^2$ или индивидуальных опе-

раторов J_i^2, хотя она всегда является собственной функцией полного момента J^2. Однако, даже если j — j-связь и L — S-связь правильны лишь приближенно, они могут принести большую пользу при классификации квантовомеханических состояний многоэлектронных систем. В действительности L — S-связь является превалирующей в большинстве атомных систем (особенно систем с малым значением Z), т. е. мы можем рассматривать полный орбитальный момент и полный спин как квантуемые по отдельности. Соответствующие им квантовые числа L и S, а также квантовое число J могут быть определены из атомных спектров (гл. 23). Эти квантовые числа дают много сведений о *системе в целом*, что часто более интересно, чем знание значений l индивидуальных электронов.

Всегда, когда это возможно, стараются задать состояние атомной системы указанием электронной конфигурации (n и l каждого электрона), а также заданием значений L, S и J (в допущении L — S-связи). Мы будем обозначать значения L, используя тот же код, что и для индивидуальных l, но с заглавными буквами. Так состояния $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ обозначаются соответственно как состояния S, P, D, F, G и H. Квантовое число полного спина S задается его «мультиплетностью» $2S + 1$, которая показывает, сколько различных собственных значений m_s может принимать одна из его компонент, скажем S_z. «Мультиплетность» записывается в виде верхнего индекса слева от буквы, указывающей значение L, а J записывается с помощью нижнего индекса справа. Например, символ $^2P_{1/2}$ обозначает «дублетное P половина» состояние, в котором $2S + 1 = 2$ (или $S = 1/2$), $L = 1$ и $J = 1/2$; аналогично символ $^3D_2$ обозначает «триплетное D два» состояние с $S = 1$, $L = 2$ и $J = 2$. Эти обозначения величин L, S и J часто называют «спектральными термами». Электронные конфигурации, так же как и термы основных состояний и ионизационные потенциалы всех элементов, приведены в табл. 3.

Определение величин L, S и J для тяжелых (большие Z) элементов может показаться на первый взгляд безнадежной задачей. К счастью, однако, допустимые значения энергии системы всегда соответствуют довольно малым моментам. Так, каждый атом, состоит ли он из полностью замкнутых оболочек, как благородные газы He, Ne, Ar, Kr, Xe и Rn, или же имеет замкнутые подоболочки, как щелочноземельные элементы Be, Mg, Ca, Sr, Ba и Ra с двумя s-электронами вне остова благородного газа, равным образом как и Zn, Pd, Cd, Yb, Hg, имеет сферически симметричную электронную конфигурацию с $L = 0$ и парами индивидуальных спинов, компенсирующими друг друга, так что полный спин $S = 0$. Тогда и J обязательно равно нулю и все эти атомы находятся в состоянии $^1S_0$. Щелочные металлы содержат остов благородных газов с $L_{\text{остова}} = 0$ и $S_{\text{остова}} = 0$ плюс единственный периферический электрон с $l = 0$ и $s = 1/2$;

для полных моментов имеют место равенства $L = 0$, $S = 1/2$ и, следовательно, $J = 1/2$. Поэтому термом для всех щелочных металлов в основном состоянии является $^2S_{1/2}$. Наибольшие известные величины S, L и J в основном состоянии для атомных систем равны соответственно: $S = 4$, $L = 8$ и $J = 17/2$ (не для одного и того же атома). Большие значения никогда не появляются, так как для каждой замкнутой оболочки счет опять начинается с $S = L = J = 0$.

Задачи

22.1. Какой смысл имеют утверждения, что электронная конфигурация есть $1s^22s^22p^63s^2$. Какой атом имеет эту конфигурацию?

22.2. Дать значения S, L и J для термов: $^1S_0$, $^2S_{1/2}$, $^1P_1$, $^3P_2$, $^3F_4$, $^5D_1$, $^1D_2$, $^6F_{9/2}$.

22.3. Указать все возможные термы в L — S-связи для конфигураций: $2p3p$ и $4d5p$.

22.4. Повторить задачу 22.3 для конфигурации $3s3p4p$.

22.5. Рассмотреть трехэлектронную систему в одноэлектронном приближении. Выразить трехэлектронную волновую функцию через одноэлектронные волновые функции таким образом, чтобы эта волновая функция была антисимметричной по отношению к перестановке двух любых электронов.

22.6. Какие термы возможны при $L = 3$ и $S = 1$?

22.7. Какие термы возможны при $L = 2$ и $S = 4$?

22.8. Скопировать рис. 22.1 и начертить маленькие кружочки, изображающие электроны на различных уровнях. Перенумеровать электроны в том порядке, в каком они добавляются (см. табл. 3). Проделать это вплоть до конфигурации криптона.

22.9. Два электрона имеют орбитальные моменты $l_1 = 1$, $l_2 = 3$. Каковы возможные значения L и S? Для каждой комбинации L, S найти возможные значения J.

22.10. Два электрона имеют значения орбитального момента $l_1 = 1$ и $l_2 = 3$ соответственно. Предполагается j — j-связь. Каковы возможные значения j_1 и j_2? Для каждой комбинации j_1, j_2 найти возможные значения J. Сравнить конечный результат с задачей 22.9.

Литература для справок

1. Борн М., Атомная физика, «Мир», 1965.
2. Гайтлер В., Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956.
3. Блохинцев Д. И., Основы квантовой механики, «Высшая школа», 1961.
4. Герцберг Г., Атомные спектры и строение атомов и молекул, ИЛ, 1962.

Глава 23

Атомные спектры

Подобно атомам водорода многоэлектронный атом испускает фотон энергии $h\nu = E_2 - E_1$, если он испытывает переход из состояния с высшей энергией E_2 в состояние с низшей энергией E_1. Так как схема уровней в атоме с большим Z гораздо сложнее, чем у водорода, то в результате в общем случае получается очень запутанный спектр. Тем не менее можно вывести последовательную схему энергетических уровней, которая объясняет невероятно запутанный порядок наблюдаемых линий. Ясно, что электроны самых крайних оболочек наиболее легко возбудимы, в то время как электроны в прочно связанных внутренних оболочках возбудить более трудно. Так как разности энергий в нормальном состоянии между незанятыми внешними энергетическими уровнями соответствуют фотонам видимой и инфракрасной области, в то время как эти разности между уровнями замкнутых оболочек соответствуют излучению ультрафиолета и рентгеновских лучей, то можно с уверенностью сказать, что оптические спектры вызываются обычно переходами электронов в самой верхней оболочке. Поэтому при обсуждении оптических спектров мы можем забыть о внутренних оболочках. Эти представления значительно упрощают дело, особенно при рассматривании спектров щелочных металлов, которые возникают вследствие переходов, затрагивающих единственный электрон над остовом благородного газа.

Рентгеновские спектры возникают вследствие точно такого же вида электронных переходов, но с участием электронов внутренних оболочек. Именно, энергия электрона внутренней оболочки возрастает или уменьшается одновременно с поглощением или излучением фотона. Так как разности энергий (энергии фотонов) велики в области рентгеновских лучей, то малые магнитные эффекты являются относительно несущественными. Поэтому некоторые усложнения, характерные для оптического спектра, практически отсутствуют в рентгеновском спектре. Мы начнем обсуждение с оптических спектров. Поэтому нам придется в первую очередь рассказать о до сих пор не учитывавшихся магнитных эффектах, особенно о так называемой энергии «спин-орбитального»

взаимодействия. Будем предполагать применимость представлений о L — S-связи, так что будет иметь смысл рассматривать полный орбитальный момент всех электронов и их полный спин. Векторная сумма этих двух величин есть полный момент электронов атома, и мы увидим, что его влияние на энергию атома до некоторой степени существенно.

§ 23.1. Спин-орбитальное расщепление

Наличие спин-орбитальной энергии означает, что на энергию атома влияет взаимодействие спинового момента **S** с орбитальным **L**. Это взаимодействие в большинстве случаев относительно мало, так что в первом приближении энергетические уровни будут определяться электронной конфигурацией, как это предполагалось ранее. Но при наличии взаимодействия для данных L и S энергия до некоторой степени зависит от того, как эти векторы складываются, т. е. от значения J. Причины появления такого взаимодействия лучше всего видны интуитивно при рассмотрении классической боровской модели атома водорода.

При орбитальном движении электрический заряд представляет собой контур с током и как таковой создает магнитное поле, подобное полю магнитного диполя. Этот магнитный «дипольный момент» взаимодействует с внешним магнитным полем точно таким же образом, как постоянный магнит, и стремится ориентироваться по наложенному полю. Таким образом, орбитальное движение электронов создает *магнитный момент*, который пропорционален орбитальному моменту **L**. Аналогично вращающийся вокруг своей оси электрический заряд обладает собственным магнитным моментом $\boldsymbol{\mu}$, который пропорционален собственному спиновому моменту **S**. То, что магнитный момент, связанный со спином электрона, будет взаимодействовать с магнитным моментом, связанным с орбитальным движением, можно себе представить, вообразив себя помещенным на электрон и вращающимся вместе с ним по орбите вокруг ядра. С этой точки зрения видно, что заряженное ядро, обращающееся вокруг электрона, приводит к появлению магнитного поля в том месте, где расположен электрон. С этим полем и взаимодействует собственный спиновый момент $\boldsymbol{\mu}$ электрона. Это взаимодействие зависит от относительного направления **S** и **L** и, следовательно, от **(LS)**.

Аналогичная ситуация квантовомеханически описывается словами, что векторные операторы **L** и **S** не являются полностью независимыми друг от друга, как это принималось до сих пор. Имеется магнитное поле, связанное с орбитальным движением электронов (пропорциональное **L**), которое взаимодействует с магнитным дипольным моментом вращающегося электрона (пропорционального

S). В результате в выражении для оператора полной энергии системы появляется член **LS**. Имеется вдобавок еще релятивистская поправка к энергии, которая также пропорциональна **LS**. Эти два эффекта мы можем объединить в одном операторе «спин-орбитальной» энергии

$$\mathsf{H}_{LS} = \frac{A}{\hbar^2}\mathbf{LS}, \tag{23.1}$$

где A — положительная константа. При данных L и S возможны несколько энергетических уровней, образующих LS-мультиплет, с различными энергиями, характеризуемыми собственными значениями оператора **LS**.

Заметим прежде всего, что это согласуется со схемой $L - S$-связи, в предположении, что квантовые числа L и S имеют определенные заданные значения и что энергетические уровни сильно от них зависят. Тогда эти уровни могут быть расщеплены на подуровни LS-мультиплет, зависящие от относительной ориентации **L** и **S**, т. е. **J**. Далее как видно, нам приходится иметь дело с совершенно новым оператором **LS**, и можно было бы ожидать, что вычисление его собственных значений потребует гигантских усилий. В действительности, однако, небольшая алгебраическая манипуляция с уже рассматривавшимися операторами немедленно приводит к собственным значениям **LS**.

Так как

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{LS},$$

то, следовательно,

$$\mathbf{LS} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2).$$

Волновая функция системы, являющаяся собственной функцией одновременно операторов $\mathbf{J}^2$, $\mathbf{L}^2$ и $\mathbf{S}^2$ ($L - S$-связь), должна также, как мы видим, быть собственной функцией **LS** с собственными значениями (уравнения (22.6), (22.9) и (22.11))

$$^1/_2\hbar^2\,[J\,(J+1) - L\,(L+1) - S\,(S+1)].$$

В результате энергия спин-орбитального взаимодействия оказывается равной

$$E_{LS} = {}^1/_2 A\,[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \tag{23.2}$$

При данных L и S спин-орбитальная энергия зависит только от J и энергетические уровни LS-мультиплета, следовательно, характеризуются разрешенными значениями J : $|L - S|, |L - S| + 1, \ldots$ $\ldots, L + S$. При $S < L$, очевидно, будет $2S + 1$ возможных значений J, а при $L < S$ их будет $2L + 1$. Так как постоянная A мала (особенно для малых Z), то энергетические уровни LS-мультиплета

располагаются близко друг от друга, в то время как состояния системы с различными квантовыми числами L могут иметь сильно различающиеся значения энергии. Так же сильно могут различаться уровни с различными значениями полного спина S. Поэтому переходы из одного мультиплета в другой будут приводить к большому количеству спектральных линий, лишь незначительно отличающихся друг от друга. Это — *тонкая структура* спектров, которая привела к открытию спина электрона.

§ 23.2. Спектры щелочных металлов

Атомы щелочных металлов имеют электронную конфигурацию, состоящую из $(Z-1)$ электронов на внутренних замкнутых оболочках и одного внешнего валентного электрона. На внешний электрон действует заряд ядра Ze, экранированный $(Z-1)$ электронами замкнутых оболочек, т. е. как бы чистый заряд e, так что следует ожидать, что энергетические уровни и спектры будут подобны уровням и спектру атома водорода. Это особенно справедливо для уровней, соответствующих большим орбитальным моментам, так как в этом случае волновая функция внешнего электрона не проникает заметным образом в замкнутые оболочки. При малых значениях L ($L = 0,1$) экранировка не является такой полной и, следовательно, эффективный заряд ядра больше e.

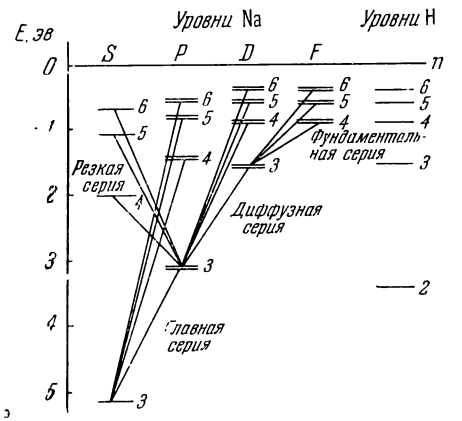
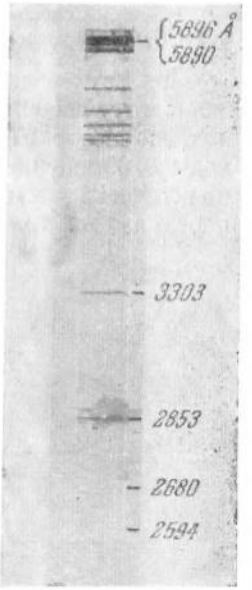


Рис. 23.1.

Так как для замкнутых оболочек всегда $L = 0$ и $S = 0$, то полный спин электронов щелочного элемента просто равен спину единственного электрона вне остова благородного газа. Поэтому $S = 1/2$ и мультиплетность LS-мультиплета равна $2S + 1 = 2$ для всех $L > 1/2$, т. е. $L = 1, 2, 3, \ldots$, и $2L + 1 = 1$ для $L = 0$. Так как все уровни, исключая $L = 0$, расщепляются на два за счет спин-орбитальной связи, то получается схема энергетических уровней того типа, какой показан для Na на рис. 23.1. (Расщепление на дублеты в этой схеме сильно преувеличено, для того чтобы сделать его видимым.) Для сравнения на этом же рисунке показаны уровни водорода. Заметьте, что, как и предполагалось, при больших значе-

ниях L уровни натрия лучше соответствуют уровням водорода. При малых L энергия уменьшается, поскольку притяжение увеличивается, когда электроны проходят ближе к ядру.

Наиболее вероятными электронными переходами являются такие, когда L изменяется на 1: $|\Delta L| = 1$, а S не изменяется: $\Delta S = 0$. Величина J может изменяться на $+1$, 0 или -1, но переходы с уровня $J = 0$ на уровень $J = 0$ происходить не могут. Эти переходы называются *разрешенными*. *Правила отбора* $|\Delta L| = 1$, $\Delta S = 0$ и $\Delta J = 0$ или 1 могут быть выведены из полной квантовомеханической теории и налагают большие ограничения на число наблюдаемых спектральных линий. Если момент атома при переходе изменяется, то закон сохранения полного момента говорит нам о том, что излучаемый фотон должен уносить момент импульса. Примерами разрешенных переходов являются серии, называемые: резкая (sharp), главная (principal), диффузная (diffuse) и основная (fundamental) (рис. 23.1). Эти названия возвращают нас к прошлому спектроскопии, и их первые буквы S, P, D и F были использованы для классификации электронных состояний, предшествующих переходам, т. е. состояний $L = 0, 1, 2, 3$ соответственно. Наиболее отчетливыми линиями в спектре натрия (фото XIII) является дублет желтых линий в первой главной серии, который возникает при переходах: $3p^2P_{1/2} \rightarrow 3s^2S_{1/2}$ и $3p^2P_{3/2} \rightarrow 3s^2S_{1/2}$. Их длины волн равны соответственно 5896 и 5890 Å.



XIII. Спектр излучения натрия. Показаны длины волн главной серии.

Мы получили две линии при переходе из $3p$ в $3s$ за счет спин-орбитального расщепления. Для S-состояния $E_{LS} = 0$, в то время как для состояния $^2P_{1/2}$ имеем $J = 1/2$, $L = 1$, $S = 1/2$ и согласно уравнению (23.2)

$$E_{LS} = A\frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - 1(1+1) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\right] = -A.$$

Для состояния $^2P_{3/2}$ мы имеем $J = {}^3/_2$ и

$$E_{LS} = A\frac{1}{2}\left[\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right) - 1(1+1) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\right] = \frac{1}{2}A.$$

Следовательно, фотоны главной серии отличаются по энергии на

$^3/_2A$. Из измерения разности энергетических уровней мы, очевидно, можем определить значение константы A.

Более сложные спектры наблюдаются, когда во внешней оболочке находится несколько электронов, но эти спектры слишком запутаны, чтобы вдаваться здесь в подробности. Однако мы все же кратко рассмотрим спектр, создаваемый двумя электронами вне замкнутой оболочки.

§ 23.3. Двухэлектронные спектры

При двух электронах вне замкнутой оболочки полный спин может быть равен либо $S = 0$ (синглет) при антипараллельных спинах, либо $S = 1$ (триплет) при параллельных спинах. Так как переходы с изменением S маловероятны, то мы получаем систему двух практически независимых спектров. Один спектр возникает при переходах внутри групп синглетных состояний ($S = 0$), а другой — при переходах среди триплетных состояний ($S = 1$). Первый из них ($S = 0$) не обнаруживает спин-орбитального расщепления, так как при $S = 0$ LS-мультиплетность равна $2S+1=1$.

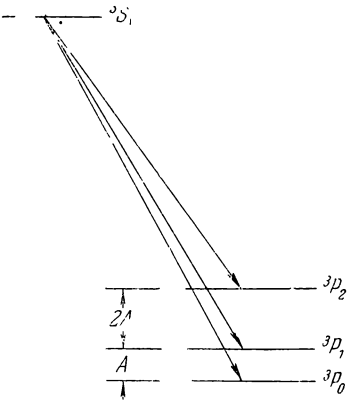


Рис. 23.2.

В качестве примера двухэлектронного спектра мы рассмотрим спектр цинка. Цинк имеет $Z = 30$. Первые 28 электронов заполняют оболочки с $n = 1$, $n = 2$ и $n = 3$. Эти замкнутые оболочки имеют полные спиновые и орбитальные моменты $S = 0$ и $L = 0$. Мы можем поэтому в последующем рассмотрении забыть о них. Остающиеся два электрона находятся на уровне $n = 4$. В основном состоянии цинка оба эти электрона занимают уровни $4s$ (т. е. имеют $l_1 = 0$ и $l_2 = 0$) и при противоположной ориентации спинов имеют состояния с $S = 0$, $L = 0$ ($^1S_0$-терм). Полное обозначение состояния $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2\ ^1S_0$ часто записывается сокращенно как $4s^2\ ^1S_0$ (см. табл. 3).

Атом цинка может быть возбужден путем перехода одного из $4s$-электронов на более высокий энергетический уровень, скажем, $4p(L = 1)$ или $5s(L = 0)$. Излучение, испускаемое при разрешенных переходах

$$\begin{aligned} 4s\,5s\ ^3S_1 &\to 4s\,4p\ ^3P_0 \\ &\to 4s\,4p\ ^3P_1 \\ &\to 4s\,4p\ ^3P_2\ , \end{aligned}$$

целиком попадает в видимую область (фактически между 4000 и 5000 Å) и определяет поэтому наиболее яркие черты спектра цинка.

Все три перехода происходят из состояния $L=0$, $S=1$ в состояние $L=1$, $S=1$ ($^3S_1$-уровень не имеет спин-орбитального расщепления, так как $E_{LS}=0$ при $L=0$). При отсутствии спин-орбитального взаимодействия три линии будут поэтому совпадать. Так как

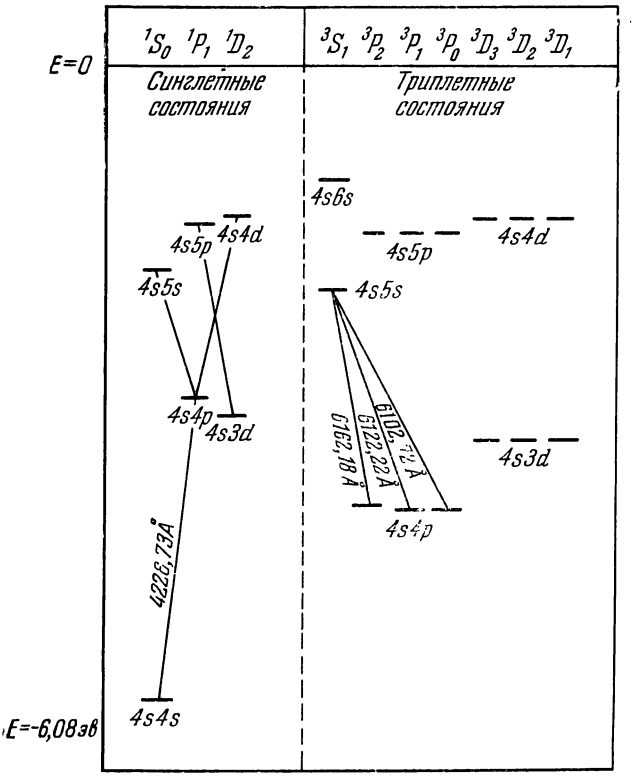


Рис. 23.3.

$L=1$ и $S=1$, то J может принимать значения 0 ($^3P_0$), 1 ($^3P_1$) или 2 ($^3P_2$). Поскольку спин-орбитальная энергия определяется выражением

$$E_{LS} = A^1/_2\,[J\,(J+1) - L\,(L+1) - S\,(S+1)] = \\ = A^1/_2\,[J\,(J+1) - 4],$$

то мы имеем

$$E_{LS} = A\,(-2) \quad \text{при } J = 0,$$
$$E_{LS} = A\,(-1) \quad \text{при } J = 1,$$
$$E_{LS} = A\,(+1) \quad \text{при } J = 2.$$

Уровни разделяются поэтому в отношении 2 : 1, как показано на рис. 23.2. Экспериментально это отношение равно 2,05 : 1, что показывает, что L — S-связь является лишь приближенно правильной.

Кальций также имеет два электрона сверх замкнутых оболочек (рис. 23.3). Выводя оптический спектр, ожидаемый на основе этой схемы, надо иметь в виду, что все интенсивные линии получаются за счет электронных переходов, при которых S не изменяется, L изменяется на 1, а J — на 0 или 1.

XIV. Спектр излучения ртути. Три линии с указанными длинами волн составляют интенсивный спин-орбитальный триплет.

По мере возрастания атомного числа Z элементов наблюдается два эффекта: во-первых, спин-орбитальное взаимодействие становится постепенно сильнее и, во-вторых, L—S-связь становится менее хорошим приближением. Оба эти эффекта заметны, если рассмотреть длины волн нескольких триплетов, получающихся при переходах $(n+1)^3S_1 \rightarrow n^3P_{0,1,2}$.

Элемент	Z	n	Длины волн, Å		
Ca	20	4	6103	6122	6162
Zn	30	4	4680	4722	4810
Hg	80	6	4046	4358	5461

Хотя уровни обратно пропорциональны длинам волн, уже из значения самих длин волн непосредственно очевидно, что расщепление возрастает с ростом Z. Кроме того, теоретическое отношение 2 : 1 (при L — S-связи) является довольно хорошим приближением для Ca и Zn, но для Hg почти полностью теряет ценность (фото XIV). Для легких элементов расщепление меньше. Исходя из того, что расщепление дублета Na равно 6 Å, мы можем заключить, что линии триплета Mg должны быть разделены несколькими ангстремами. У Be расщепление составляет доли ангстрема, а у He оно так мало, что длительное время пары триплета не могли быть разрешены экспериментально.

§ 23.4. Рентгеновские лучи

В 1895 г. немецкий физик Рентген наблюдал проникающее излучение, которое он назвал X-лучами, испускаемое разрядной трубкой при высоком напряжении и малой плотности газа. Он нашел, что источником излучения был участок стеклянной стенки, подвергавшийся ударам «катодных лучей» (электронов). Мы теперь понимаем, что испускаемые катодом электроны высокой энергии выбивают электроны из заполненных в обычном состоянии внутренних оболочек атомов стеклянной стенки и что в результате электронные переходы в атоме приводят к излучению фотонов X-лучей, наблюдавшихся Рентгеном. Однако, так как открытие Рентгена предшествовало боровской теории атома на 18 лет, Рентген не мог истолковать происхождение X-лучей подобным образом.

Рентгеноскописты подобно своим коллегам, работающим в оптической области, ввели свои собственные обозначения для спектральных линий, которые они наблюдали. Эти обозначения сохранились, и поэтому с ними нужно познакомиться. Наблюдаемые спектральные линии группируются в серии, из которых две наиболее интенсивные называются K- и L-сериями. Термины K-излучение и L-излучение были впервые введены шведским физиком Баркла (1908 г.), но первое систематическое излучение частот K- и L-линий в зависимости от атомного номера элемента, излучающего рентгеновские лучи, было проделано английским физиком Мозли (1913 г.). K-излучение на самом деле возникает, когда электрон из менее прочно связанной оболочки падает на самую глубокую оболочку ($n = 1$). Поэтому K-линии соответствуют лучам наибольшей энергии. Аналогично L-излучение возникает, когда электрон падает на оболочку с $n = 2$. Другими словами K- и L-серии рентгеновских лучей представляют собой серии Лаймана и Бальмера для атома с большим атомным номером. Рентгеноскописты оболочку $n = 1$ называют K-оболочкой, а оболочку $n=2$ L-оболочкой. Последующие оболочки называются M-, N-, O-оболочками и т. д. в алфавитном порядке.

Дифракция рентгеновских лучей на кристалле обсуждалась в гл. 13. Работая на спектрометре с кристаллом железистосинеродистого кальция, Мозли обнаружил, что частоты K_α-линий, соответствующие падению электронов из L-оболочки на K-оболочку, в зависимости от Z определяются формулой

$$h\nu_{K_\alpha} = 13{,}6 \text{ эв } (Z-1)^2\left(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{2^2}\right). \qquad (23.3)$$

При перемещении электрона из K-оболочки на L-оболочку электрон чувствует ядро сквозь экранировку лишь остающимися электронами K-оболочки, как если бы заряд ядра был равен эффективному

заряду $(Z-1)e$. С таким эффективным зарядом разность энергий между состояниями с $n=2$ и $n=1$, как следует из уравнения (21.17), должна быть точно равна энергии K_α-рентгеновских лучей, найденной Мозли (уравнение (23.3)).

Чтобы получить представление о длинах возникающих волн, рассмотрим K_α-рентгеновские лучи молибдена ($Z=42$). Молибден является одним из элементов, обычно используемых практически в рентгеновских трубках. Из уравнения (23.3) получим

$$\lambda_{K_\alpha}=\frac{c}{\nu_{K_\alpha}}=\frac{4}{3}\frac{hc}{(42-1)^2\,13{,}6\ эв\cdot 1{,}6\cdot 10^{-12}\ эрг/эв}=0{,}72\cdot 10^{-8}\ см,$$

или

$$\lambda_{K_\alpha}=0{,}72\ \text{А}.$$

Мы видим, что для элементов верхней половины периодической системы K_α-рентгеновские лучи имеют длины волн несколько меньшие одного ангстрема. Рентгеновские лучи K_β (переходы с $n=3$ на $n=1$) и K_γ (переходы с $n=4$ на $n=1$) будут иметь более высокие энергии, и поэтому их длины волн будут даже короче, чем у K_α-линий.

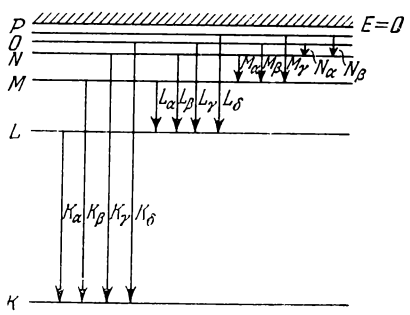


Рис. 23.4.

L-лучи, которые возникают при удалении одного из L-электронов, будут, конечно, иметь меньшие энергии и большие длины волн, чем K-лучи. Когда электрон переходит с третьей оболочки (M-оболочки) на L-оболочку, он чувствует ядро, экранированное девятью остающимися электронами в K- и L-оболочках. В этом случае следует ожидать, что эффективный заряд ядра будет равен $(Z-9)e$. В действительности экранирование эффективно приблизительно лишь на 82%, так что энергия L_α-лучей определяется формулой

$$h\nu_{L_\alpha}=13{,}6\ эв\ (Z-7{,}4)^2\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{3^2}\right). \qquad (23.4)$$

При десяти электронах в замкнутых K- и L-оболочках для энергии в M-оболочке получилось бы значение около

$$13{,}6\ эв\ (Z-8{,}2)^2\frac{1}{3^2}.$$

Имеются также и другие серии линий рентгеновских лучей с еще меньшими энергиями или большими длинами волн. M-серия получается, если отсутствует электрон в M-оболочке; N-серия — в слу-

чае, когда имеется вакансия в N-оболочке и т. д. Упрощенная диаграмма энергетических уровней многоэлектронного атома с указанием переходов, дающих несколько серий линий рентгеновских лучей можно найти на рис. 23.4. Ясно, что наиболее энергичная серия, K-серия, будет, вообще говоря, сопровождаться менее энергичными L-, M- и N-сериями, так как K_α-переход приводит к вакансии в L-оболочке, которая заполняется путем L_α-перехода, приводящего в свою очередь к вакансии в M-оболочке, и т. д. В нашем рассмотрении (рис. 23.4) мы игнорировали тот факт, что L-, M-, N- и другие высшие оболочки в свою очередь состоят из подоболочек. В L-оболочке это дает некоторое различие для возникающих L-линий рентгеновских лучей в зависимости от того, был ли отсутствующий электрон $2s$- или $2p$-электроном. В дополнение к этому имеется тонкая структура, обусловленная спин-орбитальным взаимодействием, обсуждавшаяся в § 23.1. Однако главные черты дискретного спектра рентгеновских лучей могут быть поняты на основе простой картины, данной на рис. 23.4.

§ 23.5. Поглощение рентгеновских лучей

Быть может, наиболее важной практически характеристикой рентгеновских лучей является их способность проникать на макроскопические расстояния в оптически непрозрачных средах. На этой способности основано их огромное значение в медицине, промышленности и других важных областях человеческой деятельности. Ясно, что имеется и некоторое поглощение рентгеновских лучей. Именно различие в поглощении рентгеновских лучей костными тканями по сравнению с мягкими тканями используется при диагностике переломов кости.

Поглощение фотонов веществом обсуждалось в § 17.3. Мы показали, что интенсивность I пучка фотонов в зависимости от расстояния x, пройденного пучком в поглощающей среде, дается выражением (17.14)

$$I = I_0 e^{-\mu x}.$$

Параметр μ, называемый коэффициентом поглощения, очень сильно зависит от рода вещества, а также от длины волны рентгеновских лучей. Поглощение рентгеновских лучей происходит в первую очередь за счет фотоэмиссии внутренних электронов (см. рис. 17.7). Рождение пар (§ 17.2) может иметь место лишь при энергии выше 1 *Мэв*, в то время как рентгеновские лучи лежат в области приблизительно от 1 до 100 *кэв*. Однако для малых атомных номеров важную роль играет также комптоновское рассеяние. Для Al, например, комптоновское рассеяние является более существенным, чем

фотоэлектрическое поглощение при энергии рентгеновских лучей, превышающей примерно 50 *кэв*.

Коэффициент поглощения μ может быть измерен путем помещения между падающим пучком и детектором пластин поглощающего вещества различной толщины. Результат типичных экспериментов по измерению μ в зависимости от частоты ν рентгеновских лучей проиллюстрирован на рис. 23.5. Видно, что при переходе от высоких частот к низким коэффициент поглощения возрастает с уменьшением частоты до тех пор, пока не достигнет *границы K-спектра поглощения*, отмеченной буквой K на рис. 23.5. Здесь имеется внезапное падение коэффициента μ. Начиная с этой точки, фотоны рентгеновских лучей не имеют достаточной энергии для вырывания электронов из K-оболочки; поглощение рентгеновских лучей посредством фотоэффекта K-электронов прекращается и, следовательно, μ резко уменьшается. Остаточное поглощение обусловлено главным образом фотоэмиссией L-электронов, которая возрастает по мере дальнейшего уменьшения частоты. Коэффициент поглощения возрастает по мере того, как частота приближается к границе L-спектра поглощения (в действительности к границам L_{I}-, L_{II}- и L_{III}-спектра поглощения), где прекращается фотопоглощение L-электронами, что опять приводит к скачкообразному падению μ. При еще меньших частотах рентгеновские лучи поглощаются вследствие фотоэффекта M-электронов. Тот факт, что имеется три очень тесно расположенных границы спектра поглощения L_{I}, L_{II} и L_{III} в предполагаемой области частот L-серии, показывает, что L-оболочка в действительности состоит из трех подоболочек. Они возникают из-за различия в экранировании $2s$-электронов по сравнению с $2p$ и спин-орбитального расщепления энергетических уровней последних.

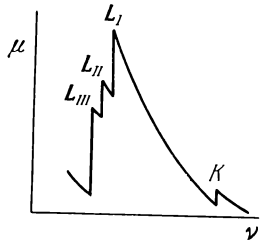


Рис. 23.5.

Измерение частот, соответствующих границам спектров поглощения рентгеновских лучей, дает энергии связи прочно связанных внутренних электронов в многоэлектронных атомах. Подобные измерения поглощения рентгеновских лучей наряду с наблюдением их спектров излучения дают ценную информацию об электронной структуре атомов.

Задачи

23.1. Записать электронную конфигурацию (внешних электронов) и термы, символически соответствующие каждому уровню, изображенному на рис. 23.1.

23.2. Сравнивая уровни Na и H на рис. 23.1 мы видим, что когда внешний электрон находится в одном из возбужденных состояний с $L \geqslant 2$, то эффективный

заряд ядра очень близок к (Z — 10) e, т. е. к e. Вычислить эффективный заряд ядра, ощущаемый электроном в основном состоянии $3s\,^2S_{1/2}$. (Ионизационный потенциал приведен в табл. 3.)

23.3. Зная, что длина волны перехода $3p\,^2P_{1/2} \rightarrow 3s\,^2S_{1/2}$ для натрия равна 5896Å, вычислить эффективный заряд ядра, который чувствует внешний электрон в состоянии $3p\,^2P_{1/2}$ (см. задачу 23.2).

23.4. Почему на рис. 23.3 отсутствует состояние $4s4s\,^3S_1$.

23.5. Скопировать рис. 23.3 и начертить все возможные переходы.

23.6. Изобразить мультиплеты ^3F и ^3D с правильным расщеплением внутри каждого мультиплета. Приписать каждому энергетическому уровню соответствующее значение J. Указать стрелками все разрешенные переходы $^3F \rightarrow {}^3D$.

23.7. Повторить задачу 23.6 для переходов $^4D \rightarrow {}^4P$ и $^4P \rightarrow {}^4S$.

23.8. Посмотреть спектральные линии Mg в кн. А. Н. Зайделя и др., «Таблицы спектральных линий», «Наука», 1969. Попытаться найти несколько триплетов и проверить затем, насколько справедливо теоретическое отношение 2 : 1 (при L — S-связи) для разделения уровней, предполагая, что переходы в действительности происходят из состояния ^3S в состояние ^3P.

23.9. Вычислить длины волн K_α-,K_β-и L_α -, L_β -рентгеновск их лучей для свинца.

23.10. Для каких ядер K_α-линии будут иметь приближенно те же длины волн, что и L_α-линии свинца?

23.11. Граница K-спектра поглощения хорошо известного металла находится возле длины волны 1,377 Å. Вычислить энергию его K-уровня. Что это за металл? Оценить длину волны K_α-линии и приближенно показать L-границу его спектра поглощения.

Литература для справок

1. Герцберг Г., Атомные спектры и строение атомов и молекул, ИЛ, 1962.
2. Зоммерфельд А., Строение атома и спектры, т. 1,2, Гостехиздат, 1956.
3. Блохинцев Д. И., Основы квантовой механики, «Высшая школа», 1961,

Глава 24

Молекулярная связь

Квантовая механика достигла громадных успехов в объяснении структуры изолированных атомов. В простейших случаях получено прецизионно точное согласие с экспериментальными данными. И даже для сложных атомов, где математические трудности делают получение точных решений невозможным, имеются подходящие приближения, обеспечивающие качественное понимание и дающие основу для количественных расчетов. Теперь мы хотим распространить наш анализ на еще более сложные задачи о совокупностях атомов в молекулах и твердых телах. Решение этих задач создает основу для химии, физики твердого тела, материаловедения.

Такие совокупности атомов являются именно теми формами вещества, с которыми мы имеем дело в повседневной жизни. Поэтому они имеют первостепенное значение для техники. Один из подходов к этим задачам был изложен в гл. 14, где предполагалось, что атомы являются частицами, взаимодействующими друг с другом по некоему гипотетическому закону сил. Подход, используемый в настоящей главе, более фундаментален в том отношении, что заранее существующими считаются совокупности ядер и электронов, и мы будем пытаться вычислять волновые функции и энергетические уровни электронов в полях, создаваемых всеми ядрами. Этот новый подход, однако, не перечеркивает старый, а дополняет (и даже оправдывает) его. Поэтому новый подход можно в действительности толковать как фундаментальное объяснение тех межатомных сил, которые раньше вводились полуэмпирическим путем. Коренная причина того, что атомы обычно сохраняют свою индивидуальность и при более глубоком описании их структуры, состоит в том, что энергии связи большинства электронов атома (исключением являются легчайшие атомы) имеют порядок тысяч электрон-вольт (§ 23.4), в то время как энергии связи в молекулах и твердых телах имеют порядок лишь нескольких электрон-вольт.

Таким образом, даже при тесном сближении атомов большинство электронов все еще можно рассматривать как прочно связанные с единичным ядром и образующие атом или ион, и только

у внешних, наиболее слабо связанных электронов волновые функции сильно изменяются. Это именно те изменения, которые и приводят к меньшей полной энергии, и следовательно, к связи при тесном сближении ядер (или ионов).

§ 24.1. Молекулярный ион H_2^+

В присутствии более чем одного ядра приходится рассматривать движение электронов в *силовом поле с несколькими центрами* в отличие от простого центрального поля изолированного атома с одним единственным ядром. И в этой задаче удобно использовать ту же стратегию, коей мы придерживались при рассмотрении атомов, а именно, начать с простейшего из мыслимых случаев (для атомов — с атома водорода), а уже далее перейти к более сложным случаям со многими электронами. Этот простейший случай и здесь можно выбрать только с одним электроном, причем оказывается, что такая задача допускает точное аналитическое решение. После же вычисления *одноэлектронных энергетических состояний* к требуемой многоэлектронной задаче в первом приближении можно подойти просто, заполняя уже вычисленные одноэлектронные состояния нужным числом электронов. Как мы увидим, и здесь в первом приближении главенствующую роль будет играть принцип Паули. Эффектом второго порядка, но также очень важным, является электростатическое отталкивание между несколькими электронами. Мы увидим, что на этом пути можно понять по крайней мере качественно наиболее важные свойства веществ. Очевидно, что при 10 атомах в молекуле или при 10^{23} атомах в твердом теле проведение точных количественных вычислений требует либо большого таланта в отыскании подходящих приближений, либо мощных методов численных расчетов, а обычно и того и другого вместе. С дальнейшим развитием машинной вычислительной техники последнему подходу суждено играть все бóльшую и бóльшую роль.

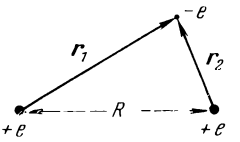


Рис. 24.1.

Простейшей из возможных молекулярных систем является однократно ионизованная молекула водорода, т. е. водородный молекулярный ион H_2^+. Молекула водорода H_2, потерявшая один из своих электронов, состоит из одного электрона, движущегося в электростатическом поле двух протонов (рис. 24.1). Так как протоны намного тяжелее электронов, то они будут двигаться намного медленнее; поэтому в первом приближении мы можем считать оба протона покоящимися и изучать движение электрона вокруг них так же, как мы это делали для атома водорода. Предположим, что протоны находятся на расстоянии R друг от друга, и попробуем оценить энергию электрона в поле протонов, закрепленных на этом расстоянии. Затем будем

рассматривать R как переменный параметр, что даст возможность описывать энергию системы в целом как функцию расстояния R между двумя ядрами. При этом окажется, что энергия будет иметь минимум при некотором значении R, так что ядра на этом равновесном расстоянии будут *связанными*. Таким образом, изучение электронных энергетических состояний позволяет предсказать энергию связи системы в целом.

Задача о частице, притягиваемой двумя силовыми центрами силой, обратно пропорциональной квадрату расстояния, подобно задаче с одним центром, допускает точное решение, если уравнение записать в подходящей системе координат (полярные координаты для одного центра, биполярные — для двух). Этим путем можно решить как классические уравнения движения, так и квантовое уравнение Шредингера. Однако решения будут более громоздкими, чем для атома водорода. Впрочем, все основные свойства этого решения можно найти путем приближенного рассмотрения электронной волновой функции. Точное уравнение Шредингера для электрона (т. е. уравнение с пренебрегаемой пока энергией взаимного отталкивания двух закрепленных ядер) имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{e^2}{r_1}-\frac{e^2}{r_2}\right]\psi=E\psi, \qquad (24.1)$$

r_1 и r_2 — расстояния между электроном и обоими ядрами (рис. 24.1).

При очень больших R вблизи ядра 1 пренебрежимо мал член e^2/r_2, так что в этой области волновая функция будет примерно такой же, как у атома водорода; соответственно вблизи ядра 2 член e^2/r_1 незначителен, и волновая функция будет такой же, как у атома водорода (рис. 24.2, *а*). Только нормировочная константа будет иной, так как вероятность нахождения электрона в окрестности каждого из ядер равна 1/2. Такая ситуация реально соответствует наличию изолированных друг от друга одного атома H и одного иона H^+ без уточнения того, какая система является атомом и какая — ионом. С другой стороны, при $R = 0$ задача становится аналогичной задаче для иона He^+ (заряд ядра $+2e$) и с такой же волновой функцией (рис. 24.2, *в*). При малых, но все же отличных от нуля расстояниях легко сообразить, какой примерно вид будет иметь волновая функция. Для этого надо просто сложить две водородные функции (рис. 24.2, *б*). Все эти случаи изображены на рис. 24.2 для *основного состояния*.

Из таких же рассуждений теперь можно получить *электронные энергетические уровни* — точные в двух предельных случаях $R \to \infty$ и $R = 0$ и приближенные в промежуточной области. При больших R энергия будет такой же, как и у атома водорода (21.17)

$$E = -e^2/2a_0 = -13{,}6 \text{ эв}$$

в основном состоянии. (Хотя электронная волновая функция распределена по обоим ядрам, электрон всегда будет *наблюдаться* около одного из них и никогда посредине между ними. Поэтому измеряемая энергия будет такой же, как у атома водорода, если другие ядра находятся далеко.) При $R = 0$ энергия будет такой же, как у иона He^+, у которого $Z = 2$, что увеличивает энергию в 4 раза

$$E = -4e^2/2a_0 = -54{,}4 \text{ эв}$$

в основном состоянии. Переход от одного из этих значений к другому

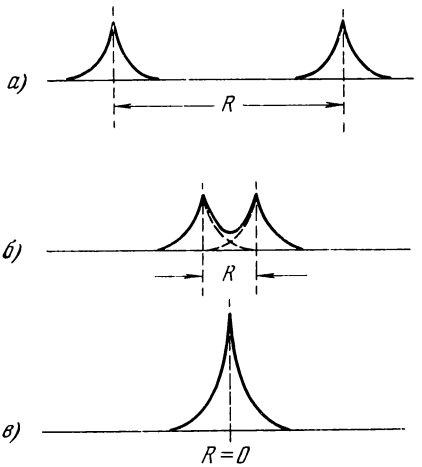


Рис. 24.2.

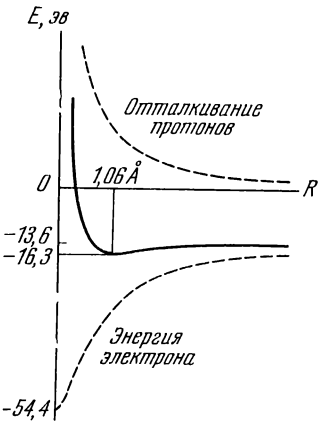


Рис. 24.3.

при изменении R происходит главным образом тогда, когда две водородные волновые функции начнут заметно перекрываться, т. е. в основном состоянии на расстояниях порядка a_0. Эта энергия, как функция параметра R, нанесена пунктиром на рис. 24.3. Она включает кинетическую энергию электрона и его потенциальную энергию взаимодействия с двумя ядрами (нуль энергии соответствует «покоящемуся» электрону на бесконечном расстоянии от обоих ядер).

Кроме того, существует еще энергия ядер. Так как ядра считаются (почти) покоящимися, то это просто энергия их *кулоновского отталкивания*

$$V = e^2/R.$$

Она также изображена пунктиром на рис. 24.3. Полной энергией системы в целом будет теперь сумма электронной энергии и энергии

отталкивания ядер (две пунктирные кривые). Полная энергия изображена сплошной линией. (При нулевой полной энергии электрон и оба протона находятся на бесконечных расстояниях друг от друга.) Кривая полной энергии имеет минимум, который соответствует стабильному состоянию системы. Очевидно, что равновесное расстояние будет порядка a_0 (= 0,53 Å), а энергия связи — порядка нескольких электрон-вольт. Фактические значения этих величин равны 1,06 Å и 16,3 *эв*. Но если электрон рекомбинирует с одним из протонов, то получится выигрыш в энергии на 13,6 *эв*. Поэтому энергия, необходимая для диссоциации H_2^+ на H и H^+, равна 16,3 — 13,6 = 2,7 *эв* (более точно 2,65 *эв*). Именно эта энергия и называется обычно *энергией связи*.

§ 24.2. Молекулы H_2 и гомеополярная связь

После этого введения нейтральную *молекулу водорода* можно описывать, просто добавляя второй электрон в основное состояние. Так как этот второй электрон будет иметь ту же волновую функцию, что и первый, то принцип Паули требует, чтобы эти два электрона имели *антипараллельные спины*. (Третий электрон, опять-таки из-за принципа Паули, должен попасть на возбужденное состояние, так что можно ожидать, что система H_2^- будет гораздо более слабо связанной.) Если пренебречь взаимным электростатическим отталкиванием электронов, то кривая, изображающая электронную энергию двух электронов, снизится (станет более отрицательной) в два раза. Если к этой функции прибавить энергию отталкивания ядер и получить тем самым полную энергию системы, то равновесное расстояние между ядрами уменьшится и энергия связи станет примерно в 2 раза больше, чем для H_2^+. Соответствующие экспериментальные значения равны 0,742 Å и 31,9 *эв*. Эти 31,9 *эв* представляют собой энергию, необходимую для удаления друг от друга всех электронов и протонов на бесконечность. Энергия, необходимая для удаления на бесконечность двух атомов H, будет меньше на удвоенный ионизационный потенциал H и равна 4,77 *эв*.

Эти экспериментальные значения дают несколько большее расстояние между атомами и несколько меньшую связь, чем соответствующие величины, получаемые из описанных выше вычислений. Это расхождение происходит за счет взаимного отталкивания двух электронов, которым мы пренебрегали. Если это отталкивание учесть, то волновые функции исказятся, а электронная энергия возрастет (т. е. станет менее отрицательной), и аккуратные (хотя все еще приближенные) вычисления дают хорошее согласие с экспериментальными значениями.

Соединение двух атомов H в молекулу H_2 представляет собой простейший пример *гомеополярной связи* или, что то же, *ковалентной*

связи, которая имеет место между одинаковыми атомами. Существенным свойством атома водорода, за счет которого он оказывается способным к образованию связи (на химическом языке *химически активным*), является *неспаренный электрон*. Когда два атома приближаются друг к другу, то принцип Паули разрешает неспаренным электронам каждого атома спариться (с антипараллельными спинами) в волновую функцию основного состояния, энергия которого в объединенной системе снижается. Система He_2 не является стабильной, поскольку два электрона могут войти в основное состояние, но следующим двум приходится переходить в возбужденное. (Если в возбужденном состоянии имеется только один электрон, то энергия оказывается не слишком высокой — гелий He_2^+ стабилен.) Однако молекула Li_2 стабильна (2,67 Å, 1,03 *эв*), так как 2*s*-электрон лития играет точно такую же роль, как 1*s*-электрон водорода. Единственное различие состоит в том, что в литии *s*-электрон движется в поле сильно связанного He-подобного ионного остова Li^+, вместо того чтобы двигаться в поле одного протона. В этом причина большего расстояния между атомами у Li_2. Образующими связи электронами являются те, которые лежат вне замкнутых оболочек. Именно поэтому эти электроны называются «*валентными электронами*».

§ 24.3. Ионная связь, многоатомные молекулы

При переходе к неодинаковым атомам плотность электронного заряда (волновая функция) уже не обязана одинаково концентрироваться вокруг двух ядер, как это должно быть (из-за симметрии) для двух одинаковых ядер. Например, молекула плавиковой кислоты HF стабильна (0,92 Å, $\leqslant 6{,}4$ *эв*), хотя энергия связи точно не известна. Электроны предпочитают концентрироваться вокруг ядра F (заряд $+7e$), а не вокруг ядра H ($+e$). Фактически альтернативный путь рассмотрения этой системы состоит в том, что электрон забирается из 1*s*-состояния атома H и помещается в одно незанятое 2*p*-состояние атома F. Получившиеся в результате протон H^+ и неоноподобный F^- притягиваются друг к другу электростатически и образуют молекулу за счет *ионной связи*, или, что то же, *гетерополярной связи*, которая уже обсуждалась в гл. 14. Аналогичным образом устроена молекула LiF. Аналогия проявляется в том, что He-подобный Li^+ электростатически притягивается к Ne-подобному F^-, а на очень малых расстояниях ионные остовы отталкиваются подобно атомам благородных газов (что препятствует образованию стабильных молекул He_2 или HeNe).

Возвращаясь к уже обсуждавшейся в § 14.2 молекуле NaCl, укажем, что работа, необходимая для отделения ионов Na^+ и Cl^-, согласно вычислениям, оказалась равной 5,1 *эв* (экспериментально 4,9 *эв*). Еще 3,8 *эв* (электронное сродство) надо затратить, чтобы

удалить электрон из Cl^-, но при этом выигрывается 5,1 *эв* (энергия ионизации) при возвращении электрона иону Na^+. Таким образом, энергия, необходимая для диссоциации NaCl на Na + Cl, равна (рис. 24.4)

$$4{,}9 + 3{,}8 - 5{,}1 = 3{,}6 \text{ эв}.$$

Характеристики обсуждавшихся здесь систем приведены ниже.

Молекула	Межъядерное расстояние, Å	Энергия связи, *эв*	Молекула	Межъядерное расстояние, Å	Энергия связи, *эв*
H_2^+	1,06	2,65	Li_2	2,67	1,03
H_2	0,74	4,72	HF	0,92	$\leqslant 6{,}4$
He_2^+	1,08	3,1	LiF	—	$\leqslant 6{,}6$
He_2	нестабилен	нестабилен	NaCl	2,51	3,58

Молекулы H_2O (вода) и NH_3 (аммиак) также можно рассматривать как связанные ионно посредством завершения Ne-подобной замкнутой оболочки аниона (N^{---} или O^{--}) электронами из атомов H. Однако относительно CH_4 (метан) возникает вопрос о том, участвуют ли электроны атомов H в завершении Ne-подобной оболочки углерода C или же четыре водородных электрона индивидуально образуют пары с двумя 2*s*- и двумя 2*p*-электронами C для того, чтобы образовать четыре ковалентные связи, подобные связи в H_2. В действительности более полезен второй подход, но урок, который мы извлекаем из этого случая, заключается в том, что ионная и ковалентная связи являются идеализациями (исключая тождественные атомы) и что реальные молекулы могут располагаться между этими двумя крайними случаями. Эти случаи отличаются *распределением заряда* в молекуле — равномерным для ковалентных связей, но с наличием избытка, кратного $+e$ или $-e$ соответственно в катионах и анионах в случае ионной связи. Не требуется очень много софистики для того, чтобы прийти к заключению о том, что распределение заряда, определяемое волновыми функциями электронов, в реальных молекулах может быть промежуточным по отношению к этим крайним случаям, что и происходит на самом деле.

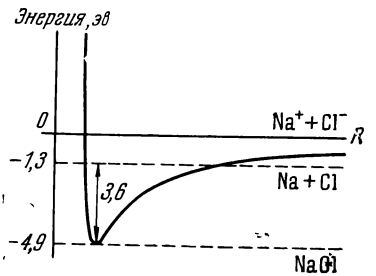


Рис. 24.4.

Как в ковалентной, так и в ионной связи первостепенное значение имеют электроны, находящиеся вне замкнутых оболочек. До 1962 г. полагали, что только эти электроны и могут участвовать в образовании химических соединений. Однако открытием XeF_4 (а затем и других стабильных соединений Xe и Kr) было доказано, что ионизационный потенциал (или, на химическом языке, окислительный потенциал) более тяжелых благородных газов достаточно мал, так что они могут реагировать с такими сильно окисляющими агентами (в химическом смысле с атомами, которые имеют большое электронное сродство), как F. Несмотря на эти интригующие исключения, остается верным, что почти все химические взаимодействия между атомами происходят главным образом за счет электронов, находящихся вне замкнутых оболочек.

