Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут»

Фізико-математичний факультет

Лекції з курсу фізики

ЕЛЕМЕНТИ КВАНТОВОЇ ФІЗИКИ

Укладачі: В. П. Бригінець, С. О. Подласов

Київ - 2016

Лекції з курсу фізики. Елементи квантової фізики / Уклад.: В.П. Бригінець, С.О. Подласов. – К.: НТУУ «КПІ», 2016. – 106 с.

Рекомендовано Методичною радою НТУУ «КПІ»

Протокол №10 (23.06.2016)

Лекція 1. СВІТЛОВІ КВАНТИ

1.1. Формула Планка

Протягом усієї історії становлення і розвитку оптики конкурували два погляди на природу світла – корпускулярний та хвильовий. Згідно з першим, якого, зокрема, дотримувався Ньютон, світло вважалося мікроскопічними частинками, що рухаються і взаємодіють з тілами за законами механіки. У другому підході воно розглядалося як хвильовий процес у гіпотетичному середовищі – ефірі, що заповнює увесь світовий простір і проникає в усі тіла.

Проте наприкінці вісімнадцятого – початку дев'ятнадцятого століття в оптиці поступово утвердилася хвильова концепція. А після відкриття Максвеллом електромагнітних хвиль і їх експериментального спостереження та вивчення властивостей Герцом здалося, що хвильова електромагнітна концепція світла перемогла остаточно. Зокрема, вона стала теоретичним підґрунтям *фізичної хвильової оптики*, яка дала вичерпне пояснення явищ пов'язаних із поширенням світла, таких як прямолінійність променів в однорідному середовищі, інтерференція, дифракція, поляризація та ін. Та хвильова концепція відображає не всі властивості електромагнітного випромінювання, зокрема, світла. Виявилося, що вона є принципово неспроможною пояснити ряд оптичних явищ, які безпосередньо пов'язані з процесами випускання електромагнітного випромінювання та його взаємодії з речовиною.

В цьому ряду осібно стоїть проблема теплового випромінювання, тобто світлового випромінювання, що випускається нагрітими тілами внаслідок теплового руху та взаємодії атомів. Попри всі зусилля, на основі хвильової теорій та законів термодинаміки теоретично пояснити всі властивості теплового випромінювання не вдалося. При цьому деякі результати виявилися взагалі позбавленими змісту. Наприклад, з класичної теорії випливає формально незаперечний висновок про те, що будь-яке тіло при будь-якій відмінній від абсолютного нуля температурі має випромінювати в простір нескінченно велику енергію. Це засвідчило неадекватність деяких фундаментальних положень класичної фізики при поясненні властивостей електромагнітного випромінювання.

Вихід із тупикової ситуації знайшов один із творців сучасної фізики Макс Планк, який в 1900 р. висловив твердження про те, що електромагнітне випромінювання випускається тілами не неперервно, а окремими порціями

енергії – *квантами*, величина яких визначається частотою випромінювання, згідно з *формулою Планка*:

$$\varepsilon = h\nu, \tag{1.1}$$

де величина $6{,}626 \cdot 10^{-34}$ Дж $\cdot$ с (джоуль-секунда) – називається *сталою Планка* і є основною константою квантової фізики.

В теорії часто замість лінійної використовують колову частоту $\omega = 2\pi\nu$ і записують формулу Планка у вигляді

$$\varepsilon = \hbar\omega, \tag{1.1а}$$

де константа $\hbar = \left(h/2\pi\right) = 1{,}054 \cdot 10^{-34}$ Дж $\cdot$ с теж називається сталою Планка.

Енергію кванта можна виразити і через довжину хвилі випромінювання у вакуумі:

$$\varepsilon = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda}. \tag{1.1б}$$

Уявлення про кванти дозволило Планку отримати теоретичну формулу, з якої випливають усі відомі властивості теплового випромінювання. Згодом з'ясувалося, що квантовий механізм випромінювання дозволяє пояснити й інші явища, побудувати теорію яких класична фізика виявилася нездатною.

У цьому зв'язку варто зауважити, що уявлення про дискретність випромінювання використовується і в деяких задачах класичної оптики, де світловий потік трактується як послідовність цугів – окремих «шматків» хвилі малої тривалості. Але революційність гіпотези Планка полягає в тому, що енергія порції випромінювання – кванта визначається тільки частотою, незалежно від його тривалості та амплітуди поля, як у хвильовій теорії.

1.2. Фотоефект

Одним із таких *квантових оптичних явищ* є фотоелектричний ефект, коротко – фотоефект. Фотоефект полягає у вивільненні електронів речовини під дією світла – електромагнітного випромінювання оптичного діапазону. Розрізняють зовнішній і внутрішній фотоефект. Зовнішній фотоефект спостерігається в металах і полягає у вильоті електронів під дією світла за межі зразка[1]. При внутрішньому фотоефекті, що спостерігається в

[1] Під дією рентгенівських та гама-променів електрони теж вилітають з речовини, але в цьому випадку говорять не про фотоефект, а про *екзоелектронну емісію*.

діелектриках і напівпровідниках, електрони при опроміненні залишаються всередині речовини, але звільняються від зв'язку з ядрами і стають додатковими носіями струму що зменшує електричний опір зразка.

На явищі фотоефекту працюють різні фотоелектричні прилади: фотоелементи, фотоопори, фотодіоди, фототранзистори та ін.

У цій лекції розглядається зовнішній фотоефект, властивості якого найбільш прозоро відображають фізику явища.

Вольт-амперна характеристика фотоелемента. Основні властивості зовнішнього фотоефекту можна встановити, досліджуючи вольт-амперні характеристики[2] (ВАХ) вакуумного фотоелемента – двохелектродної електронної лампи, в якій передбачена можливість опромінювання катода світлом.

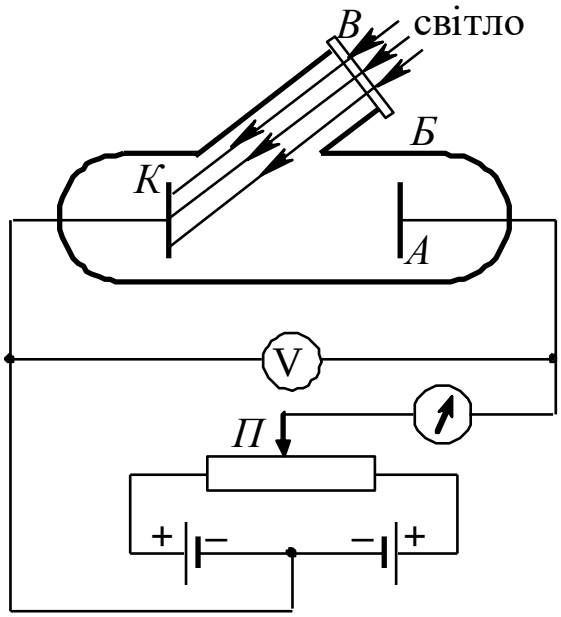


Рис.1.1

Загальна схема таких досліджень показана на рис. 1.1. На фотоелемент подається напруга, величину та полярність якої можна змінювати за допомогою потенціометра *П*. Катод *К* із досліджуваного металу та анод *А* розміщені у вакуумному балоні *Б* з віконцем *В*, яке виготовляють із матеріалу, що майже без поглинання пропускає світло в широкому діапазоні

[2] Вольт-амперною характеристикою називається залежність струму від напруги в даному електричному приладі.

довжин хвилі. Це дозволяє опромінювати катод світлом із заданою інтенсивністю та частотою. Електрони, звільнені при