Иногда утверждают, что силы связи между атомами (особенно ковалентные силы, но также и отталкивающая компонента ионной связи) могут быть поняты только на основе таких квантовомеханических понятий, как «резонанс» или «обмен». В некотором смысле это верно, но существует теорема (называемая теоремой Хеллманна—Фейнмана), которая частично рассеивает эту мистерию, утверждая, что в определенном смысле силы, скрепляющие молекулу, представляют собой не что иное, как классические электростатические силы. Суть теоремы заключается в том, что силы между ядрами в молекуле могут быть верно вычислены из электростатического отталкивания между ядрами и электростатического притяжения электронов к ядрам. Таким образом, если распределение электронов задано, то вычисление межъядерных (связывающих) сил, или энергии, представляет чисто классическую электростатическую задачу. Конечно, проблема распределения электронов немыслима без квантовой механики, но если распределение электрического заряда известно из волновых функций электронов, то остающаяся задача является классической. Теорема показывает, например, что причиной, ведущей к связи системы H_2^+, является большая амплитуда волновой функции основного состояния электрона в области между двумя ядрами (см. рис. 24.2, *б*). Ядра притягиваются внутрь зоны концентрации отрицательного заряда между ними и образуют стабильную конфигурацию как раз там, где это притяжение уравновешивает их взаимное отталкивание.

§ 24.4. Возбужденные состояния

До сих пор мы обсуждали только основное состояние молекулы, в котором она проводит бóльшую часть своего времени. Существуют, однако, и возбужденные состояния, а переходы между различными состояниями ответственны за спектры излучения и поглощения молекул, точно так же, как в случае отдельных атомов. Следуя той же самой процедуре, что и раньше, мы начнем с простейшей из возмож-

ных систем для того, чтобы рассмотреть первое возбужденное состояние двухатомной молекулы. Удивительным образом это состояние молекулы, так же как и основное, выводится из основного состояния отдельных разделенных атомов. Рассмотрим снова систему H_2^+. Когда R очень велико, тогда вместо волновой функции, рассмотренной ранее (см. рис. 24.2), мы можем использовать волновую функцию, изображенную на рис. 24.5, *а*. Она также описывает ситуацию, в которой электрон наблюдается с равной вероятностью в нижнем энергетическом состоянии любого из двух атомов водорода: плотность вероятности $|\psi|^2$ та же самая, что и для предыдущей волновой функции; тем же самым будет и соответствующий энергетический уровень.

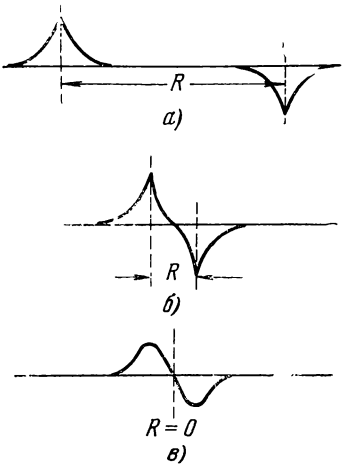


Рис. 24.5.

Однако, когда ядра сближены друг с другом, новая волновая функция (и соответствующий ей энергетический уровень) заметно отличается от рассмотренной выше волновой функции (соответственно, уровня) основного состояния молекулы. Здесь между ядрами имеется узел, который отсутствует в первом случае, и поэтому, как мы видели в общем случае (§ 20.6), эта волновая функция соответствует более высокому энергетическому состоянию. Действительно, при $R = 0$ это состояние должно перейти в одно из состояний H^+; это состояние в действительности должно быть $2p$-состоянием, так как волновая функция имеет один узел в начале координат (рис. 24.5,*в*).

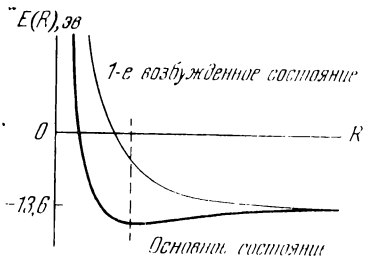


Рис. 24.6.

Из аргументов, аналогичных тем, которые были использованы при расчете основного состояния, следует, что при очень больших R энергия возбужденного состояния равна —13,6 *эв*. Однако на этот раз при $R = 0$ энергия в $2p$-состоянии H^+ также равна —13,6 *эв* ($Z = 2$, $n = 2$ в уравнении (21.17)). Хотя энергия несколько убывает при промежуточных значениях R, это убывание недостаточно для того, чтобы дать минимум в присутствии кулоновского отталкивания двух протонов, и, таким образом, это первое возбужденное состояние является

несвязанным состоянием молекулярного иона (рис. 24.6). (Большинство других молекул имеет некоторое число связанных возбужденных состояний.) Электронное возбуждение этого молекулярного иона приводит к диссоциации. Причина, по которой это состояние имеет большую энергию, может быть понята также на основе рассмотрения волновой функции, если использовать теорему Хеллманна — Фейнмана: так как ψ имеет узел, плотность электронного заряда $-e|\psi|^2$ очень мала в области между ядрами, и поэтому ядра не притягиваются сильно к центру этой области отрицательным электронным зарядом. Эта ситуация противоположна той, которая возникает в основном состоянии, где существует концентрация отрицательного заряда между ядрами. На рис. 24.7 дана плотность электронного заряда в H_2^+ для основного состояния *а*) и первого возбужденного состояния *б*).

Рис. 24.7.

§ 24.5. Молекулярные спектры

Переходы между различными состояниями молекул ответственны, как и в случае изолированного атома, за спектры излучения и поглощения. Однако даже в двухатомной молекуле энергетические уровни не могут классифицироваться по их полному угловому моменту, что оказалось таким успешным в атоме. В классическом случае угловой момент электрона в задаче с двумя силовыми центрами не сохраняется, так как она не приводит к центральной силе (§ 3.5). С точки зрения квантовой механики это означает, что собственные функции оператора энергии (т. е. стабильные состояния) молекулы не являются собственными функциями оператора $\mathbf{L}^2$, и, таким образом, угловой момент не имеет определенного значения в стабильных состояниях. В двухатомной молекуле, однако, за счет вращательной симметрии относительно оси, проходящей через ядра (и принятой за ось z), нет вращательного момента относительно этой оси, и поэтому z-компонента углового момента сохраняется. Это значит, что стабильные состояния являются собственными функциями $\mathbf{L}_z$ и z-компонента углового момента имеет определенные значения $m\hbar$, где $m = 0, 1, 2, \ldots$ Когда речь идет о молекулах, то вместо $m\hbar$ обычно пишут $\lambda\hbar$. Состояния с $\lambda = 0, 1, 2, \ldots$ обозначаются соответственно σ, π, δ, ... по аналогии с s, p, d, ... — обозначениями для состояний атома. Оба состояния на рис. 24.6 оказываются σ-состояниями.

Имеется еще один аспект, в котором молекулярные энергетические уровни отличаются от атомных. В молекуле два ядра могут дви-

гаться относительно друг друга, и квантование этого движения приводит к новой структуре в схеме энергетических уровней. (И в молекулярном и в атомном случае мы пренебрегаем поступательной кинетической энергией всей системы, так как эта энергия, соответствующая свободным частицам, не квантуется.) Ядерное движение может быть разделено на две части: в связанном состоянии, как и в основном состоянии всех стабильных молекул (см. рис. 24.2), ядра могут совершать колебания около положения равновесия, которое соответствует точке минимума кривой энергии, как функции межъядерного расстояния. Кроме того, вся молекула может свободно вращаться относительно центра масс. Оба эти движения квантуются, давая при этом энергетические уровни и приводя к довольно сложным молекулярным спектрам. В достаточно хорошем приближении мы можем изучать их отдельно, даже если в действительности между ними и существует какая-нибудь связь.

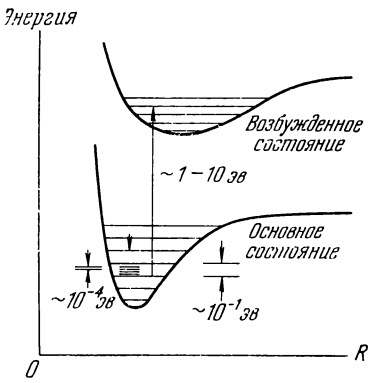


Рис. 24.8.

Молекулярные *колебания* около положения равновесия уже были рассмотрены в §§ 4.4 и 14.5. Там мы нашли, что для не слишком больших энергий колебаний (по сравнению с энергией диссоциации D) движение является приблизительно просто гармоническим с частотой $\nu_0 \approx 10^{13}$ *сек*$^{-1}$, вычисленной для NaCl. С точки зрения квантовой механики осциллятор может совершать колебания только с определенными дискретными энергиями; эти энергетические уровни, приведенные в уравнении (18.25) и § 20.6, имеют следующий вид:

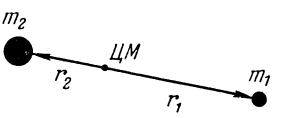


Рис. 24.9.

$$E_n = (n + 1/2)h\nu_0. \qquad (24.2)$$

Таким образом, например, в молекуле NaCl уровни колебательной энергии отделены друг от друга расстояниями

$$h\nu_0 \approx \frac{6{,}6\cdot 10^{-27}\cdot 10^{13}}{1{,}6\cdot 10^{-12}} = 0{,}04 \text{ эв}.$$

Так как для энергии диссоциации типичным является значение по меньшей мере 1 *эв*, то в потенциальной яме обычно умещается более чем 20 колебательных уровней. На рис. 24.8 показаны электронные

колебательные и вращательные энергетические уровни двухатомной молекулы.

Вращение относительно центра масс описывается с помощью момента инерции I. Из рис. 24.9 видно, что

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2.$$

Нетрудно показать (задача 24.8), что это эквивалентно выражению

$$I = mr^2, \tag{24.3}$$

где m — приведенная масса (3.35) и $r = r_1 + r_2$ — расстояние между ядрами в двухатомной молекуле. Тогда энергия вращения связана с моментом L соотношением

$$E = L^2/2I. \tag{24.4}$$

С квантовомеханической точки зрения *оператор* L^2 имеет, согласно уравнению (20.29), собственные значения

$$L_l^2 = l(l+1)\hbar^2,$$

так что энергетические уровни (собственные значения) равны

$$E_l = \frac{\hbar}{2I} l(l+1). \tag{24.5}$$

Заметим, что здесь частицей, описываемой волновой функцией, на которую действует L^2, является ядро, а не электрон. Тем не менее L^2 имеет точно те же собственные значения; масса частицы входит только в собственные значения энергии через I.

Вращательные уровни в уравнении (24.5) не являются эквидистантными. Расстояние между уровнями равно

$$E_l - E_{l-1} = \frac{\hbar^2}{I} l. \tag{24.6}$$

Вновь используем значения этих величин для молекулы NaCl из гл. 4 § 4

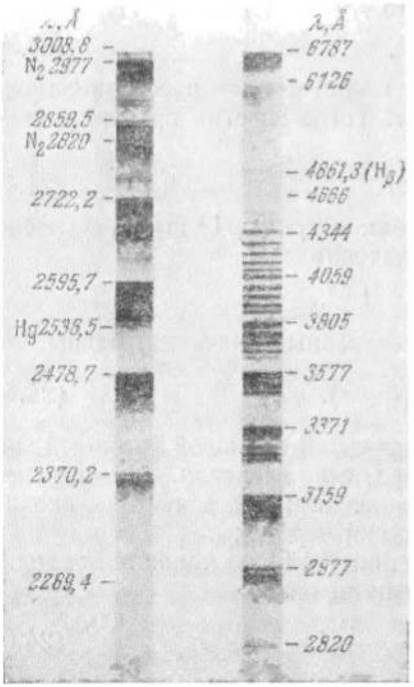
$$I = md_0^2 = 14 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-24} (2{,}5 \cdot 10^{-8})^2 = 1{,}45 \cdot 10^{-38}\ г \cdot см^2,$$
$$\hbar^2/I = 1{,}054^2 \cdot 10^{-54}/1{,}45 \cdot 10^{-38} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-12} \approx 5 \cdot 10^{-5}\ эв.$$

Поэтому более низкие вращательные уровни разделены меньшими промежутками, чем колебательные уровни. Если имеется l_0 вращательных уровней между каждой парой колебательных уровней, то среднее расстояние между ними, согласно уравнению (24.6), будет приблизительно равно $(\hbar^2/I)^{1/2} l_0$. Тогда при $h\nu_0 = 0{,}04\ эв$

$$l_0 \approx \frac{4 \cdot 10^{-2}}{5 \cdot 10^{-5} l_0/2}, \qquad l_0^2 \approx 1600, \quad l_0 \cong 40.$$

Типичная полная схема энергетических уровней двухатомной молекулы, имеющей одно связанное возбужденное электронное со-

стояние, изображена на рис. 24.8. Кривизна энергии возбужденного состояния как функции межъядерного расстояния и положение ее минимума не обязательно такие же, как для основного состояния электронов. Атомы вполне могут быть более слабо связаны в возбужденном состоянии, давая более мелкую и широкую потенциальную яму с минимумами, находящимися на больших расстояниях. (Действительно, в случае, который мы разобрали подробно, а именно в H_2^+, возбужденное состояние вообще не было связанным.) Поэтому расстояние между колебательными уровнями в общем случае различно в основном и возбужденном состояниях, и аналогичное утверждение справедливо для вращательных уровней (поскольку они имеют различные d_0). До сих пор не было сделано ни одной попытки вычислить все вращательные уровни, изображенные на рис. 24.8.



XV. Полосатый спектр излучения воздуха.

Существует три типа молекулярных спектров, обусловленных переходами между этими состояниями.

1) Электронное состояние меняется совместно с колебательным и вращательным состоянием. Электронный переход совершается так быстро, что ядра не успевают сдвинуться намного, и поэтому стрелка, изображающая переход, направлена на рис. 24.8 вертикально вверх. Расстояние между состояниями составляет несколько электрон-вольт, поглощение (или излучение) лежит в области видимого спектра или около нее. Поскольку для начального и конечного состояний существует так много колебательных и вращательных подуровней, то эти спектры имеют очень сложную структуру. Линии обычно образуют полосу, поэтому такие спектры называются полосатыми (фото XV).

2) Колебательное и вращательное состояния меняются, но нет электронного возбуждения. Изменение энергии в этом случае оказывается равным приблизительно 0,04 *эв*, и излученный или погло-

щепный фотон имеет ту же самую энергию:

$$h\nu \approx 0{,}04 \text{ эв}.$$

Соответствующая длина волны

$$\lambda = c/\nu \approx 3 \cdot 10^{-3} \text{ см} = 30 \text{ мк}.$$

Эти переходы ответственны за инфракрасный спектр и хорошо приспособлены к тому, чтобы давать экспериментальную информацию о колебательных частотах и расстояниях между атомами в молекуле, находящейся в равновесном состоянии.

3) Изменяется только состояние вращения. Для этих переходов $h\nu \approx 10^{-4} \div 10^{-3}$ эв, так что

$$\lambda \approx 1 \text{ см} \div 1 \text{ мм}.$$

Эти длины волн лежат в микроволновой области, и поглощение на этих переходах обычно изучается в микроволновой спектроскопии.

Если возбужденное состояние не является связанным (см. рис. 24.6), то переходы в это состояние ведут к диссоциации молекул. Так как «колебательные» уровни в несвязанном возбужденном состоянии переходят в континуум уровней поступательного движения свободных атомов, то результирующий спектр является непрерывным. Появление непрерывной части в спектре поглощения молекулы дает поэтому экспериментальное подтверждение фотохимической диссоциации молекулы.

Задачи

24.1. Энергия системы H_2^+ равна —16,3 эв при равновесном расстоянии между ядрами в 1,06 Å (см. рис. 24.3). Вычислить вклад кулоновского отталкивания ядер и вклад энергии электрона.

24.2. Вычислить энергию ионизации молекулярного водорода $H_2 \rightarrow H_2^+ + e^-$.

Указание: рассмотреть $H_2 \rightarrow 2H^+ + e^- + e^- \rightarrow H_2^+ + e^-$. Труднее или легче ионизовать молекулярный водород по сравнению с атомным?

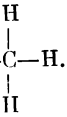
24.3. Какая энергия требуется для осуществления реакции $Li_2 \rightarrow 2Li^+ + 2e^-$? (Найти энергию ионизации Li в табл. 3.) Какова энергия кулоновского отталкивания двух ионов лития Li^+ при молекулярном равновесном расстоянии, равном 2,67 Å?

24.4. Молекулярные ионы He_2^+ и H_2^- имеют по три электрона. Какой из этих ионов, по вашему мнению, более стабилен? Почему?

24.5. Атом He и ион H^- имеют по два электрона. Для удаления первого электрона из He необходима энергия в 24 эв, для удаления второго — 54 эв. Чтобы удалить первый электрон из H^-, необходима энергия лишь 0,8 эв по сравнению с 13,6 эв, требующимися для второго. Дать качественное объяснение того факта, что отношение энергий для He (около 1/2) много больше, чем для H^- (около 1/20).

24.6. Сродство электрона с водородом составляет 0,754 эв (см. задачу 24.5). Оценить энергию связи гидрида лития LiH, воспользовавшись энергией ионизации Li и кулоновским притяжением между Li^+ и H^- при равновесном расстоянии в 1,60 Å. (Пренебречь энергией отталкивания ионного остова.)

24.7. Этан и пропан имеют химические формулы C_2H_6 и C_3H_8 соответственно. Написать их структурные формулы в предположении, что молекулы образуются при помощи ковалентных связей. *Указание*: структурная формула метана CH_4 имеет вид



24.8. Доказать, что момент инерции двухатомной молекулы дается формулой (24.3).

24.9. Колебательная частота молекулы NaCl равна $1{,}14 \cdot 10^{13}$ *сек*$^{-1}$ (§ 14.5). Вычислить нулевую энергию. (Эта энергия включена в энергию связи, см. стр. 442).

24.10. Молекула H_2 поглощает инфракрасный свет с длиной волны 2,3 *мк*, когда колебательное состояние изменяется на $\Delta n = 1$ (причем электронное или вращательное состояния не меняются). Чему равна нулевая энергия?

24.11. Вычислить разницу в расстояниях между колебательными уровнями для молекул H_2 и HD, где D — дейтерий, тяжелый изотоп водорода с двойной атомной массой. Какая из молекул имеет бо́льшую энергию связи?

24.12. На рис. 24.8 показано, что когда электрон возбужден, то потенциальная яма имеет меньшую кривизну и большее равновесное расстояние между уровнями. Дать качественное объяснение такого эффекта. Почему расстояние между уровнями было бы больше для колебательных состояний? Для вращательных состояний?

24.13. Вычислить наименьшее расстояние между уровнями вращательной энергии H_2 (в *эв*). Какому расстоянию в длинах волн (в Å) для света в видимой области спектра ($\sim$ 5000 Å) соответствует такое расстояние между уровнями?

Литература для справок

1. Борн М., Атомная физика, «Мир», 1965, гл. 9.
2. Гайтлер В., Элементарная квантовая механика, ИЛ, 1948, гл. 8,9.
3. Веселов М. Г., Элементарная квантовая теория атомов и молекул, Физматгиз, 1962.
4. Блохинцев Д. И., Основы квантовой механики, «Высшая школа», 1961.

Глава 25

Электронная зонная теория твердых тел

Как мы видели в предыдущей главе, квантовая механика добилась больших успехов в объяснении свойств молекул. Она достигла такого же успеха в изучении свойств твердых тел, хотя этот факт может на первый взгляд показаться удивительным: так как макроскопическое твердое тело обычно содержит приблизительно в 10^{23} раз больше частиц, чем молекула, то можно было бы опасаться, что задача будет в 10^{23} раз труднее для решения. Однако это не так, и в действительности она может быть даже легче, чем задача для достаточно сложной молекулы. Причина этого лежит в периодичности кристаллической структуры (гл. 13) и в практически бесконечных размерах кристалла. Следовательно, сложность, по существу заключается в описании единичной ячейки, и мы можем достичь в наших рассуждениях такого же уровня строгости, как и в случае молекул.

Подход, которому мы будем следовать, тот же, которому мы следовали в случае атомов и, позже, молекул. А именно, мы сначала рассмотрим одноэлектронные состояния в поле всех атомных ядер или ионных остовов. Затем мы сведем многоэлектронную задачу к более удобному для изучения виду простым заполнением всеми электронами рассмотренных ранее одноэлектронных состояний, принимая при этом во внимание принцип Паули. Эта операция сводится к пренебрежению электростатическим взаимодействием электронов. Если принять во внимание это взаимодействие, то энергетические уровни несколько сдвинутся, но тем не менее первоначальное описание энергетических уровней на основе так называемой энергетической зонной схемы останется достаточным. Общие особенности этой схемы энергетических уровней могут быть экстраполированы с энергетических уровней двухатомной молекулы, описание которой уже было дано в гл. 24.

§ 25.1. Происхождение электронных энергетических зон

Общая задача одного электрона в поле более чем двух силовых центров (ядер или ионов) настолько трудна, что строгое аналитическое решение никогда не было получено. Можно найти приближенные решения, но математический метод их получения (теория возмущений) довольно сложен, и мы его не рассматривали. Поэтому

мы проведем качественное обсуждение ожидаемого возможного расположения электронных энергетических уровней. Это рассмотрение опирается на детальное описание двухатомной молекулы (§ 24.4).

Для понимания электронной структуры твердых тел необходимо отметить важную особенность энергетической диаграммы (рис. 24.6) двухатомной системы, заключающуюся в том, что когда два атома находятся очень далеко друг от друга, то основной энергетический уровень *вырожден* (равно как и каждое возбужденное состояние). На рис. 25.1 показано расщепление уровней в H_2^+. Но когда атомы *сближаются*, это двукратное вырождение снимается взаимодействием между атомами, которое возмущает волновые функции и энергетические уровни. На рис. 25.2 показаны волновые функции двух состояний, изображенных на рис. 25.1. Первоначально вырожденный уровень *расщепляется* на два, расстояние между ними увеличивается по мере того, как усиливается взаимодействие между двумя атомами на меньших расстояниях. (Каждый из этих атомов кроме того имеет двукратное вырождение, соответствующее двум спиновым состояниям.) Если мы рассмотрим три атома, находящиеся на большом расстоянии друг от друга, то основное состояние этой системы будет иметь трехкратное вырождение. Это вырождение снимается взаимодействием атомов при их сближении.

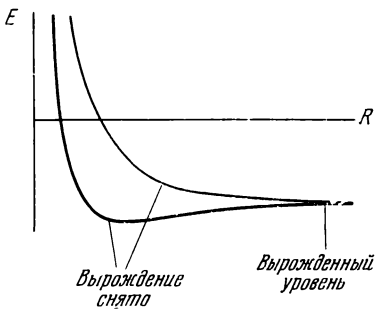


Рис. 25.1.

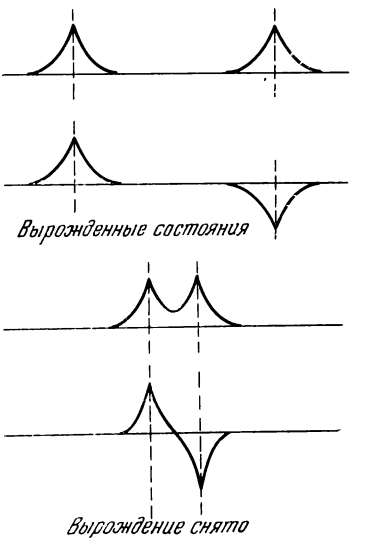


Рис. 25.2.

Аналогичным образом N атомов, находящихся на большом расстоянии, имеют N-кратный вырожденный уровень, который расщепляется, когда атомы сближаются. На рис. 25.3 схематически изображено расщепление энергетического уровня в системе одиннадцати атомов. Добавление каждого нового атома увеличивает на единицу число уровней в системе энергетических уровней. Однако добавление нового атома не увеличивает существенно ширину распре-

деления расщепляемых энергетических уровней, если мы предположим, что расстояние между соседними атомами остается приблизительно постоянным. Причина этого заключается в том, что перекрывание волновых функций, соответствующих каждой паре отдельных атомов, не увеличивается, когда добавляется новый атом,

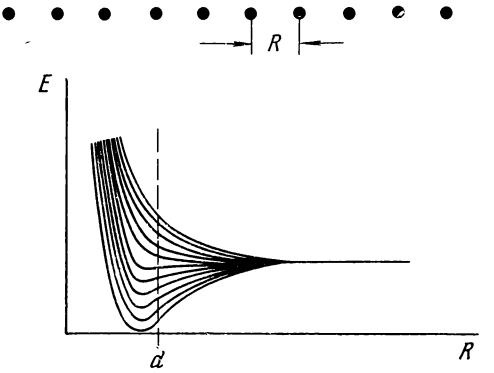


Рис. 25.3.

а именно этим перекрыванием и обусловлен сдвиг энергетических уровней. Если мы теперь предположим, что расстояние R между атомами в их равновесном состоянии в кристалле фиксировано и равно d, то мы сможем нарисовать схему энергетических уровней для электрона в твердом теле (рис. 25.4), которая будет аналогична схеме для электрона в атоме (рис. 18.2).

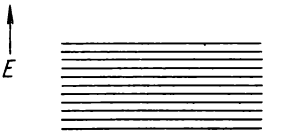


Рис. 25.4.

В *твердом теле* число N атомов может быть порядка 10^{23}. Так как разброс системы энергетических уровней (первоначально вырожденных) равен самое большее нескольким электрон-вольтам, то расстояние по энергии между соседними уровнями будет не больше чем 10^{-22} *эв*. Эти уровни расположены так близко друг от друга, что практически образуют *непрерывную энергетическую зону* уровней. Даже при самой низкой температуре, которая была когда-либо получена экспериментально — около 10^{-5} *град*— величина kT имеет значение около 10^{-9} *эв*, что больше чем в 10^{13} раз превышает расстояния между уровнями. Поэтому существенной особенностью энергетических уровней в твердом теле является то, что они образуют квазинепрерывные зоны, реальная дискретность которых никогда не проявляется при любой достижимой температуре. Хотя, с точки зрения расстояния между уровнями, их дискретность

в энергетической зоне не важна, но из-за этой дискретности в зоне существует конечное (хотя и очень большое) число уровней, имеющее порядок N, где N — число атомов в твердом теле. Нижний уровень может содержать два электрона с антипараллельными спинами, следующий уровень — еще два и т. д. Согласно *принципу Паули* каждый уровень могут занимать только два электрона (один на каждое спиновое состояние). Полное число электронов, которое должно уместиться на этих энергетических уровнях, также имеет порядок N. Таким образом, некоторая значительная часть уровней будет заполнена электронами, остальная часть будет пустой. Например, в рассмотренной системе N атомов водорода в зоне будет N уровней (соответствующих 1*s*-состояниям атомов H), на которых нужно разместить N электронов (один электрон из каждого атома). Так как зона может содержать $2N$ электронов, то она заполняется лишь наполовину. С другой стороны, соответствующая зона в аналогичной системе N атомов He была бы заполнена целиком, так как каждый атом вносит два электрона.

§ 25.2. Разделение на металлы и изоляторы

В системе более тяжелых атомов следует учитывать также зоны, которые соответствуют более высоким энергетическим уровням. Тут будет зона из N уровней, соответствующих 1*s*-состояниям, зона из N уровней, соответствующих 2*s*-состояниям, зона из $3N$ уровней, порожденных 2*p*-состояниями (трижды вырожденными), и т. д. Заселенность этих зон определяется заполнением уровней в изолированном нейтральном атоме. Те зоны, которые соответствуют *замкнутым оболочкам* изолированного атома, всегда будут *целиком заполнены* и в твердом теле. Зоны, соответствующие валентным электронным состояниям, могут как быть, так и не быть заполнены целиком.

Как и в случае молекулы, связь почти полностью обусловлена электронами, находящимися вне замкнутой оболочки. Поэтому зоны, соответствующие *незамкнутым оболочкам*, будут шире на несколько *эв*, так как электронные волновые функции заметно перекрываются. Зоны, соответствующие внутренним оболочкам, будут, однако, много у́же, так как волновые функции внутренних оболочек быстрее спадают с расстоянием и, следовательно, не очень сильно перекрываются в междуатомном промежутке, размеры которого определяются перекрыванием волновых функций внешних оболочек. На рис. 25.5 показано расщепление уровней, соответствующих внутренним и внешним оболочкам. Соответствующая схема энергетических уровней состоит из широких и узких зон (рис. 25.6).

Глубина, до которой состояния в энергетической зоне заняты электронами, оказывает очень сильное влияние на свойства твердого

тела. Как мы увидим в следующей главе, если зона заполнена целиком, то вещество — изолятор или полупроводник, в то время как при частичном заполнении зоны вещество является металлом. К сожалению, эти свойства невозможно предсказать на основе простого рассмотрения, которое мы привели, так как схема валентных электронных зон становится очень сложной для более тяжелых атомов. Даже для атома не тяжелее атома Be ($Z = 4$) наше предсказание было бы неверным: в атоме Be два электрона находятся в

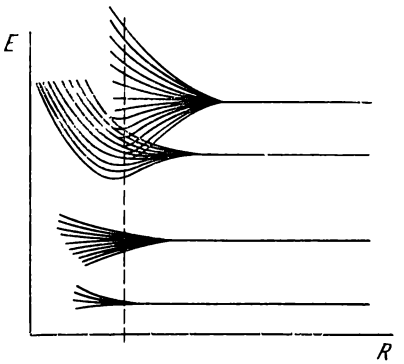


Рис. 25.5.

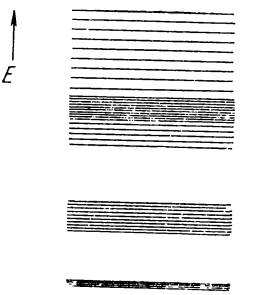


Рис. 25.6.

2*s*-состоянии (и два электрона в 1*s*-состоянии), так что зона, соответствующая 2*s*-состояниям, была бы заполнена и Be был бы изолятором. Тем не менее бериллий — металл, так как его зона, обусловленная 2*p*-состояниями, перекрывается с 2*s*-зоной, образуя в действительности одну незаполненную зону.

Предсказание оказывается неверным даже для H, хотя в этом случае верный ответ можно было бы предвидеть: согласно примеру, приведенному выше, 1*s*-зона системы атомов водорода была бы заполнена только наполовину и твердый водород оказался бы металлом. Затруднение здесь в том, что *два* атома H образуют очень стабильную систему; лишь весьма слабые силы между этими стабильными молекулярными единицами способствуют созданию конденсированной фазы водорода (точка кипения 20° K). Многие другие случаи гомополярных сил аналогичны данному, в котором образуются стабильные молекулы, дающие при обычных температурах газ, так как межмолекулярные силы очень слабы. Элементы IV группы — C (алмаз), Si, Ge — являются исключениями, так как четыре их валентных электрона могут образовывать четыре ковалентные связи; эти четыре связи на атом могут удерживать атомы в стабильной трехмерной структуре (структура алмаза), что невозможно, если имеется только одна связь на атом, как для H.

Наша простая схема зон в действительности дает недвусмысленное различие между изоляторами и металлами только для элементов, которые являются благородными газами (например, He — изолятор) или щелочными металлами (например, Li — металл), где есть или замкнутая p-оболочка (или 1s-оболочка), или один s-электрон вне ее. Относительно соединений она правильно предсказывает, что ионные кристаллы являются изоляторами: например, в LiF зона, обусловленная 2p-состоянием фтора, целиком заполнена, а 2s-зона лития целиком пуста. В широком смысле слова, она дает довольно хорошую возможность для предсказаний, так как большинство других элементов образуют ковалентные газовые молекулы или же являются металлами или полупроводниками (полупроводники — это «изоляторы» с очень узкой щелью между заполненной валентной зоной и следующей, расположенной выше, пустой зоной). Этот качественный успех вытекает из тенденции волновых зон перекрываться сложным образом в более тяжелых элементах. (Наиболее серьезные отклонения — бор и алмаз, оба — изоляторы.)

Провести вычисления, дающие количественное согласие с экспериментальной информацией о конкретной зонной структуре, чрезвычайно трудно (как и провести соответствующий эксперимент), но в этом направлении уже имеется значительный прогресс. Во всяком случае, даваемая квантовой механикой качественная картина, согласно которой электронные энергетические уровни лежат в *разрешенных зонах*, разделенных *запрещенными щелями*, в которых разрешенных уровней нет, оказалась чрезвычайно плодотворной на пути к пониманию электронных свойств твердых тел. Некоторые из этих свойств будут рассмотрены в следующей главе.

§ 25.3. Электронные волновые функции и эффективная масса

Свойства твердых тел, зависящие от движения или возбуждения электронов, в особенности электропроводность металлов и полупроводников, могут быть объяснены только на основе квантовомеханической картины электронных энергетических уровней, которая была изложена в предыдущем разделе. Электронная структура внутренних оболочек атомов не очень сильно изменяется при их объединении (соответствующие энергетические зоны очень узки), так что атомы во многом сохраняют свою индивидуальность. Явления, в которых участвуют эти внутренние электроны (например, рентгеновское излучение и поглощение) по существу те же, что и в случае, когда рассматриваются атомы, изолированные в газе. Электронное поведение, характерное для конденсированного состояния вещества, зависит от электронов внешней валентной оболочки, волновые функции которых сильно возмущаются соседними атомами, что ведет к относительно широкой энергетической зоне в твердом

теле. В дальнейшем наше внимание будет ограничено электронами, занимающими состояния в верхних широких энергетических зонах.

Для того чтобы анализировать электронное поведение количественно более подробно, необходимо иметь определенные (предпочтительно аналитические) выражения для волновых функций электрона, соответствующих энергетическим состояниям в верхних энергетических зонах. Как было подчеркнуто ранее, *атомные волновые функции*, остающиеся пригодными для внутренних электронов, для внешних электронов не очень-то хороши. Эти исходные электронные волновые функции сильно перекрываются, когда атомы вплотную подходят друг к другу, и поэтому резко искажаются. Действительно, например, в случае молекулы H_2 (см. рис. 25.2), волновые функции размазаны по всем ядрам, вместо того чтобы быть сконцентрированными вокруг отдельных ядер. На рис. 25.7 дано схематическое изображение плотности электронов в кристалле. В любом заданном состоянии вероятность нахождения электрона почти всюду в твердом теле велика. Это значит, что внутри твердого тела электрон способен двигаться более или менее свободно.

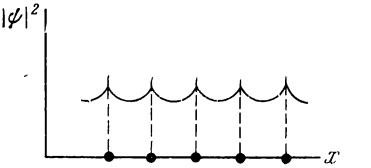


Рис. 25.7.

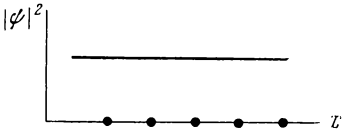


Рис. 25.8.

Это обстоятельство подсказывает очень простой выбор для волновых функций, который, как можно надеяться, приведет к полезным результатам для этих электронов; а именно волновые функции электронов могут быть аппроксимированы *плоскими волнами* (рис. 25.8)

$$\psi = e^{i\mathbf{kr}}. \qquad (25.1)$$

Эти плоские волны соответствуют модели *свободных электронов* в твердом теле (§ 20.4), каждый из которых имеет определенный постоянный импульс, заданный уравнением (20.9),

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \qquad (25.2)$$

Приближение свободных электронов сводится к предположению о том, что потенциальная энергия электрона постоянна всюду внутри кристалла. Здесь мы пренебрегаем имеющими место на самом деле ее периодическими вариациями, происходящими за счет наличия заряда у ионных остовов, состоящих из ядер атомов плюс электроны внутренних оболочек. Это, несомненно, грубое приближение, и во многих современных теориях твердого тела стремятся вводить улучшенные волновые функции. Неожиданным является то, что

даже приближение свободных электронов вносит тем не менее существенный вклад в понимание эффектов, которые мы будем рассматривать.

Принятый нами выбор волновых функций определяет собой размещение энергетических уровней в зоне. Для свободного электрона, согласно уравнению (20.7), будет

$$E = \frac{p^2}{2m} = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) k^2 = E(k). \tag{25.3}$$

Каждое различное значение $\mathbf{k}$ определяет свою волновую функцию или два различных состояния (так как возможны два направления спина). В этом соотношении между E и k подразумевается, что *нуль энергии* находится на нижней границе энергетической зоны. Здесь имеется отличие от соглашения, принятого для атомных состояний (нуль на бесконечности), но выбор нуля произволен, и здесь мы будем придерживаться выбора, диктуемого соотношением (25.3).

Описание в терминах $E(k)$ фактически предполагает более общее описание, в котором мы можем несколько ослабить допущение об абсолютно свободных электронах. Если для получения лучшего приближения рассматривать реальный периодический потенциал, то плоские волновые функции $\exp(i\mathbf{kr})$ можно будет модифицировать введением слабо изменяющейся амплитуды (вместо постоянной) и зависимость $E(k)$ от k будет несколько отличаться от квадратичной, справедливой для свободных электронов. Можно тем не менее разложить реальную функцию $E(k)$ в степенной ряд

$$E(k) = c_1 k^2 + c_2 k^4 + \ldots$$

Постоянный член в этом ряду отсутствует, так как мы выбираем $E = 0$ для $\mathbf{k} = 0$; все нечетные степени k исчезают, так как $E(k) = E(-k)$, причем энергия не зависит от направления движения электрона. Поэтому, сохраняя только первый член степенного ряда, получаем

$$E = (\hbar^2/2m^*)k^2, \tag{25.4}$$

где мы обозначили $c_1 \equiv (\hbar^2/2m^*)$. Коэффициент c_1 выражен через новую константу m^* для того, чтобы выявить сходство между уравнениями (25.4) и (25.3). Так как m^* появляется в уравнении (25.3) на месте массы электрона m, то мы можем назвать m^* «эффективной массой» электрона.

Константа m^*, эффективная масса электрона, может быть вычислена после того, как определена улучшенная волновая функция. С другой стороны, m^* может быть принята в качестве подгоночного параметра теории, и ее значение для каждого частного вещества, полученное из эксперимента, может быть использовано для предсказаний результатов других экспериментов. (Позитивным момен-

том этой ситуации является то, что об экспериментальном значении m^* можно сказать, что оно дает возможность получать некоторую информацию о зонной структуре твердого тела.) С этой дополнительной возможностью варьирования, допускаемой изменяемостью массы электрона, которая учитывает реально действующие силы, теория «свободных» электронов дает довольно согласованную картину большинства электронных явлений. Эффективная масса электрона обычно *определяется* из приведенного выше уравнения (25.4) по формуле

$$m^* \equiv \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2}. \tag{25.5}$$

В этом приближении электроны называются «квазисвободными»; это означает, что они ведут себя так, *как если бы* они были свободными.

§ 25.4. Плотность состояний и энергия Ферми

Соотношение между E и k детально определяет, как энергетические уровни расположены в энергетической зоне. Как уже указывалось, дискретные уровни в зоне настолько близки, что для большинства целей E может рассматриваться как непрерывная переменная. Тем не менее необходимо знать, сколько состояний действительно имеется в каждом частном интервале энергии, скажем, между E и $E + dE$. Это число будет пропорционально dE (для достаточно малого dE), но будет зависеть от E; оно может быть записано в виде

$$S(E)dE,$$

где величина $S(E)$ называется *плотностью состояний*. Плотность состояний есть функция энергии, дающая число состояний в единичном интервале энергии, и ее значения очень велики, если за единицу энергии взять электрон-вольт. Так как каждое значение k определяет два состояния с противоположными спинами, то мы можем найти из соотношения для $E(k)$ для квазисвободных электронов соответствующую плотность состояний; она имеет следующий вид:

$$S(E) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E}, \tag{25.6}$$

где V — полный объем твердого тела. Плотность состояний, как и можно было ожидать, пропорциональна объему и параболически зависит от E.

Для того чтобы получить приведенное выше выражение 25.6) для S (E), необходимо временно видоизменить наше пред-

положение о том, что электроны строго квазисвободны, хотя это допущение и является наиболее удобным для других целей. Они не являются полностью свободными, так как заключены в твердом теле, как частицы в ящике. (Энергия связанного состояния электрона в твердом теле меньше нуля, если нуль выбран на бесконечности.) Если на поверхности твердого тела удовлетворены граничные условия, то в модели квазисвободных электронов получается дискретный набор энергетических уровней. Волновые функции, удовлетворяющие граничным условиям, а именно те, которые обращаются в нуль на границе (§ 20.5), имеют вид $\sin kx$, где k принимает одно из значений $n\pi/L$ (уравнение (20.11)). Эти волновые функции аналогичны стоячим волнам (§ 16.3). С другой стороны, волновые функции $\exp ikx$ свободных электронов аналогичны бегущим волнам (§ 16.2), $\exp i(\omega t + kx)$, что можно увидеть, если умножить их на зависящий от времени множитель $\exp i\omega t$. Волновые функции, которые должны быть использованы в доказательстве, удовлетворяют граничным условиям и являются *стоячими волнами* $\sin kx$, а не бегущими $\exp ikx$; использование последней функции приводит к допущению о том, что вещество в действительности имеет бесконечную протяженность и что поэтому поверхностными эффектами можно пренебречь. Здесь, однако, как раз конечные размеры и приводят к дискретным уровням (и появлению объема V в $S(E)$), и поэтому нужно подсчитать именно стоячие волны.

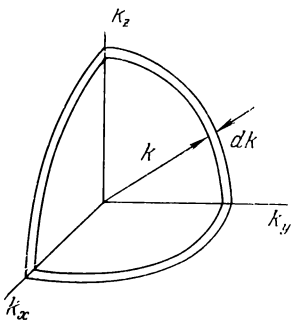


Рис. 25.9.

Если мы предположим, что «ящик» имеет форму куба с ребром L, то, как и в одномерном случае, где L должно быть целым числом полуволн, нужно потребовать (как в уравнении (20.11)), чтобы было

$$k_x = \frac{\pi}{L} n_x, \quad n_x = 1, 2, 3, \ldots,$$

и аналогично для y- и z-компонент, так как электронные волны могут существовать также и в этих направлениях. Таким образом, в единичном интервале k_x существует ровно L/π целых чисел и в 2 раза большее число состояний (различающихся двумя направлениями спина). Для того чтобы подсчитать число состояний между k и $k + dk$ в трех измерениях, мы должны умножить на $(L/\pi)^3$ соответствующий элемент объема в k-пространстве, который с точностью до выбора масштаба одинаков как в импульсном пространстве, так и в пространстве скоростей, ибо $p_x = \hbar\kappa_x$ и т. д. Элемент объема сферической оболочки в k-пространстве равен $4\pi k^2 dk$ (рис. 25.9).

Так как допустимы лишь положительные значения k_x, k_y, k_z, то следует ограничить рассмотрение одним октантом, так что объем сферической оболочки нужно разделить на 8. Тогда число состояний между k и $k + dk$ оказывается равным

$$2\left(\frac{L}{\pi}\right)^3 \frac{4\pi k^2 dk}{8}. \tag{25.7}$$

Напомним, что множитель 2 введен для того, чтобы учесть два направления спина; множитель $(L/\pi)^3$— плотность различных волновых функций в k-пространстве; остающийся сомножитель — объем слоя между k и $k + dk$ в k-пространстве. Теперь, используя соотношение (25.4) для квазисвободных электронов

$$E = (\hbar^2/2m^*)k^2, \tag{25.4}$$

вычислим интервал dE, соответствующий dk:

$$dE = (\hbar^2/2m^*)2kdk. \tag{25.8}$$

Наконец, число состояний, заданное уравнением (25.7), превращается в $S(E)dE$ подстановкой соотношений (25.4) и (25.8). Результатом является выражение (25.6)

$$S(E) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E}, \tag{25.6}$$

где $V = L^3$. Хотя плотность состояний выведена для стоячих волн, а мы теперь будем использовать бегущие волны, этим не вносится никакой серьезной непоследовательности, так как в любом случае предположение о плоских волнах является только достаточно грубым приближением. Из выражения (25.6) следует, что если m^* велика, то плотность состояний также велика. Большая величина отношения m/m^* вытекает из значительного отклонения от волновой функции свободного электрона, т. е. за счет сильного взаимодействия электронов с ионными остовами или же за счет незначительного перекрывания отдельных атомов. При этом число стостояний не меняется, но они сжимаются в более узкую зону.

В качестве первого применения полученной нами функции плотности состояний, а заодно и для предварительной проверки оправданности приближения плоских волн, мы можем вычислить наибольшую энергию электрона в случае, когда N электронов заполняют N нижних состояний зоны (принимая во внимание принцип Паули). Величина E_F этой энергии, называемой *энергией Ферми*, в металлах, где зона заполнена не целиком, определяется требованием того, чтобы полное число состояний ниже $E = E_F$ было равно N:

$$\int_0^{E_F} S(E)dE = N. \tag{25.9}$$

(Ср. рис. 25.10, где изображена плотность состояний для свободных электронов.) Проводя интегрирование и решая (25.9) относительно E_F, получим

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*}(3\pi^2 N/V)^{2/3}. \qquad (25.10)$$

Энергия E_F представляет собой максимальную энергию (кинетическую) электрона в случае, когда все твердое тело находится в основном состоянии, т. е. когда все электроны находятся в наинизших возможных одноэлектронных состояниях, допустимых принципом Паули. (В гл. 26 мы увидим, что это означает, что твердое тело находится при абсолютном нуле температуры.)

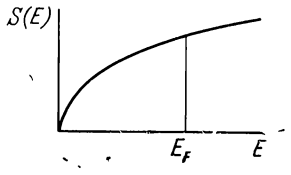


Рис. 25.16.

Заметим, что энергия Ферми зависит только от *плотности электронов* N/V, т. е. от числа электронов на единичный объем, так что она не зависит от размеров данного куска вещества. Она может быть вычислена на основе знания числа атомов в единице объема, если известно число валентных электронов на атом. Например, для металлов с одним s-электроном (щелочные металлы, а также Cu, Ag и Au) N/V равно числу атомов в единичном объеме, и мы находим для E_F значения в пределах приблизительно от 2 до 7 *эв*. В этих металлах валентные электроны, по существу, свободны, и поэтому m^*/m приблизительно равно 1. С другой стороны, переходные металлы имеют незавершенную $3d$-оболочку, и эти электроны внутренних оболочек с довольно слабым взаимодействием и с состояниями в соответственно узкой зоне имеют эффективные массы, для которых m^*/m больше 10.

Главным здесь является то, что в теории квазисвободных электронов ширина зон занятых уровней находится в согласии с шириной зон, которые дает зонная картина, полученная качественно на основе рассмотрения атомных состояний (§ 25.1). Иначе говоря, модель квазисвободных электронов может обеспечивать хорошее соответствие теоретически предсказываемых зон с экспериментальными валентными зонами без предположения о том, что эффективная масса m^* слишком сильно отличается от массы m свободного электрона.

§ 25.5. Оптическое поглощение

Закончив описание общих особенностей тех схем энергетических уровней, которые возможны в твердых телах, мы можем теперь рассмотреть переходы между уровнями, подобно тому как это было сделано ранее для изолированных атомов (гл. 23) и для моле-

кул (§ 24.5). Переход вверх может быть вызван поглощением фотона, ведущим к возбуждению электронного состояния в твердом теле, переход вниз может быть результатом излучения фотона. Как и в случае атомов и молекул, наблюдаемый оптический спектр может быть использован для изучения расположения энергетических уровней. Однако в твердых телах и особенно в металлах оптические свойства — не единственный источник информации об энергетических уровнях; большое значение имеют также другие типы свойств (гл. 26). В этом разделе мы коснемся главным образом оптического

Рис. 25.11.

поглощения, хотя излучение света твердыми телами играет роль и в таком важном явлении, как люминесценция. В частности, спектр поглощения, выводимый из зонной теории, объясняет тот упомянутый в § 17.3 факт, что некоторые твердые тела прозрачны для видимого света.

Поскольку тот факт, что металлы непрозрачны, в то время как многие изоляторы прозрачны, хорошо известен, то мы будем развивать дальше указанное в § 25.2 различие между металлами и изоляторами. Определим валентную зону как высшую энергетическую зону в твердом теле, которая целиком заполнена электронами в основном состоянии. Уровни в валентной зоне твердого тела обычно возникают за счет уровней валентных электронов основного состояния изолированного атома. Мы также определим *зону проводимости* как самую нижнюю энергетическую зону в твердом теле, которая содержит свободные уровни, когда тело находится в основном состоянии. Валентная зона и зона проводимости могут совпадать, если имеется зона, которая заполнена лишь частично. Они могут быть также и различными зонами, если одна зона целиком заполнена, а другая — целиком пуста, и в этом случае вещество — изолятор. Если две зоны перекрываются по энергии, то мы будем их рассматривать здесь как одну. Так, например, в Be, где перекрываются $2s$-и $2p$-зоны, объединенная зона заполнена лишь частично, так что Be — не изолятор, а металл. Это различие между металлами и изоляторами схематически иллюстрируется на рис. 25.11.

Теперь уже очевидно, почему может быть прозрачен изолятор. Наименьшее изменение энергии, возможное при электронном переходе, происходит тогда, когда электрон с наибольшей возможной энергией (на потолке валентной зоны) возбуждается до нижнего пустого состояния (на дне зоны проводимости) (рис. 25.12). Энергия поглощенного фотона $h\nu$ будет, согласно закону сохранения энергии, той же самой, так что

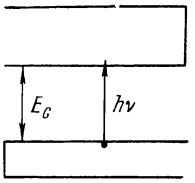


Рис. 25.12.

$$h\nu = E_G = hc/\lambda,$$

где E_G — ширина запрещенной энергетической щели. Таким образом, если $E_G \geqslant 3$ *эв*, то никакой фотон меньшей энергии ($\lambda \geqslant 4000$ Å) не может быть поглощен, и вещество прозрачно в области видимого света. С другой стороны, фотоны более высоких энергий (меньшая длина световой волны) могут поглощаться, так что все вещества становятся непрозрачными в ультрафиолетовой области (рис. 25.13). Например, для алмаза, корунда (Al_2O_3), щелочных галогенидов и щелочноземельных окислов

$$E_G \approx 5 \div 10 \text{ эв},$$

и монокристаллы всех этих веществ прозрачны. Они прозрачны по той же самой причине, что, например, и воздух. В молекулах O_2 и N_2 нижнее электронное возбужденное состояние более чем на 3 *эв* выше основного состояния, и, таким образом, молекула не может поглощать видимый свет.

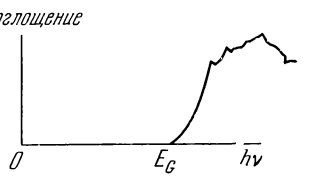


Рис. 25.13.

Другие вещества непрозрачны, так как для них E_G меньше. В «полупроводниках» (гл. 26) $E_G \leqslant 1{,}5$ *эв*. Поэтому эти вещества непрозрачны для видимого света, но прозрачны для инфракрасного. Например, Si ($E_G = 1{,}2$ *эв*) на вид черный и блестящий, прозрачен для длины волны большей, чем 10 000 Å. Металлы непрозрачны для всех длин волн, так как для них $E_G = 0$, и электрон может найти вакантное возбужденное состояние независимо от того, насколько мала энергия перехода.

В изоляторах и полупроводниках часто играет важную роль в изменении спектров поглощения присутствие структурных дефектов (гл. 15), так как соответствующие волновые функции в непосредственной близости дефектов индуцируют дополнительные энергетические уровни, которые очень часто попадают куда-нибудь в запрещенную щель между потолком валентной зоны и дном зоны проводимости (рис. 25.14). Поэтому возбуждение электрона на один

из этих изолированных уровней может произойти при большей длине световой волны, что приведет к абсорбционному пику в точке $h\nu = E_1$ (рис. 25.15). Например, рубин — это корунд (Al_2O_3), содержащий долю процента ионов Cr в виде примеси. Абсорбционный пик Cr в зеленой области придает рубину красный цвет в отличие от прозрачного чистого корунда. Другие окрашенные драгоценные камни ведут себя аналогично; например, сапфир — тоже корунд, но содержащий другие примеси. Даже структурные

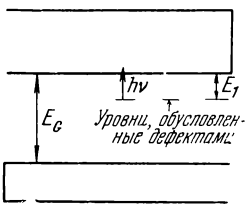


Рис. 25.14.

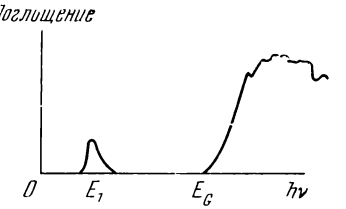


Рис. 25.15.

вакансии могут привести к таким же абсорбционным пикам. В щелочных галогенидах галогенные вакансии, в каждой из которых галогенный ион заменен на электрон, образуют F-центры, придающие соли характерную окраску. («F» происходит от немецкого «Farbzentrum», что означает «центр окраски»). Изучение таких оптических абсорбционных пиков дало много информации о важных для практики дефектах в твердых телах.

Сечение поглощения на этих изолированных атомных центрах обычно имеет порядок геометрического сечения атома, т. е. около 10^{-16} *см*^{2} (ср. § 17.3). Таким образом, требуется очень небольшая их концентрация для того, чтобы дать значительную глубину цвета. Например, концентрация порядка 10^{16} *см*$^{-3}$ (или около одной части на миллион) давала бы коэффициент поглощения (§ 17.14), равный 1 *см*$^{-1}$. Так как абсорбционные пики достаточно широки, то очень высокая концентрация просто делает вещество непрозрачным.

Задачи

25.1. Определить приблизительные размеры металлической частицы, для которой расстояние между уровнями в энергетической зоне может быть значительным. *Указание*: найти число атомов, при котором разница в энергиях была бы равна kT при 1 °K.

25.2. Обсудить связи H_2S и ZnS в молекулярной и твердой формах. Найти свойства этих соединений в справочнике «Энергии разрыва химических связей, потенциалы ионизации и сродство к электрону», Изд-во АН СССР, 1962, стр. 60, 93.

25.3. Вычислить энергию Ферми для Cu в предположении, что на атом имеется один квазисвободный электрон, для которого $m^*/m = 1$.

25.4. Энергетическая щель в Ge равна приблизительно 0,75 *эв*. При какой длине волны Ge начнет поглощать свет?

25.5. В NaCl энергетические уровни F-центра находятся на 2,65 *эв* ниже зоны проводимости. Волны какой длины поглощает NaCl? Какой цвет имеет поваренная соль, содержащая F-центры?

25.6. Предположим, что атомы As образуют значительную примесь в Ge. Если один из пяти валентных электронов As отделяется от атома, то остающиеся четыре могут образовывать ковалентные связи с германием, а один дополнительный электрон остается свободным, если не будет притянут ионом As^+. (Такая примесь называется «донором».) В своем нижнем энергетическом состоянии эта система представляет собой водородоподобное образование, в котором интенсивность кулоновского притяжения изменена диэлектрической постоянной Ge. Расстояние E_1 от этого состояния до зоны проводимости (ср. рис. 25.12) есть энергия ионизации этой водородоподобной системы. Вычислить E_1 и соответствующую длину волны, предполагая, что диэлектрическая постоянная равна 16.

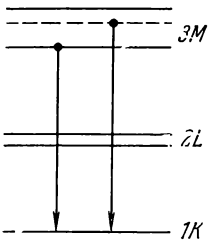


Рис. 25.16.

25.7. Спектр рентгеновского излучения легких элементов («мягкое» рентгеновское излучение) может давать информацию о глубине заполненных энергетических уровней твердого тела. Например, в Na ($Z = 11$) ширина пика K_β-излучения зависит от ширины заполненных уровней зоны проводимости (энергия Ферми). Вычислить приблизительную энергию этого перехода (§ 23.4) и относительную ширину линии излучения (рис. 25.16).

25.8. Чему равен коэффициент поглощения металла в предположении, что сечение поглощения для видимого света равно 10^{-16} *см*^{2} и что концентрация составляет 10^{22} *атом/см*^{3}? На стекло наносится тонкая пленка металла. Какую толщину она должна иметь для того, чтобы поглощать 50% падающего света?

Литература для справок

1. Спроул Р. Л., Современная физика, Физматгиз, 1961.
2. Киттель Ч., Введение в физику твердого тела, Физматгиз, 1962.
3. Епифанов Г. И., Физика твердого тела, «Высшая школа», 1965.

Глава 26

Электронные свойства твердых тел

Изучив разрешенные состояния валентных электронов в твердом теле, мы подготовились к тому, чтобы рассчитать некоторые свойства вещества, которые от них зависят. Мы увидим в этой главе, что электронные волновые функции и энергетические уровни, которые рассматривались в предыдущей главе, могут дать простое объяснение многим из этих свойств.

Ранее (гл. 14 и 15) мы получили некоторые свойства твердого тела из изучения взаимодействующих атомов вещества, например, постоянные упругости, теплоемкость, тепловое расширение, диффузию и т. д. За исключением области около абсолютного нуля температуры, это рассмотрение могло быть в основном классическим, так как атомы или ионы относительно тяжелы. Мы только что видели, что эта возможность возникает в результате сохранения атомами в целом части своей индивидуальности в твердом теле, поскольку волновые функции электронов внутренних оболочек перекрываются незначительно и мало искажаются. Однако те свойства, которые зависят от движения или возбуждения электронов, а именно, электропроводность металлов и полупроводников, затрагивают электроны внешних оболочек атомов, состояния которых лежат в валентных зонах и зонах проводимости твердого тела. Поэтому такие свойства могут быть поняты только на основе квантовой механики. Здесь мы коснемся некоторых электронных тепловых свойств, процессов переноса и других эффектов, которые зависят от внешних электронов. Наиболее далеко эта теория была продвинута для кристаллических твердых тел, но многие из наших упрощенных рассмотрений с некоторым приближением применимы также к аморфным телам и даже жидкостям.

§ 26.1. Равновесное тепловое распределение электронов

В гл. 25 мы рассмотрели все разрешенные энергетические уровни электронов, предполагая, однако, обычно, что твердое тело находится в основном состоянии. Это состояние с наименьшей возможной энергией представляет собой систему N целиком заполненных нижних энергетических одноэлектронных состояний с N электронами,

размещенными в соответствии с принципом Паули, который запрещает наличие более чем одного электрона в данном состоянии. Эта ситуация фактически относится к абсолютному нулю температуры; однако теперь мы хотим допустить возможность теплового возбуждения электронов. Многие из характерных электронных свойств твердых тел зависят от теплового возбуждения; так очевидно, что к ним относятся тепловые свойства, например теплоемкость.

Для того чтобы ориентироваться в задаче вычисления равновесного теплового распределения электронов на разрешенных энергетических уровнях, мы можем рассматривать совокупность квазисвободных электронов как электронный *газ*, заключенный в «сосуд», границы которого совпадают с границами твердого тела. С этой точки зрения задача вычисления, например, теплоемкости, сводится к аналогичной задаче для газа атомов: средняя энергия электронного газа должна быть вычислена с использованием взвешенного среднего, причем весовой множитель для каждого состояния дается *множителем Больцмана*. Множитель Больцмана $\exp(-E/kT)$ определяет вероятность того, что система находится в состоянии с энергией E. Результат для квантового электронного газа оказывается совершенно отличным от результата, полученного при рассмотрении классического газа атомов, в том, что в первом не выполняется закон равновероятного распределения энергии. Неудача этого классического подхода обусловлена двумя особенностями квантового электрона: абсолютной тождественностью двух любых электронов (которые нельзя отличить друг от друга никакими средствами наблюдения) и, что даже более важно, действием принципа Паули.

Для вычисления статистического распределения электронов по квантовым состояниям будем сначала рассматривать собственные значения энергии

$$E_1,\ E_2,\ E_3,\ \ldots,\ E_n,\ \ldots$$

как дискретные, даже если они расположены столь тесно, что позже их придется считать квазинепрерывными. Будем считать, что в этом ряде вырожденные собственные значения выписаны отдельно, так что его члены могут иметь одно и то же численное значение. Мы уже договорились упрощать многоэлектронную задачу, пренебрегая электростатическим взаимодействием (кулоновским отталкиванием) между электронами, поэтому для каждого из них используются одноэлектронные состояния, таким образом, как будто все другие электроны отсутствуют. В этом приближении прямое применение принципа Больцмана дало бы для вероятности того, что электрон имеет энергию E_n, выражение

$$f(E_n) = Ae^{-E_n/kT} \tag{26.1}$$

(A — нормировочная константа). Среднее число электронов с энергией E_n было бы соответственно равно $Nf(E_n)$, где N — полное число электронов в газе:

$$\bar{N}_n = Nf(E_n). \tag{26.2}$$

К сожалению, этот прямой результат не может быть правильным, так как он нарушает принцип Паули: чем ниже температура, тем быстрее убывает экспоненциальное распределение (рис. 26.1), и в пределе при $T = 0$ вероятность нахождения электрона в любом состоянии с $E_n > 0$ была бы равна нулю. Поэтому все электроны должны были бы находиться в низшем состоянии ($E_n = 0$), что противоречит принципу Паули, который разрешает занимать низшее состояние лишь одному электрону (либо двум в случае уровня, вырожденного по спину).

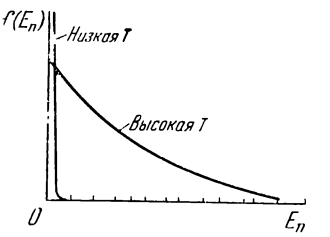


Рис. 26.1.

Неверным здесь является не распределение Больцмана, а наше рассмотрение электронов как совершенно независимых частиц. Даже если предположить, что между электронами не действуют никакие силы, так что любой данный электрон не «знает» о присутствии других и адекватно описывается одноэлектронной волновой функцией, то принцип Паули тем не менее будет вносить *корреляцию* между электронами. Если бы имелись силы, действующие между электронами, то вероятность того, что данный электрон находится в определенном состоянии, зависела бы от состояний остальных электронов. Хотя принцип Паули не является «силой», он также приводит к таким корреляциям тем, что если электрон занимает некоторое состояние, то никакой другой электрон в этом состоянии находиться не может. Меры, которые должны быть приняты для учета этих корреляций, те же, которые были упомянуты (§ 9.8) в случае газа сильно взаимодействующих атомов (например, жидкости): мы должны рассматривать в распределении Больцмана энергию системы в целом, а не отдельных частиц, что и позволяет учесть «взаимодействие». Другими словами, мы должны рассматривать многочастичную функцию распределения вместо одночастичной.

Энергия *системы электронов* определяется числами

$$N_1,\ N_2,\ \ldots,\ N_n,\ \ldots$$

электронов в каждом из состояний E_n (мы все еще пренебрегаем реальным кулоновским отталкиванием); эти числа называются *числами заполнения состояний*. Полная энергия электронного газа в

целом имеет тогда вид

$$U = N_1E_1 + N_2E_2 + \ldots + N_nE_n + \ldots, \tag{26.3}$$

и здесь уже можно корректно ввести многочастичное больцмановское распределение

$$f(U) = Ae^{-U/kT}, \tag{26.4}$$

которое дает вероятность того, что система обладает энергией U.

Для того чтобы вернуться к умозрительно более простому описанию в терминах отдельных электронов, мы можем теперь вычислить среднее число заполнения $\overline{N}_n$ состояния с энергией E_n, используя обычным образом корректное больцмановское распределение:

$$\overline{N}_n = \sum N_n f(U) = \frac{\sum N_n e^{-U/kT}}{\sum e^{-U/kT}}. \tag{26.5}$$

Это равенство дает среднее число электронов, которые могут находиться в каждом из одноэлектронных состояний с энергией E_n. Суммирование производится по всем возможным числам заполнения, появляющимся в U в уравнении (26.3) и подчиняющимся двум ограничениям:

$$N_1 + N_2 + \ldots + N_n + \ldots = N, \tag{26.6}$$
$$N_1, N_2, \ldots, N_n, \ldots = 0 \text{ или } 1.$$

Первое ограничение означает, что все числа заполнения при сложении дают общее число электронов; второе выражает принцип Паули, который разрешает числам заполнения иметь значения только 0 или 1.

Сумма в уравнении (26.5) содержит, конечно, огромное число членов, но применением некоторого ухищрения результат может быть приведен к относительно простой форме (после значительных вычислений):

$$\overline{N}_n = \frac{1}{e^{(E_n - E_F)/kT} + 1}. \tag{26.7}$$

Как будет показано, E_F является константой нормировки и представляет собой не что иное, как энергию Ферми (уравнение (25.10)). Мы можем записать уравнение (26.7) также в виде одноэлектронной функции распределения (ср. уравнение (26.2))

$$\overline{N}_n = f_F(E_n), \tag{26.8}$$

где

$$f_F(E_n) = \frac{1}{e^{(E_n - E_F)/kT} + 1}. \tag{26.9}$$

Функция f_F называется *функцией распределения Ферми — Дирака* и является правильной одноэлектронной функцией распределения. Уравнение (26.8) показывает, что если вместо распределения Больцмана (26.1) используется распределение Ферми — Дирака (26.9), то электроны могут рассматриваться как действительно независимые. Принцип Паули уже автоматически введен в функцию распределения. В дальнейшем мы всегда будем использовать одноэлектронную функцию распределения Ферми — Дирака вместо многоэлектронного распределения Больцмана, на основе которого она получена.

Между прочим, принцип Паули — не единственная неклассическая особенность рассуждений, приведенных выше. Даже если снять ограничения, налагаемые равенствами (26.6), то результатом все же будет не классическое одночастичное распределение, а *функция распределения Бозе — Эйнштейна*

$$f_B(E_n) = \frac{1}{e^{(E_n - E_B)/kT} - 1}, \tag{26.10}$$

(E_B — нормировочная константа). Эта функция должна использоваться для квантовых частиц с целым спином, которые не подчиняются принципу Паули. Например, она описывает *фотонный газ*, упомянутый нами в связи с излучением полости (§ 18.4). Нам не придется пользоваться ею здесь, но ее отличие от классического распределения (даже без принципа Паули) указывает на важность более общих аспектов квантовомеханической задачи многих частиц: именно, частицы являются абсолютно неотличимыми друг от друга в том смысле, что не может быть придуман никакой эксперимент, как-то помечающий частицу. Бессмысленно, например, говорить, что здесь находится электрон A, а там — электрон B, можно лишь сказать, что здесь находится один электрон и там — один. Это допущение полной неразличимости частиц было молчаливо введено, когда состояния системы описывались просто числами заполнения; если мы представим себе, что два электрона поменялись местами, то получим состояние, не отличное от первоначального (как в случае классического подсчета состояний), а то же самое.

§ 26.2. Распределение Ферми — Дирака

Возвращаясь к распределению Ферми (уравнение (26.9)), мы можем теперь исследовать некоторые его свойства, как правильной одночастичной функции частиц, подчиняющихся принципу Паули. Прежде всего, при $T = 0$ оно предсказывает, что вероятность заполнения состояний, для которых $E_n - E_F > 0$, равна нулю (так как f_F имеет $e^{+\infty}$ в знаменателе), а все состояния с $E_n - E_F < 0$ будут заполнены с вероятностью 1 (так как в знаменателе стоит

$e^{-\infty} = 0$) (рис. 26.2). Поэтому принципу Паули можно удовлетворить, если выбрать E_F так, чтобы существовало достаточно состояний с $E_n < E_F$, чтобы содержать все электроны; в этом смысле E_F есть нормировочная константа, зависящая от расположения состояний (или их плотности, в непрерывном приближении). Это также согласуется с определением, данным в уравнении (25.9), что мы более подробно увидим ниже. Так как в оставшейся части этой главы мы будем рассматривать только применение распределения Ферми к электронам в твердых телах, мы можем опустить индекс у f_F, а также заменить дискретные значения энергии E_n непрерывной переменной E, написав

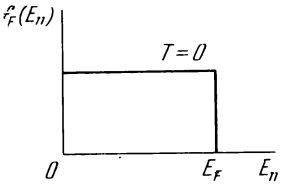


Рис. 26.2.

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}. \tag{26.11}$$

При температурах $T > 0$ углы в распределении сглаживаются, как это показано на рис. 26.3. Очевидно, что $f = 1/2$ при $E = E_F$, так как $e^0 = 1$; нетрудно показать, что функция симметрична относительно этой точки (см. задачу 26.1). Ширина интервала энергии, на котором f эффективно спадает от 1 до 0, имеет порядок kT, так как в этом интервале экспонента в знаменателе изменяется в $e = 2{,}72 \ldots$ раз.

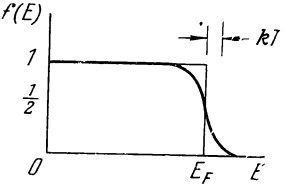


Рис. 26.3.

Функция распределения используется для подсчета числа электронов $dN(E)$, которые имеют энергии, лежащие в заданном энергетическом интервале между E и $E + dE$; этот подсчет мы сейчас и проведем. Согласно определению плотности состояний $S(E)$ (уравнение (25.6)) число разрешенных состояний в этом интервале равно $S(E)dE$. Вероятность того, что эти состояния заняты электронами, равна $f(E)$. Поэтому

$$dN(E) = f(E)S(E)dE. \tag{26.12}$$

Условие нормировки (из которого определяется E_F) дает

$$N = \int_0^N dN(E) = \int_0^\infty f(E)\,S(E)\,dE. \tag{26.13}$$

Мы уже использовали это условие для вычисления E_F при $T = 0$ в случае *металла*: при $T = 0$

$$f(E) = \begin{cases} 1 \text{ для } E < E_F, \\ 0 \text{ для } E > E_F, \end{cases}$$

что и изображено на рис. 26.2. Поэтому интеграл в уравнении (26.13) сводится к (25.9):

$$N = \int_0^{E_F} S(E)\, dE.$$

Используя для $S(E)$ выражение, полученное в модели квазисвободных электронов, мы вычислили E_F из соотношения

$$N = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2}, \tag{26.14}$$

как и в уравнении (25.10). При высоких температурах, если $S(E)$ вблизи E_F постоянна, то E_F будет независима от температуры вследствие симметрии f относительно E_F. Так как $S(E)$ в общем случае несколько изменяется в интервале порядка kT, в котором $f(E)$ спадает от 1 до 0, то E_F до некоторой степени зависит от температуры. Однако эта температурная зависимость слабая (много слабее, чем зависимость нормировочной константы в классическом распределении Максвелла в уравнении (9.14)), и мы ею пренебрегаем.

В изоляторах, где валентная зона целиком заполнена при $T = 0$ (см. рис. 25.11), подобное рассмотрение также применимо, хотя, как мы увидим позже, здесь E_F лежит около середины запрещенной щели между валентной зоной и следующей, расположенной выше незанятой зоной проводимости.

§ 26.3. Тепловое возбуждение электронов

Термические свойства электронов зависят от числа электронов, перешедших на более высокие энергетические уровни путем *теплового возбуждения*. Распределение Ферми было выведено для того, чтобы подсчитать это число. В *металле* (рис. 26.4) возбужденные электроны находятся в интервале $\Delta E \approx kT$ над E_F (ср. рис. 26.3). Их число ΔN может быть найдено из соотношения $dN = fSdE$ (уравнение (26.12), смысл которого наглядно иллюстрируется рис. 26.4), если положить в нем $dN = \Delta N$, $dE = \Delta E \approx kT$:

$$\Delta N \approx S(E_F)kT, \tag{26.15}$$

так как $f(E_F)$ имеет порядок 1 (фактически $f(E_F) = 1/2$). Это выражение может быть записано в более удобном виде, если мы заметим, что из равенств (26.14) и (25.6) следует соотношение

$$N = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2} = \frac{2}{3} E_F S(E_F). \tag{26.16}$$

Тогда, комбинируя равенства (26.15) и (26.16), получаем для относительного числа возбужденных электронов в металле выражение

$$\Delta N/N \approx kT/E_F. \qquad (26.17)$$

Из этого выражения вытекает, что число возбужденных электронов довольно мало. Оно имеет порядок 1% при комнатной температуре, так как в этом случае $kT \approx 0{,}02$ *эв* и $E_F \approx 2$ *эв*.

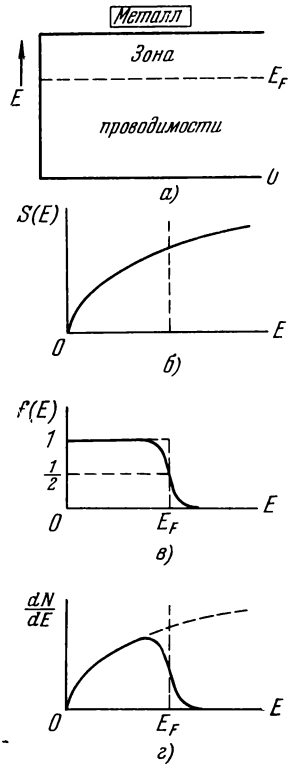


Рис. 26.4.

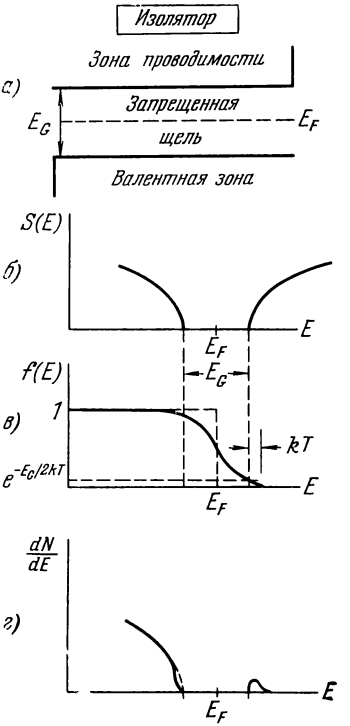


Рис. 26.5.

В *изоляторах* (рис. 26.5), с другой стороны, это число еще намного меньше. Если мы предположим, как на рис. 26.5, *б*, что плотность состояний вблизи верхнего края валентной зоны также имеет параболическую форму (что будет подтверждено позже) с той же самой кривизной, то энергия E_F должна лежать в середине запрещенной щели, для того чтобы число электронов, удаленных из состояний, находящихся в валентной зоне, было равно числу, добавленному к состояниям из зоны проводимости (вспоминая симмет-

рию f) (рис. 26.5, *г*). На дне зоны проводимости $E - E_F \gg kT$, поэтому из равенства (26.11) получаем

$$f(E) \approx e^{-(E-E_F)/kT} = (e^{E_F/kT})\, e^{-E/kT},$$

т. е. распределение Ферми приблизительно совпадает с распределением Больцмана. При $E - E_F = E_G/2$, где E_G — ширина запрещенной щели, мы имеем на дне зоны проводимости

$$f \approx e^{-E_G/2kT},$$

вместо $f \approx 1$ для металлов. Функция распределения по-прежнему спадает в e раз в интервале kT, поэтому ΔE может быть снова взята приблизительно равной kT. Функция плотности состояний должна также вычисляться в точке kT, так как на дне зоны она начинается с нуля. Тогда $dN = fSdE$ приобретает вид

$$\Delta N \approx e^{-E_G/2kT} S(kT)\, kT. \tag{26.18}$$

Для того чтобы сравнить этот результат с равенством (26.17) для металла, мы можем снова использовать соотношение $N \approx E_F S(E_F)$ из равенства (26.16), хотя, строго говоря, оно применимо только к металлу, и учесть, что $S(kT)/S(E_F) = (kT/E_F)^{1/2}$:

$$\frac{\Delta N}{N} \approx \left(\frac{kT}{E_F}\right)^{3/2} e^{-E_G/2kT}. \tag{26.19}$$

Это число меньше, чем для металла, частично потому, что плотность состояний вблизи дна зоны проводимости меньше, чем при энергии Ферми в металле, но главным образом из-за наличия множителя exp $(-E_G/2kT)$. Для $E_G = 5$ *эв* при комнатной температуре этот множитель равен $e^{-100} = 10^{-43}$, что дает полностью пренебрежимое число возбужденных электронов. Если E_G значительно меньше 5 *эв* (например, 1 *эв* или меньше), то число электронов, хотя все еще малое, становится существенным в некоторых отношениях, и тогда вещество является *полупроводником*, а не изолятором. Полупроводники, которые позже будут рассмотрены более подробно,— это плохие изоляторы или не очень хорошие проводники.

§ 26.4. Электронная теплоемкость

В качестве первого применения теории теплового возбуждения, изложенной в предыдущем разделе, мы оценим электронную теплоемкость металла, т. е. энергию, которую нужно сообщить электронному газу для того, чтобы поднять его температуру на 1°. Так как возбужденные электроны берутся из состояний, лежащих приблизительно на kT ниже E_F, и переходят в состояния, лежащие

приблизительно на kT выше E_F, то среднее увеличение энергии составляет около $2kT$ на электрон. Поэтому приближенно полная тепловая энергия равна

$$U_T \approx 2kT\Delta N \approx 2\,(kT)^2\,N/E_F.$$

Здесь было использовано равенство (26.17). Через N обозначено число свободных электронов в одном моле одновалентного металла. Тогда для молярной теплоемкости получим

$$C_V = dU_T/dT \approx 4R\,(kT/E_F), \tag{26.20}$$

где $R = Nk$ — универсальная газовая постоянная на моль.

Это значение очень мало по сравнению с величиной $3R$, возникающей за счет колебаний атомов, если выполняется классическое равновероятное распределение по степеням свободы (т. е. закон Дюлонга и Пти), оно меньше из-за наличия отношения $kT/E_F \approx 0{,}01$. Исторически этот квантовомеханический результат раскрыл давнишнюю загадку о том, почему электронная теплоемкость настолько меньше классического значения $3R/2$, которого следовало бы ожидать для газа свободных электронов. Ответ состоит в том, что большинству из этих N электронов принципом Паули запрещено приобретать тепловую энергию kT, так как состояния на kT выше заняты.

Хотя электронный вклад в теплоемкость ничтожен при комнатной температуре, он становится существенным при низких температурах. Теплоемкость, обусловленная колебаниями атомов, также стремится к нулю при $T = 0$ (причем пропорционально T^3) по квантовым причинам (§ 18.6), и около 1 °К электронный вклад становится ощутимой частью всей теплоемкости. Так как электронная теплоемкость, согласно равенству (26.20), пропорциональна T,

$$C_V = \gamma T, \tag{26.21}$$

то ее вклад можно отличить от атомного (пропорционального T^3). Наша оценка дала $\gamma = 4Rk/E_F$; более точное интегрирование средней энергии дает численную константу, бо́льшую на 20%, а именно,

$$\gamma = (\pi^2/2)Rk/E_F. \tag{26.22}$$

На основе измеренной теплоемкости может быть вычислена энергия Ферми. Из нее можно затем получить эффективную массу электрона m^*, используя равенство (25.10). (Электронная теплоемкость неметаллов неизмеримо мала, так как число возбужденных электронов в них намного меньше, согласно уравнению (26.19)).

§ 26.5. Электронная проводимость

Наиболее ярко различие между металлами и неметаллами проявляется в их *электропроводности*, и действительно, это свойство лежит в основе эмпирического определения металла. Удельная электропроводность такого металла, как медь, в 10^{20} раз больше, чем такого хорошего изолятора, как кварц (при комнатной температуре), и приблизительно в 10^6 раз больше, чем такого типичного полупроводника, как германий. Этот огромный диапазон значений естественно следует из нашей квантовомеханической картины энергетических зон, так как электропроводность пропорциональна числу электронов в зоне проводимости, которая, вообще говоря, может быть определена (§ 25.5) как самая нижняя незавершенная энергетическая зона (частично заполненная в металле и абсолютно пустая при $T = 0$ в изоляторе).

Качественное различие между металлами и изоляторами можно пояснить следующим образом. Если приложено электрическое поле, то электроны в металле ускоряются в направлении, противоположном полю (так как они имеют отрицательный заряд); скорость тех, которые уже движутся в этом направлении, увеличивается, скорость движущихся в противоположном направлении уменьшается, а результатом является *общий ток* в направлении поля. С точки зрения квантовой механики действие электрического поля состоит в индуцировании переходов между состояниями

$$\mathbf{k} \to \mathbf{k}',$$

таком, что импульс $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ возрастает в направлении, противоположном электрическому полю, становясь равным $\mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k}'$. Так как большее k соответствует большей энергии, то одни электроны переходят в несколько более высокие энергетические состояния, а другие — в более низкие. Около $T = 0$ те электроны, которые имеют энергию Ферми, переходят выше в вакантные состояния, а те, которые находятся ниже, движутся в эти освободившиеся состояния и т. д. Перед включением поля полный (средний) импульс был равен нулю, так как для каждого $\mathbf{p}$ существовало также и состояние с $-\mathbf{p}$; после включения поля распределение электронов изменяется, создавая общий импульс, который и создает электрический ток, вызываемый приложенным полем.

В противоположность этому в *изоляторе* при $T = 0$ все состояния заполнены (исключая свободные состояния в зоне проводимости при очень высоких энергиях). Никакие результирующие переходы здесь невозможны, потому что все допустимые состояния уже заняты. Поэтому именно принцип Паули препятствует тому, чтобы электроны ускорялись электрическим полем. Никакой ток не может течь в результате действия поля, так как все состояния с равными

и противоположными импульсами заполнены, и никакие переходы не возможны. Иногда наивно полагают, что металл является хорошим проводником из-за того, что электроны в нем свободны, а изолятор — плохой проводник, потому что все его электроны тесно связаны в атомах. Однако в нашей картине в *обоих случаях* электроны рассматриваются как свободные (т. е. в качестве волновых функций используются плоские волны) и быстро движущиеся внутри кристалла; в изоляторе не течет никакой суммарный ток, так как одинаково много электронов движется в обоих направлениях, а принцип Паули запрещает любые изменения этой картины. Превосходство этого последнего объяснения становится ясным при температурах $T > 0$.

При повышенных температурах изолятор может начать проводить значительный ток, зависящий от ширины E_G запрещенной энергетической щели. Мы уже видели, что при температуре T число возбужденных электронов в зоне проводимости равно $\Delta N \approx \approx \exp(-E_G/2kT)\, S(kT)kT$ (равенство (26.18)), и мы знаем форму $S(kT)$ для квазисвободных электронов. Точное интегрирование дает тот же самый результат (с тем исключением, что численная константа приблизительно на 10% меньше), приводящий к

$$\Delta N = \frac{V}{4\pi^{3/2}}\left(\frac{2m^{*}kT}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-E_G/2kT}. \tag{26.23}$$

Множитель перед экспонентой при комнатной температуре и объеме в 1 $см^3$ равен приблизительно $2\cdot 10^{19}$ $см^{-3}$, что сравнимо с типичным значением 10^{22} *атом/см*^{3}). Таким образом, если энергия E_G не слишком велика, то ΔN хотя и мало, но не совсем ничтожно. Электроны, которые находятся в зоне проводимости, могут дать электрический ток, так как для них имеется множество вакантных состояний. Если E_G достаточно мала для того, чтобы дать заметную проводимость, то вещество называется *полупроводником*. Полупроводник отличается от металла своей меньшей проводимостью. Он отличается также сильной температурной зависимостью проводимости, возникающей из-за наличия множителя $\exp(-E_G/2kT)$, так как в металле, где все электроны так или иначе дают вклад в проводимость, возбуждение нескольких из них не имеет почти никакого значения.

Равенство (26.23) обычно выражается через число электронов в единичном объеме и записывается в несколько видоизмененной форме:

$$\frac{\Delta N}{V} \equiv n = 2\left(\frac{2\pi m^{*}kT}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-E_G/2kT}. \tag{26.24}$$

Множитель в скобках, который имеет численное значение около 10^{19} $см^{-3}$ при комнатной температуре, представляет собой число квантовых состояний, в которых может находиться квазисвободный

электрон (без спина). Этот же самый множитель появляется в уравнении Саха (уравнение (10.3)) для газа свободных электронов, рассматриваемого, однако, не внутри твердого тела, а в газообразной плазме.

В полупроводнике, после того как некоторые из электронов возбудятся и перейдут в зону проводимости, давая тем самым вклад в электропроводность, освобождается равное число состояний в верхней части валентной зоны. Так как валентная зона больше не является целиком заполненной, то электроны в ней также могут давать вклад в электропроводность посредством переходов в незаполненные состояния. Эти «*дырки*» в валентной зоне можно рассматривать как электроны с *положительным* зарядом. Эта ситуация до некоторой степени аналогична той, которая возникает в случае структурных вакансий (гл. 15): вакансии, возникающие из-за отсутствия атомов, могут рассматриваться как *объекты*, которые движутся в кристалле. (Важное различие заключается в том, что атомы перемещаются в противоположном направлении и последовательно занимают свободные места, тогда как электроны ускоряются все вместе, перенося дырки с собой.) Электронные дырки, которых столько же, сколько возбужденных электронов в зоне проводимости, также дают важный вклад в электропроводность (в самом деле, именно наличие двух типов носителей заряда заставляет работать полупроводниковые приборы). Дырки могут рассматриваться как квазисвободные частицы с положительным зарядом и параболической формой функции плотности состояний вблизи потолка валентной зоны.

Не вдаваясь в излишние детали, касающиеся законности рассмотрения этих пустых состояний в верхней части валентной зоны как положительных «частиц» (дырок), заметим, что допустим и тот же самый подход, который привел к равенству (25.4). Вблизи потолка валентной зоны энергия $E(k)$ может быть разложена в степенной ряд по k:

$$E(k) = -E_G - c_1 k^2 + \ldots$$

Здесь мы предположили, что $k = 0$ на верхнем крае зоны, так что $E = -E_G$ при $k = 0$, причем нуль энергии выбран там же, где и раньше. (Если энергия на верхнем крае зоны соответствует некоторому значению k, отличному от нуля, что вполне может случиться, то энергия должна разлагаться в степенной ряд в окрестности этого значения, а не в нуле.) Используя теперь определение эффективной массы, данное в равенстве (25.5), мы видим, что около края зоны эффективная масса *отрицательна*. В электрическом поле частицы с отрицательным зарядом и отрицательной массой ускорялись бы в том же самом направлении, что и частицы с положительным зарядом и положительной массой. При рассмотрении движения этих

частиц мы можем делать вид, что масса и заряд положительны. Коэффициент разложения c_1 может иметь на верхнем крае валентной зоны такое же численное значение, как и на дне зоны проводимости, но не обязательно, а в зависимости от частных свойств периодического потенциала, в поле которого движутся электроны. Поэтому эффективная масса дырок не является необходимо равной массе электронов на дне зоны проводимости; но если это так, то энергия Ферми E_F лежит в середине запрещенной щели, как изображено на рис. 26.5.

§ 26.6. Электро- и теплопроводность

В предыдущем разделе мы рассмотрели возможность общего переноса электронов, например, в случае приложения электрического поля к металлу или полупроводнику при повышенных температурах. В обоих случаях существуют электроны, которые могут участвовать в процессе переноса, причем число их в металле намного больше, чем в полупроводнике. Что мы еще не рассмотрели, так это — почему перенос не может быть бесконечно интенсивным. Ответ, как и в случае газа атомов (гл. 8), вытекает из факта рассеяния частиц. Те волновые функции квазисвободных электронов, которые мы использовали до сих пор, не включают описания рассеяния, и мы увидим в следующем разделе, какие типы кристаллических дефектов мы должны допустить для того, чтобы ввести рассеяние. Фактически для учета столкновений мы сможем пользоваться классической картиной электронного газа, хотя, конечно, должны быть приняты во внимание квантовые энергетические зоны и распределение Ферми. (Рассеяние может быть рассмотрено строго квантовомеханически, но мы не имеем для этого математического аппарата, а результат получим примерно тот же самый.) В самом деле, классическая теория переноса свободных электронов была развита (Друде, 1900 г.) до открытия квантовой механики и добилась тем не менее больших успехов, несмотря на некоторое число расхождений, устраненных впоследствии введением распределения Ферми.

Предположим, что к электронному газу приложено электрическое поле E, так что на электроны действует сила eE. Если среднее время между столкновениями равно τ и средняя общая скорость равна u, то электроны теряют импульс m^*u через каждый промежуток времени τ. В установившемся режиме мы можем приравнять скорость потери импульса m^*u/τ скорости его увеличения eE. Тогда электроны будут приобретать *скорость дрейфа*

$$u = eE\tau/m^*. \tag{26.25}$$

Эта скорость дрейфа (общая средняя скорость, наложенная на слу-

чайную тепловую скорость) ведет к потоку частиц $J = nu$, где n — число электронов проводимости в единичном объеме. Для полупроводников это число есть число электронов, возбужденных в зону проводимости, $n = \Delta N/V$ (26.24); для металлов — это полное число электронов в зоне проводимости, $n = N/V$ (26.14), а не число термически возбужденных. Электрический поток (плотность тока)

$$j = eJ = neu. \tag{26.26}$$

Так как электропроводность σ определяется формулой

$$j = \sigma E,$$

то мы можем получить из равенств (26.26) и (26.25) следующее соотношение:

$$\sigma = ne^2\tau/m^*. \tag{26.27}$$

Электропроводность может быть также выражена через средний свободный пробег, если использовать равенство (8.2) $L=\bar{v}r$:

$$\sigma = ne^2L/m^*\tilde{v}. \tag{26.28}$$

В равенстве (26.28) нам уже знакомы все величины, за исключением среднего свободного пробега L, которым мы займемся в § 26.7.

Для некоторых целей полезно ввести понятие *подвижности* μ, определяемой как скорость дрейфа на единицу электрического поля:

$$\mu \equiv u/E = e\tau/m^* = eL/m^*\bar{v} \tag{26.29}$$

(ср. (11.11)). С введением подвижности выражение для электропроводности, полученное из (26.26), приобретает следующий вид:

$$\sigma = ne\mu. \tag{26.30}$$

Значение подвижности заключается в том, что она не зависит от числа n носителей заряда. Она зависит от среднего свободного пробега L, средней тепловой скорости $\bar{v}$ и эффективной массы m^*. Таким образом, можно сравнивать значения подвижности в металлах, полупроводниках и изоляторах, где числа n очень различны.

Предполагая, что средний свободный пробег L в металлах и полупроводниках сравним по величине, мы можем рассмотреть зависимость подвижности от $\bar{v}$, заданную равенством (26.29). В полупроводниках кинетическая энергия термически возбужденных электронов на дне зоны проводимости приблизительно равна kT, в то время как в металлах кинетическая энергия электронов на уровне Ферми есть E_F. Поэтому

$$\bar{v} \approx \sqrt{kT/m^*} \quad \text{(полупроводник)}, \tag{26.31}$$

$$\bar{v} \approx \sqrt{E_F/m^*} \quad \text{(металл)}. \tag{26.32}$$

Так как обычно $E_F \approx 100\ kT$, то $\bar{v}$ в металле может быть приблизительно в 10 раз больше, давая порядок величины для подвижности меньший, чем в полупроводнике. На практике в полупроводниковых приборах желательна высокая подвижность. *Проводимость* полупроводников, конечно, всегда много меньше, чем металлов из-за множителя n в равенстве (26.30).

Электроны могут также диффундировать через электронный газ под влиянием градиента концентрации, хотя эта диффузия обычно бывает амбиполярной (ср. § 11.5). Согласно равенству (8.29) для коэффициента диффузии справедлива приблизительная оценка

$$D \approx \bar{v}L.$$

В случае полупроводника подвижность может быть вычислена из коэффициента диффузии на основе соотношений Эйнштейна (10.17):

$$\mu = eD/kT \approx e\bar{v}L/kT.$$

Если мы подставим равенство (26.31) в это выражение для μ и в равенство (26.29), то мы в обоих случаях получим

$$\mu \approx eL/\sqrt{m^* kT}.$$

Соотношение Эйнштейна для металлов *не выполняется*, так как при его выводе было использовано больцмановское распределение, а оно применимо к электронам проводимости только в полупроводниках или в плазме, где плотность электронного газа очень мала.

Под действием температурного градиента поток электронов через электронный газ обеспечивает *теплопроводность*, которая может быть оценена на основе уравнения (8.15), выведенного для атомного газа:

$$\varkappa = \rho C\bar{v}L.$$

Величина ρC представляет собой удельную теплоемкость. Мы уже вычислили молярную теплоемкость для электронов в металле (26.20); удельная теплоемкость получается непосредственно заменой числа N электронов в моле числом n электронов в единичном объеме. Тогда

$$\varkappa \approx n\frac{k^2T}{E_F}\bar{v}L. \tag{26.33}$$

Для металлов это дает важный, фактически основной, вклад в теплопроводность. Для полупроводников этот эффект является менее доминирующим из-за малости ρC. В изоляторах электронной теплопроводностью можно полностью пренебречь по сравнению с теплом, переносимым колебаниями атомов.

Интересно провести сравнение между электропроводностью и теплопроводностью, обусловленными электронами проводимости

в металле. Используя равенство (26.32) для исключения E_F из равенства (26.33), мы получаем, что

$$\varkappa \approx nk^2TL/m^*\bar{v}. \tag{26.34}$$

Сравнивая это с (26.28), находим, что

$$\varkappa/\sigma \approx (k/e)^2T.$$

Если для всех средних провести аккуратное интегрирование, то появится численная константа:

$$\varkappa/\sigma = (\pi^2/3)(k/e)^2T. \tag{26.35}$$

Это соотношение известно под названием *закона Видемана — Франца*. Интересно, что оно является полностью независимым от всех свойств какого-либо металла. Кроме того, оно находится в довольно хорошем согласии с экспериментальными значениями, за исключением случая низких температур, когда некоторые усложнения ведут к несостоятельности формулы. Таким образом, электро- и теплопроводность во всех металлах приблизительно пропорциональны друг другу.

§ 26.7. Средний свободный пробег электрона

Для того чтобы сделать какие-либо численные оценки электропроводности, вытекающие из теоретического рассмотрения, мы должны рассмотреть средний свободный пробег. Квантовомеханическое вычисление рассеяния, ведущее к среднему свободному пробегу, довольно сложно, и мы не сможем заниматься им вообще. Поэтому мы могли бы просто принять эмпирическую точку зрения, заключающуюся в том, что измерение проводимости способно давать нам экспериментальные значения среднего свободного пробега, если мы используем равенство (26.28). С другой стороны, можно проникнуть намного глубже в физическую сущность, если попытаться сделать хотя бы грубую теоретическую оценку величины среднего свободного пробега.

На первый взгляд, можно предположить, что средний свободный пробег электронов в твердом теле очень мал, поскольку сечение рассеяния σ_s атома имеет для электрона порядок квадрата атомного диаметра, как было установлено в § 19.2. Например, для Cu радиус ионного остова Cu^+ составляет около 1 Å, что дает площадь приблизительно $3\cdot10^{-16}$ *см*^{2}. Согласно (8.3) средний свободный пробег равен $L = 1/n_s\sigma_s$, где n_s — число рассеивателей (атомов) на 1 *см*^{3}. Так как это число для Cu имеет порядок $8\cdot10^{22}$ *см*$^{-3}$, то средний свободный пробег, очевидно, будет порядка $4\cdot10^{-8}$ *см* = 4 Å, или около двух атомных диаметров. (Везде в этом разделе при рассмотрении сечения рассеяния мы будем обозначать его через σ_s для того, чтобы

не спутать с электропроводностью σ.) Этот результат следует из факта тесного расположения атомов в твердом теле. Столь короткий свободный пробег несовместим с нарисованной нами картиной, в которой квазисвободные электроны только изредка рассеиваются при столкновениях. К счастью, эта оценка некорректна. Основное взаимодействие между электронами проводимости и атомами (или остовами ионов) кристаллической решетки уже учтено (§ 25.3) введением эффективной массы m^*. Единственное взаимодействие, которое в действительности ведет к рассеянию, обусловлено *отклонениями* от идеально правильного потенциала кристаллической решетки.

Так, например, примеси, вакансии или атомы в междоузлиях, приводящие к возмущению регулярного потенциала, имеют сечения порядка 10^{-15} *см*^{2}. Так как обычно их концентрация составляет лишь доли процента, скажем 10^{-3}, или около 10^{20} *см*$^{-3}$, они могут дать средний свободный пробег порядка 10^{-5} *см* = 1000 Å. Более важным возмущением идеальной периодичности при нормальных температурах является амплитуда тепловых колебаний. Действуя очень грубо, мы могли бы предположить, что если площадь атома в состоянии покоя не дает вклада в сечение, то только добавочная площадь, возникающая за счет колебаний атома, обусловливает рассеяние. В качестве меры этой площади мы можем взять среднее квадратичное отклонение $\overline{x^2}$ при колебаниях около положения равновесия атома. В гл. 14 (задача 14.12) мы нашли, что амплитуда колебания составляла всего несколько процентов межатомного расстояния или атомного диаметра — и поэтому ее квадрат приблизительно в 10^3 раз меньше площади атома. Таким образом, сечение теплового рассеяния может иметь порядок лишь 10^{-18} *см*^{2}. С другой стороны, в этом рассеянии участвуют все 10^{23} *атом*/*см*^{3}, а не только атомы примесей. Поэтому тепловое рассеяние также ведет к среднему свободному пробегу порядка 1000 Å. Действительно, согласно закону равновероятного распределения по степеням свободы (§ 14.6)

$$^1/_2K\overline{x^2} = {}^1/_2kT.$$

Так как $\overline{x^2} \sim \sigma_s \sim 1/L$, то средний свободный пробег при высокой температуре, когда преобладает тепловое рассеяние, обратно пропорционален T; при низкой температуре, когда преобладает рассеяние на примесях, он не зависит от T.

Температурную зависимость для электропроводности можно теперь получить из равенства (26.28). В металле n и $\overline{v}$ (26.32) почти независимы от T, и поэтому температурная зависимость входит только через средний свободный пробег. Таким образом, электропроводность при высокой температуре обратно пропорциональна температуре, т. е. сопротивление пропорционально температуре; при

низких температурах оно выравнивается до постоянного значения, определяемого дефектами структуры. На рис. 26.6 приведена в двух масштабах кривая удельного сопротивления металлического натрия ($\rho = 1/\sigma$), показывающая влияние теплового рассеяния при высоких температурах и рассеяния на примесях при низких температурах. С другой стороны, в полупроводнике n (26.24) и $\bar{v}$ (26.31), так же как и L, зависят от T. Согласно (26.29), когда доминирует тепловое рассеяние, что обычно и бывает, подвижность изменяется как $T^{-3/2}$. Основная температурная зависимость электропроводности в равенстве (26.30) возникает не из-за подвижности, а из-за экспоненциальной температурной зависимости величины n (рис. 26.7).

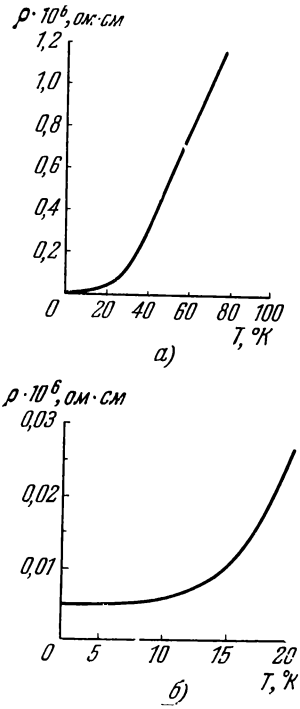


Рис. 26.6.

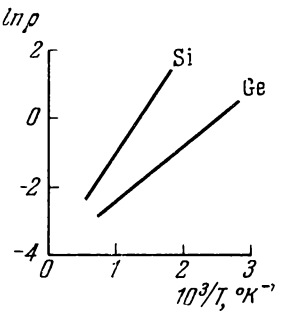


Рис. 26.7.

Важно отметить, что поведение полупроводников, которое мы описали, характерно для *чистых* (собственных) полупроводников, содержащих равное число электронов проводимости и дырок. Если имеются примеси, то они могут играть доминирующую роль в поведении механизма электропроводности (путем, который до некоторой степени аналогичен электролитической проводимости в ионном кристалле, содержащем примеси). Если примеси доминируют, то температурная характеристика больше не является экспоненциальной, а при достаточно низких температурах число электронов проводимости и дырок приблизительно постоянно. Хотя это «примесное» («extrinsic») поведение часто имеет большое практическое значение для работы полупроводниковых устройств, мы здесь не будем в него углубляться.

Задачи

26.1. Пусть $\delta \equiv E - E_F$ — расстояние от энергии Ферми. Показать, что из равенства (26.11) следует соотношение $f(E_F + \delta) = 1 - f(E_F - \delta)$.

26.2. Пусть в распределении Ферми $\delta = E - E_F$. Вычислить f для $\delta = 2kT$, $4kT$, $10kT$.

26.3. Предположим, что некая двухэлектронная система имеет только три разрешенных энергетических уровня (рис. 26.8), находящихся на равном расстоянии друг от друга. (Пренебречь спином, так что уровни невырождены.)

а) Перечислить три возможных состояния этой системы в переменных чисел заполнения.

б) Написать выражения для $\bar{N}_0$, $\bar{N}_1$, $\bar{N}_2$, используя равенства (26.5) и (26.6).

в) Вычислить эти выражения при $T = 0$ °K и $T \to \infty$.

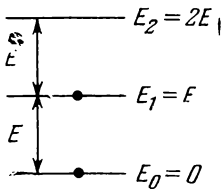


Рис. 26.8.

26.4. Используя распределение Ферми (и плотность состояний), доказать, что средняя энергия электронов в зоне проводимости металла при 0° K равна $\bar{E} = 3E_F/5$.

26.5. Какая приблизительно доля электронов зоны проводимости кобальта находится в возбужденных состояниях в точке плавления, если энергия Ферми $E_F = 1{,}1$ *эв*.

26.6. Коэффициенты электронной теплоемкости γ для Na, Cu и Ag равны соответственно 4,3; 1,8; $1{,}6 \cdot 10^{-4}$ *кал/(моль·град)*^{2}.

а) Вычислить E_F из γ.

б) Вычислить m^*/m из E_F.

26.7. Предположим, что эффективная масса дырок m_h^* значительно больше эффективной массы электронов m_e^* (что часто случается). Где будет лежать E_F относительно середины запрещенной щели, вблизи $T = 0$?

26.8. Допустим, что через медную проволоку сечением 10^{-2} *см*^{2} течет ток в 1 *а*. Число электронов проводимости для Cu равно $8 \cdot 10^{22}$ *электрон/см*^{3}.

а) Какова плотность тока j в проволоке?

б) Каков электронный поток через единицу площади J?

в) Какова скорость u дрейфа электронов?

26.9. Найти удельное сопротивление меди при комнатной температуре.

а) Вычислить подвижность μ.

б) Вычислить среднее время τ между столкновениями, предполагая, что $m^*/m = 1{,}5$.

в) Вычислить средний свободный пробег L в предположении, что $E_F = 7{,}0$ *эв*.

26.10. Вычислить электронную теплопроводность меди, используя закон Видеманна — Франца и экспериментальное значение электропроводности. Сравнить результат с экспериментальным значением теплопроводности. Какая доля теплопроводности обусловлена электронами?

26.11. Средний свободный пробег электрона в металлическом Na при комнатной температуре равен 350 Å.

а) Каково эффективное сечение, если этот средний свободный пробег обусловлен тепловым рассеянием, т. е. рассеянием, происходящим в результате тепловых колебаний атомов?

б) Какая концентрация примесей или структурных дефектов может дать тот же средний свободный пробег, если их сечение равно 10^{-15} *см*^{2}?

Литература для справок

1. Спроул Р. Л., Современная физика, М., Физматгиз, 1961.
2. Киттель Ч., Введение в физику твердого тела, Физматгиз, 1962.
3. Райт Д. А., Полупроводники, ИЛ, 1957.

Часть пятая

Ядерные частицы

Рассматривая атомы, молекулы и твердые тела, мы касались только их электронной структуры. Мы довольствовались рассмотрением ядер как тяжелых и положительно заряженных «точек», существенно не имеющих размеров. Это совершенно законно при изучении атомных явлений. Однако теперь мы предлагаем сделать следующий шаг вглубь от обычного макроскопического мира для того, чтобы проникнуть в реальную внутреннюю структуру наших «точечных» ядер. В действительности это — гигантский шаг! В то время как типичные атомные расстояния измеряются в ангстремах (1 Å = 10^{-8} см), ядерные расстояния в 10^5 раз меньше и измеряются в ферми (1 ферми = 10^{-13} см). Изменяется также и область рассматриваемых энергий: от нескольких электрон-вольт в случае атома до ядерных энергий, измеряемых в мегаэлектрон-вольтах (1 Мэв = 10^6 эв). Ясно, что в численном отношении речь идет о совершенно отличной области явлений, так что экстраполировать из атомной области тут в высшей степени опасно.

Все, что мы знаем о ядре, основано, конечно, на экспериментальных фактах. Так, информация о ядерных энергетических уровнях может быть получена при помощи измерения энергии фотонов (γ-лучей), испускаемых возбужденным ядром. В этом отношении ядро совершенно аналогично атому, с той лишь разницей, что измерение ядерных фотонов представляет собой специальную проблему, так как их энергия много больше энергии фотонов, излучаемых при атомных переходах. Хотя результаты многих ядерных экспериментов и рассматриваются в последующих главах, мы будем мало говорить или вообще не будем упоминать о том, как именно ядерные измерения проводятся в действительности. Техника измерений лучше всего изучается в лаборатории, и мы считаем, что студенты, читающие эту книгу, будут иметь возможность проделать некоторые ядерные измерения. Кроме того, процесс измерения в ядерном эксперименте имеет существенно неядерную природу. Типичный эксперимент включает ускорение заряженной частицы электромагнитными средствами и детектирование и подсчет конечных продуктов ядерных столкновений на основе их электромагнитного взаимодействия с измерительной

аппаратурой. Поэтому детали измерений включают скорее физику твердого тела (например, сцинтилляционные счетчики), ионизованные газы (например, счетчики Гейгера) или химию фотографии (ядерные эмульсии), чем физику ядер. По этим причинам и для того, чтобы чрезмерно не увеличивать книгу, мы ограничим наше рассмотрение главным образом теоретическим описанием свойств и структуры ядра. Важно помнить, что это описание твердо основано на ядерных измерениях, которые были проведены с мастерством и изобретательностью многими и многими ядерными экспериментаторами.

На пути от макроскопической физики к атомной мы обнаружили, что необходимо отказаться от классической механики в пользу квантовой. Мы могли бы спросить, должны ли мы теперь отказаться от квантовой механики в пользу новой «ядерной механики». К счастью, такой решительный шаг не оказался необходимым. Верно, что квантовую теорию пришлось расширить во многих направлениях, но базисные идеи квантовой механики с большим успехом переносятся с атомной физики на ядерную. Мы увидим, например, что ядерные энергии и угловые моменты квантуются и что основные составные части ядра, нейтроны и протоны, подчиняются принципу запрета Паули. Поэтому можно было бы действовать во многом так же, как и в атомной физике: во-первых, решить задачу двух тел (аналог атома водорода), во-вторых, использовать волновые функции двух тел для конструирования приближенных волновых функций задачи многих тел и нахождения приближенных энергетических уровней.

В известном смысле в ядерной физике мы находимся в лучшем положении, чем в физике твердого тела, где мы сталкиваемся с системами, содержащими $\sim 10^{23}$ частиц. Самое тяжелое ядро, существующее в естественном виде,— ядро урана — содержит только 238 частиц. Однако в других отношениях ядерные системы намного труднее для рассмотрения, чем атомы, молекулы и твердые тела. Основной закон сил или «взаимодействие», осуществляющееся в атомных системах, имеет электромагнитную природу и хорошо известно из макроскопической физики. Для того чтобы получить энергетические уровни атома водорода, мы просто вставляем кулоновский потенциал, описывающий взаимодействие между электроном и протоном, в уравнение Шредингера, которое затем решается. Ядерные силы не распространяются на макроскопические и даже на атомные расстояния. В результате ядерные силы не так хорошо известны, как электромагнитные. Все же мы знаем о них три факта. Во-первых, ядерные силы являются очень сильно притягивающими на расстояниях порядка 10^{-13} см. Это может быть выведено из того, что ядра, содержащие до 92 положительно заряженных и, следовательно, взаимно

отталкивающихся протонов, удерживаются в области радиуса $\sim 10^{-12}$ *см. Во-вторых, ядерные силы имеют очень короткий радиус. Эксперименты, в которых протоны рассеиваются на протонах, показывают, что силы взаимодействия между частицами являются чисто кулоновскими до тех пор, пока протоны находятся один от другого на расстоянии большем, чем* 10^{-12} *см —* 10^{-13} *см. В-третьих, ядерные силы между двумя частицами не являются просто функцией расстояния между ними, а сложным образом зависят от относительной ориентации спинов, от углов между направлениями спинов и направлением от одной частицы к другой и даже от относительных скоростей частиц.*

Ясно, что недостаточное понимание ядерных сил, действующих между двумя телами, создает серьезные затруднения в любом подходе к ядерной задаче многих тел. Кроме того, нам не хватает упрощающего дело существования единого сильно действующего центра, что оказалось столь полезным в нашем рассмотрении многоэлектронных атомов, где в первом приближении мы пренебрегали силами взаимодействия между электронами. Поэтому наш подход к задаче с ядрами, содержащими много частиц, с необходимостью будет феноменологическим по своей природе. Мы найдем, что некоторые довольно простые модели ядер могут качественным образом «объяснить» многие модели ядер на основе наблюдаемых особенностей. Перед тем как идти дальше, мы коротко обсудим некоторые из основных свойств ядер, которыми должна руководствоваться любая фундаментальная теория.

Глава 27

Основные свойства ядер

Наше изучение атомного ядра начинается с описания ядра через составляющие его элементы и с обсуждения основных ядерных параметров: массы, размеров, заряда и спина.

§ 27.1. Составные части ядра

Целью ученого является понять все наблюдаемые явления на основе нескольких базисных идей. Несмотря на обилие задач и на временные неудачи, эти поиски привели к большим успехам. Одним из наиболее важных ранних достижений было открытие, что все вещество в его, казалось бы, бесконечном многообразии форм построено из атомов различных элементов, причем число различных элементов очень мало (около 100).

Преждевременный шаг к дальнейшему упрощению был сделан уже в 1816 г., когда Праут предположил, что все атомные веса являются целыми кратными атомного веса водорода и что в действительности все более тяжелые элементы — это комбинации атомов водорода. Однако гипотеза Праута была отвергнута, когда оказалось, что некоторые атомные веса не являются даже приближенно кратными атомного веса водорода.

После открытия электрона, отрицательно заряженной частицы, значительно более легкой, чем самый легкий элемент, и являющейся частью нейтрального атома, стало ясно, что основная часть массы атома заряжена положительно. Экспериментами Резефорда по рассеянию (1911 г.) было установлено, что масса и положительный заряд сконцентрированы в чрезвычайно малом ядре с диаметром $\lesssim 10^{-12}$ *см* (см. гл. 5 и 6). Так как диаметр атома порядка 10^{-8} *см*, то объем ядра составляет только небольшую долю $\lesssim (10^{-12}/10^{-8})^3 = 10^{-12}$ объема атома.

Фундаментальное открытие Резефорда может рассматриваться как рождение ядерной физики. После открытия ядра были предприняты усилия объяснить ядра тяжелых элементов как состоящие из ядер водорода и электронов, которые были нужны для того, чтобы получать правильные отношения заряда к массе ядра. Опорой для этой гипотезы явилось наблюдение излучения электронов («β-частиц») радиоактивными ядрами. α-частицы (ядра гелия), также

излучаемые радиоактивными ядрами, в рамках этой гипотезы можно было бы рассматривать как комбинации четырех ядер водорода (называемых протонами) и двух электронов.

Тем не менее электронно-протонная модель ядра встретилась с непреодолимыми трудностями. Одна из них может быть понята на основе принципа неопределенности (гл. 19). Электрон, заключенный в ядерном объеме ($\Delta x \approx 10^{-12}$ *см*), должен был бы иметь минимальную кинетическую энергию 100 *Мэв* (задача 19.7), т. е. много бо́льшую, чем любая разумная энергия кулоновской связи. Кроме того, самые быстрые электроны, излучаемые ядрами при β-распадах, имеют энергию около 4 *Мэв*. Поэтому предположение о том, что ядро может содержать свободные электроны, кажется неправдоподобным. Эта дилемма была разрешена открытием нейтрона — нейтральной частицы с массой, приблизительно равной массе протона.

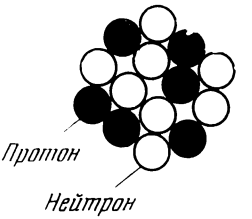


Рис. 27.1.

Со времени открытия нейтрона (Чэдвик, 1932 г.), что будет рассмотрено в гл. 31, наше представление о составе ядра осталось существенно неизменным: ядро — это система, состоящая из плотно упакованных нейтронов и протонов. Протон представляет собой просто ядро атома водорода с зарядом $+e$, равным по величине и противоположным по знаку заряду электрона, с массой $M_p = 1836\, m_e$ (m_e — масса электрона) и со спиновым квантовым числом, равным 1/2. Нейтрон не имеет электрического заряда, но в других отношениях он очень похож на протон, масса которого $M_n = 1839\, m_e$, спин равен 1/2. И нейтрон и протон подчиняются принципу запрета Паули (гл. 22). Из-за большого сходства между протоном и нейтроном для них было введено общее название «нуклон», обозначающее любой из них.

Нуклоны в ядре образуют не жесткую решетку, такую как атомы в кристалле, а скорее жидкую структуру с нуклонами, способными свободно двигаться, подобно молекулам в жидкости (рис. 27.1). Аналогия с жидкостью используется в капельной модели ядра (гл. 29), которая способна качественно объяснить многие из наблюдаемых свойств ядра.

Число протонов в ядре называется атомным номером и обычно обозначается буквой «Z». Полный заряд ядра равен тогда Ze, и нейтральный атом будет иметь Z электронов, окружающих ядро. Так как химические свойства зависят только от электронной структуры, то атомный номер Z определяет химический элемент. Полное число нуклонов, называемое массовым числом, обозначается символом A. Таким образом, число нейтронов N равно

$$N = A - Z. \tag{27.1}$$

Ядра с одним и тем же атомным номером Z, но с разными массовыми числами A называются *изотопами*. Многие элементы имеют более чем один стабильный изотоп (§ 27.2). Ядра с равными N, но различными Z известны как *изотоны*, и ядра с равными A, но различными Z и N называются *изобарами*.

Так как атомный номер известен, если дан символ химического элемента, скажем X (см. табл. 3), то ядро будет полностью определено, если мы напишем массовое число A в виде верхнего индекса X^A. Так нестабильный изотоп водорода, тритий ($Z = 1$, $A = 3$), обозначается символом H^3. Иногда числа Z и N выписываются с левой стороны химического символа ${}_Z^N X^A$, хотя это в действительности не является необходимым. Тритий в этом случае будет определен символом ${}_1^2 H^3$.

Успешное объяснение структуры ста или около этого элементов на основе только трех типов частиц, протонов и нейтронов, заключенных в ядрах, которые окружены электронами, является значительным упрощением базисных концепций. Однако природа сил, которые удерживают нуклоны вместе, все еще недостаточно понята (гл. 28).

§ 27.2. Стабильные ядра

Можно было бы предположить, что так как ядерные силы являются сильно притягивающими, то могут существовать стабильные ядра с любым атомным номером Z и нейтронным числом N. Однако это не так. График значений N и Z для стабильных ядер дан на рис. 27.2. Самым тяжелым стабильным ядром является изотоп висмута Bi^{209} с $Z = 83$ и $N = 126$. Однако, так как нестабильные изотопы U^{238}, U^{235} и Th^{232} распадаются очень медленно, эти более тяжелые элементы и продукты их распада все еще существуют в земле в естественном виде. Они представляют собой нераспавшийся остаток еще более тяжелых элементов, существовавших тогда, когда около $5 \cdot 10^9$ лет назад образовалась Солнечная система.

Двадцать элементов имеют только один стабильный изотоп, а у восьми других один из изотопов имеет относительное содержание более чем 99%. Большинство элементов, однако, имеет несколько стабильных изотопов. Олово имеет наибольшее число изотопов — десять, ксенон — девять. Именно смесь изотопов ведет к атомным весам, которые даже приблизительно не являются кратными атомного веса водорода (крах гипотезы Праута). Не существует стабильных ядер с $Z = 43$ или 61; с $N = 19$, 35, 39, 45, 61, 89, 115 или 123; а также с $A = 5$ или 8. С этими исключениями все значения Z от 1 до 83, все значения N от 0 до 126 и все значения массового числа A от 1 до 209 соответствуют стабильным ядрам.

Относительное изотопическое содержание в земле стабильных и очень долго живущих нестабильных ядер дано в табл. 4.

Причина, по которой ядра, отличные от тех, которые изображены на рис. 27.2, являются нестабильными, может быть понята на основе: а) кулоновского отталкивания протонов, б) «насыщения» ядерных сил, в) принципа запрета Паули, за счет которого значения $Z \approx N$ наиболее благоприятны для стабильности. Тот факт, что положительно заряженные частицы отталкиваются друг от друга, не нуждается в дальнейшем разъяснении. Что подразумевается под насыщением ядерных сил, станет понятным, когда мы рассмотрим изменение энергии связи и ядерных размеров при изменении массового числа A (§§ 27.3, 27.4). Приблизительное равенство Z и N для стабильных ядер (особенно для легких ядер) может быть лучше всего объяснено на основе оболочечной модели или одночастичной модели ядра (гл. 29), аналогичной электронной оболочечной модели атома. Так как нейтроны и протоны подчиняются принципу запрета Паули, то они заполняют «оболочки» в ядерной потенциальной яме. Таким образом, на нижний энергетический уровень можно поместить два протона (спин вверх, спин вниз) и два нейтрона (рис. 27.3, *а*). Эта ситуация с энергетической точки зрения более предпочтительна, чем четырехнейтронная система, где два нейтрона должны были бы перейти на следующий, более высокий энергетический уровень (рис. 27.3, *б*). Так как нейтроны могут превращаться в протоны и наоборот посредством процессов β-распада (испускание ядром электрона) и электронного захвата (гл. 30), то ядра вне стабильной Z — N-кривой (рис. 27.2) будут менять отношение Z/N

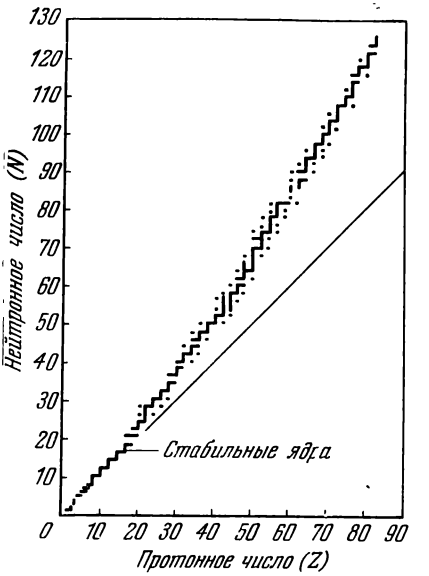


Рис. 27.2.

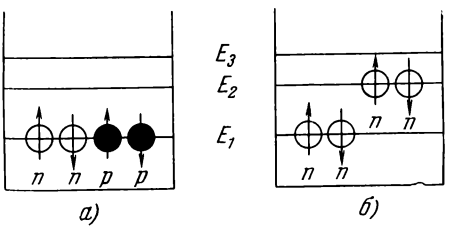


Рис. 27.3.

путем этих процессов до тех пор, пока не будет достигнут стабильный изобар. Для тяжелых ядер кулоновское отталкивание между протонами делает энергетически предпочтительным соотношение $Z < N$. В результате достигается некоторый компромисс между тенденциями принципа Паули в пользу $Z \approx N$ и кулоновского в пользу $Z \approx 0$. Так, стабильные изотопы свинца имеют $Z = 82$ и $N = 124$, 125 и 126. Нестабильность ядер с $A > 209$ по отношению к α-распаду (испускание ядра гелия) является следствием кулоновского отталкивания протонов и обсуждается в гл. 30.

§ 27.3. Энергия связи ядра

Атомные массы стабильных изотопов были измерены с большой точностью. Массы определяются из данных, полученных как на масс-спектрографах, так и на основе измерения энергии, освобождающейся в ядерных реакциях и распадах. Атомные массы обычно измеряются в атомных единицах массы (а.е.м.). Используются, к сожалению, три различные шкалы атомных единиц масс. Одна базируется на массе изотопа ${}_6C^{12}$. В этой схеме 1 а.е.м. $= (1/12) \times$ $\times$ (вес атома C^{12}). Можно надеяться, что этот стандарт будет принят повсюду, так как он более удобен для измерения масс атомов масс-спектрографами. Наша табл. 4 атомных масс основывается на стандарте C^{12}. Другое определение: 1 а.е.м. $= (1/16) \times$ (вес атома O^{16}). Большинство таблиц в старых книгах основано на стандарте O^{16}. Существует также химическая шкала, в которой 1 а.е.м. $= (1/16) \times$ (вес атома природной смеси изотопов водорода).

Энергия связи ядра B определяется как энергия, которая должна быть придана к ядру для того, чтобы разделить его на составляющие частицы. Это определение полностью аналогично тому, которое использовалось ранее для атомов, молекул и твердых тел. После разделения полная энергия системы просто равна энергии покоя нуклонов, $ZM_pc^2 + NM_nc^2$, где M_p и M_n — массы протона и нейтрона соответственно. Перед разделением полная энергия есть энергия покоя ядра M_Nc^2. Поэтому энергия связи равна

$$B = (-M_N + ZM_p + NM_n)c^2.$$

Добавив к M_N массу Z электронов, мы получим атомную массу $M_{Z,A} = M_N + Zm_e$, если пренебречь очень незначительной энергией связи электронов.

Выражение для энергии связи ядра теперь может быть переписано через атомные массы:

$$B = [-M_N - Zm_e + Z(M_p + m_e) + NM_n]c^2$$

или

$$B = (-M_{Z,A} + ZM_H + NM_n)c^2. \qquad (27.2)$$

Здесь $M_{\text{H}} = M_p + m_e$ — атомная масса водорода. Так как а.е.м. связана с *Мэв* соотношением

$$1 \text{ а.е.м. } (C^{12}) = 931{,}441 \text{ Мэв}/c^2,$$

то мы находим, что энергия связи может быть выражена следующим образом:

$$B = 931{,}441 \text{ Мэв } [Z \cdot 1{,}0078252 + N \cdot 1{,}0086654 - M_{Z,A}], \quad (27.3)$$

где подразумевается, что $M_{Z,A}$ задана в а.е.м. (C^{12}). Если мы определим дефект массы как уменьшение полной массы ΔM при образовании атома из протонов, нейтронов и электронов, то мы увидим, что энергия связи B и дефект массы очень просто связаны:

$$B = \Delta M c^2.$$

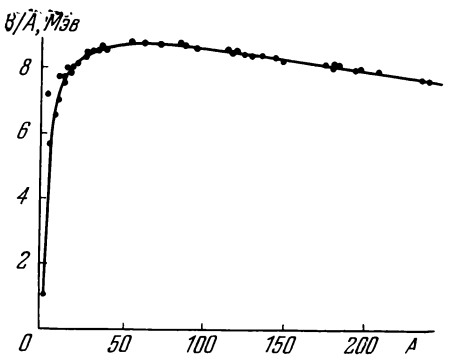


Рис. 27.4.

Важным ядерным параметром является энергия связи на нуклон B/A. На рис. 27.4 мы изобразили B/A как функцию A для стабильных ядер. Наиболее поразительным на этом рисунке является факт приблизительного постоянства B/A; $B/A \approx 8$ *Мэв* почти для всех ядер, за исключением небольшого числа самых легких. Постоянство B/A означает, что ядерные силы «насыщаются». Смысл этого будет обсужден более подробно в следующем параграфе. Медленное убывание B/A при больших A объясняется возрастанием кулоновского отталкивания для тяжелых ядер (см. гл. 29). Очевидно, что энергия связи ядер огромна:

$$B \approx 8 \text{ Мэв} \cdot A. \quad (27.4)$$

Если даже небольшая часть этой энергии высвобождается, как, например, при делении ядер урана или при синтезе легких ядер, то легко подсчитать (гл. 30), что ядерная энергия, выделяющаяся на килограмм «топлива», оказывается несравненно большей, чем химическая энергия, выделяющаяся при сгорании обычного топлива.

§ 27.4. Размеры ядер

Размеры ядер были определены главным образом из экспериментов по рассеянию быстрых нейтронов и очень быстрых электронов. Было довольно скоро установлено, что плотность ядерного вещества очень мало изменяется от ядра к ядру, т. е. что ядерный объем

пропорционален числу A нуклонов в ядре. Ядерный радиус R может быть тогда выражен формулой

$$R = r_0 A^{1/3}, \quad r_0 = \text{const}. \tag{27.5}$$

Значение, получаемое для r_0, слегка зависит от метода измерения. Эксперименты по рассеянию нейтронов дают $r_0 \approx 1{,}3$—$1{,}4$ *ферми*, в то время как в экспериментах по рассеянию электронов получаются значения, лежащие в интервале 1,2—1,3 *ферми*. В действительности эти два метода измеряют не совсем одно и то же. Рассеяние электронов дает измерение распределения электрического заряда в ядре, т. е. плотности распределения протонов, в то время как рассеяние нейтронов определяет размеры ядерного потенциала. Небольшое расхождение не должно нас поэтому тревожить.

Для тяжелых ($A > 209$) α-излучателей существует другой метод определения r_0. Ядерный радиус может быть вычислен из энергий α-частиц и времен распада. Значения r_0, полученные этим способом, несколько изменяются от ядра к ядру, но среднее значение приблизительно равно 1,4 *ферми*. Далее мы будем повсюду выбирать

$$r_0 = 1{,}3 \text{ ферми}$$

или

$$R = 1{,}3\, A^{1/3} \text{ ферми},$$

как наилучшее значение для среднего ядерного радиуса. Очевидно, что при этом выборе ядерные радиусы изменяются от $\sim 1{,}3$ *ферми* при $A = 1$ до $1{,}3\sqrt[3]{238}$ *ферми* ≈ 8 *ферми* для U^{238}.

§ 27.5. Насыщение ядерных сил

Постоянство плотности ядерной материи приводит к картине ядра, состоящего из «твердых сфер» или из нуклонов, ведущих себя как бильярдные шары. Снова приходит на ум аналогия с жидкостью. (См. дискуссию о капельной модели в гл. 29.) Если мы сольем вместе две чашки воды, то плотность воды существенно не изменится. Кроме того, энергия связи или «теплота конденсации» воды пропорциональна объему (т. е. в два раза бóльшим количеством тепла можно вскипятить вдвое больше воды). Точно такой же результат мы получили для ядер (§ 27.3), где $B/A \approx \text{const}$ или, так как массовое число пропорционально объему $^4/_3\pi R^3$ (27.5), $B/\text{объем} \approx \approx \text{const}$.

В жидкости эти свойства (постоянная плотность и пропорциональность энергии связи объему) объясняются за счет насыщения связей, которые позволяют атому сильно взаимодействовать только с небольшим числом соседей, а не со всеми атомами жидкости. Аналогичное ядерное свойство (равенства (27.4) и (27.5)) называется насыщением ядерных сил. Наблюдаемая зависимость энергии связи

ядра от массового числа может быть объяснена, если мы предположим, что каждый нуклон взаимодействует не со всеми другими нуклонами, а только с небольшим числом соседей. Это в свою очередь означает, что ядерные силы должны иметь очень короткий радиус действия, который, в частности, должен быть меньше, чем радиусы $1{,}3\,A^{1/3}$ *ферми* всех ядер, кроме очень легких, т. е. должен иметь порядок величины от 1 до 2 *ферми*. То, что ядерные силы насыщаются, можно легко увидеть из факта, что уже в гелии ($A = 4$) энергия связи на нуклон равна 7,07 *Мэв*, т. е. близка к значению насыщения. (Отметим, однако, большую нерегулярность B/A при небольших A, рис. 27.4.)

Дальнодействующие силы с большим радиусом, такие как гравитационные или электростатические, не насыщаются. Таким образом, каждый протон в ядре электрически взаимодействует со всеми другими протонами, т. е. с Z — 1 протоном. Число взаимодействующих пар равно Z (Z — 1), и кулоновская энергия будет пропорциональна этой величине, т. е. приближенно Z^2 для $Z \gg 1$. Поэтому энергия кулоновского отталкивания на протон не постоянна, а линейно растет с увеличением Z. Относительная важность силы кулоновского отталкивания по сравнению с ядерными силами притяжения будет поэтому возрастать с Z, что и объясняет уменьшение B/A для тяжелых ядер (рис. 27.4). Мы увидим (гл. 29), что зависимость массы и энергии связи ядер от A и Z может быть значительно лучше объяснена на основе капельной модели ядра при учете кулоновской энергии и предположении об уменьшении связи на поверхности ядра.

§ 27.6. Электрические и магнитные свойства ядер

Заряд ядра равен, конечно, Ze, так как каждый протон несет заряд, равный $+e$, в то время как нейтроны нейтральны. Известно, что распределение заряда в ядре не совсем сферически симметрично. Мерой отклонения от сферической симметрии является так называемый квадрупольный момент ядра. Мы не будем здесь касаться его точного определения; достаточно сказать, что если заряд распределен равномерно по эллипсоиду вращения с полуосью a вдоль оси симметрии и полуосью b, перпендикулярной этой оси, то квадрупольный момент Q имеет следующий вид:

$$Q = {}^2/_5\, Ze\,(a^2 - b^2).$$

Положительное значение Q соответствует вытянутому или сигарообразному сфероиду ($a > b$), отрицательное — сплющенному или плоскому как блин сфероиду ($a < b$), в то время как для сферы $Q = 0$. Наличие неисчезающего квадрупольного момента у дейтрона (гл. 28) устанавливает несомненный факт, что нейтрон-протон-

ные силы *нецентральны*, а это является серьезно осложняющей дело особенностью ядерных сил.

Многие ядра также обладают магнитным дипольным моментом, как если бы они были крошечными магнитиками. Ядерные магнитные моменты измеряются в ядерных магнетонах:

$$1 \text{ ядерный магнетон} = e\hbar/2M_pc = 0{,}505 \cdot 10^{-23} \text{ эрг/гс}.$$

Направление магнитного момента всегда дается по отношению к направлению углового момента ядра. При таком соглашении магнитный момент протона равен $\mu_p = +2{,}793$, а нейтрона $\mu_n = -1{,}913$. Знак минус у момента нейтрона указывает, что он направлен противоположно спину. Мы увидим (гл. 29), что нуклоны в ядре объединяются в пары, приводя к попарной компенсации спинов и магнитных моментов. Так, существует экспериментальный факт, что все ядра с четными Z и N имеют нулевой угловой момент и нулевой магнитный момент. Все ядра с нечетным A, однако, должны иметь нечетные Z либо N. Можно поэтому предположить, что угловой момент и магнитный момент всего ядра будут в этом случае обусловлены одним нечетным нуклоном. Это и есть основное допущение одночастичной модели ядра, которое, в общем, приводит к довольно хорошим результатам.

Задачи

27.1. Каковы радиусы ядер Fe^{56} и Pb^{208}?

27.2. Могут ли более тяжелые изобары иметь бóльшую энергию связи, чем более легкие? Дать объяснение.

27.3. Используя (27.3), вычислить энергию связи B и энергию связи на нуклон B/A для ядер O^{16}, Fe^{56} и U^{238}.

27.4. Ядро Lu^{175} имеет очень большой электрический квадрупольный момент, равный заряду протона, умноженному на $5{,}6 \cdot 10^{-24}$ *см*^{2}. Оценить разность $a - b$ между большой и малой полуосями ядра, если заряд равномерно распределен по эллипсоиду вращения. Изобразить форму этого ядра.

27.5. Пользуясь таблицей атомных масс, вычислить энергию связи последнего протона в ядрах O^{16}, F^{19}, Mg^{24}, Na^{23} и Bi^{209} и последнего нейтрона в ядрах O^{17}, Ne^{22}, Ne^{21} и Pb^{208}. Сравнить результаты со средней энергией связи на нуклон. Сравнить результаты для четных и нечетных ядер.

27.6. Рассмотреть C^{12} и O^{16} как связанные системы, состоящие соответственно из трех и четырех α-частиц. Каковы энергии связи этих систем?

27.7. Представить на графике числа стабильных ядер в зависимости от атомного номера Z. Где находится максимум этих чисел?

27.8. Повторить задачу (27.7) для числа нейтронов $N = A - Z$.

27.9. Какое ядро имеет вдвое больший радиус, чем ядро $_{13}Al^{27}$.

Литература для справок

1. Глесстон С., Атом. Атомное ядро. Атомная энергия. Развитие современных представлений об атоме и атомной энергии, ИЛ, 1961.
2. Бете Г. и Моррисон Ф., Элементарная теория ядра, ИЛ, 1958.

Глава 28

Ядерные силы

Как и в случае атомной физики, мы начнем изучать строение ядра с двухчастичной системы. Можно надеяться, что уже на примере системы двух нуклонов нам удастся что-то узнать о природе ядерных сил, избежав, однако, математических трудностей, типичных для проблемы многих тел.

§ 28.1. Система двух нуклонов

Обнаружена только одна связанная система двух нуклонов — *дейтрон*, состоящий из одного протона и одного нейтрона. Атомный номер дейтрона Z равен единице, и поэтому он представляет собой изотоп водорода. В системе двух протонов или двух нейтронов связанных состояний нет. В связи с этим может показаться, что нейтрон-протонные силы отличаются (приводят к более сильному притяжению) от нейтрон-нейтронных и протон-протонных сил. Такое предположение тотчас же объяснило бы и тот факт, что стабильные ядра состоят из примерно равного числа протонов и нейтронов. Однако для физика, который ищет в природе простоту и порядок, эта точка зрения не очень привлекательна. Нейтрон и протон так похожи друг на друга (у них равные спины и практически равные массы), что хочется думать, что *ядерные* силы между любой парой нуклонов одинаковы. Тогда нейтроны и протоны различались бы только своими *электромагнитными* свойствами. Отсутствие стабильного ди-протона (связанного состояния двух протонов) можно было бы попытаться объяснить кулоновскими силами отталкивания между двумя протонами. Однако это не помогает понять неустойчивость двухнейтронной системы. Тем не менее, концепция единых *нуклон-нуклонных сил* притяжения все же разумна.

Оказывается, что причина нестабильности ди-протона и динейтрона гораздо тоньше и обусловлена принципом запрета Паули, который применим к нейтронам и протонам точно так же, как и к электронам. Нуклон-нуклонные силы зависят от взаимной ориентации нуклонных спинов. Каждый нуклон обладает спиновым квантовым числом s, равным 1/2, так что система двух нуклонов может оказаться либо в триплетном состоянии с полным спином S, равным единице (спины нуклонов параллельны), либо в синглетном

состоянии, когда S равно нулю (спины антипараллельны). Оказывается, что нуклоны с параллельными спинами (правая пара нуклонов на рис. 28.1) притягиваются друг к другу сильнее, чем с антипараллельными (три левых пары на том же рисунке). Об этом прямее всего свидетельствует тот факт, что все дейтроны находятся в триплетном по спину состоянии, т. е. в состоянии, когда спины протона и нейтрона параллельны. Поскольку никто никогда не видел дейтрон в возбужденном состоянии, мы должны заключить, что протон и нейтрон в синглетном по спину состоянии ($S = 0$) не могут образовать связанную систему.

В ди-протоне или ди-нейтроне нуклоны были бы идентичными. Но запрет Паули не разрешает двум идентичным частицам иметь

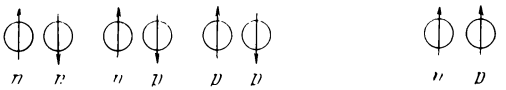


Рис. 28.1.

один и тот же набор квантовых чисел. В силу полной пространственной симметрии, скажем, между двумя нейтронами в основном состоянии ($l = 0$) ди-нейтрона, эти частицы могут различаться только ориентацией спинов, т. е. значением m_s. В основном состоянии ди-нейтрона или ди-протона одна из частиц должна иметь $m_s = +1/2$, а другая $m_s = -1/2$, так что полный спин оказывается равным нулю*). На нейтрон-протонную систему эти ограничения не распространяются, поскольку в этом случае частицы различимы (см. §§ 22.1, 22.2). Если мы теперь сделаем совершенно общее утверждение, что двухнуклонная система может быть связанной только в триплетном ($S = 1$) состоянии, но что не существует связанных двунуклонных синглетных ($S = 0$) состояний, то мы сможем объяснить стабильность дейтрона и нестабильность ди-нейтрона и ди-протона, не предполагая внутреннего различия в природе нейтрон-нейтронного, нейтрон-протонного и протон-протонного полей ядерных сил. Тот факт, что связанных синглетных состояний нет, вовсе не обязательно означает, что нуклон-нуклонные силы приводят к отталкиванию при антипараллельных спинах. Можно утверждать, только, что «синглетная потенциальная яма» не настолько глубока, чтобы удержать нуклоны вместе (рис. 28.1).

Из предыдущего параграфа ясно, что любая информация, полученная из опытов над дейтронами, имеет отношение лишь к «триплетному потенциалу». Сведения же о «синглетном потенциале» можно получить из экспериментов по нуклон-нуклонному рассея-

*) Аргументация автора переупрощена. Суммарная проекция спина может равняться нулю как при $S = 0$, так и при $S = 1$. (*Прим. ред.*)

нию, поскольку два не связанных друг с другом нуклона могут при столкновении испытывать воздействие и синглетного потенциала.

Известно, что энергия связи дейтрона в основном состоянии равна 2,225 *Мэв*, т. е. на каждый нуклон приходится 1,11 *Мэв*, что довольно мало по сравнению с энергией связи нуклонов в типичных ядрах (§ 27.3). Спин дейтрона S, как и полный момент количества движения J, равен единице: $S = J = 1$. В случае водородного атома наблюдаемый спектр позволил найти энергетические уровни, отвечающие большому числу возбужденных состояний. Что касается дейтрона, то здесь нам не повезло с такой детальной информацией — возбужденных состояний у дейтрона нет вовсе. Знания же энергетического уровня, отвечающего основному состоянию, далеко не достаточно для того, чтобы определить форму двухнуклонного триплетного потенциала. Предположим, однако, что это — центрально-симметрическая потенциальная яма $V(r)$ с достаточно четко выраженными радиусом r_0 и глубиной V_0, что иллюстрируется рис. 28.2. Для описания дейтрона предлагалось много различных потенциалов, например, «прямоугольная яма», гауссовская яма $V \sim e^{-(r/r_0)^2}$, экспоненциальная яма $V \sim e^{-r/r_0}$ и потенциал Юкавы $V \sim e^{-r/r_0}/r$. Из всех этих потенциалов только потенциал Юкавы имеет хоть какое-то обоснование в общей теории (гл. 31). Все остальные выбираются просто из соображений математической простоты. К сожалению, все эти потенциалы позволяют удовлетворительно объяснить результаты экспериментов по низкоэнергетическому (< 10 *Мэв*) нейтрон-протонному рассеянию и энергию связи дейтрона, но все они не могут описать рассеяние при высоких энергиях. Другими словами, экспериментальных данных недостаточно, чтобы определить детальную форму потенциала, можно лишь грубо оценить радиус r_0 и глубину V_0. Однако и эта информация очень полезна, и в следующих трех параграфах мы укажем, как можно определить r_0 и V_0.

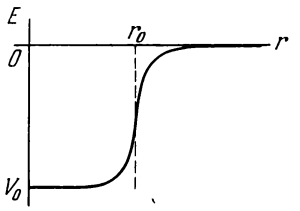


Рис. 28.2.

§ 28.2. Прямоугольная потенциальная яма

Поскольку прямоугольная яма есть математически простейший потенциал, мы и воспользуемся им в качестве основы для анализа системы нейтрон — протон. Предположим (рис. 28.3), что

$$V = -V_0 \quad \text{при } r \leqslant r_0, \qquad V = 0 \quad \text{при } r > r_0. \tag{28.1}$$

Пренебрежем небольшой разницей масс нейтрона и протона и обозначим обе массы через M. Приведенная масса (гл. 3) в этом случае

равна

$$m = \frac{M^2}{M+M} = \frac{1}{2} M. \tag{28.2}$$

Вспомним, что двухчастичную задачу можно свести (гл. 3) к задаче о движении одной частицы с приведенной массой в центральном поле, которое совпадает с полем сил, действующих между двумя исходными частицами. Действуя так же, как и в случае атома водорода, мы приходим к уравнению Шредингера для системы нейтрон — протон, аналогичному уравнению (21.4):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{dR}{dr} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right]R = ER. \tag{28.3}$$

Здесь $V(r)$ уже не равно $-Ze^2/r$, как это было в уравнении (21.4), а определяется соотношениями (28.1); приведенная масса выбирается согласно уравнению (28.2). Те же аргументы, что и в § 21.1, приводят нас к заключению, что основным состоянием системы снова будет состояние с $l = 0$. Низкоэнергетическое рассеяние (§ 28.3) также происходит в состоянии с $l = 0$. Полагая в уравнении (28.3) $l = 0$, мы получаем

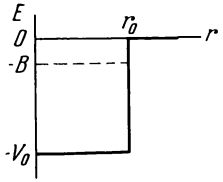


Рис. 28.3.

$$-\frac{\hbar^2}{M}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{dR}{dr} + (V-E)R = 0. \tag{28.4}$$

Это уравнение можно упростить, введя функцию $u(r)$, определенную равенством

$$u(r) \equiv rR. \tag{28.5}$$

Подставляя в (28.4) u/r вместо R, получаем уравнение

$$u'' + \frac{M}{\hbar^2}(E-V)u = 0, \tag{28.6}$$

которое мы и будем решать для прямоугольного потенциала как при положительных, так и при отрицательных E.

Случай 1. $E < 0$. Если E отрицательно, то система связана, причем энергия связи, которую мы обозначим через B, равна $-E$:

$$B \equiv -E.$$

Определим теперь константы α^2 и β^2 равенствами

$$\alpha^2 \equiv \frac{M}{\hbar^2}(V_0 - B) \tag{28.7}$$

и

$$\beta^2 \equiv \frac{M}{\hbar^2}B. \tag{28.8}$$

Уравнение (28.6) с потенциалом V, заданным соотношениями (28.1), перепишется теперь так:

$$u'' + \alpha^2 u = 0 \qquad (r \leqslant r_0) \tag{28.9}$$

и

$$u'' - \beta^2 u = 0 \qquad (r > r_0). \tag{28.10}$$

Можно сразу же написать решения этих уравнений:

$$u = A_1 \sin \alpha r + B_1 \cos \alpha r \qquad (r \leqslant r_0)$$

и

$$u = A_2 e^{-\beta r} + B_2 e^{+\beta r} \qquad (r > r_0).$$

Если потребовать, чтобы волновая функция $R \equiv u/r$ нигде не обращалась в бесконечность, то надо положить $B_1 = 0$, так как в противном случае R неограниченно растет в начале координат, и $B_2 = 0$, поскольку иначе R неограниченно возрастает при $r \to \infty$. Поэтому в качестве решений нужно выбрать функции

$$u = A_1 \sin \alpha r \qquad (r \leqslant r_0) \tag{28.11}$$

и

$$u = A_2 e^{-\beta r} \qquad (r > r_0). \tag{28.12}$$

Если теперь нам удастся определить постоянные A_1 и A_2, то мы получим правильное решение для u (и для R) при всех значениях r. Соотношение между A_1 и A_2 можно установить, заметив, что u'' должна быть конечной, поскольку конечны функции u и V, входящие в уравнение (28.6). Отсюда следует, что функции u' и u должны быть непрерывными. Условие непрерывности u и u' в точке $r = r_0$ приводит к равенствам

$$u(r_0) = A_1 \sin \alpha r_0 = A_2 e^{-\beta r_0} \tag{28.13}$$

и

$$u'(r_0) = \alpha A_1 \cos \alpha r_0 = -\beta A_2 e^{-\beta r_0}. \tag{28.14}$$

Теперь, когда равенство (28.13) выражает A_2 через A_1, можно вычислить и саму величину A_1, воспользовавшись условием нормировки интеграла от квадрата волновой функции (уравнение (20.23)). Однако численное значение A_1 здесь нам не понадобится. Вместо этого мы разделим уравнение (28.14) на уравнение (28.13) и получим соотношение

$$\alpha \operatorname{ctg} \alpha r_0 = -\beta, \tag{28.15}$$

которое с помощью уравнений (28.7) и (28.8) приводится к виду

$$\sqrt{V_0 - B} \operatorname{ctg} [r_0 \sqrt{M(V_0 - B)}/\hbar] = -\sqrt{B}, \tag{28.16}$$

чем устанавливается связь между неизвестными параметрами прямоугольной потенциальной ямы r_0 и V_0.

В гл. 20 мы выяснили, что для одномерной потенциальной ямы основное состояние всегда отвечает волновой функции без узлов. Точно такие же аргументы применимы и к трехмерному случаю: чем больше узлов у волновой функции, тем заметнее ее кривизна и соответственно тем выше кинетическая энергия. Таким образом, если выбрать решение уравнений (28.11) и (28.12) так, чтобы оно описывало основное, т. е. не имеющее узлов, состояние, то $u(r)$ будет иметь вид кривой, изображенной на рис. 28.4. Чтобы обеспечить плавный переход $\sin \alpha r$ в убывающее экспоненциальное решение $e^{-\beta r}$, нужно потребовать, чтобы $\sin \alpha r$ убывал при подходе к точке $r = r_0$, а стало быть, уже перевалил через свой первый максимум ($\alpha r = \pi/2$). Отсюда следует, что для основного состояния аргумент αr_0 лежит во втором квадранте:

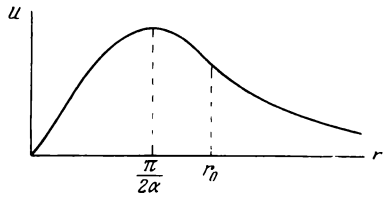


Рис. 28.4.

$$\pi/2 < \alpha r_0 < \pi, \tag{28.17}$$

как это изображено на рис. 28.4, на котором нанесена волновая функция основного состояния дейтрона. Связь между r_0 и V_0, вытекающая из (28.15) или (28.16) и удовлетворяющая ограничениям, наложенным уравнением (28.17), изображена в виде графика на рис. 28.5 для $B = 2{,}225$ *Мэв*, т. е. для известной энергии связи дейтрона. (Поскольку уравнения трансцендентны, их нужно решать численно.) Для $r_0 = 1$ *ферми* этот график дает значение глубины потенциальной ямы 118 *Мэв*, в то время как для $r_0 = 2$ *ферми* $V_0 = 36{,}6$ *Мэв*. Оказывается, что для нуклон-нуклонного триплетного потенциала разумно выбрать именно вторую цифру $r_0 = 2 \cdot 10^{-13}$ *см* (см. § 28.3).

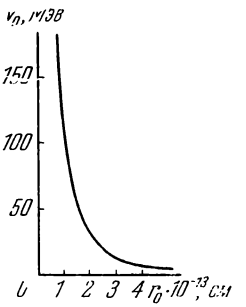


Рис. 28.5.

Случай 2. $E > 0$. С тем чтобы отличать этот случай от решения для связанного состояния, мы введем новые обозначения γ и k для волновых чисел соответственно при $r \leqslant r_0$ и $r > r_0$:

$$\gamma^2 \equiv \frac{M}{\hbar^2}(E + V_0), \tag{28.18}$$

$$k^2 \equiv \frac{M}{\hbar^2} E. \tag{28.19}$$

Уравнение (28.6) примет теперь вид

$$u'' + \gamma^2 u = 0 \qquad (28.20)$$

при $r \leqslant r_0$ и

$$u'' + k^2 u = 0 \qquad (28.21)$$

при $r > r_0$. Решение уравнения (28.20) имеет вид

$$u = C_1 \sin \gamma r \qquad (r \leqslant r_0), \qquad (28.22)$$

где второе независимое решение $\cos \gamma r$ отброшено из соображений конечности функции $R = u/r$ в начале координат. Общее решение при $r > r_0$ можно записать в виде линейной комбинации $\sin kr$ и $\cos kr$ или, что то же самое, в виде

$$u = C_2 \sin (kr + \delta). \qquad (28.23)$$

Как и в случае уравнений (28.13) и (28.14), описывающих связанное состояние, мы должны потребовать непрерывности u и u' в точке $r = r_0$. Это требование вместе с уравнениями (28.22) и (28.23) приводит к соотношениям

$$C_1 \sin \gamma r_0 = C_2 \sin (kr_0 + \delta) \qquad (28.24)$$

и

$$\gamma C_1 \cos \gamma r_0 = k C_2 \cos (kr_0 + \delta). \qquad (28.25)$$

При делении уравнения (28.25) на уравнение (28.24) постоянные C_1 и C_2 выпадают, и мы получаем соотношение

$$\gamma \operatorname{ctg} \gamma r_0 = k \operatorname{ctg} (kr_0 + \delta), \qquad (28.26)$$

которое в нашем случае служит аналогом уравнения (28.15) для связанного состояния.

При заданной энергии E уравнение (28.26) связывает параметры r_0, V_0 и δ. Поскольку, как мы выясним (§ 28.3), при низких энергиях полное сечение рассеяния равно

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta, \qquad (28.27)$$

то параметр δ, называемый *сдвигом фазы*, можно определить из экспериментов по рассеянию. Тогда уравнение (28.26), как и уравнение (28.15), будет содержать лишь два неизвестных параметра; r_0 и V. Казалось бы, можно надеяться, что из этих двух уравнений, связывающих r_0 и V_0, удается однозначно определить и эффективный радиус r_0 и глубину V_0 нейтрон-протонного потенциала, согласующегося с сечением низкоэнергетического нейтрон-протонного рассеяния и с известной энергией связи дейтрона.

§ 28.3. Нейтрон-протонное рассеяние

Все, чему можно научиться, изучая связанную систему протон—нейтрон, заключено в графике рис. 28.5, устанавливающем соотношение между радиусом и глубиной нейтрон-протонного потенциала в случае параллельных спинов $S = 1$. Дальнейшие сведения о нейтрон-протонных силах мы должны извлекать из опытов над *несвязанными* состояниями, иначе говоря, из опытов по нейтрон-протонному рассеянию. В гл. 6 мы рассчитали, основываясь на классической механике, эффективное сечение рассеяния для потенциала $1/r$ и для потенциала, имеющего вид абсолютно твердой сферы. Теперь же наш подход будет несколько иным. Во-первых, мы должны пользоваться квантовой механикой. Во-вторых, мы попытаемся воспользоваться известным эффективным сечением, для того чтобы рассчитать неизвестный потенциал.

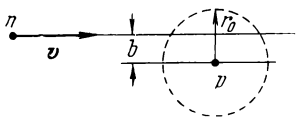


Рис. 28.6.

Эксперименты по нейтрон-протонному рассеянию состоят в том, что пучок движущихся в одном направлении нейтронов направляется на мишень, богатую водородом (протонами), и при этом измеряется число рассеянных нейтронов как функция угла рассеяния. На самом деле при низких энергиях в системе центра масс все углы рассеяния равновероятны. Это можно понять с помощью следующих качественных классических аргументов.

Чтобы нейтрон испытал рассеяние, он должен оказаться настолько близко к протону, чтобы почувствовать воздействие ядерных сил. Иначе говоря, прицельный параметр в нейтроне должен быть меньше, чем эффективный радиус r_0 потенциала $b < r_0$. Если налетающий нейтрон обладает скоростью v, а протон (в мишени) покоится, то момент количества движения $L = Mbv$ нейтрона должен быть меньше Mr_0v, для того чтобы рассеяние могло произойти (рис. 28.6):

$$L < Mr_0v.$$

При релятивистских скоростях $v = \sqrt{2E/M}$ это условие принимает форму

$$L < \sqrt{2MEr_0^2} \qquad (28.28)$$

(с точностью до множителя 2 такой же результат получается и в системе центра масс.) Хотя эти аргументы базируются на классической механике, к аналогичным, правда, не столь категорическим, выводам приводит и квантовомеханическое рассмотрение. (В квантовой механике существует малая, но все же ненулевая вероятность обнаружить частицу с большим L вблизи начала коор-

динат, поскольку волновые функции при $l \geqslant 1$ хотя и малы в окрестности начала координат, но строго в нуль обращаются лишь при $r = 0$.) Однако мы знаем, что момент количества движения квантуется (уравнение (20.29)):

$$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar, \qquad l = 0,\ 1,\ 2,\ 3, \ldots$$

Таким образом (28.28) можно переписать так:

$$\sqrt{l(l+1)}\hbar < \sqrt{2MEr_0},$$

откуда вытекает, что при

$$E \leqslant \hbar^2/Mr_0^2 \text{ имеет место неравенство } l < 1. \qquad (28.29)$$

Но из $l < 1$ следует, что $l = 0$, так как для частицы с приведенной массой в системе центра масс момент квантован. Поэтому для энергий, меньших предельного значения, даваемого выражением

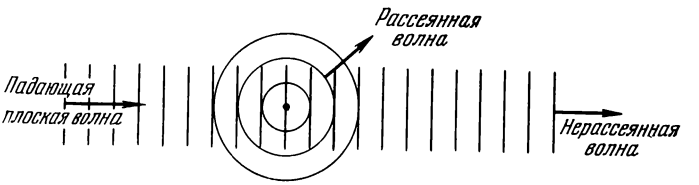


Рис. 28.7.

(28.29), рассеяние происходит преимущественно в состоянии с $l = 0$ (S-состоянии), которому отвечает сферически симметричная волновая функция. Для $r_0 = 2$ *ферми* эта предельная энергия равна 20 *Мэв*. Поэтому при энергиях, меньших 20 *Мэв*, волновая функция рассеянной частицы сферически симметрична в системе центра масс (рис. 28.7). Налетающая низкоэнергетическая частица (нейтрон) с $l \geqslant 1$, как правило, не будет рассеиваться вовсе, поскольку она не приближается к рассеивающему центру (протону) настолько, чтобы испытать его воздействие. Таким образом, следует ожидать, что волновая функция, описывающая процесс низкоэнергетического рассеяния частицы, будет иметь вид суперпозиции плоской волны (уравнение (20.9)), представляющей налетающую свободную частицу, и сферической волны (уравнение (16.21)), определяющей вероятность рассеяния. Посмотрим, удастся ли нам найти обладающее такими свойствами решение уравнения Шредингера (рис. 28.7).

На расстояниях от начала координат, превышающих радиус r_0 потенциальной ямы, частица свободна ($V(r) = 0$) и уравнение

Шредингера принимает вид (20.22):

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = 0, \tag{28.30}$$

где

$$k^2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{ME}}{\hbar}.$$

Но это — как раз уравнение Гельмгольца (16.18). Решения этого уравнения в виде плоской волны и в виде сферической волны получены в гл. 16 (равенства (16.19) и (16.21)). Так как уравнение линейно, то сумма этих решений также является решением, так что мы можем объявить выражение

$$\psi = D\left(e^{ikz} + f\frac{e^{ikr}}{r}\right) \tag{28.31}$$

решением уравнения Шредингера при $r > r_0$. Здесь мы считаем, что падающий пучок частиц направлен по оси z. Здесь D — это нормировочная константа, а f — постоянная (*амплитуда рассеяния*), определяющая относительную долю рассеянной волны. Наша цель состоит в том, чтобы связать f, с одной стороны, с экспериментально наблюдаемым сечением рассеяния, а с другой стороны,— с параметрами потенциала.

Соотношение между множителем f в уравнении (28.31) и эффективным сечением рассеяния σ устанавливается просто. Поскольку сечение σ представляет собой эффективную «площадь мишени», обращенную к налетающей частице (гл. 6), то оно равно также вероятности того, что падающая на мишень частица, которая первоначально заведомо находится в цилиндре с сечением единичной площади и осью, проходящей через мишень и параллельной направлению движения частицы, испытает акт рассеяния (рис. 28.8). В терминах рис. 28.9 это означает, что σ определяется вероятностью того, что частица в единичном объеме A впоследствии окажется в сферическом слое объема B, а не в единичном объеме C. Так как $|\psi|^2$ является плотностью вероятности, вероятность обнаружить частицу в объеме A равна $|De^{ikr}|^2 \cdot 1 = |D|^2$ (см. уравнение (28.31)), а вероятность обнаружить ее в объеме B есть

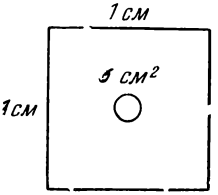


Рис. 28.8.

$$|Dfe^{ikr}/r|^2 4\pi r^2 \cdot 1 = 4\pi |D|^2 |f|^2.$$

Поскольку σ определяется отношением этих вероятностей, то

$$\sigma = 4\pi |D|^2 |f|^2 / |D|^2 = 4\pi |f|^2. \tag{28.32}$$

Попытаемся теперь выразить множитель f в уравнении (28.31) через параметры прямоугольной потенциальной ямы r_0 и V_0 (см.

§ 28.2). Мы уже выяснили, что только частицы с $l = 0$ рассеиваются при низких энергиях. Однако плоская волна e^{ikz} описывает всевозможные свободные частицы, движущиеся в направлении оси z, вне зависимости от того, каков их прицельный параметр b или момент количества движения. Действительно, функция e^{ikz} не

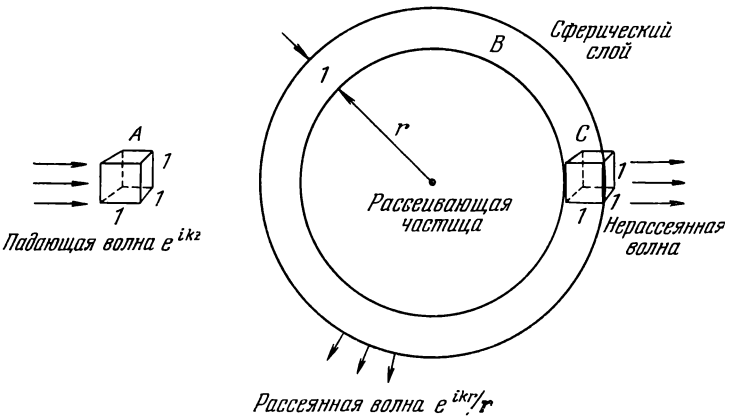


Рис. 28.9.

является собственной функцией оператора квадрата углового момента $\mathbf{L}^2$; ее можно записать в виде бесконечной суммы собственных функций оператора $\mathbf{L}^2$, отвечающих всевозможным значениям l. Мы приведем без доказательства следующее математическое разложение:

$$e^{ikz} = \frac{\sin kr}{kr} + \sum_{l=1}^{\infty} \psi_l(r, \theta). \tag{28.33}$$

Здесь «парциальные волны» ψ_l удовлетворяют уравнению

$$\mathbf{L}^2\psi_l = l(l+1)\hbar^2\psi_l),$$

также уравнению Шредингера. Первый член в разложении (28.33) сферически симметричен и потому представляет собой решение с $l = 0$. Сферически симметричная часть ($l = 0$) полной волновой функции при $r > r_0$ (уравнение (28.31)) задается, следовательно, равенством

$$\psi_0 = D\left[\frac{\sin kr}{kr} + f\frac{e^{ikr}}{r}\right], \tag{28.34}$$

где первый член есть сферически симметричная часть приходящей плоской волны, а второй член представляет собой рассеянную волну.

Однако мы уже нашли общий вид решения с $l = 0$ при $r > r_0$ (т. е. для $V = 0$). Это решение дается равенством (28.23), где $u = r\psi_0$. Чтобы показать, что функция (28.34) действительно может быть записана в виде (28.23), приравняем эти два выражения для $u \equiv r\psi_0$:

$$C_2 \sin(kr + \delta) = D\left[\frac{1}{k}\sin kr + fe^{ikr}\right],$$

$$C_2 \frac{1}{2i}\left[e^{i(kr+\delta)} - e^{-i(kr+\delta)}\right] = D\left[\frac{1}{2ik}\left(e^{ikr} - e^{-ikr}\right) + fe^{ikr}\right]$$

или

$$e^{ikr}\left[\frac{1}{2i}C_2 e^{i\delta} - D\frac{1}{2ik} - Df\right] + e^{-ikr}\left[D\frac{1}{2ik} - C_2\frac{1}{2i}e^{-i\delta}\right] = 0.$$

Последнему равенству можно удовлетворить при всех r только в том случае, если коэффициенты при e^{ikr} и при e^{-ikr} независимо равны нулю. По отдельности из равенства нулю второго коэффициента мы получаем

$$C_2 = D\frac{1}{k}e^{i\delta}.$$

Подставив это в первый коэффициент, мы придем к равенству

$$f = \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta} - 1), \quad \text{или} \quad f = \frac{1}{k}e^{i\delta}\sin\delta. \tag{28.35}$$

Это показывает, что функцию $r\psi_0$, заданную уравнением (28.34), можно переписать в форме равенства (28.23), причем сдвиг фазы δ выражается через f с помощью уравнения (28.35). Объединив уравнения (28.32) и (28.35), мы получим, что полное сечение рассеяния можно выразить через сдвиг фазы δ простым соотношением

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta. \tag{28.27}$$

Этот результат мы уже приводили в § 28.2.

До сих пор мы рассматривали решение уравнения Шредингера при $r > r_0$. При $r \leqslant r_0$ волновая функция, разумеется, не будет совпадать с решением (28.31) для свободной частицы. Однако можно утверждать, что «парциальные волны» ψ_l (28.33) при $l \geqslant 1$ не испытывают воздействия потенциала, поскольку, как мы знаем, частицы с $l \geqslant 1$ при низких энергиях редко подходят достаточно близко к началу координат, где только и «работает» потенциал. И в самом деле, оказывается, что ψ_l для $l \geqslant 1$ практически равны нулю при $r \leqslant r_0$. Иначе говоря, полная волновая функция при $r \leqslant r_0$ является в основном решением уравнения Шредингера с $l = 0$. Поэтому мы должны решить уравнение Шредингера для $l = 0$ и $r \leqslant r_0$ и затем сшить полученное решение в точке $r = r_0$

с парциальной волной для $l = 0$ и $r > r_0$ (уравнение (28.34) или (28.23)). Но это было уже фактически сделано в § 28.2. Решение при $r \leqslant r_0$ задается уравнением (28.22), а в результате сшивания решений получается уравнение (28.26). После ряда тригонометрических преобразований уравнение (28.26) можно разрешить относительно $\sin\delta$ в явном виде (задача 28.4). Подставив ответ в равенство (28.27), мы приходим к выражению

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta = \frac{4\pi}{k^2}\,\frac{\sin^2 kr_0\,(k\operatorname{ctg} kr_0 - \gamma\operatorname{ctg}\gamma r_0)^2}{k^2 + \gamma^2\operatorname{ctg}^2\gamma r_0}. \qquad (28.36)$$

Итак, нам удалось выразить полное сечение рассеяния σ через энергию E (входящую в k и γ), глубину потенциальной ямы V_0 (входящую в γ) и ее радиус r_0. В пределе низких энергий $E \to 0$ и $k \to 0$ выражение (28.36) заметно упрощается (задача 28.35):

$$\sigma(E = 0) = 4\pi r_0^2\left[1 - \frac{\operatorname{tg}\gamma r_0}{\gamma r_0}\right]^2. \qquad (28.37)$$

Если измерить σ при фиксированной энергии E, то уравнение (28.36) даст второе соотношение между r_0 и V_0, которое совместно с уравнением (28.16) или рис. 28.5 могло бы позволить однозначно определить глубину и радиус потенциала. Однако здесь возникает одно затруднение. Поскольку дейтрон находится в состоянии с $S = 1$, то соотношение (28.16) и рис. 28.5 относятся лишь к параметрам триплетного потенциала. При рассеянии же система нейтрон — протон может оказаться как в состоянии с $S = 1$ ($m_S = 1, 0, -1$), так и в состоянии с $S = 0$ ($m_S = 0$). Все четыре возможные комбинации S и m_S равновероятны, так что триплетная конфигурация втрое вероятнее синглетной. Если обозначить сечение рассеяния в триплетном состоянии через σ_t, а в синглетном состоянии — через σ_s, то экспериментально наблюдаемое сечение будет на самом деле равно

$$\sigma = \frac{3}{4}\sigma_t + \frac{1}{4}\sigma_s.$$

Тем не менее измерения σ при различных энергиях ($\lesssim 20$ *Мэв*) позволяют найти параметры V_0 и r_0 и для триплетного, и для синглетного потенциалов. Хорошее согласие с данными по низкоэнергетическому рассеянию получается, если выбрать

$$r_{0t} = 2 \text{ } \textit{ферми}, \quad V_{0t} = 36 \text{ } \textit{Мэв} \qquad (28.38)$$

для триплетного состояния и

$$r_{0s} = 2{,}5 \text{ } \textit{ферми}, \quad V_{0s} = 14 \text{ } \textit{Мэв} \qquad (28.39)$$

для синглетного состояния (рис. 28.10).

Синглетная потенциальная яма не настолько глубока, чтобы привести к появлению связанного состояния. Даже на верхней

границе ямы кинетическая энергия (14 *Мэв*) еще слишком мала, так что синусоидальная волновая функция изменяется чересчур медленно и не успевает достичь своего первого максимума ($\alpha r = \pi/2$) прежде, чем r приблизится к r_0. Поэтому ее нельзя сшить с экспоненциально убывающей в области $r \geqslant r_0$ волновой функцией, что необходимо в случае связанного состояния (уравнение (28.12) и рис. 28.4).

Анализировать протон-протонное рассеяние несколько труднее, чем рассеяние нейтрона на протоне. Дело в том, что протоны взаимодействуют друг с другом не только через ядерные силы, но и через кулоновские силы отталкивания. Однако если выделить вклад ядерных сил, то оказывается, что протон-протонный синглетный потенциал хорошо согласуется с соответствующим синглетным нейтрон-протонным потенциалом (равенства (28.39)).

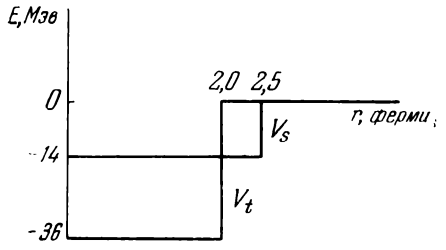


Рис. 28.10.

В силу принципа Паули низкоэнергетическое ($l = 0$) рассеяние протона на протоне может происходить только в синглетном состоянии (спины противоположны). Сведения о нейтрон-нейтронном рассеянии можно получить косвенным образом — из опытов по рассеянию нейтронов на дейтронах (чисто нейтронной мишени не существует), но эти сведения не настолько точны, чтобы можно было с достаточной уверенностью определить параметры нейтрон-нейтронного потенциала. Однако имеющиеся данные не противоречат предположению о том, что нейтрон-нейтронный синглетный потенциал равен нейтрон-протонному и протон-протонному синглетным потенциалам.

Подводя итог, можно сказать, что гипотеза зарядовой независимости ядерных сил в значительной мере подтверждается экспериментами по низкоэнергетическому нуклон-нуклонному рассеянию.

§ 28.4. Проблема ядерных сил

Итак, мы выяснили, что нуклон-нуклонное взаимодействие является сильным, имеет радиус действия порядка $2 \cdot 10^{-13}$ *см* и приводит к притяжению. Ядерные силы зависят от спинов, причем они более интенсивны в состоянии с параллельными спинами (триплетное состояние). Однако на этом разговор не кончается. Оказывается, что имеются отклонения от сферической симметрии, о чем свидетельствует наличие у дейтрона ненулевого квадрупольного

момента. Это означает, что потенциал не является строго центральным, как мы это до сих пор предполагали. На самом деле потенциал зависит от взаимной ориентации спинового вектора и радиуса-вектора, соединяющего положение обоих нуклонов. Это приводит к тому, что основное состояние дейтрона не является чистым состоянием с $l = 0$. С вероятностью 4 % в основном состоянии можно обнаружить орбитальный момент $l = 2$.

Имеются также указания, что в нуклон-нуклонном потенциале имеется своего рода «отталкивающая сердцевина», как это показано на рис. 28.11. С точки зрения низкоэнергетического рассеяния потенциалы на рис. 28.3 и 28.11 неотличимы друг от друга.

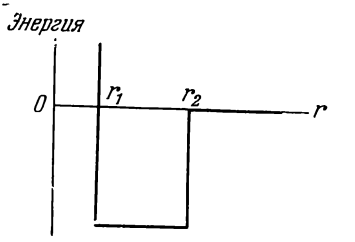


Рис. 28.11.

«Отталкивающая сердцевина» помогает объяснить *насыщение ядерных сил*. Мы уже знаем (гл. 27), что нейтроны и протоны упакованы в ядре подобно твердым шарикам, так что радиус ядра пропорционален $A^{1/3}$, и что энергия связи, приходящаяся на один нуклон, примерно постоянна (не зависит от A). Можно показать, что потенциал вида рис. 28.3 привел бы к стягиванию ядра до таких размеров, когда каждый нуклон окажется в пределах досягаемости ядерных сил любого другого нуклона. Это дало бы радиус ядра порядка 2 *ферми* вне зависимости от A и энергию связи на нуклон, которая увеличивалась бы по мере роста A. И тот, и другой результат противоречит наблюдаемым фактам. С другой стороны, отталкивающая сердцевина способна удерживать нуклоны в некотором удалении друг от друга и приводит к радиусам, пропорциональным $A^{1/3}$. В свою очередь это означает, что каждый нуклон может взаимодействовать лишь с небольшим фиксированным числом соседних нуклонов, которые находятся в радиусе действия его сил. Результатом будет постоянная, независимая от $A^{1/3}$, энергия связи на один нуклон. Внутриядерные силы с отталкивающей сердцевиной (рис. 28.11) по виду напоминают внутриатомные силы (рис. 14.2). Это сходство служит основой «капельной модели» ядра (гл. 29).

Объясняя насыщение ядерных сил, мы должны отметить также их *обменный* характер. Когда нейтрон был открыт (1932 г.), Гейзенберг предположил, что в процессе протон-нейтронного взаимодействия заряд «перепрыгивает» от протона к нейтрону, превращая таким образом протон в нейтрон, а нейтрон — в протон. Высказывались и другие возможности, например обмен не зарядом, а спином. Обменные силы обладают той особенностью, что они приводят к притяжению или отталкиванию в зависимости от того, в

каком *состоянии* относительного орбитального движения находятся нуклоны (почему это так, довольно трудно объяснить на словах, не обращаясь к математике). Поскольку принцип Паули гарантирует, что в тяжелых ядрах нуклоны оказываются в целом ряде различных состояний, то часть нуклонов будет отталкиваться друг от друга, в то время как другие будут притягиваться. Возникшие таким образом силы отталкивания будут препятствовать сжатию ядра, хотя и сомнительно, что наблюдаемое «насыщение» можно получить только за счет обменных сил. В настоящее время очевидно, что ядерные силы представляют собой смесь обменных и необменных, т. е. обычных сил, но в какой точно мере представлены те и другие — еще неясно.

Наличие обменных сил никак не меняет нашего рассмотрения низкоэнергетического нуклон-нуклонного взаимодействия (§§ 28.2 и 28.3), так как это рассмотрение ограничивалось взаимодействием в состоянии с $l = 0$. Но нужно иметь в виду, что в других l-состояниях обменные силы могут совершенно изменить потенциал.

Когда Гейзенберг ввел обменные силы, было еще совершенно неясно, как реально осуществляется этот обмен зарядами. Теперь мы знаем, что π-мезоны, а на очень маленьких расстояниях и более тяжелые мезоны (гл. 31), непрерывно как бы снуют между взаимодействующими нуклонами. Ситуация несколько напоминает ковалентную связь, осуществляемую электронами в *молекуле* H_2 (гл. 24), но здесь силы имеют уже не электромагнитную, а ядерную природу. Обычные силы переносятся только нейтральными π-мезонами, в то время как обменные силы возникают благодаря как заряженным, так и нейтральным мезонам. Дальнейшее обсуждение роли π-мезонов как переносчиков ядерных сил мы отложим до главы, посвященной элементарным частицам (гл. 31).

Отметим, наконец, проблемы, связанные с высокоэнергетическим нуклон-нуклонным рассеянием. Низкоэнергетическое рассеяние дает сколько-нибудь подробную информацию только о примерном радиусе и глубине, но отнюдь не о форме ядерного потенциала. При более коротких волнах $\lambda = \hbar/p$, т. е. при более высоких энергиях, можно надеяться на выяснение детальной структуры этого потенциала. К настоящему времени накоплено большое количество соответствующих экспериментальных данных. Существует прямое свидетельство в пользу значительных обменных сил, имеются также некоторые указания на отталкивающую сердцевину (рис. 28.11). Ядерный потенциал содержит интенсивные нецентральные силы. Эксперимент указывает также на наличие спин-орбитального взаимодействия (см. гл. 23), т. е. на то, что потенциал включает член вида $\mathbf{LS}$. Такой член является нецентральным и, сверх того, зависит от скорости. Дополнительные соображения

в пользу спин-орбитального взаимодействия мы приведем позднее, когда будем разбирать модель ядерных оболочек (гл. 29).

В заключение можно сказать, что, хотя о природе ядерных сил нам известно уже очень много, наши знания еще далеко не полны. Поэтому пока еще невозможно, основываясь на нашем современном уровне знаний о двухчастичных нуклон-нуклонных силах, развить строгую теорию строения ядра.

Задачи

28.1. По уравнению (28.16) рассчитать глубину V_0 прямоугольной потенциальной ямы, если ее радиус r_0 равен $1{,}8 \cdot 10^{-13}$ *см*, а B — энергия связи дейтрона.

28.2. Считая радиус дейтронного триплетного потенциала равным $2 \cdot 10^{-13}$ *см*, найти, какова должна быть глубина потенциальной ямы, чтобы дейтрон имел возбужденное связанное триплетное состояние.

28.3. Оценить примерно, какую энергию должен иметь нуклон в состоянии с $l = 4$, чтобы он заметно рассеивался другим покоящимся нуклоном.

28.4. Вывести уравнение (28.36).

28.5. Вывести уравнение (28.27).

28.6. Радиус двухнуклонного синглетного потенциала составляет около $2{,}5 \cdot 10^{-13}$ *см*, а его глубина — около 14 *Мэв*. Насколько глубже должна быть потенциальная яма, чтобы появилось связанное состояние?

28.7. Рассчитать сечение нуклон-нуклонного рассеяния в пределе низких энергий ($E \to 0$) для триплетного потенциала ($r_0 = 2$ *ферми*, $V_0 = 36$ *Мэв*) и для синглетного потенциала ($r_0 = 2{,}5$ *ферми*, $V_0 = 14$ *Мэв*). Какое сечение измеряется экспериментально?

28.8. Рассчитать сечение нуклон-нуклонного рассеяния в триплетном состоянии ($r_0 = 2$ *ферми*, $V_0 = 36$ Мэв) для $E = 5$ *Мэв*.

Литература для справок

1. Бете Г. и Моррисон Ф., Элементарная теория ядра, ИЛ, 1958.
2. Глесстон С., Атом. Атомное ядро. Атомная энергия. Развитие современных представлений об атоме и атомной энергии, ИЛ, 1961.

Глава 29

Строение ядер

Изучая строение ядер, содержащих большое число нуклонов, мы сталкиваемся с двумя основными проблемами. Первая состоит в том, что наши знания о силах, действующих между двумя нуклонами, неполны (гл. 28). Вторая проблема носит математический характер: это — неизбежная сложность любой многочастичной системы.

Вторая трудность характерна не только для ядер, она возникает каждый раз, когда рассматривается объект, содержащий большое число частиц. Однако ядерная задача многих тел особенно сложна, так как она лишена упрощающих черт. В макроскопических объемах газа количество частиц настолько велико, что хорошо работают статистические методы (ч. II); в кристаллическом теле задача облегчается упорядоченностью частиц, а в многоэлектронном атоме имеется единственный и мощный силовой центр. У ядра же нет ни одного из этих преимуществ. Число нуклонов в ядре слишком мало, чтобы всерьез надеяться на успех статистического описания, нельзя выделить и единый силовой центр. Из-за этих трудностей физику-ядерщику приходится работать в рамках простых моделей, которые способны объяснить некоторые, но, разумеется, отнюдь не все особенности реальных ядер.

Всю совокупность ядерных явлений можно разделить на две обширные категории: а) к первой категории относятся те явления, которые определяются в основном индивидуальным поведением находящихся в ядре частиц, б) за явления второй категории отвечает, напротив, коллективное взаимодействие всех этих частиц. Эффекты в ядрах, попадающие в первую категорию, лучше всего изучать в рамках модели независимых частиц или, как ее еще называют, модели ядерных оболочек (§ 29.2). Эффекты же второй категории можно понять лишь в рамках моделей, подчеркивающих коллективное движение частиц, таких, например, как капельная модель ядра, рассмотрению которой посвящен следующий параграф.

Предполагались и гораздо более хитроумные модели, сочетающие в себе черты обоих подходов. Но для наших ограничен-

ных целей нам достаточно и упомянутых выше простейших моделей, так как мы хотим показать, что уже они позволяют в значительной мере разобраться в особенностях реальных ядер.

§ 29.1. Капельная модель ядра

Мы воспользуемся здесь капельной моделью ядра для того, чтобы получить «полуэмпирическую массовую формулу» и рассмотреть коллективные возбуждения и деление тяжелых ядер.

Мы уже отмечали аналогию с жидкостью, рассматривая насыщение ядерных сил в гл. 27. В жидкой капле энергия связи (теплота конденсации) в основном пропорциональна объему этой капли, т. е. числу частиц в ней содержащихся. В применении к ядру это означает, что в энергию связи входит член, называемый *объемной энергией* и пропорциональный A:

$$B_1 = a_1 A. \tag{29.1}$$

Сам по себе этот член дает завышенное значение энергии связи, поскольку нуклоны у поверхности ядра взаимодействуют с меньшим числом соседей и соответственно не так сильно связаны, как нуклоны в глубине ядра. Количество частиц на поверхности пропорционально ее площади, т. е. $A^{2/3}$, так как радиус пропорционален $A^{1/3}$. Таким образом, к энергии связи еще нужно добавить отрицательную поправку, пропорциональную $A^{2/3}$:

$$B_2 = -a_2 A^{2/3}. \tag{29.2}$$

Это — так называемая *поверхностная энергия*, которая аналогична энергии поверхностного натяжения в жидкости.

Другая важная поправка к объемной энергии возникает из-за кулоновского отталкивания между протонами. Кулоновские силы уменьшают энергию связи и, как мы уже выяснили в гл. 27, соответствующая добавка пропорциональна числу взаимодействующих пар $Z(Z-1)/2$ ($\approx Z^2/2$ при больших Z) и обратно пропорциональна радиусу ядра R, т. е. $A^{1/3}$:

$$B_3 = -a_3 Z^2 A^{-1/3}. \tag{29.3}$$

Чтобы ввести дальнейшие уточнения формулы $B = B_1 + B_2 + B_3$ для энергий связи ядер, мы должны уже выйти за рамки аналогии с жидкой каплей и принять во внимание запрет Паули, которому подчиняются нуклоны. Как уже отмечалось в гл. 27 и еще раз будет обсуждено в следующем параграфе, принцип Паули приводит к тому, что при прочих равных условиях ядра, содержащие примерно равное количество нейтронов и протонов, обладают наибольшей энергией связи. Отклонения от равенства $Z \approx N$ уменьшают

энергию связи. Детальный анализ показывает, что соответствующая *энергия симметрии* должна иметь вид

$$B_4 = -a_4(^1/_2 A - Z)^2/A. \tag{29.4}$$

Все введенные пока члены представляют собой непрерывные функции атомного номера Z и массового числа A **или** Z и N. Из эксперимента, однако, известно, что при изменении Z энергия связи меняется не совсем плавно (см. рис. 27.3), что существенно зависит от того, является Z четным или нечетным. То же самое относится и к зависимости B от N. Ядра с четным Z и четным N наиболее стабильны и наиболее широко распространены, ядра с нечетным A (либо Z, либо N нечетно) обладают промежуточной стабильностью, а ядра с нечетным Z и нечетным N наименее стабильны и наименее распространены (см. табл. 4 и рис. 27.2). Эту особенность ядер также можно понять в терминах принципа Паули и одночастичных энергетических уровней. Поэтому к энергии связи нужно добавить еще один член — *энергию спаривания* B_5:

$$B_5 = \begin{cases} +f(A), & A \text{ четное}, \quad Z \text{ нечетное}, \\ 0, & A \text{ нечетное}, \\ -f(A), & A \text{ четное}, \quad Z \text{ четное}. \end{cases} \tag{29.5}$$

Постоянные a_1, a_2, a_3, a_4 и функция $f(A)$ выбираются так, чтобы получить наилучшее согласие с экспериментально известными энергиями связи. В зависимости от конкретных критериев наилучшего согласия было получено несколько слегка отличающихся друг от друга наборов этих констант. Один из таких наборов, полученный А. Е. С. Грином, приводит к формуле

$$B = 15{,}753\,A - 17{,}804\,A^{2/3} - \\ -0{,}7103\,\frac{Z^2}{A^{1/3}} - 94{,}77\,\frac{\left(\frac{1}{2}A - Z\right)^2}{A} - B_5\,[\text{Мэв}], \tag{29.6}$$

где фигурирующая в B_5 функция $f(A)$ взята в виде

$$f(A) = 33{,}6\,A^{-3/4} \tag{29.7}$$

Согласно уравнению (27.2) масса атома задается формулой

$$M = ZM_{\text{H}} + (A - Z)M_n - B/c^2, \tag{29.8}$$

где B выражается через A и Z с помощью равенства (29.6). Формула для определения массы такого вида рассматривалась впервые немецким физиком Карлом фон Вайцзеккером.

Посредством таких довольно простых рассуждений можно добиться согласия с экспериментальными энергиями связи всех тяжелых и промежуточных ядер ($A \gtrsim 15$) с точностью, превышающей

1%. Формула (29.8) согласуется с экспериментальными значениями атомных масс еще лучше, поскольку главными в уравнении (29.8) являются первые два члена, а расхождения содержатся в сравнительно малом члене B/c^2.

Имея формулу для масс ядер, мы теперь можем обсудить их относительную стабильность. В частности, можно изучить свойства стабильности изобар, т. е. ядер с одинаковым массовым числом A. Начнем с рассмотрения нечетных по A ядер, когда член B_5 равен нулю. При фиксированном A масса M есть функция только от Z. Как видно (уравнение (29.6)), эта функция представляет собой полином второй степени, графиком которого служит парабола (рис. 29.1). Эта парабола ($A = \text{const}$) имеет минимум, который можно найти, положив $\partial M/\partial Z$ равным нулю. Ближайшие к минимуму изобары должны обладать наименьшей массой и наименьшей полной энергией $E = Mc^2$. Как правило, имеется только одна стабильная изобара (A нечетное), поскольку, как мы узнаем, ядра могут менять Z, не изменяя числа A, посредством процесса β-распада, при котором испускается электрон или позитрон (гл. 30).

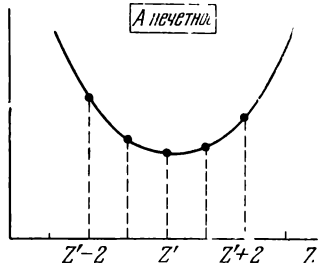


Рис. 29.1.

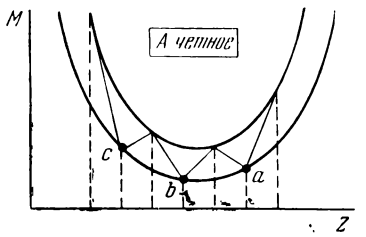


Рис. 29.2.

Только в редких случаях, например при $A = 113$ или $A = 123$, имеются две изобары с нечетным A, которые обе одинаково близки к минимуму параболы и, следовательно, обе стабильны. Рассчитанные по уравнению (29.8) значения A и Z для изобар с минимальной массой очень хорошо согласуются с кривой стабильных ядер (см. рис. 27.2).

Если A четное, то слагаемое B_5 уже равно не нулю, а $+f(A)$ для нечетных Z и $-f(A)$ для четных Z, где $f(A)$ задается уравнением (29.7). Поэтому при фиксированном A нам нужно добавить к массовой параболе некоторую постоянную, если Z нечетно, и вычесть эту постоянную, если Z четно. По этой причине при четных A массы нечетных по Z изобар лежат на отдельной параболе, отстоящей от соответствующей массовой параболы для четных Z на некотором постоянном расстоянии (рис. 29.2). Это объясняет отсутствие четных по A и нечетных по Z ядер при $A > 14$, а также

тот факт, что четные по A ядра часто имеют несколько стабильных изобар (табл. 4), таких, например, как изобары a, b и c на рис. 29.2. Все эти изобары имеют меньшую массу, чем их непосредственные соседи, отличающиеся от них на единицу по протонному числу Z. Они стабильны, поскольку в процессе β-распада (гл. 30) Z может изменяться лишь на единицу. Иначе говоря, изобара a на рис. 29.2 не может распасться с образованием изобары b, несмотря на то, что у b меньшая, чем у a, масса.

Таким образом, область значений величин A и Z для стабильных изобар можно понять с помощью нашей простой формулы для определения массы. Вопрос, почему, начиная с некоторых значений A, даже «самые стабильные» с точки зрения наших предыдущих рассуждений ядра все-таки на самом деле нестабильны по отношению к α-распаду, мы обсудим более подробно в следующей главе. Отметим, однако, что при фиксированном отношении Z/A объемная энергия связи пропорциональна A, в то время как кулоновский член пропорционален $A^{5/3}$. Поэтому при больших A кулоновский член становится относительно более важным и уменьшает, таким образом, энергию связи, приходящуюся на один нуклон. Ясно, что в этом случае более устойчивая конфигурация возникает, если ядро распадается на меньшие части, скажем, в результате процесса ядерного деления или α-распада.

Другая особенность ядер, которую можно понять в рамках капельной модели, — это типы «коллективных возбуждений» ядер. Система нуклонов в каком-либо ядре может перейти в возбужденное состояние многими способами. При некоторых возбуждениях все нуклоны играют существенную роль. Такие возбуждения можно охарактеризовать как упругие колебания, поверхностные колебания или как вращение ядра в целом. В параграфе, посвященном молекулярным спектрам, мы уже рассматривали вращение с позиций квантовой механики (§ 24.5). Энергетические уровни даются равенством (§ 24.5) $E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$, где I — момент инерции ядра, а l — орбитальное квантовое число, связанное с вращением. Существование электрического квадрупольного момента ядер показывает, что их форма отличается от идеально сферической. Расчет вращательных энергетических уровней ядер, имеющих вид слегка деформированной сферы, дает прекрасное согласие с наблюдаемыми энергиями возбуждения. Идентифицировать вращательные серии нетрудно, так как энергетические уровни $l\ (l+1)$ чрезвычайно просто зависят от l*).

*) Вращательные уровни не принято трактовать с помощью капельной модели, поскольку для их существования ядро должно иметь равновесную несферическую форму, что жидкостям не свойственно. *(Прим. ред.)*

Можно рассчитать и энергетические уровни, отвечающие поверхностным колебаниям, но здесь мы этого делать не будем. Вообще говоря, колебательные возбуждения соответствуют бо́льшим энергиям (несколько мегаэлектрон-вольт), чем вращательные уровни. Колебательное возбуждение с наименьшей энергией, когда ядро периодически принимает эллипсоидальную форму, иллюстрируется рис. 29.3. Если сфера деформируется при постоянной плотности, то в массовой формуле (уравнения (29.6) и (29.8)) изменяются только поверхностный и кулоновский члены. При постоянном объеме любое искажение сферической формы увеличивает площадь поверхности, а следовательно, и вклад поверхностного члена в полную массу (уравнение (29.8)). С другой стороны, в эллипсоиде протоны оказываются в среднем более удаленными друг от друга, чем в сфере, что приводит к уменьшению кулоновского вклада в массу. Если *увеличение* поверхностного члена превышает *уменьшение* кулоновского, то полная энергия (или масса) системы возрастает; другими словами, для деформации ядра нужна какая-то *внешняя* энергия. Такое ядро стабильно. Если какое-либо внешнее воздействие деформирует его, оно будет устойчиво колебаться, как это показано на рис. 29.3. В обратном случае, когда увеличение поверхностного члена не может компенсировать убыль кулоновского (кулоновское отталкивание сильнее, чем поверхностное натяжение), то ядро способно самопроизвольно деформироваться и без всякого притока энергии извне развалиться на две части. В этом состоит процесс *деления* (рис. 29.4), который более полно мы обсудим в гл. 30. Деление будет происходить самопроизвольно, если изменение кулоновской энергии $|\Delta B_3|$ превосходит изменение поверхностной $|\Delta B_2|$, $|\Delta B_3|/|\Delta B_2| > 1$. Аккуратное вычисление B_2 и B_3 (уравнения (29.2), (29.3) и (29.6)) в случае эллипсоидальной конфигурации показывает, что $|\Delta B_3|/|\Delta B_2|$ равно $a_3Z^2/2a_2A$, что больше единицы при $Z^2/A \gtrsim 50$ или, в соответствии с кривой стабильных ядер, при $Z \sim 140$, $A \lesssim 390$. На самом деле ядра оказываются нестабильными по отношению к α-распаду значительно раньше ($Z > 83$). Мы увидим также (гл. 30), что если сообщить

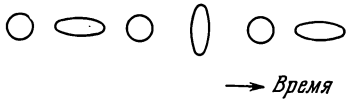


Рис. 29.3.

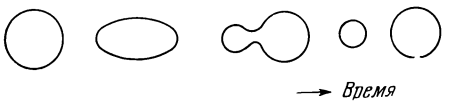


Рис. 29.4.

ядру довольно скромную энергию, то деление может произойти и при гораздо меньших массовых числах.

Наконец, нужно отметить значение капельной модели для понимания идеи *составного ядра* в ядерных реакциях, идеи, которую мы разовьем в гл. 30.

§ 29.2. Оболочечная модель ядра

Успехи капельной модели в объяснении основных особенностей поведения энергии связи как функции A и Z не должны закрывать нам глаза на ее ограниченность. Капельная модель предсказывает, вообще говоря, плавную зависимость свойств ядер от A и Z. Эксперимент же обнаруживает крайне нерегулярные отклонения от соответствующих плавных кривых (см. рис. 27.3). Особенно интересны отчетливые отклонения от плавности при некоторых специальных значениях протонных или нейтронных чисел, а именно, когда Z или N равны 2, 8, 20, 28, 50, 82 и 126. Эти числа известны теперь как *магические числа* ядерной физики. Ядра с «магическими» Z и N оказываются особенно стабильными, т. е. у них энергия связи больше, а масса меньше, чем это предсказывается уравнением (29.6). Из атомной физики мы знаем, что особенно устойчивые электронные конфигурации (с большими потенциалами ионизации) связаны с замкнутыми оболочками или подоболочками. Соблазнительно попытаться установить такую же связь и для ядер.

Эффекты замкнутой оболочки при магических Z- и N-числах проявляются самыми различными способами. Во-первых, при магических значениях Z наблюдается больше стабильных изотопов, а при магических N — больше стабильных изотонов, чем при каких-либо других соседних значениях Z и N. Так, например, из всех элементов олово с $Z = 50$ имеет наибольшее количество, а именно 10 изотопов, причем N для них варьируется от 62 до 74. Аналогично существуют семь стабильных изотонов с $N = 82$ (от Xe^{136} до Sm^{144}) и всего лишь три с $N = 80$ и два с $N = 84$ (см. рис. 27.2 и табл. 4). Оказывается также, что в природе ядра с магическими значениями Z или N более распространены, чем соседние немагические ядра.

О замкнутых оболочках свидетельствуют также ядерные реакции и распады. Так, у ядер с магическими N особенно мало́ эффективное сечение поглощения нейтрона, в то время как ядра, у которых на один нейтрон меньше (N равно магическому числу минус единица), охотно поглощают нейтрон, необходимый для заполнения оболочки. Оказывается также, что когда в результате β-распада ядро освобождается от «лишнего» нейтрона, находящегося вне замкнутой оболочки, то выделяющаяся энергия особенно велика.

Примером может служить распад $^{21}_{18}Ar^{39}$, в итоге которого 21-й нейтрон превращается в 19-й протон.

Указания на наличие замкнутых оболочек с $N = 126$ и $Z = 82$ можно извлечь и из энергетического баланса α-распада (гл. 30). Все ядра с $N > 126$ нестабильны по отношению к α-распаду; однако при $N = 126$ имеются два стабильных изотона — висмут и свинец. Фактически все четыре α-радиоактивные серии (гл. 30) кончаются на стабильных ядрах, у которых N и Z близки к $N = 126$, $Z = 82$:

$$^{126}_{83}Bi^{209}, \quad ^{126}_{82}Pb^{208}, \quad ^{125}_{82}Pb^{207} \quad \text{и} \quad ^{124}_{82}Pb^{206}.$$

Несмотря на то, что все как будто свидетельствует в пользу оболочечного строения ядра, имеются серьезные причины, по которым можно было бы усомниться в разумности такой модели. Электронные оболочки в атоме получались благодаря *одночастичному приближению*, когда мы считали, что электроны движутся независимо друг от друга в доминирующем поле ядра. Менее существенные эффекты взаимодействия электронов учитывались только через уменьшение эффективного заряда ядра (экранировку заряда).

В ядре нет доминирующего центрального потенциала, подобного потенциалу в атоме. Если мы хотим считать, что нуклон движется независимо в каком-то общем потенциале, то им реально может быть лишь *усредненный* потенциал, возникающий из-за взаимодействия нуклонов друг с другом. Имеет ли смысл полагать, что нуклон свободно перемещается по ядру в плавном потенциале, создаваемом всеми другими нуклонами? На первый взгляд на этот вопрос естественно ответить «нет». Нуклон-нуклонные силы обладают небольшим радиусом действия и очень интенсивны (гл. 28). Поэтому, казалось бы, нужно считать, что потенциал будет отчаянно пульсировать и что, перемещаясь внутри ядра, нуклон будет чрезвычайно резко взаимодействовать со своими соседями. Такое положение вещей, разумеется, несовместимо с представлением о независимом движении нуклонов в общей потенциальной яме.

На самом деле противоречие, по крайней мере частично, снимается благодаря принципу Паули. Если два нуклона взаимодействуют в глубине «ядерного вещества», то один нуклон должен был бы передать часть своей энергии и импульса другому, причем квантовомеханическое состояние обеих частиц изменилось бы. В результате взаимодействия с обменом энергией одна из частиц должна была бы перейти на низший энергетический уровень. Но все низшие уровни уже заполнены, и принцип Паули запрещает такое взаимодействие. Нуклон, столкнувшись с одним из своих соседей, стремится как-то переместить его, но очень часто оказывается, что перемещать его уже некуда. Это — довольно-таки

упрощенная картина, поэтому неудивительно, что оболочечная структура ядра не так ярко выражена, как оболочечная структура атома. Тем не менее качественно наши рассуждения приводят к представлению о независимых нуклонах.

Поставим теперь перед собой задачу объяснить, почему замкнутым оболочкам отвечают как раз магические значения нейтронных и протонных чисел. Поскольку все нуклоны сосредоточены в объеме, характеризуемом радиусом ядра R, то нужно принять, что радиус единого потенциала ядра равен $R = 1{,}3 \cdot A^{1/3}$ *ферми*. О детальной форме этого потенциала ничего не известно. Из соображений

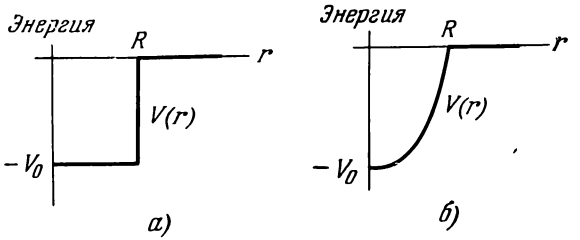


Рис. 29.5.

математической простоты обычно пользуются либо прямоугольной сферически симметричной потенциальной ямой конечной глубины (рис. 29.5, *а*)

$$V = -V_0, \quad r \leqslant R, \qquad V = 0, \quad r > R,$$

либо конечным потенциалом типа потенциала гармонического осциллятора (рис. 29.5, *б*)

$$V = -V_0 + {}^1/_2 Kr^2, \quad r \leqslant R, \quad V = 0, \quad r > R.$$

Еще проще бесконечные потенциальные ямы:

$$V = -V_0, \quad r \leqslant R, \quad V = \infty, \quad r > R$$

или

$$V = -V_0 + {}^1/_2 Kr^2 \text{ при всех } r.$$

Решение уравнения Шредингера для бесконечной сферической потенциальной ямы приводит к следующему расположению низших энергетических уровней: $1s$, $2p$, $3d$, $2s$, $4f$, $3p$, $5g$, $4d$, $6h$, $3s$, $5f$, $7i$, $4p$,..., где символы s, p, d, f, g... отвечают моментам $l = 0$, 1, 2, 3, 4 и т. д., а числа перед этими символами обозначают соответствующее значение главного квантового числа, т. е. количество n узлов радиальной части $R(r)$ волновой функции плюс $(l + 1)$ (гл. 21). Поскольку в соответствии с принципом Паули число тож-

дественных частиц на каждом из этих уровней не может превышать $2(2l+1)$ (§ 22.4), то они «вмещают» соответственно 2, 6, 10, 2, 14, 6, 18, 10, 22, 2, 14, 26 и 6 частиц, а замкнутые оболочки возникают при протонных или нейтронных числах, равных 2, 8, 18, 20, 34, 40, 58, 68, 90, 92, 106, 132 и 138. Из всех этих чисел только 2, 8 и 20 известны как «магические», т. е. отвечающие экспериментально наблюдаемым замкнутым оболочкам. В то же время в этом списке отсутствуют такие магические числа, как 50, 82 и 126.

Если же взять бесконечный потенциал гармонического осциллятора, то $1s$-уровень снова оказывается низшим, за ним следует $2p$-уровень, потом $2s$- и $3d$-уровни с одинаковой энергией, затем одновременно $3p$- и $4f$-уровни, за ними, тоже одновременно, $3s$-, $4d$- и $5g$-уровни и, наконец, $4p$-, $5f$- и $6h$-уровни, также обладающие одинаковой энергией. При таком расположении уровней замкнутые оболочки появляются, когда число частиц равно 2, 8, 20, 40, 70 или 112. В этой последовательности снова фигурируют магические числа 2, 8 и 20 и отсутствуют 50, 82 и 126.

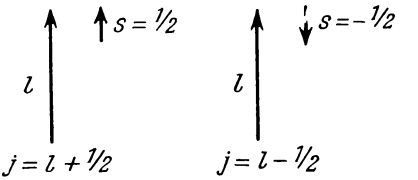


Рис. 29.6.

Другие потенциалы слегка перетасовывают низшие уровни, но ни одна из перетасовок не может воспроизвести все магические числа. Однако до сих пор мы игнорировали сильную связь между спиновым и орбитальным моментами отдельных нуклонов.

У нуклона с $l \geqslant 1$ спин $s = 1/2$ может быть направлен либо параллельно орбитальному моменту, либо антипараллельно ему, так что полный момент j количества движения нуклона равен либо $l + 1/2$, либо $l - 1/2$ (рис. 29.6). Оказывается, что в ядре приближенно сохраняются индивидуальные моменты j, а не полные орбитальный и спиновый моменты L и S (j — j-связь, а не L — S-связь, см. гл. 22). Выяснилось, что гамильтониан каждого нуклона содержит спин-орбитальный член вида

$$-\beta \mathbf{L}_i \mathbf{S}_i = -\frac{\beta}{2}[\mathbf{J}_i^2 - \mathbf{L}_i^2 - \mathbf{S}_i^2],$$

где β — положительная постоянная. Этот член и приводит к спин-орбитальной энергии (уравнение (23.2)), равной

$$E_{ls} = -\frac{\beta}{2}\hbar^2[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]. \qquad (29.9)$$

Отметим, что величины j, l и s относятся здесь к отдельному нуклону, а не к системе нуклонов в целом. При $j = l + 1/2$ эта

энергия равна

$$E_{ls} = -\frac{\beta}{2}\hbar^2\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right) - l(l+1) - \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right)\right] = -\frac{\beta}{2}\hbar^2 l, \tag{29.10}$$

а при $j = l - \frac{1}{2}$, $l \geqslant 1$,

$$E_{ls} = -\frac{\beta}{2}\hbar^2\left[\left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right) - l(l+1) - \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right)\right] = \\ = +\frac{\beta}{2}\hbar^2[l+1]. \tag{29.11}$$

Поэтому для параллельной ориентации спина и орбитального момента количества движения ($j = l + 1/2$) энергия уменьшается, а для антипараллельной ориентации ($j = l - 1/2$) увеличивается. При $l = 0$ спин-орбитального расщепления уровней нет, поскольку при $l = 0$, $s = 1/2$ и $j = 1/2$ энергия $E_{ls} = 0$ (уравнение (29.9)). Но все энергетические уровни, отвечающие $l \neq 0$, расщепляются на два, причем величина расщепления пропорциональна $2l + 1$ (уравнения (29.10) и (29.11)). Уровень с данным j способен вместить $2j + 1$ нуклонов каждого сорта, а не $2(2j + 1)$ нуклонов, так как направление спина уже фиксировано. Так, например, $2p$-уровень, который в отсутствие спин-орбитальной связи содержит $2(2 \cdot 1 + 1) = 6$ частиц, теперь расщепляется на два, один из которых отвечает $j = l + 1/2 = 3/2$ и содержит $2 \cdot 3/2 + 1 = 4$ частицы, а другой соответствует $j = l - 1/2 = 1/2$ и вмещает $2 \cdot 1/2 + 1 = 2$ частицы. Оказывается, что, рассуждая таким образом, можно и в самом деле построить схему энергетических уровней, для которой замкнутые оболочки будут возникать при 2, 8, 20, 28, 50, 82 и 126 частицах в полном согласии с экспериментальными фактами (рис. 29.7). Замкнутые оболочки появляются в тех случаях, когда энергетическая щель между соседними уровнями особенно велика. Значение спин-орбитальной связи для понимания оболочечной структуры ядра было впервые осознано Мейер в Соединенных Штатах и независимо Хакселем, Йенсеном и Шуессом в Германии.

Можно было бы добавить, что опыты по рассеянию нуклонов на ядрах дают независимые указания на спин-орбитальную связь того же знака и той же величины, что и в оболочечной модели.

Точно так же как для электронных оболочек благородных газов, можно предсказать, что полный момент количества движения ядер с замкнутыми оболочками (например, O^{16}) должен быть равен нулю. Так и оказывается на самом деле. Аналогично можно ожидать, что полный момент количества движения ядер, у которых только один нуклон находится за пределами замкнутой оболочки,

будет определяться моментом этого избыточного нуклона: $J = j$. Так, ядро $^{126}_{83}Bi^{209}$ обладает замкнутой нейтронной оболочкой и единственным протоном над замкнутой конфигурацией с $Z = 82$.

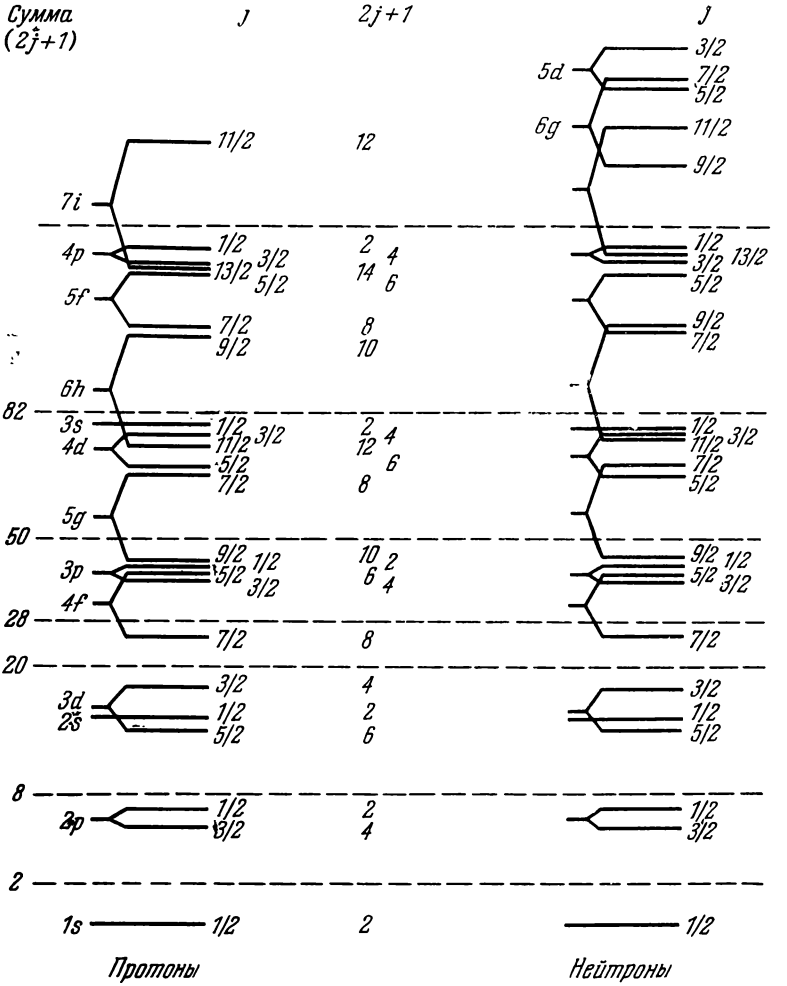


Рис. 29.7.

Магическое число 82 возникает благодаря расщеплению $6h$-уровня на подуровни с $j = 11/2$ и с $j = 9/2$ (рис. 29.7). Если уровень с $j = 11/2$ уже заполнен, то 83-й протон должен попасть на уровень с $j = 9/2$ (рис. 29.7). Оказывается, что квантовое число, отвечаю-

щее полному моменту количества движения Bi^{209}, действительно равно 9/2. Аналогично $^{21}_{20}Ca^{41}$ содержит один нейтрон вне дважды замкнутой оболочки, состоящей из 20 нейтронов и 20 протонов. Полный же момент Ca^{41} составляет 7/2 в согласии со схемой уровней рис. 29.7. Ядра $^{28}_{21}Sc^{49}$ и $^{9}_{8}O^{17}$, обладающие моментами 7/2 и 5/2 соответственно, также подтверждают правильность наших представлений.

Как складываются моменты нуклонов, когда оболочка заполнена лишь частично,— это уже более сложная проблема. Однако из эксперимента известно, что у всех ядер с четным числом нейтронов и четным числом протонов момент количества движения равен нулю. Соблазнительно предположить, что когда к такой четной по нейтронам и четной по протонам конфигурации добавляется еще один нуклон, то момент ядра в целом снова определяется моментом этого избыточного нуклона: $J = j$. Это предположение, называемое также моделью независимых нуклонов, оказалось чрезвычайно успешным. При $A \leqslant 140$ моменты количества почти всех ядер*) удается объяснить на основе этой модели и схемы энергетических уровней, изображенной на рис. 29.7. Однако относительная очередность уровней в какой-то мере зависит от того, сколько частиц реально содержится в системе. При $A > 140$ одночастичная модель работает лучше всего в окрестности магических чисел 82 и 126.

В качестве примера рассмотрим три ядра $^{24}_{21}Sc^{45}$, $^{55}_{42}Mo^{97}$ и $^{87}_{62}Sm^{149}$. В первом из этих трех ядер 21-й протон должен оказаться в $j = 7/2$-состоянии $4f$-уровня, во втором случае 55-й нейтрон — в $j = 5/2$-состоянии $4d$-уровня, а в третьем уровне, содержащем пять нейтронов вне замкнутой оболочки с $N = 82$, нечетный 87-й нейтрон должен занимать $j = 7/2$-подуровень $5f$-уровня (рис. 29.7). Полные моменты J количества движения этих ядер действительно оказываются равными 7/2, 5/2 и 7/2 соответственно.

Нужно подчеркнуть, что предположение о том, что одинаковые нуклоны (к примеру, нейтроны) за пределами замкнутой оболочки стремятся спариться, так чтобы суммарный момент пары был равен нулю, далеко не очевидно. Нужно было бы доказать, что из всех возможных состояний такая конфигурация моментов приводит к наименьшей энергии. Были произведены соответствующие вычисления энергий. Они показали, что модель независимых нуклонов приложима к большинству ядер. Таким образом, конфигурации моментов в ядрах значительно проще, чем в окружающей ядро системе электронов. Заполненная наполовину электронная

*) Кроме самых легких (до кислорода), где связь ближе к $L - S$, чем к $j - j$. (*Прим. ред.*)

оболочка обладает, вообще говоря, ненулевым моментом количества движения (табл. 3). Тот факт, что закономерности в ядрах отличаются от закономерностей электронных систем, не удивителен, поскольку в ядрах мы имеем дело с силами совершенно другой природы.

Другие подтверждения модели независимых нуклонов и схемы энергетических уровней, изображенной на рис. 29.7, получаются из расчетов магнитных моментов ядер с нечетным A. Согласие с опытом здесь не настолько хорошее, как в случае моментов количества движения. Угловой момент квантован, и любые предсказания в этом случае либо в точности подтверждаются, либо дают ошибку сразу в несколько единиц $\hbar$. В рамках модели независимых нуклонов они, как правило, оказываются точными. Магнитный же момент не квантуется, и предсказания модели выполняются здесь лишь приближенно. С другой стороны, можно показать, что сравнение расчетных и наблюдаемых магнитных моментов позволяет определить оба квантовых числа лишнего нуклона — и j, и l, что дает возможность проверить схему уровней оболочечной модели (рис. 29.7) непосредственно. В противоположность этому измерение J (полного момента количества движения ядра) определяет только j (момент лишнего нуклона) и ничего не говорит о том, чему равно l : $j + 1/2$ или $j - 1/2$.

До сих пор мы обсуждали только те предсказания оболочечной модели, которые относятся к основному состоянию ядра. Однако следует ожидать, что возможны такие возбуждения ядра, при которых нуклон переходит на один из незанятых высших энергетических уровней. Возбуждения такого типа означают, что всю энергию возбуждения забирает только один нуклон. Поэтому они сильно отличаются от коллективных возбуждений (колебательных, вращательных), которые мы рассматривали в § 29.1 и которые характеризуются тем, что энергия возбуждения распределяется между всеми нуклонами. И действительно, одночастичные возбуждения такого рода были надежно идентифицированы. Возвращение ядра в основное состояние обычно происходит посредством излучения фотона (γ-излучение) в полной аналогии с электронными переходами в атоме. Однако для ядерных переходов энергия фотона составляет, как правило, несколько мегаэлектрон-вольт.

Особенно поразительный успех оболочечной модели — это правильное предсказание тех областей изменения чисел N и Z, где наблюдаются *изомеры*. Изомерами называются просто возбужденные ядра с чрезвычайно большим временем жизни (порядка часов, суток или лет). Для сравнения отметим, что времена жизни большинства возбужденных состояний ядер составляют что-нибудь от 10^{-6} до 10^{-13} *сек*. Известно, что квантовые переходы со значительным изменением момента количества движения крайне маловероят-

ны (гл. 23). Уже давно все понимали, что «живучесть» изомеров связана как раз с тем обстоятельством, что угловой момент основного состояния ядра сильно отличается от момента изомера. Экспериментально изомеры обнаружены главным образом в следующих изолированных областях, называемых «островами изомерии»:

$$a)\ 39 \leqslant (N \text{ или } Z) \leqslant 49,\ b)\ 63 \leqslant (N \text{ или } Z) \leqslant 81,$$
$$c)\ 91 \leqslant N \leqslant 125.$$

Появление изомеров в этих областях тотчас же объясняется схемой уровней на рис. 29.7. Как видно, «самый крайний» нейтрон или протон в ядрах группы a оказывается в том интервале энергий, где расположены чрезвычайно близкие друг к другу уровень $5g$ ($j = 9/2$) и уровень $3p$ ($j = 1/2$). Так, у иттрия ${}_{39}Y^{89}$, 39-й протон которого находится на $p_{1/2}$-уровне, есть возбужденное $g_{9/2}$-состояние, в то время как изотопы индия ${}_{49}In^{113}$ и ${}_{49}In^{115}$ обладают обратным порядком уровней, т. е. $g_{9/2}$-уровень отвечает основному, а $p_{1/2}$-уровень — возбужденному состоянию ядра. В одном только этом первом «острове» обнаружено более тридцати изомеров.

Появление изомеров группы b можно объяснить аналогично — близостью энергетических уровней $g_{7/2}$ и $h_{11/2}$, отвечающих высоким моментам количества движения, к уровням $s_{1/2}$ и $d_{3/2}$. Изомеры же группы c возникают благодаря соседству $i_{13/2}$- и $p_{1/2}$-уровней (рис. 29.7).

В заключение можно сказать, что целый ряд свойств ядра существенно определяется одночастичными эффектами и может быть истолкован, по крайней мере приближенно, в рамках модели ядерных оболочек. С другой стороны, имеются и коллективные эффекты, которые легче всего понять с помощью моделей, подчеркивающих коллективное движение всех нуклонов, таких, например, как капельная модель ядра. Мы рассмотрели примеры как одночастичных, так и коллективных возбуждений ядра. Таким образом, γ излучение из ядра (испускание фотона) может быть или одночастичным, или коллективным эффектом. С другой стороны, ясно, что деление — это коллективный процесс (§ 29.1), в то время как β-распад сводится к превращению только одного нейтрона в протон или наоборот. Имеется также ряд эффектов, например α-распад, для которых принципиально важны определенные совокупности частиц, содержащие не один, но отнюдь и не все нуклоны. Эти промежуточные случаи представляют, по-видимому, наибольшие трудности для аналитического рассмотрения. Однако примечательнее всего не то, что ядерные проблемы сложны, а то, что уже простейшие модели, которые мы изучали в этой главе, оказываются настолько успешными.

Задачи

29.1. Пользуясь формулой (29.6), рассчитать полную энергию связи ядер Al^{37}, Cu^{63}, Xe^{130} и U^{238}. Сравнить с экспериментальными энергиями связи, помещенными в табл. 4.

29.2. Решить задачу 29.1 для ядер O^{16}, Ca^{40}, Sn^{120} и Pb^{208}. Обсудить различие результатов задач 29.1 и 29.2.

29.3. Построить графики зависимости от A для объемной энергии B_1, поверхностной энергии B_2 и кулоновской энергии B_3. Для B_3 взять значение Z, отвечающее самой стабильной изобаре, а A выбрать примерно на 25 единиц поодаль. Какие заключения можно сделать из этого графика?

29.4. Самопроизвольное деление происходит, если величина $2a_2A/a_3Z^2$ меньше единицы. Вычислить это отношение для ${}_8O^{16}$ и ${}_{92}U^{238}$.

29.5. В результате деления ядро ${}_{92}U^{235}$ распалось на ядро Kr^{90}, ядро ${}_{56}Ba^{144}$ и нейтрон. Воспользовавшись формулой для определения массы, оценить полную энергию, освобожденную в итоге деления. Сравнить эту энергию с кулоновской энергией взаимодействия (сферических) ядер ${}_{0}Kr^{90}$ и ${}_{56}Ba^{144}$ в момент, когда они еще соприкасаются.

29.6. Основываясь на формулах (29.6) и (29.8), построить график рис. 29.1 для $A = 73$. Какие изобары окажутся стабильными? Проверьте ваши результаты по табл. 4. Оценить энергетический выход при β-распаде двух соседних изобар.

29.7. С помощью формул (29.6) и (29.8) построить график рис. 29.2 для $A = 64$. Отметить на нем экспериментальные значения масс Ni^{64} и Zn^{64}. Объяснить, почему Cu^{64} может распадаться с испусканием либо электрона, либо позитрона. Оценить энергетический выход при β^-- и β^+-распадах.

29.8. Предположим, что момент инерции ядра, масса которого равна M, а средний радиус равен R, дается соотношением $I = 2/5\ MR^2$. Считая $A = 125$, оценить энергию (в мегаэлектрон-вольтах) γ-кванта, испущенного в результате перехода ядра с вращательного энергетического уровня с $l = 2$ на уровень с $l = 0$.

29.9. Пользуясь формулами (29.6) и (29.8), исследовать стабильность ядра U^{235} по отношению к испусканию а) α-частицы, б) протона и в) нейтрона (т. е. рассчитать энергетический выход, если он положителен).

29.10. Основываясь на оболочечной модели и схеме энергетических уровней, изображенной на рис. 29.7, установить значения l и j для всех нуклонов в ядрах: а) ${}_1H^3$, b) ${}_6C^{12}$, с) ${}_6C^{13}$ и *d*) ${}_{17}Cl^{35}$. Какой полный момент количества движения J вы предсказываете для всех этих ядер?

29.11. Рассчитать по формулам (29.6) и (29.8) энергию связи последнего протона в ядрах Bi^{209} и Pb^{206} и последнего нейтрона в ядрах Pb^{208} и Pb^{207}. Сравнить ваши результаты с экспериментальными значениями, помещенными в табл. 4, и дать их интерпретацию в терминах оболочечной модели.

Литература для справок

1. Бете Г. и Моррисон Ф., Элементарная теория ядра, ИЛ, 1958.
2. Глесстон С., Атом. Атомное ядро. Атомная энергия. Развитие современных представлений об атоме и атомной энергии, ИЛ, 1961.

Глава 30

Радиоактивный распад и ядерные реакции

Поскольку ядра построены из более мелких частиц — нуклонов, то неудивительно, что они могут претерпевать различные превращения. Легко представить себе, что два взаимодействующих ядра могут образовать составное ядро («жидкую каплю», состоящую из двух исходных ядер), которое затем распадается на два, три или более ядер, подчиняясь, впрочем, законам сохранения полного заряда, энергии и момента количества движения. Так как количество различных возможных реакций такого рода чрезвычайно велико, мы не станем пытаться изучить их все. Вместо этого мы выберем несколько особенно важных ядерных превращений и рассмотрим их более подробно.

Всевозможные превращения ядер удобно разделить на две группы. Индуцированные ядерные реакции являются результатом того, что тем или иным способом ядру сообщается какая-то энергия извне. Эта энергия может быть принесена γ-квантом, нейтроном, другим ядром или какой-либо иной частицей. Стабильные ядра испытывают превращения лишь этого вида. Однако нестабильные ядра могут изменяться спонтанно. Спонтанные ядерные реакции обычно называют радиоактивным превращением. Мы рассмотрим сначала как раз такие радиоактивные превращения, а в конце главы вернемся к индуцированным реакциям.

§ 30.1. Радиоактивность

Радиоактивность была впервые обнаружена у урана в 1896 г. Беккерелем. Существование атомного ядра тогда еще не было установлено, но ретроспективно к открытию Беккереля следует относиться как к первому свидетельству о ядерных реакциях.

Если принять, что ядра радиоактивного вещества обладают постоянной вероятностью λ распада в единицу времени, то вероятность $d\Pi$ того, что ядро спонтанно распадется за время dt, равна

$$d\Pi = \lambda dt.$$

Если всего имеется N ядер, то надо ожидать, что за время dt распадется $Nd\Pi = N\lambda dt$ ядер. Изменение числа нуклонов поэтому равно

$$dN = -N\lambda dt. \tag{30.1}$$

Это уравнение можно проинтегрировать и получить N как функцию времени:

$$N = N_0 e^{-\lambda t}. \tag{30.2}$$

Здесь N_0 — это число ядер в момент $t = 0$. И действительно, экспериментально число радиоактивных распадов в единицу времени убывает со временем экспоненциально в полном согласии с уравнениями (30.1) и (30.2) (рис. 30.1).

Время, в течение которого распадается половина ядер радиоактивного вещества, называется его *периодом полураспада*. Соотно-

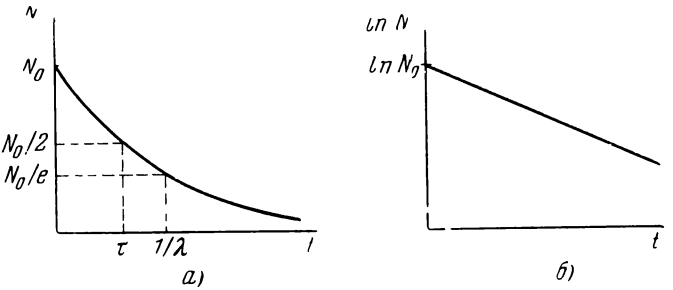


Рис. 30.1.

шение между периодом полураспада τ и постоянной распада λ нетрудно установить, положив в уравнении (30.2) $N = N_0/2$ и $t = \tau$. Мы получаем $1/2 = e^{-\lambda\tau}$, или

$$\tau = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0{,}693}{\lambda}. \tag{30.3}$$

Значения τ для различных ядер варьируются от менее чем 10^{-13} *сек* до более чем 10^{10} лет.

Часто ситуация бывает более сложной, чем в случае уравнений (30.1) и (30.2). Может случиться так, что ядра типа *a* превращаются в ядра типа *b*, которые в свою очередь превращаются в ядра *c* и т. д. Возникает *радиоактивный ряд*, причем число ядер каждого типа изменяется со временем сложным образом в зависимости от постоянных распада и первоначальных количеств ядер каждого сорта.

Даже когда продукты распада стабильны, часто оказывается, что вещество содержит смесь двух видов радиоактивных ядер, например, нестабильные ядра в основном состоянии и те же ядра в изомерных состояниях (§ 29.2). В этих случаях наблюдаемая радиоактивность представляет собой сумму активностей различных нестабильных компонент. Если эти компоненты обладают разными периодами полураспада, то, как правило, удается выделить вклад в общую радиоактивность от каждой компоненты и определить соответ-

ствующие периоды полураспада. Иллюстрацией может служить рис. 30.3, схематически изображающий распады изомеров серебра Ag^{110} и индия In^{116}. Математическим анализом этих более сложных ситуаций мы здесь заниматься не будем.

Радиоактивность обычно измеряется в кюри. Один кюри (*кюри*) — это $3{,}7 \cdot 10^{10}$ распадов в секунду. Милликюри (*мкюри*) — это одна тысячная кюри.

Уже давно было установлено, что радиоактивные распады сопровождаются тремя различными видами излучений. Они были названы соответственно α-, β- и γ-излучением. Впоследствии оказалось, что α-излучение представляет собой поток ядер He^4, β-излучение — поток электронов, а γ-излучение — поток фотонов. Позднее обнаружилось, что иногда испускаются и положительно заряженные электроны или *позитроны* (гл. 31), так что необходимо различать β^- (электронные) и β^+ (позитронные) распады. Сейчас мы рассмотрим эти три вида излучений в порядке, противоположном алфавитному.

§ 30.2. Гамма-распад

В гамма-распаде не меняются ни массовое число A, ни атомный номер Z. Гамма-лучи — это просто фотоны, испущенные в результате перехода возбужденного ядра на уровень с меньшей энергией. Как говорилось в предыдущей главе, такой переход может быть либо коллективным эффектом, либо переходом только одного нуклона с одной оболочки на другую. В принципе гамма-распад очень похож на испускание видимого света или рентгеновских лучей атомом. Однако в случае ядра энергия γ-кванта обычно гораздо больше, часто порядка нескольких мегаэлектрон-вольт. Измерив энергии гамма-квантов, испущенных возбужденными ядрами, можно построить детальные диаграммы энергетических уровней ядра. Полная теория ядра должна была бы «уметь» предсказывать положение этих уровней. Такой теории в настоящее время не существует, однако многие энергетические уровни можно объяснить в рамках либо оболочечной, либо коллективной модели ядра (гл. 29).

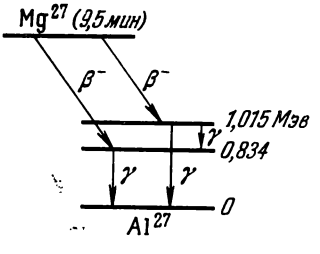


Рис. 30.2.

По теоретическим соображениям период полураспада для разрешенных гамма-распадов должен составлять что-нибудь около 10^{-14} *сек*. Иначе говоря, он слишком мал, чтобы его можно было измерить. Крайне маловероятные распады со значительным изменением момента количества движения ядра могут обладать гораздо большими пе-

риодами полураспада. Как уже отмечалось в предыдущей главе, период полураспада изомеров иногда достигает нескольких минут, часов или суток. Однако по большей части периоды полураспада

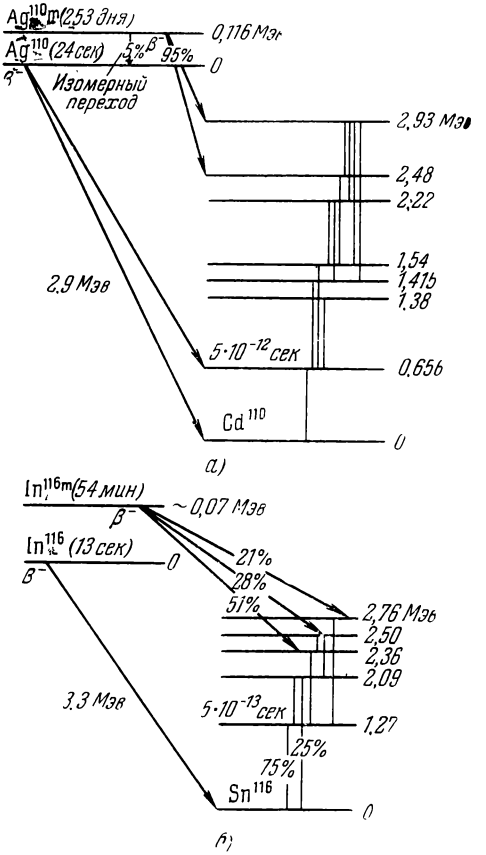


Рис. 30.3.

очень малы. Причина, по которой в веществах с естественной радиоактивностью все же наблюдается γ-излучение, состоит не в том, что соответствующие периоды полураспада велики, а в том, что после α-распада или β-распада ядро часто остается в возбужденном состоянии. Переход из такого возбужденного состояния в основное сопровождается испусканием γ-лучей. Иллюстрация γ-излучения, сопутствующего β-распаду, дается рис. 30.2 (для β-распада Mg^{27}), а также рис. 30.3 (для β- и γ-распадов изомеров серебра (*а*) и индия (*б*)).

Другой способ, каким ядро может освободиться от избытка энергии,— это передача такой энергии одному из внутренних атомных электронов (обычно находящемуся в K-оболочке), в результате чего электрон выбрасывается из атома. Этот процесс, конкурирующий с гамма-распадом, называется *внутренней конверсией*.

§ 30.3. Бета-распад

Теперь мы рассмотрим некоторые процессы, в результате которых ядро может изменить атомный номер на единицу, сохранив прежнее значение массового числа, т. е. процессы превращения ядра в одну из его изобар. Исторически первым обнаруженным процессом такого рода оказался β^--распад, при котором находящийся

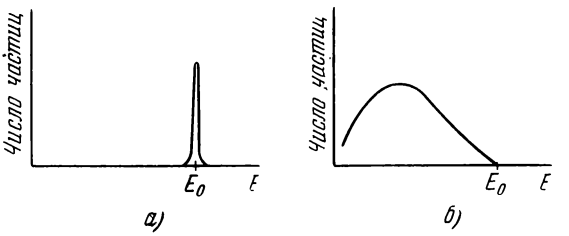


Рис. 30.4.

в ядре нейтрон превращается в протон (остающийся в ядре) и одновременно рождается электрон (β^--частица). Примеры приведены на рис. 30.2 и 30.3. Если покоящееся ядро, которое мы обозначим через ${}_ZX^A$, распадается на «дочернее» ядро ${}_{Z+1}X^A$ и электрон e^-, то импульсы электрона и дочернего ядра должны быть равны по величине и противоположны по направлению. Закон сохранения полной энергии требует тогда, чтобы

$$\sqrt{p^2c^2+m_e^2c^4}+\frac{p^2}{2M_{Z+1,\ A}}+M_{Z+1,A}\,c^2=M_{Z,A}\,c^2, \qquad (30.4)$$

где m_e — масса электрона, $M_{Z,A}$ — масса исходного ядра, а $M_{Z+1,A}$ — масса дочернего ядра. Поскольку массы ядер велики, их движение можно считать нерелятивистским. Уравнению (30.4) можно удовлетворить при единственном значении p^2, а следовательно, при единственном значении кинетической энергии электрона. Другими словами, все испущенные при бета-распаде электроны должны обладать одинаковой энергией E_0 (рис. 30.4, *а*). Это — совершенно общий результат для всех двухчастичных распадов. Однако наблюдаемый спектр энергий электрона имеет скорее форму, изображенную на рис. 30.4, *б*, т. е. форму, типичную для распадов на более чем две частицы.

Если в результате распада образуются три или больше частиц, то освобождающаяся энергия может распределяться между этими частицами таким образом, что у электрона может оказаться любая кинетическая энергия от нуля до некоторого максимального значения, как это показано на рис. 30.4, *б*. Это обстоятельство позволило Паули (1930 г.) выдвинуть предположение, впоследствии развитое Ферми, о том, что при β-распаде помимо электрона испускается еще какая-то частица. Чтобы сохранялся электрический заряд, такая частица должна быть нейтральной; она была названа *нейтрино*. В настоящее время ее называют *антинейтрино* (см. § 31.1) и обозначают символом $\bar{\nu}$:

$$_{Z}X^{A} \rightarrow {}_{Z+1}X^{A} + e^{-} + \bar{\nu}.$$

Поскольку эта частица взаимодействует с другими частицами чрезвычайно слабо, ее трудно обнаружить (§ 31.2). Никакие ее взаимодействия с веществом не были зарегистрированы вплоть до 1956 г., когда антинейтрино было «замечено» в процессе «обратного β-распада» (гл. 31):

$$\text{антинейтрино} + \text{протон} \rightarrow \text{позитрон} + \text{нейтрон}.$$

Спин антинейтрино равен 1/2. Относительно массы покоя нейтрино известно, что она меньше 0,0005 m_e. Как предполагают, она строго равна нулю. Эта оценка выводится из того факта, что максимальная энергия E_0 электронного спектра (рис. 30.4, *б*) совпадает с энергией, определяемой соотношением (30.4), так что уносимая нейтрино энергия (включая энергию покоя) равна в этом случае нулю.

Бета-распад представляет собой процесс, посредством которого ядро с избытком нейтронов приближается к своей стабильной изобаре (см. рис. 27.2). Бета-распады часто сопутствуют альфа-распадам (табл. 5—8, стр. 585) в естественных радиоактивных рядах тяжелых нестабильных ядер ($A > 209$). В результате α-распада вещество выбрасывает ядра гелия; таким образом, и Z и N уменьшаются на 2. Поэтому при $N > Z$ альфа-распад *увеличивает* отношение N/Z, приводя к нарушению оптимального баланса, который и восстанавливается посредством β-распада.

В 1934 г. Кюри и Жолио, изучая реакцию

$$_{13}Al^{27} + {}_{2}He^{4} \rightarrow {}_{15}P^{30} + {}_{0}n^{1},$$

впервые обнаружили β^+-распад, или *позитронный распад*. Ядро $_{15}P^{30}$ радиоактивно и распадается по схеме

$$_{15}P^{30} \rightarrow {}_{14}Si^{30} + e^{+} + \nu.$$

Позитрон — это положительный электрон, который мы рассматривали в гл. 17 и будем более подробно рассматривать в гл. 31.

Процесс β^+-распада — это одна из реакций, с помощью которых ядро с избытком протонов приближается к стабильной изобаре. Другая такая реакция — это процесс *электронного захвата*, который часто называют также K-захватом, поскольку поглощаемый ядром электрон обычно находится первоначально в K-оболочке атома:

$$_ZX^A + e^- \to {}_{Z-1}X^A + \nu.$$

Стабильность ядер по отношению к β-распаду и K-захвату можно качественно оценить по полуэмпирической массовой формуле § 29.1 (см. также рис. 29.1 и 29.2).

§ 30.4. Альфа-распад

Обсудив γ-распад, который не изменяет ни A, ни Z, и β-распад, изменяющий Z, но сохраняющий A, мы переходим теперь к α-распаду, который меняет и Z, и A, причем Z уменьшается на 2, а A — на 4. В то время как β^+- и β^--распады позволяют ядру освободиться от излишнего положительного или отрицательного заряда, α-распад освобождает его как от избыточного заряда, так и от избыточной массы. На рис. 30.5 указаны области α-, β^- и β^+-распадов по отношению к положению стабильных ядер. В итоге α-распада образуются только две частицы — сама α-частица и дочернее ядро:

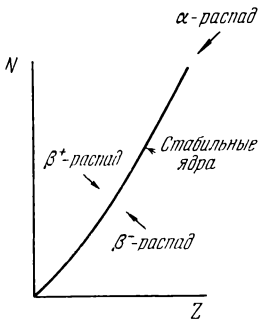


Рис. 30.5.

$$_ZX^A \to {}_{Z-2}X^{A-4} + {}_2He^4.$$

Поэтому в данном распаде все α-частицы будут обладать одной и той же кинетической энергией E_α (§ 30.3 и рис. 30.4, *а*). Поскольку освобождаемая при распаде энергия примерно в 1000 раз меньше массы покоя α-частицы (≈ 4 *Гэв*), движение α-частицы всегда можно считать нерелятивистским. Закон сохранения энергии (аналог уравнения (30.4)) теперь можно записать так:

$$\frac{p^2}{2M_\alpha} + \frac{p^2}{2M_{Z-2,A-4}} + M_\alpha c^2 + M_{Z\ 2,A-4}c^2 = M_{Z,A}c^2$$

или

$$E_\alpha = \frac{p^2}{2M_\alpha} = \left(1 + \frac{M_\alpha}{M_{Z-2,A-4}}\right)^{-1}(M_{Z,\,A} - M_{Z-2,A-4} - M_\alpha)c^2. \quad (30.5)$$

Наблюдаемые энергии α-частиц варьируются в ограниченном диапазоне от 3,99 *Мэв* в распаде $_{90}Th^{232}$ (период полураспада

1,39 · 10^{10} лет) до 8,78 *Мэв* в распаде Po^{212} (период полураспада 3 · 10^{-7} *сек*), хотя времена жизни соответствующих ядер варьируются очень широко. Сравнивая энергии α-частиц и периоды полураспада в четырех радиоактивных сериях (табл. 5—8, стр. 585), мы видим, что энергия обратно пропорциональна периоду полураспада.

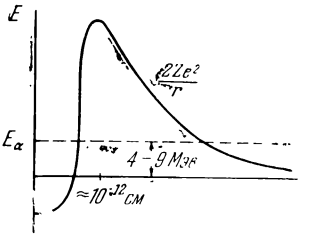


Рис. 30.6.

Качественно это соотношение можно понять в терминах квантовомеханического «туннельного» прохождения сквозь потенциальный барьер. Рассмотрим движение α-частицы в потенциале дочернего ядра. За пределами радиуса действия ядерных сил ($r > 1{,}3A^{1/3}$) потенциал представляет собой простой кулоновский потенциал отталкивания $V \sim r^{-1}$. На меньших расстояниях главный вклад дают мощные ядерные силы притяжения. В сумме получается что-то вроде потенциала, изображенного на рис. 30.6. Если потребовать, чтобы на бесконечности потенциал был равен нулю, то энергия E_α α-частицы должна быть положительной и иметь порядок от 4 до 9 *Мэв*, поскольку именно в этом интервале заключены экспериментальные

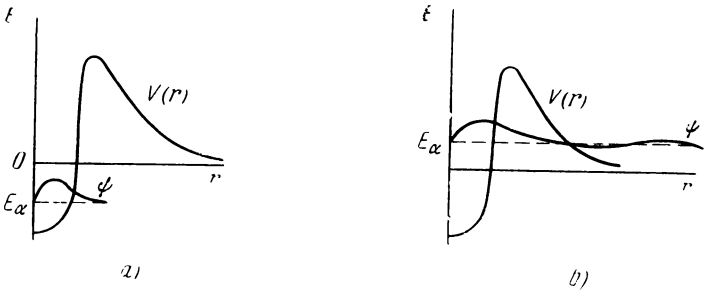


Рис. 30.7.

значения энергий вылетающих при α-распаде частиц. Если бы E_α была отрицательной, то α-частица оказалась бы абсолютно связанной в ядерной потенциальной яме и ее волновая функция имела бы форму, изображенную на рис. 30.7, *а*. Если же E_α положительна, то волновая функция (рис. 30.7, *б*) не обращается в нуль даже в результате экспоненциального убывания внутри барьера (см. гл. 20). Поэтому существует хотя и малая, но конечная вероятность обнаружить α-частицу вне ядра; иначе говоря, посредством туннельного эффекта частица может преодолеть потенциальный барьер.

Если мы идеализируем ситуацию и рассмотрим прямоугольный барьер (рис. 30.8) с высотой V_0 и шириной d, то волновая функция ψ внутри барьера будет иметь вид (гл. 20)

$$\psi \sim e^{-\sqrt{2M_\alpha (V_0 - E_\alpha)}\, x/\hbar}.$$

Отношение значений волновой функции в точках b и a будет поэтому равно

$$\psi(b)/\psi(a) = e^{-\sqrt{2M_\alpha (V_0 - E_\alpha)}\, d/\hbar}. \qquad (30.6)$$

Квадрат этого отношения представляет собой относительную вероятность обнаружить частицу вблизи точки b вместо окрестности точки a, т. е. вероятность прохождения частицы сквозь потенциальный барьер. Если эта вероятность мала, например равна 10^{-15}, то в результате удвоения d или учетверения $V_0 - E_\alpha$ она может измениться в колоссальное число раз; действительно, эта вероятность уменьшится до 10^{-30}. Поэтому ясно, что уже небольшое уменьшение энергии α-частицы, допустим, от 7 *Мэв* до 5 *Мэв*, что для «реальных» ядерных потенциалов (см. рис. 30.6) равносильно увеличению и высоты $V_0 - E_\alpha$, и эффективной ширины d барьера, может на много порядков увеличить период полураспада. Таким образом, громадный диапазон наблюдаемых периодов полураспада при довольно умеренном интервале изменения энергий α-частиц можно объяснить в терминах квантовомеханического туннельного эффекта.

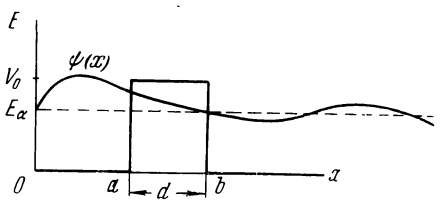


Рис. 30.8.

На самом деле внутри ядра нельзя выделить независимо движущиеся α-частицы; однако на поверхности ядра, как известно, нуклоны стремятся сгруппироваться в α-частицы. Именно здесь и происходит, если верны наши представления, проникновение сквозь барьер. Нельзя ожидать, что наша грубая модель в каждом конкретном случае способна дать что-то большее, чем качественное объяснение α-распада.

Сравнивая массы ядер (табл. 4), мы видим, что заданная уравнением (30.5) энергия E_α оказывается положительной и для тех ядер, массовое число которых лежит гораздо ниже точки $A \approx 208$, где оканчиваются естественные радиоактивные ряды (табл. 5—8). Однако для этих ядер энергия E_α настолько мала ($E_\alpha < 4$ *Мэв*) и тем самым вероятность туннельного эффекта настолько ничтожна, что такие ядра можно считать практически стабильными (задача 30.6).

§ 30.5. Деление ядер

Мы уже рассматривали процесс деления, в результате которого ядро разваливается на два примерно равных куска, в терминах капельной модели (гл. 29). Но деление можно также трактовать и как «α-распад», в котором роль α-частицы играет теперь другая частица, приблизительно в 25 раз более тяжелая. Сравнивая α-распад и деление, рассматриваемые как туннельные процессы, мы видим из формулы (30.6), что увеличение массы продукта деления приводит к уменьшению вероятности деления. С другой стороны, энергетический выход при делении гораздо больше, чем при α-распаде. К этому выводу можно прийти с помощью рис. 27.3, который показывает, что энергия связи на один нуклон (B/A) значительно выше при $A \approx 120$, чем при $A \approx 240$. Разница в энергиях связи возникает главным образом из-за кулоновского члена в уравнении (29.3), который пропорционален $Z^2A^{-1/3}$, т. е. при фиксированном отношении Z/A пропорционален $A^{5/3}$. Поэтому для ядра с массовым числом A кулоновский член в $2^{5/3} \approx 3{,}2$ раза, а кулоновская энергия связи на один нуклон в 1,6 раза больше, чем для ядра с массовым числом $A/2$. Поскольку кулоновский член входит в общее выражение для энергии связи со знаком минус, это означает, что суммарная энергия связи на один нуклон для очень тяжелых ядер будет заметно меньше. Если ядро с атомным номером Z, массовым числом A и массой $M_{Z,A}$ делится на две равные части с атомным номером $Z/2$, массовым числом $A/2$ и массой $M_{Z/2,\ A/2}$, то энергетический выход E_f равен

$$E_f = (M_{Z,\ A} - 2M_{Z/2,\ A/2})c^2. \qquad (30.7)$$

Пользуясь формулами (29.8) и (29.6), можно оценить эту энергию для типичной реакции деления. Первые два члена в уравнении (29.8) выпадают при взятии разности $M_{Z,A} - 2M_{Z/2,\ A/2}$. Поэтому энергия деления E_f получается в результате вычитания полной энергии связи до начала деления из энергии связи продуктов деления. Из рис. 27.3 мы видим, что при $A \approx 120$ отношение B/A равно примерно 8,4 *Мэв*, а при $A \approx 240$ оно составляет около 7,6 *Мэв*. Таким образом, при делении ядра с $A \approx 240$ освобождается энергия

$$E_f \approx (8{,}4\text{—}7{,}6) \cdot 240\ \text{Мэв} \approx 200\ \text{Мэв}.$$

Для сравнения напомним, что при α-распаде энергетический выход варьируется от 4 до 9 *Мэв*.

Если попытаться нарисовать потенциальную энергию одного из продуктов деления как функцию расстояния до другого, мы получим кривую рис. 30.9, аналогичную соответствующей кривой для случая α-частицы в поле дочернего ядра (рис. 30.6). Точно так же как и α-частица, образующееся в результате деления ядро должно

преодолеть потенциальный барьер. Это вытекает из обсуждения, приведенного в § 29.1, где мы отмечали, что при $A \lesssim 390$ небольшие отклонения от сферической формы *увеличивают* полную энергию ядра (поверхностное натяжение больше кулоновского отталкивания). По сравнению с α-частицей продукт деления имеет то преимущество (в смысле вероятности туннельного прохождения), что энергия выхода в этом случае больше, но тот недостаток, что он гораздо тяжелее (вспомним зависимость выражения (30.6) от массы). В результате ни для одного из тяжелых ядер, перечисленных в табл. 5—8, деление не может конкурировать с α-распадом. Поэтому самопроизвольное деление не наблюдается. Однако оно может быть *индуцировано* небольшим количеством энергии, переданным тяжелому ядру.

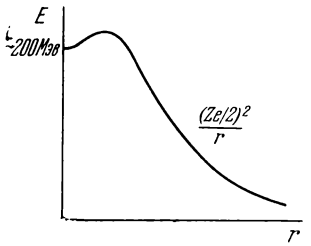


Рис. 30.9.

Три важных тяжелых ядра, а именно $_{92}U^{235}$, $_{92}U^{233}$ и $_{94}Pu^{239}$, обладают тем свойством, что они охотно претерпевают деление, поглотив *медленный нейтрон*, т. е. нейтрон с пренебрежимо малой кинетической энергией. Когда нейтрон попадает в ядро, его потенциальная энергия уменьшается на величину, равную его энергии связи с ядром (порядка нескольких мегаэлектрон-вольт). Освобожденная энергия тратится при этом на возбуждение ядра, и зачастую она оказывается достаточной, чтобы вызвать деление. Тот факт, что медленные нейтроны способны вызвать деление этих ядер, очень важен, поскольку вероятность захвата ядром для медленного нейтрона гораздо выше, чем для быстрого. Медленный нейтрон проводит больше времени вблизи данного ядра, чем быстрый. Поэтому у него больше шансов быть поглощенным. Кроме того, у него меньше избыточная энергия, от которой ему приходится освобождаться внутри ядра. В среднем одному процессу деления сопутствует «испарение» из ядра двух или трех нейтронов. Если один или несколько из этих нейтронов удастся замедлить, они могут снова поглотиться другим ядром и вызвать новый акт деления. Таким образом, процесс деления можно сделать самоподдерживающимся. Почти одновременное деление большой массы тяжелых ядер в такого рода *цепной реакции* было впервые осуществлено Ферми и его сотрудниками в 1942 г.

Как и во всех распадах нестабильных систем, в процессе деления энергия покоя переходит в кинетическую энергию. 200 *Мэв*, освобождающиеся в результате деления, составляют меньше чем 0,1% полной энергии покоя. Тем не менее деление макроскопических количеств «расщепляющегося вещества» сопровождается освобождением колоссальной энергии. Как используется эта энергия в ядер-

ных реакторах и урановых бомбах — общеизвестно. Мы не будем обсуждать здесь подробности этих технических применений ядерных реакций. Скажем только еще несколько слов об источниках расщепляющихся материалов. Как видно из табл. 5—8, все возникающие в природе ядра с массовым числом большим, чем 209, обязаны своим существованием трем долгоживущим ядрам $_{92}U^{238}$ (период полураспада $4{,}5 \cdot 10^9$ лет), $_{92}U^{235}$ (период полураспада $7{,}1 \cdot 10^8$ лет) и $_{90}Th^{232}$ (период полураспада $1{,}39 \cdot 10^{10}$ лет). Только эти ядра ($A > 209$) встречаются на Земле в заметных количествах, и только они могут служить «сырьем» для получения ядерного топлива. Из этих трех ядер лишь $_{92}U^{235}$ допускает непосредственное использование, т. е. расщепляется при поглощении медленного нейтрона. Однако относительная распространенность этого изотопа составляет только 0,7%. Очень распространенные ядра $_{92}U^{238}$ и $_{90}Th^{232}$, хотя сами по себе и не годятся в качестве ядерного топлива, но в результате поглощения нейтрона и двух последующих β^--распадов они могут превратиться в делящиеся ядра $_{94}Pu^{239}$ и $_{92}U^{233}$ соответственно. Поэтому в принципе в ядерных реакторах можно «сжигать» любые тяжелые ядра. Для этого нужно только, чтобы с помощью нейтронов, которые образуются в реакторе, работающем на $_{92}U^{235}$, удалось получить из $_{90}Th^{232}$ и $_{92}U^{238}$ больше ядерного топлива, чем «сгорело» в реакторе. Именно это и достигается в реакторах, называемых «бридерами».

§ 30.6. Слияние ядер

Вернемся на секунду к рис. 27.3. Он показывает, что средняя энергия связи нуклона оказывается наибольшей для ядер с массовым числом, равным примерно 50. И в более тяжелых, и в более легких ядрах нуклоны связаны не так сильно. Поэтому энергия будет освобождаться не только при делении тяжелых, но и при слиянии легких ядер. Действительно, как известно, слияние водородных ядер в гелиевые — это главный источник энергии звезд, в том числе и нашего Солнца.

В отличие от деления урана, которое происходит в результате захвата нейтральной частицы, слияние ядер возможно лишь тогда, когда эти две частицы, преодолев кулоновское отталкивание, сблизятся друг с другом на расстоянии в несколько ферми. На расстоянии $2 \cdot 10^{-13}$ *см* кулоновская потенциальная энергия взаимодействия двух протонов составляет 0,72 *Мэв*. Поскольку эта энергия пропорциональна квадрату атомного номера Z, то чем тяжелее ядра, тем труднее сблизить их настолько, чтобы началось слияние. Наиболее важным и наиболее доступным процессом слияния является слияние водорода.

В настоящее время считается, что основной цикл, посредством которого водород в Солнце переходит в гелий, представляет собой *водородный цикл*. Это — трехступенчатый процесс:

$$H^1 + H^1 \to H^2 + e^+ + \nu + 0{,}42\ Мэв,$$
$$H^1 + H^2 \to He^3 + \gamma + 5{,}5\ Мэв,$$
$$He^3 + He^3 \to He^4 + 2H^1 + 12{,}8\ Мэв.$$

(В итоге получается реакция

$$4H^1 \to He^4 + 2e^+ + 2\gamma + 2\nu + 26{,}7\ Мэв$$

примерно 0,5 *Мэв* уносят нейтрино). Согласно современным оценкам, температура внутри Солнца составляет что-нибудь около $2 \cdot 10^7$°K. При такой температуре средняя кинетическая энергия $^3/_2 kT$ равна приблизительно 1 *кэв*. Этой энергии отнюдь не достаточно, чтобы преодолеть кулоновский барьер. Тем не менее, согласно стандартному энергетическому распределению, какая-то часть протонов будет обладать гораздо большей энергией. Эти частицы, принадлежащие высокоэнергетическому «хвосту» распределения, уже способны к слиянию. Кроме того, слияние может осуществляться и другим способом — в результате туннельного прохождения через кулоновский барьер, подобного туннельному эффекту в α-распаде. Скорость слияния в Солнце фактически очень невелика: в течение года «сгорает» примерно 10^{-11} всей массы Солнца.

Реакции слияния представляют огромный интерес также в связи с возможностями получения дешевой и доступной энергии здесь, на Земле. Водородный цикл в этом смысле не очень перспективен, поскольку первая реакция цикла идет чрезвычайно медленно. Однако на Земле вовсе не обязательно обращаться к протонам, так как в нашем распоряжении имеются без труда получаемые дейтроны. На 5000 частей обычной морской воды приходится примерно 1 часть тяжелой воды, выделение которой обходится очень дешево. Это дает возможность осуществить следующие реакции слияния:

$$H^2 + H^2 \to He^3 + n + 3{,}25\ Мэв,$$
$$H^2 + H^2 \to H^3 + H^1 + 4{,}0\ Мэв,$$
$$H^3 + H^2 \to He^4 + n + 17{,}6\ Мэв,$$
$$H^2 + He^3 \to He^4 + H^1 + 18{,}3\ Мэв.$$

Эти четыре реакции позволяют достичь полной трансформации шести дейтронов по следующей схеме:

$$6H^2 \to 2He^4 + 2H^1 + 2n + 43\ Мэв.$$

При этом около 0,4 % энергии покоя дейтронов переходит в кинетическую энергию, что значительно превосходит энергетический выход в реакциях деления. Однако основное преимущество реактора, использующего слияние ядер, над реактором, использующим деление, заключается в дешевизне и обилии топлива*) и отсутствии опасных радиоактивных отходов.

Слияние дейтронов — это довольно маловероятное событие. Даже при оптимальной энергии упругое рассеяние дейтронов гораздо вероятнее. Для того чтобы в результате такого рода столкновений высокоэнергетический дейтрон не растерял свою энергию, прежде чем у него появится возможность к слиянию, необходимо, чтобы частицы, с которыми он сталкивается, также обладали высокой энергией. Для того чтобы реакция слияния (туннельного прохождения сквозь кулоновский барьер) была достаточно интенсивной, нужно, чтобы частицы в рабочем объеме реактора имели в среднем энергию ~ 10 *кэв*. Для этого температура газа должна достигать примерно 10^8 °K, а при такой температуре (гл. 10) газ, вне сомнения, полностью ионизован. Поэтому рабочим веществом в реакторе, основанном на слиянии, должна быть плазма. Таким образом, перед нами встают проблемы нагревания этой плазмы до нужной температуры и удержания ее в заданном объеме на достаточный для развития реакции слияния срок. По-видимому, единственный практический способ удержания плазмы состоит в применении магнитных полей. В гл. 11 мы уже кратко обсуждали попытки получить устойчивую плазму в таких установках, как *стеллараторы* и *системы с магнитными зеркалами*.

§ 30.7. Другие реакции

Количество изученных ядерных реакций исчисляется тысячами. Мы отметим здесь только несколько таких реакций, представляющих особый интерес.

Впервые искусственная ядерная реакция была получена Резерфордом в 1919 г. Этот первый зарегистрированный процесс такого рода изображается схемой

$$_2\mathrm{He}^4 + {}_7\mathrm{N}^{14} \rightarrow {}_8\mathrm{O}^{17} + {}_1\mathrm{H}^1.$$

Он служит примером так называемой (α, p)- или «альфа-протонной реакции» (α-частица влетает, протон вылетает) и обычно сокращенно обозначается символом

$$\mathrm{N}^{14}\ (\alpha,\ p)\mathrm{O}^{17}.$$

*) В настоящее время освоены энергетические бридерные реакторы, позволяющие использовать на атомных электростанциях Th^{232} и U^{238}, энергетические запасы которого в горных породах не меньше запасов дейтерия в океане при сравнимой стоимости извлечения. *(Прим. ред.)*

Особенно интересна (α, n)или «альфа-нейтронная реакция», поскольку именно в ней Чэдвик в 1932 г. открыл нейтрон (гл. 31):

$$_2He^4 + {}_4Be^9 \rightarrow {}_6C^{12} + {}_0n^1$$

или

$$Be^9\ (\alpha,\ n)C^{12}.$$

Эта реакция представляет также и практический интерес, поскольку она служит одним из наиболее распространенных способов получения нейтронов.

Так как нейтроны не заряжены, их обычно регистрируют с помощью (n, p)- или (n, α)-реакций, в которых заряженные продукты процесса можно «увидеть» непосредственно. Примером является счетчик Гейгера, наполненный трифторидом бора (BF_3), в котором нейтрон регистрируется по реакции

$$B^{10}\ (n,\ \alpha)\ Li^7.$$

α-частица, а также и ядро Li ионизуют газ, что приводит к электрическому разряду в счетчике, позволяющему зарегистрировать нейтрон.

Хорошим «топливом» для реакций слияния является тритий. Его можно очень просто получать при помощи (n, α)-реакции

$$_3Li^6 + {}_0n^1 \rightarrow {}_1H^3 + {}_2He^4,$$

бомбардируя литий нейтронами, вылетающими, например, из ядерного реактора.

Дейтронные реакции особенно важны для получения изотопов, не встречающихся в природе. При (d, p)-реакциях образуются ядра с избытком нейтронов, а при (d, n)-реакциях — с избытком протонов.

Особый интерес представляют ядра, находящиеся в периодической таблице (табл. 2) за ураном $_{92}U^{238}$ — *трансурановые элементы*. Их можно получить самыми разнообразными способами; мы приведем здесь только один пример:

$$_{92}U^{238} + {}_6C^{12} \rightarrow {}_{98}Cf^{244} + 6\,{}_0n^1.$$

Что касается других типов реакций, то мы ограничимся их простым перечислением. Это — (n, p)-, (p, n)-, (p, γ)-, (n, γ)-, (p, $2n$)-, (n, $2n$)- и (α, $2n$)-реакции. Изомеры Ag^{110} и In^{116}, схемы распада которых изображены на рис. 30.3, обычно получают посредством (n, γ)-реакций из Ag^{109} и In^{115}.

При очень высоких энергиях в реакциях типа рассмотренных в настоящем параграфе возникают и другие частицы, такие как π-мезоны или «странные» частицы. Этим новым для нас частицам посвящена следующая, последняя, глава.

Задачи

30.1. Периоды полураспада U^{238} и U^{235} (табл. 5 и 6) и их относительная распространенность (табл. 4) известны. Принимая, что в момент образования Земли имелись равные количества этих двух изотопов, оценить возраст Земли.

30.2. Рассчитать, какая доля первоначального количества радиоактивного вещества останется по истечении времени, равного 10 периодам полураспада и 100 периодам полураспада.

30.3. Рассчитать радиоактивность (в кюри) одного грамма радия (табл. 5).

30.4. Какова активность одной тонны Th^{232}?

30.5. В реакции In^{115} $(n, \gamma)In^{116}$ получен один миллиграмм радиоактивного In^{116}. Предположим, что In^{116} в основном состоянии (период полураспада 13 *сек*) и его изомер (рис. 30.3, *б*) с периодом полураспада 54 *мин* получаются в равных количествах. Построить график зависимости возникшей β^--активности от времени (в логарифмическом масштабе).

30.6. Предположим, что, испустив α-частицу, изотоп $_{60}Nd^{144}$ превратился в $_{58}Ce^{140}$. Рассчитать энергию α-частицы. Пользуясь табл. 7, построить график зависимости энергии α-частицы от логарифма периода полураспада для серии тория. Экстраполировать эту кривую и оценить период полураспада $_{60}Nd^{144}$.

30.7. Пользуясь табл. 4, вычислить максимальную энергию электрона в β^--распаде трития H^3 (который обозначается также символом T).

30.8. Рассчитать Q (см. гл. 6) для следующих реакций:

$$B^{10}\ (n, \alpha)\ Li^7, \quad Be^9\ (\alpha, n)\ C^{12}, \quad N^{14}\ (\alpha, p)\ O^{17}, \quad Cl^{35}\ (p, \alpha)\ S^{32}.$$

Для каждой из этих реакций найти минимальную (пороговую) энергию налетающей частицы, при которой реакция еще возможна. При пороговой энергии продукты реакции движутся параллельно и с одной и той же скоростью, если Q положительна.

30.9. Минимальная (пороговая) энергия протона в реакции $_{29}Cu^{65}$ $(p, n)_{30}Zn^{65}$ равна 2,16 *Мэв*. Рассчитать соответствующее Q (см. § 6.2) и массу $_{30}Zn^{65}$. Как, по вашему мнению, должен распадаться $_{30}Zn^{65}$?

30.10. Рассмотреть слияние двух изотопов кислорода $_8O^{16} + {}_8O^{17} \rightarrow {}_{16}S^{32} + n$. Рассчитать полную энергию, освободившуюся в результате этой реакции, и сравнить ее с кулоновской энергией взаимодействия двух ядер кислорода в момент, когда они соприкасаются.

30.11. При распаде O^{14} образуется возбужденное ядро N^{14} и испускается позитрон. Максимальная кинетическая энергия позитрона равна при этом 1,81 *Мэв*, а энергия γ-кванта, излученного при переходе N^{14} в основное состояние, равна 2,31 *Мэв*. Зная массу N^{14} (табл. 4), вычислить массу O^{14}.

Литература для справок

1. Бете Г. и Моррисон Ф., Элементарная теория ядра, ИЛ, 1958.
2. Глесстон С., Атом. Атомное ядро. Атомная энергия. Развитие современных представлений об атоме и атомной энергии, ИЛ, 1961.

Глава 31

Элементарные частицы

История физики — это во многом история выхода за рамки повседневного, привычного опыта, история наступления вглубь микромира. В двадцатом столетии это наступление достигло области элементарных частиц — области, в которой расстояния обычно измеряются в ферми (10^{-13} см). В попытках проникнуть в недра внутренней структуры материи ученого постоянно направляет и поддерживает вера в то, что природе присуща скрытая простота и симметрия.

Идея о том, что вещество состоит из элементарных частиц, является теперь общепринятой, хотя при ближайшем рассмотрении эти частицы оказываются не такими уж «элементарными», как хотелось надеяться сначала. Элементарную частицу нельзя представлять себе как маленький бильярдный шарик. Это — просто самая мелкая из всех известных порция вещества, которой удается еще приписать определенные значения массы, спина, электрического заряда и некоторых других таинственных величин, с которыми мы познакомимся позже. Можно задать вопрос, в каком, собственно, смысле частицы, образующие большие молекулы, более «элементарны», чем, скажем, песчинки, образующие пляж. Однако между элементарными частицами и песчинками имеется фундаментальное различие (если даже не говорить о разнице в размерах). Все электроны в молекуле (да и во всей Вселенной, насколько мы знаем) представляют собой тождественные частицы, в то время как, внимательно рассмотрев песчинки, мы не найдем среди них и двух в точности одинаковых. Приходится только удивляться, что природа со всеми ее мириадами форм и видов сложена из небольшого числа групп совершенно идентичных объектов. Это, конечно, не означает, что сами элементарные частицы лишены внутренней структуры. Напротив, в последние годы распределение электрического заряда в протоне и нейтроне было предметом интенсивных исследований. Несомненно, и в будущем внутреннее строение элементарных частиц будет привлекать к себе все возрастающее внимание. Удастся ли при этом осмыслить свойства известных теперь частиц в терминах еще более элементарных «кирпичей природы» — это открытый вопрос.

Для физика открытие новой элементарной частицы — это всегда волнующее событие. Хотя в нашем коротком рассказе нам вряд ли удастся воспроизвести драматизм и возбуждение, связанные с такими открытиями, все-таки, по-видимому, лучше построить изложение в историческом плане.

§ 31.1. Открытие частиц

Корпускулярная природа материи отнюдь не очевидна. Так, например, возможность того, что электричество представляет собой непрерывную однородную жидкость, не исключалась и обсуждалась вполне серьезно вплоть до 1897 г., когда Дж. Дж. Томсон, измерив отношение заряда *электрона* к его массе, убедительно установил существование этой первой элементарной частицы. В связи с огромными размерами современной аппаратуры физики элементарных частиц интересно вспомнить, что прибор Томсона, в котором он измерял отклонение катодных лучей (электронов) магнитным и электрическим полями, имел в длину всего лишь около 30 *см*.

Второй «открытой» частицей был *фотон*. Как говорилось в гл. 17 и 18, корпускулярная природа света была установлена благодаря работам Планка (1900 г.) и Эйнштейна (1905 г.). Тем не менее вплоть до 30-х годов никто не относился к фотону как к «настоящей» элементарной частице, такой, скажем, как электрон. У фотона нет массы, в любой системе отсчета он всегда движется со скоростью света, он может с легкостью исчезать и появляться (т. е. поглощаться веществом или же, напротив, испускаться). «Настоящие» частицы, как тогда думали, существуют вечно. Однако по мере развития квантовой теории пропасть, разделяющая фотон и массивные частицы, все время сужалась. В частности, оказалось, что и частицы с массой также можно создавать или уничтожать. Сейчас фотон без всяких оговорок считается полноправной элементарной частицей.

Главный шаг вперед был сделан в 1911 г., когда Резерфорд экспериментами по рассеянию (гл. 5 и 6) продемонстрировал существование атомного ядра. Знаменитая резерфордовская планетарная модель атома и вскоре появившаяся работа Бора революционизировали атомную физику. Однако нам сейчас важно отметить лишь то, что из наличия положительно заряженного атомного ядра следует существование *протона*, поскольку протон — это просто ядро атома водорода.

В течение примерно двадцати лет протоном, электроном и фотоном, которые мы будем обозначать соответственно через p, e^- и γ, исчерпывался список известных элементарных частиц. Свойства этих, а также и других, открытых недавно, частиц перечислены в табл. 9. Хотя период с 1911 по 1931 г. был сравнительно спокойным для физики микрочастиц, для атомной физики и квантовой

теории это было время бурного прогресса. Но и затишье в физике частиц было скоро нарушено — в 1932 г. Чэдвик открыл *нейтрон*, а Андерсон — положительно заряженный электрон, или *позитрон* e^+.

Ранние исследователи считали, что проникающее нейтральное излучение, возникающее при реакции

$$_4Be^9 + {}_2He^4 \rightarrow {}_6C^{12} + n,$$

представляет собой γ-лучи. Чэдвик направил это излучение на водородную мишень и мишень, содержащую азот. Измеряя скорости протонов и ядер азота, выбитых из мишеней нейтронами, он установил, что масса нейтрона примерно равна массе протона. Свойства нейтрона также перечислены в табл. 9. Как мы это уже не раз обсуждали в предшествующих четырех главах, открытие нейтрона знаменовало собой истинное начало современной ядерной физики. Теперь уже можно было понять — в терминах нуклонов (протонов, нейтронов) и электронов,— как устроены все элементы. Возможно, было бы лучше, если бы на этом мы могли и закончить наш рассказ, поскольку большинство недавно открытых частиц скорее запутало, чем прояснило общую картину.

Позитрон был открыт Андерсоном с помощью *камеры Вильсона* — хитроумного приспособления, изобретенного К. Т. Р. Вильсоном и позволяющего непосредственно увидеть треки заряженных частиц. Заряженные частицы выбивают электроны из атомов вещества, в котором они перемещаются, образуя след, состоящий из ионов. Камера Вильсона была первой из серии «умных» машин, дающих возможность зарегистрировать эту локальную ионизацию. Заряженные частицы оставляют в ней видимый невооруженным взглядом след из капелек, конденсирующихся на ионах перенасыщенного пара. В *ядерной эмульсии* заряженные частицы активизируют зерна бромистого серебра, создавая «скрытое изображение». Затем в результате надлежащей химической обработки появляются зерна чистого серебра, образующие готовую фотографию. Сравнительно недавно — в 1952 г.— Д. Глазер сделал другое очень полезное открытие. Оказалось, что треки частиц можно регистрировать посредством пузырьков газа, возникающих в жидкости при резком уменьшении давления ниже ее точки кипения. Это открытие привело к созданию *пузырьковой камеры*. Наконец, нужно отметить еще *искровую камеру*, впервые использованную в ее современном виде Т. Крэншау и Дж. де-Биром. Искровая камера состоит из ряда параллельных пластин, погруженных в газ. Если на соседние пластины подать высокое напряжение, то вдоль траектории ионизующей частицы проскакивают искры, которые можно сфотографировать.

Андерсон направил в камеру Вильсона *космические лучи* — поток высокоэнергетических частиц, вторгающихся в околоземное прост-

ранство из космоса. На одной из полученных фотографий была обнаружена частица, которая выглядела в точности как электрон, но отклонялась магнитным полем *) в противоположном направлении (для каждой частицы в камере Вильсона характерна та или иная плотность капелек; по этой плотности можно идентифицировать различные частицы, в частности электрон). Последующие эксперименты показали, что у позитрона действительно та же масса и тот же спин, что и у электрона, а его заряд равен электронному по величине, но имеет противоположный знак. На самом деле позитрон был предсказан несколькими годами раньше, когда П. Дирак сформулировал релятивистскую квантовую теорию электрона. Уравнение Дирака инвариантно по отношению к некоторому преобразованию, которое называется «зарядовым сопряжением» (§ 31.3). По этой причине оно имеет как решение, отвечающее обычной частице (электрону), так и решение, описывающее «зарядово сопряженную» частицу, или *античастицу* (позитрон). При этом, что называть частицей, а что античастицей — это вещь условная. Принято говорить, что обычное вещество в нашей части Вселенной состоит из частиц, но это не исключает возможности того, что где-то имеется «антиматерия», построенная из античастиц. Особенно поразительным следствием и особенно блестящим подтверждением теории Дирака явилось предсказание двух реакций — полной *аннигиляции* электрона и позитрона, в результате которой вся энергия покоя двух частиц переходит в энергию излучения (фотонов), и обратного процесса — *рождения* фотоном электрон-позитронной пары (рождение пар, гл. 17). Успехи дираковской теории электрона вскоре привели к убеждению, что у каждой частицы есть соответствующая античастица — партнер, и что любая частица, независимо от того, как велика ее масса, может быть порождена или уничтожена. Особенно интересным было возможное существование антинуклонов. После того как был сооружен беватрон — ускоритель протонов, рассчитанный на достаточную для рождения антинуклонов энергию шесть биллионов электрон-вольт, вопрос был решен положительно: в 1955 г. был открыт *антипротон* $\bar{p}$, а в 1956 г.— *антинейтрон* $\bar{n}$.

Довольно трудно указать точную дату «открытия» *нейтрино*. В 1930 г. Паули ввел нейтрино, чтобы спасти закон сохранения энергии в β-распаде (гл. 30). Вскоре выяснилось, что существование нейтрино необходимо также для спасения законов сохранения импульса и момента количества движения. Работа Паули появилась еще до открытия нейтрона, поэтому он думал, что до момента β-распада нейтрино и электрон уже находятся в ядре. С появлением нейтрона от-

*) Идея установки камеры Вильсона в сильное магнитное поле принадлежит Д. В. Скобельцыну. Магнитное поле дает возможность измерять отношение заряда к массе для частицы. *(Прим. ред.)*

пала необходимость предполагать, что в состав ядра входят электроны (раньше эго нужно было для объяснения того факта, что массовое число A больше атомного номера Z). Ферми (1934 г.) воспользовался этим, чтобы построить теорию β-распада, в которой считалось, что электрон и нейтрино рождаются непосредственно в момент распада, точно так же как рождается фотон при γ-распаде или переходе ядра в основное состояние. Теория Ферми оказалась очень удачной, ее основные черты содержатся и в нынешних воззрениях. Согласно современной теории, процессы рождения и уничтожения частиц определяют все основные взаимодействия в природе.

Чтобы при β-распаде сохранялся момент количества движения, нужно приписать нейтрино спиновое квантовое число $^1/_2$. Поэтому нейтрино подобно электрону, протону и нейтрону подчиняются принципу Паули (§ 22.3). Предполагается, что масса нейтрино в точности равна нулю; из эксперимента известно, что она меньше по крайней мере одной тысячной электронной массы.

Со времени 1934 г. условные термины «нейтрино» и «антинейтрино» поменялись местами. Частица, испускаемая при β^--распаде, называется теперь *антинейтрино* $\bar{\nu}$:

$$n \to p + e^- + \bar{\nu},$$

в то время как частица, испускаемая при β^+-распаде, носит название *нейтрино* ν:

$$p \to n + e^+ + \nu.$$

Из-за того, что нейтрино взаимодействует с другими частицами очень слабо, его чрезвычайно трудно зарегистрировать непосредственно. Эта задача оставалась нерешенной вплоть до 1956 г. Рассмотренные только что нейтрино, рождающиеся совместно с электронами или позитронами, в современной литературе часто обозначаются дополнительным значком e (ν_e, $\bar{\nu}_e$), позволяющим отличать их от другой пары нейтрино ν_μ и $\bar{\nu}_\mu$, связанной с *мюоном* μ.

Мюон мы рассмотрим здесь одновременно с *пионом* (называемым также π-мезоном). Хотя это совершенно различные частицы, истории их открытия переплетаются чрезвычайно тесно.

В 1935 г. японский физик-теоретик Юкава предположил, что сильное взаимодействие между двумя нуклонами осуществляется посредством поля ядерных сил, подобно тому как взаимодействие двух зарядов переносится электромагнитным полем. Следует ожидать, что поле ядерных сил, как и электромагнитное поле, будет квантованным. Если бы кванты ядерного поля аналогично электромагнитным квантам, т. е. фотонам, обладали нулевой массой, то, как показал Юкава, ядерный потенциал имел бы бесконечный радиус и убывал бы на больших расстояниях как r^{-1} в полной анало-

гии с кулоновским потенциалом. Однако если масса покоя квантов равна m, то это приводит к потенциалу вида $r^{-1}e^{-rmc/\hbar}$, эффективный радиус которого имеет порядок $\hbar/mc$ — «комптоновской длины волны» кванта ядерного поля. Считая радиус действия ядерных сил равным двум ферми $2 \cdot 10^{-13}$ *см* $\approx \hbar/mc$, мы получаем $m \approx 200\, m_e$, где m_e — масса электрона. По той причине, что ожидаемая масса оказалась промежуточной между массой электрона и массой нуклона, частица была окрещена «мезоном».

Результат Юкавы можно, в общем, понять на основе принципа неопределенности

$$\Delta E \Delta t \gtrsim \hbar.$$

За интервал времени Δt энергия нуклона содержит неопределенность, равную по крайней мере $\Delta E = \hbar/\Delta t$, а его масса — неопределенность $\Delta M = \Delta E/c^2 = \hbar/c^2\Delta t$. Если ΔM совпадает с массой m мезона ($\Delta M = m$), то мы не можем определить, состоит система только из одного нуклона или же из нуклона и мезона. Однако такая неопределенность характерна лишь для короткого периода

$$\Delta t = \hbar/\Delta E = \hbar/mc^2,$$

в течение которого мезон, если он вообще существует, должен быть испущен и вновь поглощен. Для $m \approx 200m_e$ этот период чрезвычайно мал:

$$\Delta t \approx 10^{-23}\ сек.$$

Такое время требуется частице, движущейся со скоростью света, чтобы покрыть некоторое характерное для ядер расстояние. Поэтому оно представляет собой естественную единицу для измерения времени в ядерных масштабах. За время Δt мезон перемещается не больше чем на

$$c\Delta t = \hbar/mc,$$

т. е. на расстояние, равное его комптоновской длине волны. В таком случае, согласно идеям Юкавы, нуклон может постоянно излучать и снова поглощать кванты ядерного поля, т. е. мезоны, даже когда он полностью изолирован от всех других частиц. На расстояниях порядка $\hbar/mc$ нуклон окружен «мезонным облаком». Если вслед за Юкавой предположить, что мезоны заряжены, то нужно признать, что в какие-то короткие промежутки времени протон представляет собой систему, состоящую из нейтрона и положительно заряженного мезона, а нейтрон — систему из протона и отрицательного мезона. Такая точка зрения находит подтверждение в недавних экспериментах по электрон-нуклонному рассеянию. Эти эксперименты показывают, что в нейтроне имеется внутренний положительно заряженный слой с радиусом около 0,6 *ферми* и за пределами этого радиуса —

слой отрицательного заряда. Мезоны в «облаке», появляющиеся только на миг и как бы прикованные к нуклону, называются *виртуальными* мезонами. Они не принадлежат к разряду реальных наблюдаемых частиц, поскольку закон сохранения энергии не позволяет им отделиться от изолированного нуклона. Однако если другой нуклон приближается к первому на расстояние, меньшее $\hbar/mc$, т. е. вторгается непосредственно в мезонное облако, то испущенный одним из нуклонов мезон успевает добраться до второго раньше, чем закон сохранения энергии потребует его исчезновения. Таким образом, мезон может переносить от одного нуклона к другому импульс, момент количества движения и даже заряд; нуклоны *взаимодействуют* посредством обмена мезонами.

В 1937 г., т. е. два года спустя после того, как Юкава опубликовал свою теорию мезонов, Неддермейер и Андерсон и независимо от них также Стрит и Стивенсон сообщили, что в космических лучах они наблюдали частицу, масса покоя которой по порядку величины совпадала с предсказанным Юкавой значением. Эта частица тотчас же была объявлена юкавским квантом ядерного поля, но дальнейшие исследования показали, что концы с концами при этом не сходятся. Поскольку предполагалось, что юкавская частица является переносчиком ядерных сил, она должна была сильно взаимодействовать с ядрами. Отсюда следует, что, попав в вещество, она должна очень быстро поглотиться. Однако открытая в 1937 г. частица (сейчас она известна как *мюон*, μ) обладает высокой проникающей способностью и, стало быть, слабо взаимодействует с ядрами. В 1947 г. было показано, что силы, переносимые мюоном, по крайней мере в 10^{13} раз слабее мощных ядерных сил.

Парадокс был решен в том же году (1947), когда группой Пауэлла был открыт π-мезон или *пион*. Оказалось, что пионы сильно взаимодействуют с ядрами, и их можно отождествить с мезонами Юкавы. (На самом деле Юкава рассматривал только заряженные пионы π^+ и π^-. Нейтральный пион π^0 был предсказан в 1939 г. Кеммером.) Масса π^--мезона и его античастицы π^+-мезона равна $273{,}1m_e$, в то время как нейтральный π^0-мезон, который, подобно фотону, сам является своей античастицей, обладает массой $264{,}3m_e$. Заряженные пионы распадаются преимущественно на мюоны и нейтрино с периодом полураспада $2{,}55 \cdot 10^{-8}$ *сек*:

$$\pi^+ \to \mu^+ + \nu_\mu,$$
$$\pi^- \to \mu^- + \bar{\nu}_\mu,$$

а нейтральный пион π^0 распадает на два фотона, причем среднее время жизни равно примерно $2 \cdot 10^{-16}$ *сек*:

$$\pi^0 \to 2\gamma.$$

Пионы — это бесспиновые частицы: $s = 0$.

Мюон в каком-то смысле по-прежнему остается загадкой. Он, по-видимому, тождествен электрону во всех своих свойствах, за исключением гораздо большей массы: $m_\mu = 206{,}8\, m_e$. Вопрос: какова природа большой массы этого «тяжелого электрона» и каково назначение этой, казалось бы, «бесполезной» частицы — представляет одну из многих интригующих нерешенных проблем физики элементарных частиц.

По аналогии с электроном принято считать μ^--мезон «частицей», а μ^+-мезон — «античастицей» (нейтрального мюона нет). Мюон нестабилен и распадается на электрон, нейтрино и антинейтрино:

$$\mu^+ \to e^+ + \nu_e + \nu_\mu,$$
$$\mu^- \to e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu.$$

Среднее время жизни мюона равно $2{,}21 \cdot 10^{-6}$ *сек*. Тот факт, что мюонное нейтрино ν_μ отличается от электронного нейтрино ν_e, был установлен впервые в 1962 г. группой ученых из Колумбийского университета. В этом эксперименте нейтрино ν_μ и $\bar{\nu}_\mu$, возникающие в результате распадов π^+- и π^--мезонов, поглощались нуклонами в процессе реакций

$$\bar{\nu}_\mu + p \to n + \mu^+,$$
$$\nu_\mu + n \to p + \mu^-.$$

Какая-то часть образовавшихся в итоге мюонов была зарегистрирована в искровой камере. Чтобы исключить попадание в камеру каких-либо других частиц, кроме исследуемых нейтрино, она была защищена 13-метровым слоем железа, взятого с военного корабля «Миссури». В результате ускорения примерно $3 \cdot 10^{17}$ протонов до энергии 15 *Гэв* было получено достаточно много пионов, так что в искровую камеру попало необходимое (по предварительным оценкам 10^{14}) количество нейтрино (продуктов распада пионов). Сложность эксперимента иллюстрируется тем фактом, что только двадцать девять из этих 10^{14} нейтрино привели к рождению мюона. Если бы электронное нейтрино ν_e и мюонное нейтрино ν_μ были тождественными, то следовало бы ожидать, что одновременно с мюонами будут возникать также электроны и позитроны за счет реакций типа

$$\bar{\nu}_e + p \to n + e^+.$$

Действительно, именно в этой реакции в 1956 г. Коуэн и Райнес впервые зарегистрировали нейтрино, возникшее при β-распаде. Однако при использовании мюонных нейтрино, образующихся в результате распада пионов, не было ни одного события такого рода. Поэтому нужно считать, что ν_e и ν_μ — это разные частицы. К существованию отдельного мюонного нейтрино можно относиться как к еще одному проявлению «мюонной загадки». Электрон и мюон

вместе с соответствующими нейтрино образуют семейство частиц, известных под названием *лептоны*, что по-гречески означает «легкие».

Вплоть до 1947 г. ситуация с элементарными частицами представлялась разумно простой. Электроны и нуклоны были «нужны», чтобы построить атомы, а фотоны и пионы играли роль переносчиков соответственно электромагнитных и ядерных сил. Античастицы воспринимались как приятное указание на симметрию природы. Только мюоны и нейтрино не находили пока себе места в этой схеме мироздания, но их существование не слишком портило общий пейзаж. Однако с того времени был открыт целый сонм новых необычных частиц. Эти частицы получили общее название «*странные частицы*». С 1947 по 1953 г. единственным источником энергий, достаточных для получения этих тяжелых нестабильных частиц, служило космическое излучение. Количество странных частиц в космических лучах было относительно небольшим, и прогресс был довольно медленным вплоть до 1953 г., когда вступил в строй первый ускоритель, на котором можно было получать странные частицы в лабораторных условиях (брукхэвенский космотрон на 3 *Гэв*).

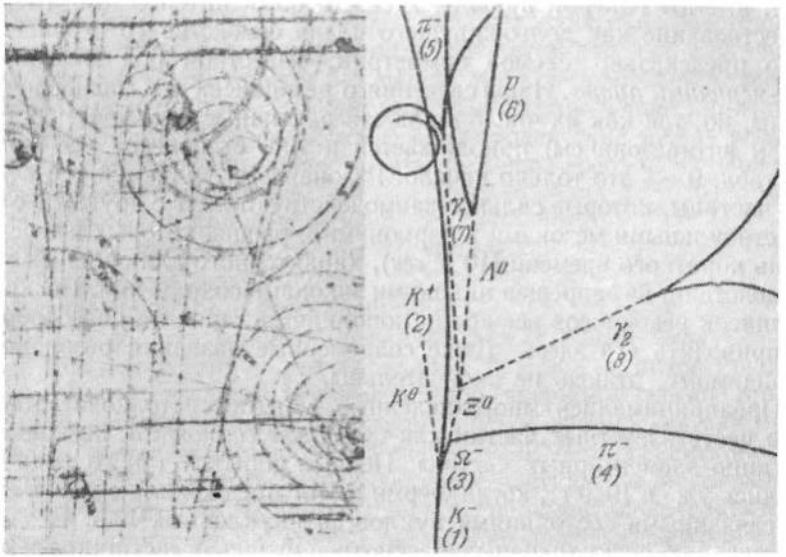
К 1956 г. общая картина несколько прояснилась. К этому времени «появились» 16 новых «элементарных» частиц, большинство из них было зарегистрировано на эксперименте, относительно других имелась твердая уверенность, что они существуют (хотя некоторые античастицы реально не обнаружены и до сих пор). Странные частицы распадаются на две главные группы: в первую входят K-мезоны, или каоны, вместе со своими античастицами, вторую же составляют шесть гиперонов и их античастицы. Подобно π-мезонам, K-мезоны обладают нулевым спином; известно, что они играют определенную роль в передаче интенсивных ядерных сил на очень малых расстояниях. Так как для рождения K-мезона нужна довольно большая энергия, радиус каонного потенциала гораздо меньше, чем радиус пионного (юкавского) потенциала. Имеются всего четыре K-мезона: положительно заряженный K^+-мезон, нейтральный K^0-мезон и их античастицы — K^--мезон и $\overline{K}^0$-мезон соответственно (K^0- и $\overline{K}^0$-мезоны — это совершенно разные частицы).

Гипероны можно трактовать как «странные» тяжелые нуклоны. Вместе с нуклонами они образуют группу из восьми частиц *), называемых *барионами*, что по-гречески означает «тяжелые». Гипероны делятся на три семейства — *зарядовые мультиплеты*. Первый мультиплет содержит только одну частицу — нейтральную Λ^0

*) В 1964 г. был открыт Ω^- (омега-минус) гиперон с массой 3284 m_e. Считается, что спин этого гиперона равен 3/2 $\hbar$. Таким образом, полное число гиперонов теперь равно 9. (*Прим. ред.*)

(лямбда), которая является самым легким гипероном. Затем следуют зарядовый триплет Σ^+, Σ^0 и Σ^- (сигма) и, наконец, дублет «каскадных» частиц Ξ^0 и Ξ^- (кси). Спин всех этих гиперонов равен $^1/_2$, и потому все они подчиняются принципу запрета Паули.

Массы, заряды, спины и средние времена жизни всех элементарных частиц, обнаруженных к середине пятидесятых годов (или тогда ожидавшихся, а реально найденных впоследствии), сведены



XVI. Рождение и распад Ω^--гиперона. Налетающий K^--мезон взаимодействует с покоящимся протоном в водородной пузырьковой камере и порождает K^0-мезон, K^+-мезон и Ω^--гиперон.

в табл. 9. Сверх того, мы включили в эту таблицу мюонное нейтрино (открытое в 1962 г.), *гравитон* (гипотетический квант гравитационного поля) и недавно открытые η^0-мезон и Ω^--гиперон (фото XVI).

Важные схемы распада элементарных частиц и относительные вероятности этих распадов перечислены в табл. 10. Схемы распада соответствующих античастиц можно получить, заменив в схеме продукты распада на их античастицы. Особенно интересен распад нейтрального K-мезона, поскольку K^0 (и аналогично $\bar{K}^0$) ведет себя так, как если бы он представлял собой смесь двух других частиц, обозначаемых через K_1^0 и K_2^0 и распадающихся с различными вероятностями.

Эпоха «странных» частиц (50-е годы) сменилась эпохой «*резонансов*» (60-е годы). Резонансы — это элементарные частицы с настолько малым временем жизни (10^{-22} *сек*), что, может быть, они не заслуживают права называться «частицами». Однако в те же семейства, что и резонансы, попадают иногда и долгоживущие частицы, такие, например, как недавно открытый Ω^--гиперон. Время жизни Ω^--гиперона составляет примерно 10^{-10} *сек*, поэтому он может быть назван «частицей» с не меньшим правом, чем все остальные члены табл. 9. Этот гиперон привлек к себе особый интерес тем, что его существование как долгоживущего члена семейства 10 резонансов было предсказано схемой симметрии, известной под названием «*восьмеричный путь*». Наши сведения о резонансах все еще фрагментарны, но, так как их число (включая различные зарядовые состояния и антирезонансы) приближается к 100, становится все яснее, что табл. 9 — это только начало. Резонансами являются все тяжелые частицы, которые сильно взаимодействуют друг с другом и с более стабильными мезонами и барионами и распад которых в течение очень короткого времени (10^{-22} *сек*), характерного для сильных взаимодействий, не запрещен никакими законами сохранения. Поскольку список резонансов все время пополняется, вряд ли целесообразно приводить его здесь. Даже современные названия резонансов, по-видимому, отнюдь не окончательны.

Предпринимались многочисленные попытки истолковать большую часть известных частиц как *связанные состояния* нескольких «истинно элементарных частиц». Первые попытки такого рода появились уже в 1949 г., когда Ферми и Янг предложили считать пионы связанными состояниями нуклон-антинуклонных пар. В одном из недавних спекулятивных рассмотрений число «истинно элементарных» частиц сокращалось до одного фундаментального лептона, одного фундаментального бариона и нескольких мезонов (отнюдь не пионов!), необходимых для переноса ядерных сил.

Противоположная точка зрения, которая в настоящее время очень популярна, состоит в том, что все сильно взаимодействующие частицы, включая мезоны и барионы, рассматриваются на равных основаниях. В этой картине нет частиц «более элементарных», чем другие; все они трактуются как возбуждения одной и той же системы. Предпринимались попытки как-то систематизировать квантовые числа частиц, например, строя графики зависимости «массовых уровней» от момента количества движения, подобно тому как это делается при построении диаграмм энергетических уровней в атоме (рис. 22.1 и 23.1). Однако никакой теории типа теории Бора, объясняющей массовые уровни частиц, не существует. Проблемы элементарных частиц чрезвычайно сложны. Но большинство физиков глубоко уверено в простоте природы, в том, что на внешне сложные вопросы будут даны простые ответы, и поиск продолжается.

§ 31.2. Взаимодействия элементарных частиц

Итак, мы видели (табл. 9), что существуют 36 различных элементарных частиц и античастиц, не считая большого количества недавно открытых «резонансов». Каждая из этих частиц испытывает какое-то взаимодействие с любой другой частицей, хотя сила этого взаимодействия может варьироваться в чрезвычайно широких пределах. Средний свободный пробег низкоэнергетического нейтрона в твердом веществе измеряется сантиметрами, в то время как нейтрино в среднем проходит в твердом теле галактические расстояния, прежде чем поглощается в реакции обратного β-распада. Если даже исключить из рассмотрения резонансы, все равно останется еще несколько сотен различных попарных комбинаций элементарных частиц. Поразителен тот факт, что все взаимодействия между элементарными частицами распадаются тем не менее всего на четыре четко выраженных класса:

1) сильные взаимодействия,
2) электромагнитные взаимодействия,
3) слабые взаимодействия,
4) гравитационные взаимодействия.

Возможно, что основное различие между этими четырьмя видами взаимодействия — это громадная разница в интенсивности. В шкале, где сильному взаимодействию (ядерному «клею») приписывается интенсивность 1, электромагнитное взаимодействие будет обладать интенсивностью 10^{-2}, слабое — 10^{-13}, а гравитационное взаимодействие — 10^{-38}. Поскольку все частицы (за исключением гипотетического, не обнаруженного экспериментально гравитона) взаимодействуют друг с другом не только посредством гравитационных сил, то ясно, что на уровне элементарных частиц эффектами гравитационного взаимодействия можно полностью пренебречь.

Все барионы, мезоны и резонансы взаимодействуют сильно; иначе говоря, все частицы, кроме лептонов, фотона и гравитона, подвержены сильному взаимодействию. Очень может быть, что «сильные взаимодействия» на самом деле создаются силами различной природы, но примерно одинаковой интенсивности. Однако, поскольку ситуация остается пока неясной, мы не будем здесь на этом останавливаться. Сильное взаимодействие отвечает за связь нуклонов в ядрах, за аннигиляцию нуклон-антинуклонных пар, за рождение странных частиц при столкновениях высокоэнергетических нуклонов, а также как за рождение, так и за распады короткоживущих (10^{-22} *сек*) резонансов.

Все частицы, кроме гравитона и нейтрино, испытывают электромагнитное взаимодействие. Это взаимодействие несет ответственность за все химические и биологические реакции и определяет строение вещества вне ядер. Оно играет также фундаментальную

роль в деятельности человека. На микроскопическом же уровне электромагнитные эффекты можно понять в терминах рождения и поглощения фотонов.

Слабое взаимодействие ощущается всеми частицами, кроме гравитона. Для нейтрино — это самое «ощутимое» взаимодействие, в то время как другие частицы взаимодействуют, сверх того, электромагнитно или сразу — и электромагнитно, и сильно. Поскольку некоторые законы сохранения (§ 31.1), которым подчиняются более интенсивные силы, могут нарушаться слабым взаимодействием, то последнее отвечает за ряд процессов, которые иначе были бы запрещены. Так, слабое взаимодействие управляет всеми распадами, перечисленными в табл. 10, за исключением распадов π^0, η^0 и Σ^0, которые определяются электромагнитными силами. Слабо распадающиеся частицы (табл. 9) обычно обладают средним временем жизни порядка 10^{-8} — 10^{-10} *сек*, в то время как время жизни «резонансов», распадающихся за счет сильных взаимодействий, примерно в 10^{13} раз меньше, т. е. составляет 10^{-21} — 10^{-23} *сек*. В низкоэнергетической ядерной физике слабое взаимодействие играет важную роль только благодаря процессам β^+- и β^--распадов и процессу электронного захвата. Обусловлено ли слабое взаимодействие каким-либо квантованным полем сил (гипотетическими W-мезонами) — неизвестно. Во всяком случае кванты такого поля никогда не наблюдались.

Гравитационному взаимодействию подвержены все частицы, но из-за его малости эффекты гравитации во взаимодействиях элементарных частиц пренебрежимы. Гравитация становится важной только тогда, когда «парализованы» более мощные силы, например, когда взаимодействуют два нейтральных тела, разделенных макроскопическим расстоянием. Разумеется, в космических масштабах гравитационные силы становятся определяющими. Хотя многие физики убеждены, что гравитационные силы переносятся гравитонами, квантовые эффекты в гравитации пока не наблюдались.

Из вышеприведенного обсуждения можно сделать следующий вывод: чем слабее силы, тем больше частиц участвует в соответствующем взаимодействии. Более того, если частица способна чувствовать силы какого-нибудь из этой иерархии взаимодействий, то она участвует также и во всех более слабых взаимодействиях. Причины, по которым выполняются эти правила, пока неизвестны.

§ 31.3. Принципы инвариантности и законы сохранения

Законы сохранения занимают центральное место в современной физике. С некоторыми законами сохранения мы уже познакомились (гл. 3). Напомним, в частности, что в изолированной системе должны сохраняться *энергия*, *импульс*, *момент количества движе-*

ния и электрический заряд. В мире элементарных частиц открыт еще целый ряд законов сохранения. По большей части эти законы представляют собой просто эмпирические правила, природа которых еще не понята сколько-нибудь глубоко. Тем не менее они чрезвычайно полезны, поскольку они устанавливают какой-то порядок и гармонию в хаосе явлений рождения и аннигиляции частиц в субмикроскопическом мире. Законы сохранения резко ограничивают число возможных реакций между элементарными частицами — число, которое при всем том остается еще поразительно большим. Физики приняли гипотезу, что все, что *может произойти* без нарушения законов сохранения, действительно *происходит.* Можно сказать и по другому: если неожиданно выясняется, что какая-то реакция не идет, начинают искать новый закон сохранения.

Чтобы проиллюстрировать мощь законов сохранения, отметим, что сохранение энергии и электрического заряда обеспечивает стабильность электрона. Действительно, сохранение энергии предполагает, что частица может распасться только на более легкие частицы. Но никаких заряженных частиц легче электрона просто нет, поэтому электрону не на что распасться.

Установлен следующий эмпирический факт: разность между числом барионов и числом антибарионов строго сохраняется во всех реакциях. Если мы припишем каждому бариону так называемое *барионное число* $+1$, а каждому антибариону — барионное число -1, то можно сказать, что полное барионное число всегда сохраняется. Нужно отметить, что некоторые из «резонансов» также являются барионами в этом смысле. Из сохранения числа барионов следует стабильность протона, так как протон — это самый легкий барион. Все более легкие частицы обладают нулевым барионным числом, так что протон не может превратиться, скажем, в позитрон и гамма-квант, не изменив полное барионное число всей системы. С другой стороны, распад Λ^0-частицы

$$\Lambda^0 \to p + \pi^-$$

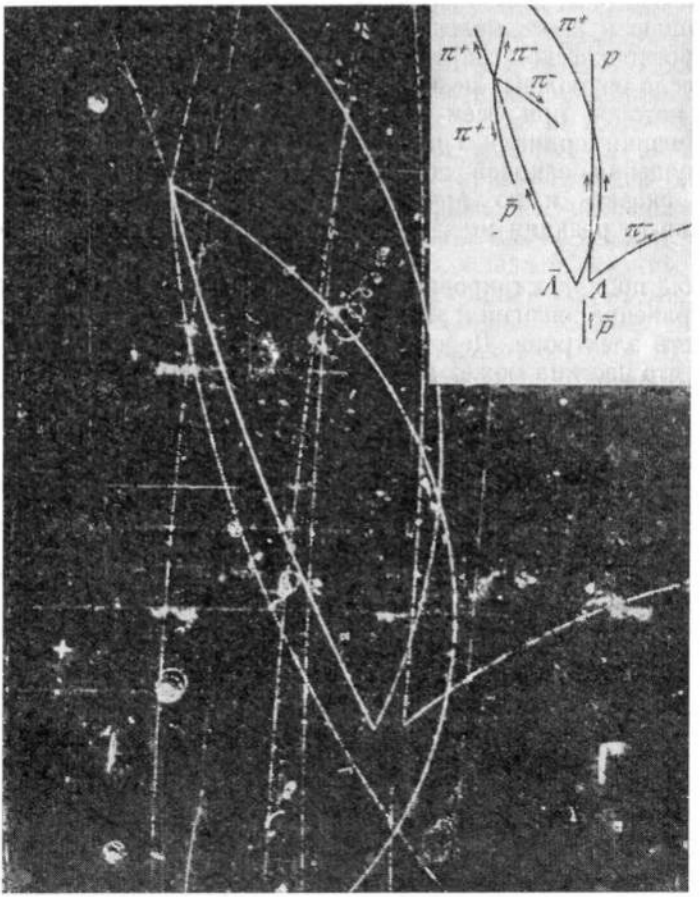
разрешен (фото XVII), поскольку барионное число и до, и после распада одно и то же $(= +1)$. Аналогично типичная реакция рождения антипротонов

$$p + p \to p + p + p + \bar{p}$$

также не запрещена, поскольку в ней сохраняются и барионное число $+2$, и электрический заряд. Еще одним примером разрешенной реакции может служить аннигиляция протона и антипротона в пионы:

$$p + \bar{p} \to \pi^+ + \pi^- + \pi^0.$$

Другими сохраняющимися «фамильными числами» служат *электронное число* и *мюонное число*. Электронное семейство состоит из электрона e^- и электронного нейтрино ν_e, а мюонное семейство —



XVII. Рождение и распад пары ламбда — антиламбда в водородной пузырьковой камере. Антипротон аннигилирует с протоном, образовав четыре пиона.

из мюона μ^- и мюонного нейтрино ν_μ. Частицам данного семейства опять приписывается число $+1$, а соответствующим античастицам — число -1. Для примера рассмотрим бета-распад

$$n \to p + e^- + \bar{\nu}_e.$$

Так как нейтрону n и протону p отвечает нулевое электронное число, электрону — $+1$, а антинейтрино — -1, то полное электронное число сохраняется. В распаде мюона

$$\mu^- \to e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$$

мюонное число равно $+1$, а электронное число — нулю и до, и после распада. Аналогично в пионных распадах

$$\pi^+ \to \mu^+ + \nu_\mu$$

и

$$\pi^- \to \mu^- + \bar{\nu}_\mu$$

мюонное число также сохраняется.

До открытия отдельного мюонного нейтрино (1962 г.) μ^-, e^- и ν рассматривались как члены одного семейства, и можно было говорить о сохранении лептонного числа. При этом не возникало никаких запретов на распад мюона на электрон и фотон

$$\mu^- \to e^- + \gamma.$$

Отсутствие этого распада на опыте считалось «μ — e — γ-загадкой». С установлением отдельных законов сохранения для мюонного и электронного чисел загадка разрешилась, поскольку этот распад оказался запрещенным.

Энергия, импульс, момент количества движения, электрический заряд и «фамильные числа» барионов, мюонов и электронов, по-видимому, *строго сохраняются* во всех взаимодействиях элементарных частиц. Теперь же мы рассмотрим *частичные законы сохранения* — законы, которым подчиняются лишь некоторые, но не все взаимодействия.

Когда появилась возможность получать странные частицы в лабораторных условиях (1953 г.), оказалось, что создавать их совсем не трудно. Они рождались при высокоэнергетических столкновениях «нестранных» частиц (за время около 10^{-22} *сек*), так что напрашивался вывод, что за их появление отвечает сильное взаимодействие. Однако, единожды появившись, они способны существовать в течение времени, которое примерно в 10^{13} раз больше временного интервала, необходимого для их рождения. Они возникают благодаря сильному взаимодействию, но обратный процесс распада обусловлен, очевидно, слабым взаимодействием. Именно это свойство новых частиц казалось таким «странным». Гелл-Манн и Нишиджима независимо друг от друга выдвинули предположение, что большое время жизни странных частиц можно было бы объяснить новым законом сохранения, точно так же как сохранение электрического заряда объясняет стабильность электрона, а сохранение барионного числа — стабильность протона. Новая сохраняющаяся величина была названа «*странностью*». Нестранным нуклонам и

пионам приписывается странность 0, гиперонам Λ и Σ — странность —1, Ξ-гиперону — странность —2, а K-мезону — странность +1. Что касается недавно открытых частиц, то η^0-мезон обладает странностью 0, а Ω^--гиперон — странностью —3. Странность античастиц равна странности соответствующих частиц, взятой с обратным знаком.

Схема Гелл-Манна и Нишиджимы оказалась чрезвычайно успешной. Из этой схемы ясно, что если странность сохраняется, то при столкновениях нестранных частиц странные частицы могут рождаться только парами (или даже в большем количестве), например

$$\pi^- + p \to \Lambda^0 + K^0 \quad \text{(фото XVIII)}$$

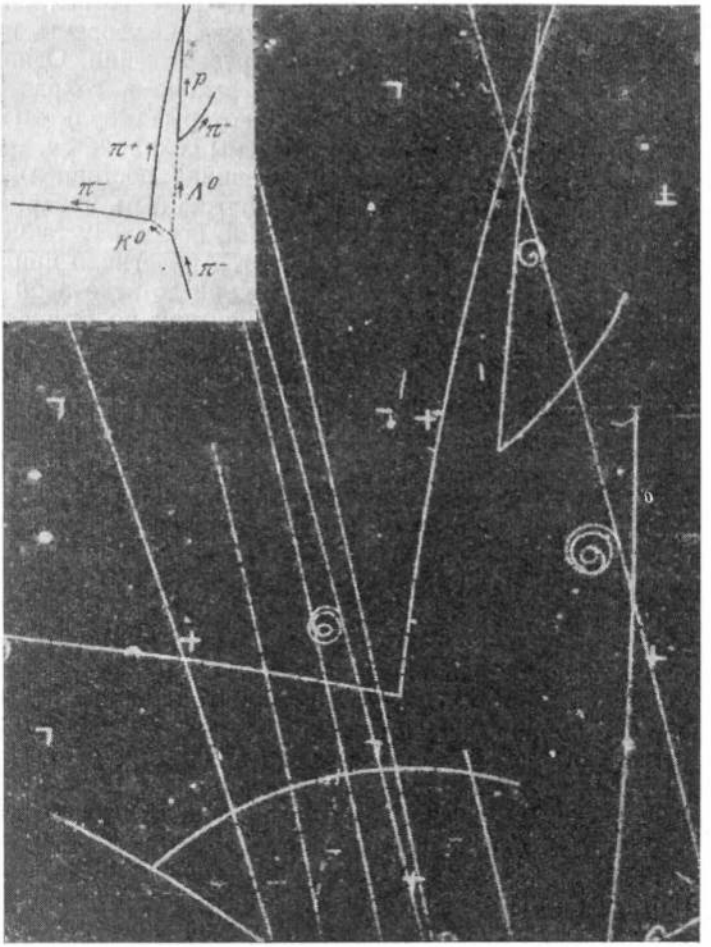
или

$$p + p \to \Xi^0 + p + K^0 + K^+.$$

Фактически этот процесс «совместного рождения» каонов и гиперонов был впервые предложен Пайсом. К настоящему времени эксперимент убедительнейшим образом подтвердил правильность таких воззрений: все наблюдаемые на опыте процессы, обусловленные сильным взаимодействием, идут с сохранением странности. Если же мы обратимся к распадам странных частиц, перечисленным в табл. 10, то мы увидим, что все они (кроме распада Σ^0) изменяют странность на единицу. Соответствующие периоды полураспада (за исключением распада Σ^0) типичны для слабых взаимодействий, так что нужно заключить, что в *сильных и электромагнитных взаимодействиях странность сохраняется, а в слабых взаимодействиях меняется на единицу.*

Другим частичным законом сохранения является закон *сохранения изотопического спина*, который выполняется в сильных, но нарушается как в электромагнитных, так и в слабых взаимодействиях. Когда был открыт нейтрон, Гейзенберг предположил, что нейтрон и протон являются разными зарядовыми состояниями одной и той же частицы — нуклона. В таком случае нуклон представляет собой *зарядовый дублет*. По аналогии со спиновым дублетом, связанным со значением спина $^1/_2$, говорят, что нуклон, являясь зарядовым дублетом, обладает *изотопическим спином* $^1/_2$. Точно так же зарядовым триплетам, например пионам, приписывается изотопический спин 1 в полной аналогии со спиновыми триплетами, обусловленными единичным значением обычного спина. Подобно обычному спину изотопический спин — это вектор, но не в обычном нашем пространстве, а в некотором абстрактном «пространстве изотопического спина». Примечательно, что эта величина сохраняется лишь в сильных взаимодействиях, но совершенно не обязана сохраняться электромагнитными или слабыми взаимодействиями. Примерами несохраняющих изотопический спин процессов могут

служить распады Λ^0-гиперона (табл. 10). Так Λ^0, являясь зарядовым синглетом, обладает нулевым изотопическим спином, в то время как соответствующие продукты распада имеют изотопический



XVIII. Фотография реакций в пузырьковой камере:
$\pi^- + p \to \Lambda^0 + K^0$, $\Lambda^0 \to \pi^- + p$, $K^0 \to \pi^- + \pi^+$.

спин $^1/_2$ (нуклон) и 1 (пион). Ясно, что никакая комбинация спинов $^1/_2$ и 1 не может дать состояние с нулевым спином.

Физические законы сохранения тесно связаны с «принципами инвариантности». Так, можно показать, что из инвариантности

физической системы относительно смещений (однородности пространства) следует сохранение импульса, из инвариантности относительно вращений (изотропии пространства) — сохранение момента количества движения, а из инвариантности относительно сдвигов по времени (из однородности времени) — сохранение полной энергии. Мы не будем разбирать здесь математические теоремы, необходимые для строгого доказательства этих утверждений. Однако мы можем проиллюстрировать связь между законами сохранения и принципами инвариантности, вспомнив некоторые результаты гл. 3. Так, например, импульс физической системы сохраняется, если отсутствуют внешние силы (внешний потенциал постоянен). Но в случае постоянного потенциала система должна быть инвариантной относительно пространственных трансляций, поскольку такие трансляции, по существу, ничего не изменяют. Аналогично при потенциале, который зависит только от расстояния до некоторой точки, физическая система должна быть инвариантной по отношению к вращениям вокруг этой точки. Но мы знаем, что в случае такого рода центрального потенциала сохраняется момент количества движения (гл. 3). Если же потенциал зависит только от пространственных координат, но не от времени, то система инвариантна относительно временны́х сдвигов; с другой стороны, известно (гл. 3), что такие потенциалы приводят к сохранению полной энергии. Таким образом, чрезвычайно приятно, что такие «могучие» законы, как законы сохранения энергии, импульса и момента количества движения, являются простым следствием этих «очевидных» утверждений о симметрии пространства и времени.

Обычно считается, хотя это и не доказано строго, что каждый закон сохранения — это проявление некоторого принципа инвариантности и, обратно, что каждому принципу инвариантности отвечает какая-то сохраняющаяся величина. Иногда эта связь оказывается трудноуловимой, и принципы инвариантности, ассоциированные с некоторыми законами сохранения, еще ни в коей мере нельзя считать окончательно понятыми. Тем не менее все же имеет смысл изучать эту связь, поскольку физический закон, сформулированный как утверждение о симметрии природы, по всей вероятности (хотя и не наверное), окажется весьма устойчивым. Отнюдь не все законы сохранения связаны с симметрией пространства и времени. Так, сохранение заряда следует из инвариантности законов физики по отношению к формальным математическим операциям, которые называются «калибровочными преобразованиями», а сохранение изотопического спина возникает благодаря инвариантности относительно вращений вектора изотопического спина в «изотопическом пространстве». Все эти утверждения вряд ли содержат что-то большее, чем математическую формулировку теории. Достаточно сказать, что эти законы сохранения, как и законы сохра-

нения барионного, мюонного и электронного чисел, ассоциированы с *внутренними симметриями* системы, которые, по крайней мере пока, не имеют никакого отношения к обычному пространству — времени.

Теперь мы обратимся к рассмотрению следующих трех преобразований: обращения времени, отражения пространства и зарядового сопряжения. Во всех этих случаях гораздо легче понять принципы инвариантности, чем «что именно сохраняется».

Допустим, что вместо сдвигов по времени мы изменим знак временно́й координаты. Тогда все скорости dr/dt также изменят знак, так что движение окажется обращенным. Возникает вопрос, будет ли процесс, в котором все идет во времени «вспять», также возможным с точки зрения законов физики процессом. Известно, что ньютонова механика инвариантна относительно обращения времени. Так, например, ясно, что уравнение движения частицы в потенциале

$$m\,d^2r/dt^2 = -\nabla V$$

не меняется (инвариантно) при замене t на $-t$. На уровне же элементарных частиц

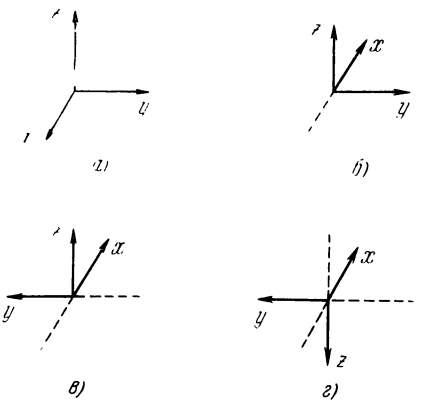


Рис. 31.1.

оказывается, что все сильные и электромагнитные взаимодействия *инвариантны относительно обращения времени* и, может быть, то же самое справедливо применительно к слабому взаимодействию. Если это так, то обращенный во времени процесс также будет всегда являться физически возможным процессом. Ограничение, которое накладывается на теорию этим принципом инвариантности, станет понятнее, если переформулировать его следующим образом: все процессы, которые не могут идти в обратном порядке, запрещены.

Рассмотрим, далее, отражение пространственных координат. На рис. 31.1 показано отражение одной, двух и трех координатных осей правовинтовой системы координат. Поскольку отражение двух координатных осей эквивалентно повороту системы координат, а отражение трех осей равносильно отражению только одной координаты, помноженному на поворот, нам достаточно рассмотреть отражение лишь одной координатной оси. При отражении *одной* координаты система переходит в свое *зеркальное изображение*. Если физический процесс инвариантен относительно такого отражения, иначе говоря, если зеркальное изображение процесса также

является физически возможным процессом, то мы говорим, что сохраняется *четность*. До 1956 г. сохранение четности ни у кого не вызывало сомнений. Все макроскопические законы физики обладают соответствующей инвариантностью. Действительно, зеркальное изображение какого-либо макроскопического повседневного события представляет собой, разумеется, тоже возможное событие. Человек, которого вы видите в зеркале, вполне *мог бы быть* вами, хотя в отличие от вас он левша. Однако, когда в 1956 г. Ли и Янг рассмотрели экспериментальные основания этой инвариантности, они обнаружили, что в слабых взаимодействиях, вопреки общепринятой точке зрения, *нет* никаких экспериментальных указаний на симметрию правого и левого. Они предположили, что на самом деле четность не сохраняется слабыми взаимодействиями, и предложили эксперимент, позволяющий проверить эту гипотезу. Сама же гипотеза фактически возникла из-за трудности со схемами распада каона (табл. 10). Если бы четность сохранялась, то каон не мог бы распадаться иногда на 2 пиона, а иногда на 3 пиона. Предложенный эксперимент был проведен группой Ву. Спины ядер радиоактивного Co^{60} были ориентированы преимущественно в одну сторону (для этого требуется температура ниже 0,1° К). Оказалось, что образующиеся при бета-распаде электроны удивительным образом испускаются в основном в направлении, противоположном спину Co^{60}. При зеркальном отражении этого эксперимента (рис. 31.2) спин меняет знак и, следовательно, электроны испускаются уже преимущественно по направлению спина Co^{60}. Другими словами, при зеркальном отражении получается процесс, который в природе *не наблюдается*. Это и есть знаменитое «нарушение сохранения четности». Несохранение четности было проиллюстрировано также открытием, что нейтрино является «левовинтовым». Спин нейтрино всегда обращен в сторону, противоположную направлению движения (назад), подобно тому как винт с левой резьбой вращается при движении *всегда* в одну сторону (антинейтрино является правовинтовым). Зеркальное отражение левовинтового нейтрино представляет собой правовинтовое нейтрино (рис. 31.3), которое никогда не наблюдалось. Поэтому зеркальное отражение любого процесса с участием нейтрино приводит к невозможному процессу. Следовательно, закон сохранения четности нарушается во всех нейтринных реакциях. Известно, что и в других реакциях, идущих за счет

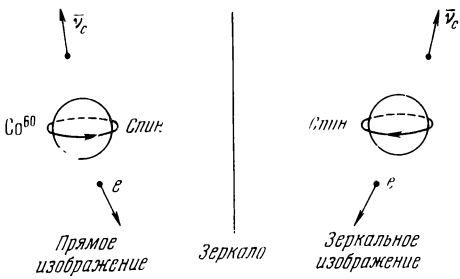


Рис. 31.2.

слабого взаимодействия, например, в Λ^0-распаде $\Lambda^0 \to p + \pi^-$, четность не сохраняется, хотя этот процесс идет и без участия нейтрино. Тем не менее закон сохранения четности является полезным и мощным орудием физики, поскольку ему строго подчиняются сильные и электромагнитные взаимодействия. Лишь слабые взаимодействия нарушают симметрию правого и левого.

Последнее преобразование симметрии, которое мы здесь рассмотрим,— это *зарядовое сопряжение*. Зарядовое сопряжение представляет собой очень общую математическую операцию над «внутренним пространством» частицы. Эта операция изменяет знак электрического заряда, «фамильного числа» частицы (например, барионного числа) и ее странности, но никак не затрагивает обычного пространства, в частности, ориентации спина. Сильные и электромагнитные взаимодействия инвариантны относительно зарядового сопряжения. Так, если в системе сильно взаимодействующих частиц одновременно заменить все частицы на «зарядово-сопряженные частицы», то не изменятся ни силы, ни результирующее движение системы. Однако слабые взаимодействия не обладают такой симметрией. Тот факт, что нейтрино является левовинтовой частицей, нарушает не только инвариантность относительно пространственных отражений, но и инвариантность по отношению к зарядовому сопряжению. Поскольку зарядовое сопряжение переводит левовинтовое нейтрино в несуществующее левовинтовое антинейтрино, ясно, что операция зарядового сопряжения превращает любую реакцию с участием нейтрино в невозможную реакцию.

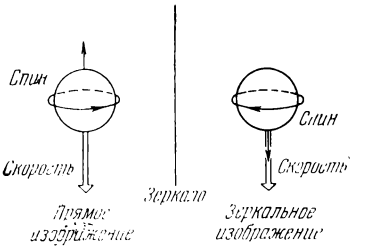


Рис. 31.3.

Комбинированная операция одновременного зарядового сопряжения и пространственного отражения переводит левовинтовое нейтрино в правовинтовое антинейтрино, т. е. *в существующую* частицу. Таким образом, пространственное отражение плюс зарядовое сопряжение превращают реально наблюдаемый процесс π^+-распада

$$\pi^+ \to \mu^+ + \nu_\mu$$

снова в реально наблюдаемый процесс π^--распада

$$\pi^- \to \mu^- + \bar{\nu}_\mu.$$

Вплоть до лета 1964 г. казалось, что все процессы, обусловленные слабым взаимодействием (как, впрочем, сильным и электромагнитным взаимодействиями), инвариантны относительно комбинированного преобразования пространственного отражения и зарядового сопряжения. Однако недавние эксперименты по распадам K-ме

зонов указывают, что для слабых взаимодействий эта инвариантность может выполняться лишь приближенно. Поскольку имеются очень серьезные теоретические основания считать, что слабые взаимодействия строго инвариантны относительно тройного преобразования, включающего отражение пространства, обращение времени и зарядовое сопряжение, то это означает, что инвариантность слабых взаимодействий относительно обращения времени также попадает под подозрение. Правда, окончательно этот вопрос еще не решен.

Итак, мы выяснили, что *чем сильнее взаимодействие, тем большему числу законов сохранения оно подчиняется*. Так, для сильных взаимодействий справедливы следующие двенадцать законов сохранения и принципов инвариантности:

сохранение энергии,
импульса,
момента количества движения,
электрического заряда,
электронного числа,
мюонного числа,
барионного числа;

инвариантность
относительно комбинации обращения времени,
пространственного отражения
и зарядового сопряжения;
только обращения времени (а следовательно, комбинации пространственного отражения и зарядового сопряжения);
только пространственного отражения (а следовательно, также и зарядового сопряжения);

сохранение странности,
изотопического спина.

Электромагнитные взаимодействия подчиняются только первым одиннадцати из этих законов, но могут нарушать закон сохранения изотопического спина. Слабые взаимодействия подчиняются первым восьми законам и, возможно, девятому закону, но нарушают законы сохранения четности, странности и изотопического спина. Вопрос о том, не нарушается ли еще большее число законов сохранения в процессе самого слабого из известных взаимодействий — гравитационного взаимодействия, остается открытым, так как о гравитационном взаимодействии на уровне элементарных частиц ничего не известно. Возможно, например, что закон сохранения числа барионов в гравитации не выполняется. Это, в частности, предполагается в теории Вселенной с непрерывным рождением вещества.

Итак, развитие взглядов на строение вещества пошло в настоящее время по удивительному пути. Вместо твердых и определенных законов детерминизма мы сталкиваемся с законами случая, вместо вечно живущих «кирпичей природы» мы обнаруживаем хаос рождения и уничтожения, стихию виртуальных частиц, возникающих «ниоткуда» лишь затем, чтобы мгновенно исчезнуть. Систематизируя этот хаос, мы приходим к законам сохранения, которые устанавливают свой порядок в микроскопическом мире, обеспечивают стабильность электронов и протонов, определяя тем самым высокую организацию структуры вещества, структуры, с которой мы имеем дело в нашем макроскопическом опыте. Более глубокое понимание существа законов сохранения и поиски новых симметрий природы — это одна из самых важных задач современной физики.

Задачи

31.1. Рассмотреть распад покоящегося π^+-мезона. Сколько энергии уносит нейтрино? Какова скорость μ^+-мезона?

31.2. Какова максимальная энергия электрона, возникающего при распаде покоящегося нейтрона $n \to p + e^- + \bar{\nu}$?

31.3. Каковы энергия и длина волны фотона, испущенного при распаде покоящегося Σ^0-гиперона?

31.4. η^0-мезон распадается на два фотона, причем направление каждого из них составляет 30° с первоначальным направлением η^0-мезона. Какова кинетическая энергия η^0? Сравнить ее с энергией покоя мезона.

31.5. Выписать все реакции распада, переводящие Ω^- в стабильные частицы.

31.6. Рассмотрим фоторождение мезонов $\gamma + p \to \pi^+ + n$. Какова минимальная энергия фотона, при которой реакция еще возможна? *Указание*: при «пороговой энергии» пион и нейтрон не движутся друг относительно друга.

31.7. Первый Ω^--гиперон был обнаружен в феврале 1964 г. Он был получен в Брукхэйвенской национальной лаборатории в результате столкновения пучка высокоэнергичных K-мезонов с покоящимися протонами. Какова пороговая энергия для этой реакции? Для импульса и энергии следует пользоваться релятивистскими выражениями.

31.8. Пучок π^--мезонов сталкивается с водородной мишенью. Какова пороговая энергия рождения странных частиц: $\pi^- + p \to \Lambda^0 + K^0$?

31.9. Допустим, мы хотим получить частицу с массой покоя, равной десяти протонным массам, направив пучок высокоэнергичных протонов на неподвижную протонную мишень: $p + p \to p + x$. Какой энергией должны обладать протоны в пучке?

31.10. Указать, какая из следующих реакций рождения может идти через сильное взаимодействие (предполагается, что энергия достаточно велика):

$$\pi^- + n \to K^- + \Lambda^0,$$
$$\pi^+ + n \to K^+ + \Lambda^0,$$
$$\pi^+ + p \to K^+ + \Sigma^+,$$
$$\pi^- + n \to \Lambda^0 + K^0,$$
$$\gamma + p \to n + \pi^+,$$
$$\pi^- + p \to K^- + K^+,$$
$$n + p \to \Lambda^0 + \Sigma^+.$$

31.11. Указать, какие из следующих распадов возможны:

$$\Xi^- \to n + \pi^-,$$
$$\Omega^- \to p + \pi^- + \pi^-,$$
$$\Sigma^0 \to \Lambda^0 + e^- + e^+,$$
$$\mu^- \to e^- + \bar{\nu}_e,$$
$$\pi^+ \to \mu^+ + e^- + e^+,$$
$$\Lambda^0 \to p + e^- + \bar{\nu}_e,$$
$$\Lambda^0 \to K^- + \pi^+,$$
$$K^- \to \pi^- + 3\pi^0,$$
$$\pi^- \to e^- + \nu_e.$$

В случае, если распад возможен, укажите, какое взаимодействие за него отвечает. Если же распад невозможен, то укажите, какой закон сохранения нарушался бы этим распадом.

Литература для справок

1. Хилл Р., По следам элементарных частиц, «Мир», 1966.
2. Форд К., Мир элементарных частиц, «Мир», 1965.
3. Григорьев В. И. и Мякишев Г. Я., Силы в природе, «Наука», 1969.

Приложения

I. Таблицы

Таблица 1

Периодическая система элементов

I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	0
H ---								He
Li оцк	Be гекс	B	C алмаз	N ---	O ---	F		Ne гцк
Na оцк	Mg гекс	Al гцк	Si алмаз	P ---	S ---	Cl ---		Ar гцк
K оцк	Ca гцк	Sc	Ti гекс	V оцк	Cr оцк	Mn оцк	Fe Co Ni оцк гекс гекс	
Cu гцк	Zn гекс	Ga ---	Ge алмаз	As ---	Se ---	Br ---		Kr гцк
Rb оцк	Sr гцк	Y	Zr гекс	Nb оцк	Mo оцк	Tc	Ru Rh Pd гекс гцк гцк	
Ag гцк	Cd гекс	In ---	Sn (серое) алмаз	Sb ---	Te ---	I ---		Xe гцк
Cs оцк	Ba оцк	Редкие земли	Hf гекс	Ta оцк	W оцк	Re гекс	Os Ir Pt гекс гцк гцк	
Au гцк	Hg ---	Tl гекс	Pb гцк	Bi ---	Po ---	At		Rn
Fr	Ra	Ac	Th гцк	Pa	U оцк			

Таблица 2

Периодическая система элементов

H							He										
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne										
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar										
K	Ca							Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
		Ga	Ge	As	Se	Br	Kr										
Rb	Sr							Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
		In	Sn	Sb	Te	I	Xe										
Cs	Ba							La									
	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
		Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg
Fr	Ra							Ac									
	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	Ku		

Таблица 3

Электронные конфигурации и ионизационные потенциалы

Элемент	Атомный номер	Первый ионизационный потенциал, в	Конфигурация 1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	Терм основного состояния
H	1	13,595	1										$^2S_{1/2}$
He	2	24,580	2										$^1S_0$
Li	3	5,390	2	1									$^2S_{1/2}$
Be	4	9,320	2	2									$^1S_0$
B	5	8,296	2	2	1								$^2P_{1/2}$
C	6	11,264	2	2	2								$^3P_0$
N	7	14,54	2	2	3								$^4S_{3/2}$
O	8	13,614	2	2	4								$^3P_2$
F	9	17,418	2	2	5								$^2P_{3/2}$
Ne	10	21,559	2	2	6								$^1S_0$
Na	11	5,138				1							$^2S_{1/2}$
Mg	12	7,644				2							$^1S_0$
Al	13	5,984				2	1						$^2P_{1/2}$
Si	14	8,149				2	2						$^3P_0$
P	15	10,55				2	3						$^4S_{3/2}$
S	16	10,357				2	4						$^3P_2$
Cl	17	13,01				2	5						$^2P_{3/2}$
Ar	18	15,755				2	6						$^1S_0$

Конфигурация неона
Остов из 10 электронов

Элемент	Атомный номер	Первый ионизационный потенциал, в	Конфигурация 3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	Терм основного состояния
K	19	4,339		1						$^2S_{1/2}$
Ca	20	6,111		2						$^1S_0$
Sc	21	6,538	1	2						$^2D_{3/2}$
Ti	22	6,818	2	2						$^3F_2$
V	23	6,743	3	2						$^4F_{3/2}$
Cr	24	6,763	5	1						$^7S^3$

Конфигурация аргона
Остов из 18 электронов

Таблица 3 (продолжение)

Элемент	Атомный номер	Первый ионизационный потенциал, в	Конфигурация							Терм основного состояния
			3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	
Mn	25	7,432	5	2						$^6S_{5/2}$
Fe	26	7,90	6	2						$^5D_4$
Co	27	7,862	7	2						$^4F_{9/2}$
Ni	28	7,633	8	2						$^3F_4$
Cu	29	7,724	10	1						$^2S_{1/2}$
Zn	30	9,391	10	2						$^1S_0$
Ga	31	6,00	10	2	1					$^2P_{1/2}$
Ge	32	7,88	10	2	2					$^3P_0$
As	33	9,81	10	2	3					$^4S_{3/2}$
Se	34	9,75	10	2	4					$^3P_2$
Br	35	11,84	10	2	5					$^2P_{3/2}$
Kr	36	13,996	10	2	6					$^1S_0$
Rb	37	4,176						1		$^2S_{1/2}$
Sr	38	5,692						2		$^1S_0$
Y	39	6,5				1		2		$^2D_{3/2}$
Zr	40	6,95				2		2		$^3F_2$
Nb	41	6,77				4		1		$^6D_{1/2}$
Mo	42	7,10				5		1		$^7S_3$
Tc	43	7,28				6		1		$^6S_{5/2}$
Ru	44	7,364				7		1		$^5F_5$
Rh	45	7,46				8		1		$^4F_{9/2}$
Pd	46	8,33				10				$^1S_0$
Ag	47	7,574						1		$^2S_{1/2}$
Cd	48	8,991						2		$^1S_0$
In	49	5,785						2	1	$^2P_{1/2}$
Sn	50	7,342						2	2	$^3P_0$
Sb	51	8,639						2	3	$^4S_{3/2}$
Te	52	9,01						2	4	$^3P_2$
I	53	10,454						2	5	$^2P_{3/2}$
Xe	54	12,127						2	6	$^1S_0$

Конфигурация аргона
Остов из 18 электронов

Конфигурация криптона
Остов из 36 электронов

Конфигурация палладия
Остов из 46 электронов

Таблица 3 (продолжение)

Элемент	Атомный номер	Первый ионизационный потенциал, в	Конфигурация													Терм основного состояния
			4f	5s	5p	5d	5f	5g	6s	6p	6d	6f	6g	6h	7s	7p	
Cs	55	3,893	Конфигурация ксенона Остов содержит 54 электрона						1								$^2S_{1/2}$
Ba	56	5,210							2								$^1S_0$
																	$^2D_{3/2}$
La	57	5,61	Оболочки от 1s до 4d содержат 46 электронов	2	6	1			2								
Ce	58	6,91		1	2	6	1		2								$^3H_4$
Pr	59	5,76		2	2	6	1		2								$^4I_{9/2}$
Nd	60	6,31		3	2	6	1		2								$^5I_4$
Pm	61	—		4	2	6	1		2								$^6H_{5/2}$
Sm	62	5,6		5	2	6	1		2								$^7F_0$
Eu	63	5,67		6	2	6	1		2								$^8S_{7/2}$
Gd	64	6,16		7	2	6	1		2								$^9D_2$
Tb	65	6,74		8	2	6	1		2								$^6H_{15/2}$
Dy	66	6,82		9	2	6	1		2								$^5I_8$
Ho	67	—		10	2	6	1		2								$^4I_{15/2}$
Er	68	—		11	2	6	1		2								$^3H_6$
Tm	69	—		13	2	6	0		2								$^2F_{7/2}$
Yb	70	6,2		14	2	6	0		2								$^1S_0$
Lu	71	5,0		14	2	6	1		2								$^2D_{3/2}$
Hf	72	7	Оболочки от 1s до 5p содержат 68 электронов				2		2								$^3F_2$
Ta	73	7,88					3		2								$^4F_{3/2}$
W	74	7,98					4		2								$^5D_0$
Re	75	7,87					5		2								$^6S_{5/2}$
Os	76	8,7					6		2								$^5D_4$
Ir	77	9					7		2								$^4F_{9/2}$
Pt	78	9,0					9		1								$^3D_3$
Au	79	9,22					10		1								$^2S_{1/2}$

Таблица 3 (продолжение)

Элемент	Атомный номер	Первый ионизационный потенциал, в	Конфигурация 4f	5s	5p	5d	5f	5g	6s	6p	6d	6f	6g	6h	7s	7p	Терм основного состояния
Hg	80	10,43	Оболочки от 1s до 5d содержат 78 электронов						2								$^1S_0$
Tl	81	6,106							2			1					$^2P_{1/2}$
Pb	82	7,415							2			2					$^3P_0$
Bi	83	7,287							2			3					$^4S_{3/2}$
Po	84	8,43							2			4					$^3P_2$
At	85	9,5							2			5					$^2P_{3/2}$
Rn	86	10,746							2			6					$^1S_0$

Элемент	Атомный номер	Первый ионизационный потенциал, в	Конфигурация 5s	5p	5d	5f	5g	6s	6p	6d	6f	6g	6h	7s	7p	Терм основного состояния
Fr	87	4,0	Конфигурация радона Остов из 86 электронов											1		$^2S_{1/2}$
Ra	88	5,277												2		$^1S_0$
Ac	89		Оболочки от 1s до 5d содержат 78 электронов					2	6	1				2		$^2D_{3/2}$
Th	90					1		2	6	1				2		$^3F_2$
Pa	91					2		2	6	1				2		$^4K_{11/2}$
U	92	4				3		2	6	1				2		$^5L_6$
Np	93					4		2	6	1				2		$^6L_{1/2}$
Pu	94					5		2	6	1				2		$^7F_0$
Am	95					6		2	6	1				2		$^8S_{7/2}$
Cm	96					7		2	6	1				2		$^9D_2$
Bk	97					8		2	6	1				2		$^8H_{17/2}$
Cf	98					9		2	6	1				2		$^5I_8$

Таблица 4

Свойства ядер

Символ	Атомный номер, Z	Массовое число, A	Относительное содержание, %	Избыток атомной массы $M - A$, 10^{-3} а. е. м. (C^{12})	Энергия связи, *Мэв*
n	0	1		8,6654	...
H	1	1	99,9349—99,9861	7,8252	...
D	1	2	0,01392—0,0151	14,1022	2,225
T	1	3		16,0494	88,482
He	2	3	10^{-5}—10^{-4}	16,0299	7,718
		4	100	2,6036	28,295
Li	3	6	7,52	15,126	31,991
		7	92,48	16,005	39,244
Be	4	9	100	12,186	58,161
B	5	10	18,45—19,64	12,939	64,749
		11	80,36—81,55	9,305	76,205
C	6	12	98,892	0	92,161
		13	1,108	3,354	97,108
N	7	14	99,634	3,074	104,66
		15	0,366	0,108	115,49
O	8	16	99,759	—5,085	127,62
		17	0,037	—0,867	131,76
		18	0,204	—0,840	139,81
F	9	19	100	—1,595	147,80
Ne	10	20	90,92	—7,560	160,64
		21	0,257	—6,151	167,40
		22	8,82	—8,616	177,77
Na	11	23	100	—10,227	186,56
Mg	12	24	78,70	—14,995	198,25
		25	10,13	—14,160	205,58
		26	11,17	—17,409	216,68
Al	13	27	100	—18,465	224,95
Si	14	28	92,21	—23,073	236,53
		29	4,70	—23,503	245,01
		30	3,09	—26,239	255,62
P	15	31	100	—26,237	262,91
S	16	32	95,0	—27,926	271,77
		33	0,760	—28,540	280,42
		34	4,22	—32,136	291,84
		36	0,014	—32,909	308,70
Cl	17	35	75,529	—31,146	298,20
		37	24,471	—34,104	317,10
Ar	18	36	0,337	—32,452	306,71
		38	0,063	—37,276	327,34
		40	99,600	—37,616	343,80
K	19	39	93,10	—36,29	333,7
		40	0,012	—35,99	341,5
		41	6,88	—38,16	351,6
Ca	20	40	96,97	—37,41	342,0
		42	0,64	—41,37	361,9
		43	0,145	—41,22	369,8
		44	2,06	—44,51	380,9

Таблица 4 (продолжение)

Символ	Атомный номер, Z	Массовое число, A	Относительное содержание, %	Избыток атомной массы $M - A$, 10^{-3} а.е.м. (C^{12})	Энергия связи, *Мэв*
Ca	20	46	0,003	—46,31	398,8
		48	0,185	—47,64	416,1
Sc	21	45	100	—44,08	387,8
Ti	22	46	7,93	—47,37	398,2
		47	7,28	—48,24	407,1
		48	73,94	—52,05	418,7
		49	5,38	—52,13	426,8
		50	5,34	—55,21	437,8
V	23	50	0,24	—52,84	434,8
		51	99,76	—56,02	445,8
Cr	24	50	4,31	—53,95	435,0
		52	83,76	—59,49	456,3
		53	9,55	—59,35	464,3
		54	2,38	—61,12	474,0
Mn	25	55	100	—61,95	482,1
Fe	26	54	5,82	—60,38	471,7
		56	91,66	—65,07	492,3
		57	2,19	—64,61	499,9
		58	0,33	—66,73	509,9
Co	27	59	100	—66,81	517,3
Ni	28	58	67,88	—64,66	506,5
		60	26,23	—69,22	526,8
		61	1,19	—68,95	534,6
		62	3,66	—71,66	545,3
		64	1,08	—72,04	561,8
Cu	29	63	69,1	—70,41	551,4
		65	30,9	—72,21	569,2
Zn	30	64	48,89	—70,86	559,1
		66	27,81	—73,95	578,1
		67	4,11	—72,85	585,2
		68	18,56	—75,14	595,4
		70	0,62	—74,65	611,1
Ga	31	69	60,4	—74,32	601,9
		71	39,6	—75,16	618,8
Ge	32	70	20,52	—75,72	610,5
		72	27,43	—78,26	629,0
		73	7,76	—76,64	635,6
		74	36,54	—78,85	645,7
		76	7,76	—78,64	661,6
As	33	75	100	—78,42	652,6
Se	34	74	0,87	—77,49	650,9
		76	9,02	—80,77	662,0
		77	7,58	—80,07	669,5
		78	23,52	—82,65	679,9
		80	49,82	—83,49	696,9
		82	9,19	—83,34	712,9

Таблица 4 (продолжение)

Символ	Атомный номер, Z	Массовое число, A	Относительное содержание, %	Избыток атомной массы $M - A$, 10^{-3} а.е.м. (C^{12})	Энергия связи, *Мэв*
Br	35	79	50,54	—81,65	686,3
		81	49,46	—83,66	704,3
Kr	36	78	0,354	—79,63	675,6
		80	2,27	—83,61	695,4
		82	11,56	—86,52	714,3
		83	11,55	—85,87	721,7
		84	56,90	—88,50	732,2
		86	17,37	—89,38	749,2
Rb	37	85	72,15	—88,29	739,3
		87	27,85	—90,82	757,8
Sr	38	84	0,56	—86,62	728,9
		86	9,86	—90,74	748,9
		87	7,02	—91,11	757,3
		88	82,56	—94,39	768,5
Y	39	89	100	—94,57	775,9
Zr	40	90	51,46	—95,68	784,2
		91	11,23	—94,75	791,4
		92	17,11	—95,41	800,1
		94	17,40	—93,86	814,8
		96	2,80	—91,80	829,1
Nb	41	93	100	—93,98	806,1
Mo	42	92	15,84	—93,71	797,0
		94	9,04	—95,26	814,6
		95	15,72	—94,28	821,7
		96	16,53	—95,45	830,9
		97	9,46	—94,25	837,8
		98	23,78	—94,49	846,1
		100	9,63	—92,43	860,4
Ru	44	96	5,51	—92,40	826,5
		98	1,87	—94,50	844,6
		99	12,72	—93,92	852,1
		100	12,62	—96,98	863,0
		101	17,07	—95,88	870,1
		102	31,61	—96,28	878,5
		104	18,58	—94,47	893,0
Rh	45	103	100	—95,20	884,8
Pd	46	102	0,96	—95,06	875,8
		104	10,97	—96,44	893,2
		105	22,23	—95,36	900,3
		106	27,33	—96,80	909,7
		108	26,71	—96,08	925,2
		110	11,81	—95,50	940,8
Ag	47	107	51,35	—95,03	915,4
		109	48,65	—95,30	931,8
Cd	48	106	1,215	—94,05	905,6
		108	0,875	—96,00	923,6
		110	12,39	—97,03	940,7

Таблица 4 (продолжение)

Символ	Атомный номер, Z	Массовое число, A	Относительное содержание, %	Избыток атомной массы $M-A$, 10^{-3} а.е.м. (C^{12})	Энергия связи, *Мэв*
Cd	48	111	12,75	—95,85	947,6
		112	24,07	—97,16	956,9
		113	12,26	—95,39	963,3
		114	28,86	—96,43	972,4
		116	7,58	—94,99	987,2
In	49	113	4,28	—95,72	962,9
		115	95,72	—95,93	979,2
Sn	50	112	0,96	—95,06	953,4
		114	0,66	—97,04	971,4
		115	0,35	—96,47	978,9
		116	14,30	—97,89	988,3
		117	7,61	—96,94	995,5
		118	24,03	—98,21	1004,8
		119	8,58	—96,61	1011,3
		120	32,85	—97,87	1020,6
		122	4,72	—96,59	1035,5
		124	5,94	—94,76	1050,0
Sb	51	121	57,25	—96,25	1026,4
		123	42,75	—95,85	1042,1
Te	52	120	0,089	—95,49	1016,8
		122	2,46	—97,00	1034,4
		123	0,87	—95,82	1041,3
		124	4,61	—97,24	1050,7
		125	6,99	—95,58	1057,2
		126	18,71	—96,76	1066,4
		128	31,79	—95,29	1081,2
		130	34,49	—93,30	1095,5
I	53	127	100	—95,65	1072,7
Xe	54	124	0,096	—93,88	1046,0
		126	0,090	—95,83	1064,0
		128	1,919	—96,46	1080,7
		129	26,44	—95,22	1087,6
		130	4,08	—96,49	1096,9
		131	21,18	—94,91	1103,5
		132	26,89	—95,84	1112,4
		134	10,44	—94,60	1127,4
		136	8,87	—92,78	1141,9
Cs	55	133	100	—94,91	1118,8
Ba	56	130	0,101	—93,75	1092,8
		132	0,097	—94,88	1110,0
		134	2,42	—95,69	1126,9
		135	6,59	—94,43	1133,8
		136	7,81	—95,64	1143,0
		137	11,32	—94,44	1149,9
		138	71,66	—94,99	1158,5
La	57	138	0,089	—93,19	1156,0
		139	99,911	—93,94	1164,8

Таблица 4 (продолжение)

Символ	Атомный номер, Z	Массовое число, A	Относительное содержание, %	Избыток атомной массы $M - A$, 10^{-3} а.е.м. (C^{12})	Энергия связи, *Мэв*
Ce	58	136	0,193	—92,90	1138,9
		138	0,250	—94,28	1156,3
		140	88,48	—94,72	1172,8
		142	11,07	—90,96	1185,5
Pr	59	141	100	—92,61	1178,1
Nd	60	142	27,11	—92,52	1185,4
		143	12,17	—90,38	1191,4
		144	23,85	—90,10	1199,2
		145	8,30	—87,84	1205,2
		146	17,22	—87,31	1212,8
Sm	62	144	3,09	—88,35	1196,0
		147	14,97	—85,38	1217,5
		148	11,24	—85,44	1225,6
		149	13,83	—83,07	1231,5
		150	7,44	—82,99	1239,5
		152	26,72	—80,51	1253,3
		154	22,71	—77,99	1267,1
Eu	63	151	47,82	—80,37	1244,3
		153	52,18	—79,14	1259,3
Gd	64	152	0,20	—80,47	1251,7
		154	2,15	—79,28	1266,8
		155	14,73	—77,41	1273,1
		156	20,47	—77,90	1281,6
		157	15,68	—76,06	1288,0
		158	24,87	—75,90	1295,9
		160	21,90	—72,88	1309,2
Tb	65	159	100	—75,05	1302,4
Dy	66	156	0,0524	—76,24	1278,5
		158	0,0902	—76,04	1294,4
		160	2,294	—75,17	1309,8
		161	18,88	—73,40	1316,2
		162	25,53	—73,53	1324,4
		163	24,97	—71,63	1330,7
		164	28,18	—71,17	1338,3
Ho	67	165	100	—69,70	1344,3
Er	68	162	0,136	—71,22	1320,7
		164	1,56	—70,71	1336,6
		166	33,41	—69,60	1351,5
		167	22,94	—67,95	1358,0
		168	27,07	—67,62	1365,8
		170	14,88	—64,49	1379,0
Tm	69	169	100	—65,65	1371,2
Yb	70	168	0,135	—66,10	1362,8
		170	3,03	—65,12	1378,0
		171	14,31	—63,54	1384,6
		172	21,82	—63,44	1392,6
		173	16,13	—61,70	1399,0
		174	31,84	—60,98	1406,4
		176	12,73	—57,26	1419,1

Таблица 4 (продолжение)

Символ	Атомный номер, Z	Массовое число, A	Относительное содержание, %	Избыток атомной массы $M_i - A$, 10^{-3} а.е.м. (C^{12})	Энергия связи, *Мэв*
Lu	71	175	97,40	—59,11	1412,0
		176	2,60	—57,26	1418,3
Hf	72	174	0,18	—59,74	1403,7
		176	5,20	—58,35	1418,6
		177	18,50	—56,52	1424,9
		178	27,14	—56,13	1432,6
		179	13,75	—53,98	1438,7
		180	35,24	—53,19	1446,0
Ta	73	181	100	—52,02	1452,2
W	74	180	0,135	—53,02	1444,3
		182	26,41	—51,73	1459,3
		183	14,40	—49,71	1465,5
		184	30,64	—49,01	1472,9
		186	28,41	—45,66	1485,9
Re	75	185	37,07	—46,98	1478,3
		187	62,93	—44,04	1491,7
Os	76	184	0,018	—47,44	1469,8
		186	1,59	—46,06	1484,7
		187	1,64	—44,04	1490,9
		188	13,3	—44,03	1498,9
		189	16,1	—41,75	1504,9
		190	26,4	—41,40	1512,6
		192	41,0	—38,59	1526,2
Ir	77	191	37,31	—39,15	1517,8
		193	62,7	—36,72	1531,7
Pt	78	190	0,0127	—40,05	1509,8
		192	0,78	—38,57	1524,6
		194	32,9	—37,19	1539,4
		195	33,8	—35,18	1545,6
		196	25,3	—35,02	1553,6
		198	7,21	—32,47	1567,3
Au	79	197	100	—33,45	1559,4
Hg	80	196	0,146	—34,18	1551,2
		198	10,02	—33,23	1566,5
		199	16,84	—31,74	1573,2
		200	23,13	—31,66	1581,2
		201	13,22	—29,69	1587,4
		202	29,80	—29,37	1595,2
		204	6,85	—26,52	1608,6
Tl	81	203	29,50	—27,67	1600,9
		205	70,50	—25,54	1615,0
Pb	82	204	1,48	—26,93	1607,5
		206	23,6	—25,54	1622,3
		207	22,6	—24,10	1629,0
		208	52,3	—23,36	1636,4
Bi	83	209	100	—19,58	1640,2
Th	90	232	100	—38,21	1766,5
U	92	234	0,056	—40,90	1778,6
		235	0,7205	—43,93	1783,8
		238	99,2739	—50,76	1801,7

Таблица 5

Ряд урана — радия

Изотоп	Классическое название	Испускаемые частицы	Период полураспада	*E*, *Мэв*
$_{92}U^{238}$	Уран I	α	$4{,}51\cdot10^{9}$ лет	4,18
$_{90}Th^{234}$	Уран X_1	β	2,41 дня	0,19; 0,10
$_{91}Pa^{234}$	Уран X_2	β	1,18 *мин*	2,31
$_{91}Pa^{234}$	Уран *Z*	β	6,66 *час*	0,5
$_{92}U^{234}$	Уран II	α	$2{,}50\cdot10^{5}$ лет	4,76
$_{90}Th^{230}$	Ионий	α	$8{,}0\cdot10^{4}$ лет	4,68; 4,61
$_{88}Ra^{226}$	Радий	α	1620 лет	4,78; 4,59
$_{86}Em^{222}$	Радон	α	3,825 дня	5,48
$_{84}Po^{218}$	Радий *A*	α	3,05 *мин*	6,00
$_{82}Pb^{214}$	Радий *B*	β	26,8 *мин*	0,7
$_{83}Bi^{214}$	Радий *C*	βα	197,7 *мин*	β 1,6; 3,17
$_{84}Po^{214}$	Радий *C'*	α	$1{,}6\cdot10^{-4}$ *сек*	α 5,5—10,5
$_{81}Tl^{210}$	Радий *C''*	β	1,32 *мин*	7,68
$_{82}Pb^{210}$	Радий *D*	β	20 лет	1,9
$_{83}Bi^{210}$	Радий *E*	β	5,0 дней	0,02
$_{84}Po^{210}$	Полоний	α	138 дней	1,17
$_{82}Pb^{206}$	Урановый свинец	стабилен		5,30

Таблица 6

Ряд актиния

Изотоп	Классическое название	Испускаемые частицы	Период полураспада	*E*, *Мэв*
$_{92}U^{235}$	Актиноуран	α	$7{,}1\cdot10^{8}$ лет	4,40; 4,58
$_{90}Th^{231}$	Уран *Y*	β	25,6 *час*	0,09; 0,30; 0,22
$_{91}Pa^{231}$	Протактиний	α	$3{,}4\cdot10^{4}$ лет	5,0; 4,63—5,05
$_{89}Ac^{227}$	Актиний	β	22 года	0,046
$_{90}Th^{227}$	Радиоактиний	α	18,2 дней	5,97; 5,65—6,03
$_{88}Ra^{223}$	Актиний *X*	α	11,6 дней	5,70—5,68
$_{86}Em^{219}$	Актинон	α	3,92 *сек*	6,82; 6,56
$_{84}Po^{215}$	Актиний *A*	α	$1{,}8\cdot10^{-3}$ *сек*	7,36
$_{82}Pb^{211}$	Актиний *B*	β	36,1 *мин*	1,4; 0,5
$_{83}Bi^{211}$	Актиний *C*	αβ	2,15 *мин*	α 6,62; 6,27 β 0,35
$_{81}Tl^{207}$	Актиний *C'*	β	4,78 *мин*	1,45
$_{84}Po^{211}$	Актиний *C''*	α	0,52 *сек*	7,43
$_{82}Pb^{207}$	Актиниевый свинец	стабилен		

Таблица 7

Ряд тория

Изотоп	Классическое название	Испускаемые частицы	Период полураспада	*E*, *Мэв*
$_{90}Th^{232}$	Торий	α	$1{,}39 \cdot 10^{10}$ лет	3,99; 3,93
$_{88}Ra^{228}$	Мезоторий I	β	6,7 года	$<0{,}02$
$_{89}Ac^{228}$	Мезоторий II	β	6,13 *час*	1,11; 0,45—2,18
$_{90}Th^{228}$	Радиоторий	α	1,90 года	5,42; 5,34
$_{88}Ra^{224}$	Торий *X*	α	3,64 дня	5,68; 5,44
$_{86}Em^{220}$	Торон	α	52 *сек*	6,28; 5,75
$_{84}Po^{216}$	Торий *A*	α	0,16 *сек*	6,77
$_{82}Pb^{212}$	Торий *B*	β	10,64 *час*	0,34; 0,58
$_{83}Bi^{212}$	Торий *C*	βα	60,5 *мин*	β 2,25α 6,05; 6,09
$_{80}Po^{212}$	Торий *C′*	α	$3 \cdot 10^{-7}$ *сек*	8,78
$_{81}Tl^{208}$	Торий *C″*	β	3,1 *мин*	1,79; 1,28
$_{82}Pb^{208}$	Ториевый свинец	стабилен		

Таблица 8

Ряд нептуния

Изотоп	Испускаемые частицы	Период полураспада	*E*, *Мэв*
$_{93}Np^{237}$	α	$2{,}2 \cdot 10^{6}$ лет	4,79; 4,52—4,87
$_{91}Pa^{233}$	β	27,4 дней	0,26; 0,14; 0,57
$_{92}U^{233}$	α	$1{,}62 \cdot 10^{5}$ лет	4,82; 4,78; 4,73
$_{90}Th^{229}$	α	7300 лет	4,85; 4,94; 5,02
$_{88}Ra^{225}$	β	14,8 дней	0,32
$_{89}Ac^{225}$	α	10 дней	5,80
$_{87}Fr^{221}$	α	4,8 *мин*	6,30; 6,07
$_{85}At^{217}$	α	$1{,}8 \cdot 10^{-2}$ *сек*	7,02
$_{83}Bi^{213}$	βα	47 *мин*	β 1,39 α 5,90
$_{84}Po^{213}$	α	$4{,}0 \cdot 10^{-6}$ *сек*	8,34
$_{81}Tl^{209}$	β	2,2 *мин*	1,8; 2,3
$_{82}Pb^{209}$	β	3,3 *час*	0,62
$_{83}Bi^{209}$	стабилен		

Таблица 9

Элементарные частицы

Частица	Символ	Масса (в единицах m_e)	Заряд	Спин	Среднее время жизни, *сек*	Античастица
Гравитон (?)	g	0	0	2	стабилен	**совпадает с** g
Фотон	γ	0	0	1	стабилен	**совпадает с** γ
Лептоны:						
Нейтрино	ν_e	0	0	$^1/_2$	стабильно	$\bar{\nu}_e$ **(антинейтрино)**
	ν_μ	0	0	$^1/_2$	стабильно	$\bar{\nu}_\mu$
Электрон	e^-	1	$-e$	$^1/_2$	стабилен	e^+ **(позитрон)**
Мю-минус	μ^-	206,77±0,02	$-e$	$^1/_2$	$(2{,}212\pm0{,}001)\cdot10^{-6}$	μ^+ (мю-плюс)
Мезоны:						
Пи-нуль	π^0	264,2±0,1	0	0	$(2{,}2\pm0{,}8)\cdot10^{-16}$	совпадает с π^0
Пи-плюс	π^+	273,2±0,1	$+e$	0	$(2{,}55\pm0{,}03)\cdot10^{-8}$	π^- (пи-минус)
K-плюс	K^+	966,6±0,4	$+e$	0	$(1{,}224\pm0{,}013)\cdot10^{-8}$	K^-
K-нуль	K^0	974±1	0	0	K_1^0: $(1{,}00\pm0{,}04)\cdot10^{-10}$ K_2^0: $(6{,}1\pm1{,}4)\cdot10^{-8}$	$\bar{K}^0$
Эта	η^0	1072±2	0	0	$\sim10^{-18}$ (?)	совпадает с η^0
Барионы:						
Протон	p	1836,12±0,02	$+e$	$^1/_2$		$\bar{p}$ антипротон
Нейтрон	n	1838,65±0,02	0	$^1/_2$	$(1{,}01\pm0{,}03)\cdot10^3$	$\bar{n}$ антинейтрон
Лямбда	Λ^0	2182,8±0,3	0	$^1/_2$	$(2{,}51\pm0{,}09)\cdot10^{-10}$	$\bar{\Lambda}^0$ антилямбда
Сигма-плюс	Σ^+	2327,7±0,4	$+e$	$^1/_2$	$(0{,}81\pm0{,}06)\cdot10^{-10}$	$\bar{\Sigma}^-$ антисигма-минус
Сигма-нуль	Σ^0	2331,8±1,0	0	$^1/_2$	10^{-11} (10^{-19}?)	$\bar{\Sigma}^0$ антисигма-нуль
Сигма-минус	Σ^-	2340,5±0,6	$-e$	$^1/_2$	$(1{,}61\pm0\ 10)\cdot10^{-10}$	$\bar{\Sigma}^+$ антисигма-плюс
Кси-нуль	Ξ^0	2565±8	0	$^1/_2$	10^{-10}	$\bar{\Xi}^0$ антикси-нуль
Кси-минус	Ξ^-	2580±2	$-e$	$^1/_2$	$(1{,}3\pm0{,}4)\cdot10^{-10}$	$\bar{\Xi}^+$ антикси-плюс
Омега-минус	Ω^-	3300±20	$-e$	$^3/_2$ (?)	$\sim10^{-10}$	$\bar{\Omega}^+$ антиомега-плюс

Таблица 10

Схемы распада нестабильных частиц

Реакция распада	Относительная вероятность, %	Реакция распада	Относительная вероятность, %
$\mu^+ \to e^+ + \nu + \bar{\nu}$	100	$\eta^0 \to 2\gamma$	~35
		$\eta^0 \to 3\pi^0$	~30
$\pi^0 \to 2\gamma$	99	$\eta^0 \to \pi^+ + \pi^- + \pi^0$	~30
$\pi^0 \to \gamma + e^+ + e^-$	1	$\eta^0 \to \pi^+ + \pi^- + \gamma$	~5
$\pi^+ \to \mu^+ + \nu$	99,99		
$\pi^+ \to e^+ + \nu$	0,01	$n \to p + e^- + \bar{\nu}$	100
$K^+ \to \mu^+ + \nu$	63	$\Lambda^0 \to p + \pi^-$	67
$K^+ \to \pi^+ + \pi^0$	19	$\Lambda^0 \to n + \pi^0$	33
$K^+ \to 2\pi^+ + \pi^-$	6		
$K^+ \to \pi^0 + e^+ + \nu$	5	$\Sigma^+ \to p + \pi^0$	50
$K^+ \to \pi^0 + \mu^+ + \nu$	5	$\Sigma^+ \to n + \pi^+$	50
$K^+ \to \pi^+ + 2\pi^0$	2		
		$\Sigma^0 \to \Lambda^0 + \gamma$	100
$K_1^0 \to \pi^+ + \pi^-$	67		
$K_1^0 \to 2\pi^0$	33	$\Sigma^- \to n + \pi^-$	100
$K_2^0 \to \pi^+ + e^- + \bar{\nu}$ $K_2^0 \to \pi^- + e^+ + \nu$	48	$\Xi^0 \to \Lambda^0 + \pi^0$	~100
		$\Xi^- \to \Lambda^0 + \pi^-$	~100
$K_2^0 \to \pi^+ + \mu^- + \bar{\nu}$ $K_2^0 \to \pi^- + \mu^+ + \nu$	38	$\Omega^- \to \Lambda^0 + K^-$	?
$K_2^0 \to \pi^+ + \pi^- + \pi^0$ $K_2^0 \to 3\pi^0$	14	$\Omega^- \to \Xi^0 + \pi^-$	?
		$\Omega^- \to \Xi^- + \pi^0$	?

Примечание. Схемы распада античастиц можно получить, если во всех реакциях в обеих частях равенств заменить все частицы на античастицы. Мезоны K^0 и $\bar{K}^0$ получаются как смесь K^0_1- и K_2^0-мезонов, доли которых равны в момент рождения, но меняются с течением времени.

II. Единицы и переводные множители

Электромагнитные силы записываются в различной форме в зависимости от того, какая система единиц, СГС или МКСА, используется.

	СГС	МКСА
Закон Кулона	$F = \frac{qq'}{r^2}$	$F = \frac{qq'}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$
Сила Лоренца	$\mathbf{F} = q\left(\mathbf{E} + \left[\frac{\mathbf{v}}{c}\mathbf{B}\right]\right)$	$\mathbf{F} = q\,(\mathbf{E} + [\mathbf{vB}])$

Все другие механические уравнения в этих двух системах имеют одинаковый вид, за исключением различий, возникающих из-за введения вышеупомянутых сил. В следующей таблице перечислены соотношения между единицами СГС (система Гаусса) и МКСА.

Величина и ее обозначение	Единица измерения и ее обозначение		Соотношение между единицами
	МКСА	СГС	
Длина l	метр (*м*)	сантиметр (*см*)	$1\ м = 10^2\ см$
Масса m	килограмм (*кг*)	грамм (*г*)	$1\ кг = 10^3\ г$
Время t	секунда (*сек*)	секунда (*сек*)	
Сила F	ньютон (*н*)	дина (*дин*)	$1\ н = 10^5\ дин$
Давление p	ньютон на квадратный метр ($н/м^2$)	дина на квадратный сантиметр ($дин/см^2$)	$1\ н/м^2 = 10\ дин/см^2$
Энергия E	джоуль (*дж*)	эрг (*эрг*)	$1\ дж = 10^7\ эрг$
Мощность P	ватт (*вт*)	эрг на секунду (*эрг/сек*)	$1\ вт = 10^7\ эрг/сек$
Заряд * q	кулон (*к*)	СГСЭ-ед	$1\ к = 3 \cdot 10^9$ СГСЭ-ед.
Сила тока * I	ампер (*а*)	СГСЭ-ед	$1\ а = 3 \cdot 10^9$ СГСЭ-ед.
Потенциал * Ф	вольт (*в*)	СГСЭ-ед	$1\ в = \frac{1}{300}$ СГСЭ-ед.
Напряженность электрического поля * E	вольт на метр (*в/м*)	СГСЭ-ед	$1\ в/м = \frac{1}{3} \cdot 10^{-4}$ СГСЭ-ед.
Электропроводность * σ	обратный ом на метр ($ом^{-1}/м$)	СГСЭ-ед	$1\ ом^{-1}\ м^{-1} = 1$ СГСЭ-ед.
Сопротивление R	ом (*ом*)	СГСЭ-ед	$1\ ом = \frac{1}{9} \cdot 10^{-11}$ СГСЭ-ед.
Емкость * C	фарада (*ф*)	сантиметр (*см*)	$1\ ф = 9 \cdot 10^{11}\ см$
Напряженность магнитного поля H	ампер на метр ($а/м$)	эрстед (*э*)	$1\ а/м = 4\pi \cdot 10^{-3}\ э$
Магнитная индукция B	вебер на квадратный метр ($вб/м^2$)	гаусс (*гс*)	$1\ вб/м^2 = 10^4\ гс$
Магнитный поток Ф	вебер (*вб*)	максвелл (*мкс*)	$1\ вб = 10^8\ мкс$
Индуктивность L	генри (*гн*)	сантиметр (*см*)	$1\ гн = 10^9\ см$

Международные стандарты основываются на системе единиц МКСА. Этот факт имеет значение только для тех электрических величин, отмеченных звездочкой*, в которых в качестве переводного множителя встречается скорость света c, так как эти соотношения зависят от экспериментального значения c. В приведенной выше таблице переводных множителей мы предполагали для удобства, что скорость света $c = 3 \cdot 10^8$ *м/сек*. При более точном переводе всюду, где появляется 3 ($9 = 3^2$), она должна быть заменена на 2,9979 согласно приложению III.

Магнитная проницаемость вакуума μ_0 в системе МКСА определяется равенством $\mu_0 = 4\pi/107$. Диэлектрическая проницаемость вакуума ε_0 является экспериментальной величиной, $\varepsilon_0 = 1/\mu_0 c^2$, значение которой приведено в приложении III; $1/4\pi\varepsilon_0 = c^2/10^7 = 9 \cdot 10^9$ *м/ф*.

Другие единицы получаются из исходных путем использования приставки, которая указывает, во сколько раз данная единица больше или меньше исходной. В следующей таблице приведены эти приставки (с их символами, международными и русскими) и множитель, на который умножается данная единица.

10^{12}	тера	*T*	*Т*	10^{-2}	санти	*c*	*с*
10^9	гига	*G*	*Г*	10^{-3}	милли	*m*	*м*
10^6	мега	*M*	*М*	10^{-6}	микро	μ	*мк*
10^3	кило	*k*	*к*	10^{-9}	нано	*h*	*н*
10^2	гекто	*h*	*г*	10^{-12}	пико	*p*	*п*
10	дека	*da*	*да*	10^{-15}	фемто	*f*	*ф*
10^{-1}	деци	*d*	*д*	10^{-18}	атто	*a*	*а*

Например, 1 *км* равен 10^3 *м*; 10^{-6} *м* называется микрометром (микроном). Иногда приставки сочетаются, так что, например, чаще говорят киломегациклы, а не гигациклы.

Имеется большое количество других единиц, не принадлежащих ни к системе СГС, ни к системе МКСА, которые используются для специальных целей. В этой книге используются следующие единицы такого рода:

Ангстрем	Å	10^{-8} *см*
Астрономическая единица*	а. е.	$1{,}49598 \cdot 10^{13}$ *см*
Атмосфера	*атм*	$1{,}01325 \cdot 10^6$ *дин/см*^{2} (10^5 *н/м*^{2})
Атомная единица массы	а. е. м. (C^{12})	$1{,}66 \cdot 10^{-24}$ *г*
Бар	*бар*	10^6 *дин/см*^{2} (10^5 *н/м*^{2})
Барн	*барн*	10^{-24} *см*^{2}
Год (календарь)	год	$3{,}1536 \cdot 10^7$ *сек*
Калория	*кал*	$4{,}184 \cdot 10$ эрг ($4{,}184$ *дж*)
Кюри	*кюри*	$3{,}7 \cdot 10^{10}$ *распад/сек*
Литр	*л*	10^3 *см*^{3}
Микрон	*мк*	10^{-6} *м*
Миля	миля	1,609344 *км*
Миллиметр ртутного столба*	*мм рт. ст.*	$1{,}333224 \cdot 10^3$ *дин/см*^{2} (10^2 *н/м*^{2})
Пуаз	*пз*	1 *дин·сек/см*^{2} (10^{-1} *н·сек/м*^{2})
Световой год*	св. год	$9{,}46055 \cdot 10^{17}$ *см*
Сутки (средние солнечные)	сутки	$8{,}64 \cdot 10^4$ *сек*
Тор	*тор*	1 *мм рт. ст.*
Ферми	*ферми*	10^{-13} *см*
Фут	*фут*	30,38 *см*
Час	*ч*	3600 *сек*
Электрон-вольт	*эв*	$1{,}602 \cdot 10^{-12}$ *эрг* (10 *дж*$^{-19}$)

Большинство из этих единиц определяется данными соотношениями. Однако немногие из них, отмеченные звездочкой, определяются через некоторые другие выражения, так что дающие их выражения являются экспериментальными. Некоторые приставки из предыдущей таблицы используются и с данными единицами: например, *мкбар*, *ккал*, *Гэв*, *ммк*.

III. Физические константы

Газовая постоянная	$R = 8{,}314 \cdot 10^{7}$ *эрг/(моль·град)*
Гравитационная постоянная	$G = 6{,}67 \cdot 10^{-8}$ *дин·см²/г²*
Диэлектрическая проницаемость вакуума	$\varepsilon_0 = 8{,}854 \cdot 10^{-12}$ *ф/м*
Заряд электрона	$e = 4{,}803 \cdot 10^{-10}$ СГСЭ $= 1{,}602 \cdot 10^{-19}$ *к*
Классический радиус электрона	$r_e = e^2/m_e c^2 = 2{,}818 \cdot 10^{-13}$ *см*
Комптоновская длина волны	$\lambda_c = h/m_e c = 2{,}427 \cdot 10^{-10}$ *см*
Магнетон Бора	$\mu_B = 9{,}273 \cdot 10^{-21}$ *эрг/гс*
Масса электрона	$m_e = 9{,}109 \cdot 10^{-28}$ *г*
	$m_e c^2 = 0{,}511$ *Мэв*
Масса протона	$m_p = 1{,}6725 \cdot 10^{-24}$ *г*
	$m_p c^2 = 938{,}3$ *Мэв*
Масса нейтрона	$m_n = 1{,}6748 \cdot 10^{-24}$ *г*
	$m_n c^2 = 939{,}6$ *Мэв*
Постоянная Больцмана	$k = \dfrac{R}{N_0} = 1{,}381 \cdot 10^{-16}$ *эрг/град*
Постоянная Планка	$h = 6{,}6256 \cdot 10^{-27}$ *эрг·сек*
	$\hbar = 1{,}0545 \cdot 10^{-27}$ *эрг·сек*
Постоянная тонкой структуры	$\alpha = \dfrac{e^2}{\hbar c} = 7{,}297 \cdot 10^{-3}$
	$1/\alpha = 137{,}04$
Постоянная Стефана — Больцмана	$\sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-5}$ *эрг·см⁻² сек⁻¹град⁻⁴*
Постоянная Ридберга	$R_\infty = 1{,}097373 \cdot 10^{5}$ *см⁻¹*
Радиус Бора	$a_0 = \dfrac{\hbar^2}{m_e c^2} = 5{,}292 \cdot 10^{-9}$ *см*
Скорость света	$c = 2{,}9979 \cdot 10^{10}$ *см/сек*
Стандартный объем идеального газа	$V_0 = 2{,}241 \cdot 10^{4}$ *см³/моль*
Число Авогадро	$N_0 = 6{,}023 \cdot 10^{23}$ *моль⁻¹*
Энергия Ридберга	$E_R = R_\infty hc = 13{,}605$ *эв*
Ядерный магнетон	$\mu_M = 5{,}051 \cdot 30^{-24}$ *эрг/гс*

Предметный указатель

Авогадро число 141
Альфа-распад 538
Альфа-частицы траектория 114
Аморфные вещества 243, 252
Аннигиляция 327, 551
Античастицы 551, 557
Астрономическая единица 105
Атмосфера, изменение плотности 191
Атом Бора 340
—, диаметр 148, 152, 260
— Томсона 114, 116
—, ядерная модель 113
Атомная масса 492
— —, единица 494
— плоскость в кристалле 256

Базисные векторы 27
Бальмера серия 338
Барионы 556, 558
Бета-распад 536
Бозе — Эйнштейна распределение 471
Больцмана постоянная 145
— распределение 189, 227, 277, 286, 344, 468
Бора атом 340
— радиус 342, 394
Брэгга условие 256 и т. д.

Вайцзеккера формула 518
Вакансии 285 и т. д.
Валентная зона 463, 473
Ван-дер-Ваальса уравнение 147
Вектор единичный 28, 35
Векторное пространство функций 312
Вероятность квантовомеханическая 370
Взаимодействие атомов 263
— молекул 146
— «мягких сфер» 135, 147, 166
— твердых сфер 129, 136, 265
— элементарных частиц 559
Видемана — Франца закон 483
Вина закон 346
Внутренняя конверсия 536
Водорода атом 392
— —, спектр 338
— —, энергетические уровни 339, 398, 400
Возбужденное состояние 339
— — молекулы 443, 447, 449
— — ядра 520, 529
Волна бегущая 307, 314
— звуковая 315
—, интенсивность 315
— плоская 313, 374, 457 и сл., 507 и сл.
— поперечная 312
— продольная 312

Волна стоячая 308, 376
— сферическая 314, 507
— электронная 355
Волновое уравнение 304, 368
Вращательный момент 72
Вращение молекул 446
— ядер 520
Время абсолютное 46
— операционное 42—43
— собственное 52
Вырождение 340, 403, 452
Вязкость 166, 171, 173

Гейзенберга принцип 360, 553
Газовая постоянная 142
Газовый разряд 207
Галилея инвариантность 46
— преобразования 45
Гамильтониан 327
Гамма-лучи 323 и сл., 328
Гамма-распад 534
Гельмгольца уравнение 305, 309, 313, 374, 508
Гравитация 35, 104 и сл., 559
Гравитационная постоянная 35
Градиент 30
Границы зерен 244, 284
Граничные условия 307
Гука закон 238, 271, 296

Давление газа 141 и сл.
— гидростатическое 239
— звуковой волны 317
Дебаевский радиус 216, 217, 219, 228
Дебая модель твердого тела 319
Дейтрон 499
Деление ядер 520, 541
Дефект массы 495
Дефекты решетки 283, 464
Деформация 235, 272
— пластическая 296
Дивергенция 31
Дислокации 284
Дисперсия 319—320, 357
Диссоциация 445
Дифракция нейтронов 359
— рентгеновских лучей 255
— электронов 357
Диффузия амбиполярная 225
— в газах 169, 203—204
— в твердых телах 286, 290 и сл.
Длина абсолютная 46
— вектора 25
— волны 306
— — комптоновская 326
—, операционное определение 44

Длина покоя 51
—, сокращение 51—55
Дырка электронная 479

Жидкость 139, 173, 240, 293, 318

Замедление времени 51
Запрета принцип 407
Запрещенная щель 456, 473
Затухающий гармонический осциллятор 87
Звук 315
Зеркальное отражение 567
Зона проводимости 463, 473

Идеального газа теплоемкость 192
— — уравнение состояния 142, 240
Излучение черного тела 345
Изобары 492, 519
Изоляторы 454, 463, 473
Изомеры 529, 534
Изотоны 492, 522
Изотопический спин 564, 570
Изотопы 492, 499, 522
Импульс 32, 56, 72
— релятивистский 33, 56—59
Инвариантность 25, 46, 54
—, принципы 560
— скорости света 48
Инерциальная система 44, 47
Интенсивность 315, 330
Инфракрасный спектр 90, 276
Ионизации степень 197
Ионная связь 441
Ионные кристаллы 250, 263, 285

Капельная модель ядра 431, 496, 513, 517
Квадратура 71
Квадрупольный момент 497, 512
Квантование 342, 358, 386, 398
Квантовое число 402, 409, 417
Кеплера третий закон 105
Кинетическая энергия 62, 71, 120
— — релятивистская 66
— —, оператор 373, 385, 388
— — отрицательная 378
Ковалентная связь 440
Колебания струны 303
— тепловые 274, 319, 484
— ядер 520
Кометы 105
Комплексные функции 89, 305
Компоненты векторов 28
Комптон-эффект 323
Координационное число 247
Корреляция 469
Коэффициент поглощения 330, 433
Криволинейный интеграл 63
Кристаллическая решетка 224
— структура 243, 284
Кристаллы ионные 250, 263, 285
Критическая точка 149
Кулоновская сила 36, 340
Кулоновское рассеяние 133

Ламбда-нуль распад 127
Лапласа оператор 313
Ларморовский радиус 229
Лауэ метод 258
Лептоны 556, 558
Логарифмический декремент затухания 92
Лоренца инвариантность 54
Лоренца преобразование 41, 46
— сила 37, 228

Магнитное зеркало 232
Магнитные числа 522, 527
Магнитный момент 424, 498, 529
Маделунга постоянная 269
Майкельсона и Морлея опыт 48
Максвелла распределение 181
Масса 31
— покоя 35
— приведенная 76, 90
— релятивистская 34, 66
— элементарных частиц 587
— эффективная 458, 478
Массовое число 491
Математическое ожидание 382, 384, 386, 389
Межмолекулярные силы 146
Мезоны 553—558
Металлы 249, 454, 463, 467 и сл.
Ми потенциал 265, 275
Модуль упругости 237, 239, 271
Молекула водорода 437
—, вращение 446
—, диаметр 148, 152, 158, 164
—, колебание 90, 446
Молекулярные спектры 445
Молекулярный вес 145
— ион 437
Моль 141
Момент импульса 72, 111, 341
— — релятивистский 33, 56
— —, сохранение 72, 96
Мультиплетность 421
Мюон 552

Напряжение 167, 236, 296
Насыщение ядерных сил 496, 513
Начальные условия 308
Нейтрино 537, 551, 555, 563, 569, 587
Независимых нуклонов модель 528
Неопределенности принцип 360, 553
Неспаренный электрон 441
Нормировка 180, 311, 371, 386, 389, 432
Нуклон 491, 549—550, 556
Ньютона второй закон 32, 47
— первый закон 44, 61
— третий закон 61

Обменные силы 443, 513, 553
Оболочечная модель ядра 522
Оболочки атома 412, 454
Одновременность 43, 55
Одноэлектронное приближение 405, 417, 437, 451
Оператор векторный 30
— Гамильтона 374, 389
— дифференциальный 30, 313
— квантовой механики 373, 389
— момента 386, 402, 410, 445, 525
— спин-орбитального взаимодействия 424
Операционное определение 32, 41
Орбита гармонического осциллятора 79
— гиперболическая 110
— допустимая 341
— круговая 100
— эллиптическая 102, 342
— энергетически минимальная 107
Ортогональные векторы 28
— функции 310
Ортонормированные векторы 28

Ортонормированный набор функций 314
Основное состояние 339
Осциллятор гармонический 81 347, 353, 382
— —, амплитуда 83, 305
Отбора правила 427
Относительное содержание изотопа 493, 585
Относительности принцип 42, 52
Относительность длины и времени 51

Паули принцип 407, 409, 437, 451, 468, 523
Период движения планет 105
— осциллятора 84
— полураспада 533, 539
Периодическая система 249, 415, 573
Пи-мезон (пион) 55, 554, 556
Плазменные колебания 214, 219, 230
Планеты 104
Планка закон излучения 349
— постоянная 325, 337, 348, 357
Плотная упаковка 246
Плотность атмосферы 191
— газа 145, 168
— кристалла 243, 252
— состояний 459, 472
— электронов 462, 472
Поглощение рентгеновских лучей 433, 456
— фотонов 328, 337, 431, 462
Подвижность 209, 223, 482
Позитрон 327, 534, 550
Покоя масса 35, 323
Полупроводники 455, 464, 475, 486
Постоянная решетки 252
— Ридберга 338, 342
Потенциал гравитационный 94
— кулоновский 113
— Ми 265, 275
— Морса 281
— эффективный 97—99, 400
— Юкавы 501, 552—553
— ядерный 500, 510—512, 523—525
Потенциальная энергия 67, 95
— — гармонического осциллятора 82
Поток импульса 168
— молекул 143, 159, 167, 169, 183
— тепла 158—159
— фотонов 329—330
— энергии 315
Правила отбора 427
Преломление 320, 357
Приведенная масса 76, 90, 447, 502
Примеси 284, 289, 294, 465, 484
Прицельное расстояние 111, 119, 130, 134, 506
Проводимость дырочная 479
— ионная 293
— электронная 477

Работа 62
— выхода 333
Равновесная степень ионизации 199
Равновесное распределение 178, 202, 206, 468
Равнораспределения энергии закон 193, 277
Радиационные пояса 211, 233
Радиус электрона 325, 331
Размерностей метод 163
Распад элементарных частиц 554, 588
Распределение Максвелла-Больцмана 178—187
Распределение по скоростям 181
Рассеяние, дифференциальное сечение 132—139
— Комптона 323
— нейтрон-протонное 505
— полное 129, 155
— Резерфорда 133
— рентгеновских лучей 255, 325
—, угол 114, 119, 122
— электронов 483
Резонансы 558
Рекомбинация 199
Релятивистская кинетическая энергия 66
— масса 34, 66
— полная энергия 69
Рентгеновских лучей дифракция 255, 259
— — испускание 431, 456
Рефракция 320
Ридберга постоянная 338, 342
Рождение пар 327, 551
Ротор 31
Рэлея — Джинса закон 348

Саха уравнение 200, 479
Света скорость 33, 48, 323
Свободная частица 374
Связь $j - j$ 418, 525
— $L - S$ 419—430, 435
Сдвиг 167, 236, 296
Сечение поглощения фотонов 328, 462
— рассеяния дифференциальное 132
— — комптон-эффекта 330
— — нейтрон-протонное 508
— — полное 129, 155
— — резерфордовское 133
— — электронов 483
Силы 21, 24
— гравитационные 35
— консервативные 70
— кулоновские 36, 340
— Лоренца 37
— межатомные 264 и сл.
— межмолекулярные 145, 163—166
— обменные 443, 513—514, 553—554
— трения 38
— центральные 73, 76, 94
— ядерные 488, 496, 499 и сл., 512
Симметрия взаимодействий 566
— волновых функций 408
— зеркальная 567
— кристалла 248
Система координат вращающаяся 44
— — декартова 24
— — инерциальная 44
— — покоя 53, 78, 79
Скаляр 24
Скалярное произведение 27
Скольжение 296
Скорости преобразование 56
Скорость 29
— дрейфа 209, 223, 481
— звука 315
— критическая 96, 101
— среднеквадратичная 144, 188, 291
— средняя 188, 291, 317, 480
— фазовая 306
Собственная функция 309, 382
Собственное значение 309, 383
Соль поваренная (NaCl) 90, 251, 268, 275, 441
Сохранение импульса 57, 61, 119
— момента импульса 72, 96

Сохранение энергии 69, 119
Сохранения законы 560—571
Спектральные термы 421
Спектры водорода 338
— двухэлектронные 428
— молекулярные 445
— полосатые 448
— рентгеновских лучей 431
— твердого тела 462—467
— черного тела 345
— щелочных металлов 426
— ядерные 524, 527
Спин 409, 500
— изотопический 564
Сплавы 250
Среднее время жизни 587
— — свободного пробега 155
— значение измерений 382
— — по распределению 183, 187
Средняя длина свободного пробега 156, 205, 281, 482
— скорость 188
— энергия 192, 277, 347
Стефана закон 345
Столкновения вероятность 156
— неупругие 124
— упругие 120
Странность 556, 563, 569
Струны уравнение движения 304
Сферические координаты 132, 185—186

Твердый раствор 250
Телесный угол 132, 186
Температура 185
Тепловое излучение 345
— расширение 239—241, 279—281
Теплоемкость газов 166, 192
— твердых тел 274, 350, 475
— электронная 475
Термоионизация 199
Термоядерная реакция 125, 231, 543
Трение 38, 89
Туннельный эффект 380, 539—540, 544

Угол отдачи 119, 122
Уравнение движения 24, 71
— состояния Ван-дер-Ваальса 147
— — вириальное 151—152
— — Дитеричи 153
— — идеального газа 142
— — твердого тела 239
— траектории 86
Ускорение 29

Фазовая скорость 306
Фазовое пространство 190
Фазы сдвиг 505, 510
Ферми — Дирака распределение 471, 475
Ферми-энергия 459, 461, 475
Фотон 322, 337, 549, 556
Фотонный газ 346, 471
Фотоэффект 328, 333, 343
Функция распределения 178, 191
Фурье-ряд 310

Хеллманна — Фейнмана теорема 445

Центр масс 77
Циклотронная частота 229

Частота волны 306
— ларморовская 229
— осциллятора 84
— плазменная 215, 219, 230
— рентгеновских лучей 431
— тепловых колебаний 94, 175
— циклотронная 229
Числа заполнения 407, 469

Шредингера уравнение 368
— —, атома водорода 392
— — двухнуклонное 502
— —, молекулы водорода 438

Эйнштейн 35, 41, 60, 334
Эйнштейна модель твердого тела 279, 351
— соотношение 206, 209, 293, 482
Экзотермическая реакция 125
Экранировка в атоме 413, 417, 426, 431
— в плазме 216—221
Эксцентриситет 102, 109
Электрон 549, 556
Электрон-вольт 125
Электронная конфигурация 415, 575
Электронные волны 355
Электронный газ 468
— захват 538
Электропроводность газа 204
— плазмы 221
Элементарная ячейка 252
Эллиптические орбиты 102, 342
Эндотермическое столкновение 125
Энергетические зоны 451
Энергия активации 291
— волны 314
— вращательная 447, 520
— диссоциации 266
— ионизации 198
— кинетическая 64, 75, 120
— покоя 66
— пороговая 327
— потенциальная 67, 95
— релятивистская 65
— связи молекул 269, 438
— — ядер 494, 501, 517
— спин-орбитального взаимодействия 422, 428, 525
— твердых тел 266
— тепловая 190, 277, 350, 476
— Ферми 459, 471
— фотона 325, 337, 431
Эфир 48
Эффузия 188

Юкавы потенциал 501, 552

Ядерные силы 496—497, 499, 512
Ядерный радиус 449

Р. Кристи, А. Питти

Строение вещества:
введение в современную физику

М., 1969 г., 596 стр. с илл.

Редактор *Д. А. Миртова*
Техн. редактор *В. Н. Крючкова*
Корректоры *С. Н. Емельянова, Н. Б. Румянцева*

Сдано в набор 20/III 1969 г. Подписано к печати 6/VIII 1969 г. Бумага 60×90¹/₁₆.
Физ. печ. 37,25. л. Условн. печ. л. 37,35. Уч.-изд. л. 35,91.
Тираж 17000 экз. Цена книги 2 р. 77 к.
Заказ № 2004.

Издательство «Наука»
Главная редакция
физико-математической литературы
Москва В-71, Ленинский проспект, 15.

Москва Г-99, Шубинский пер., 10.

2-я типография издательства «Наука».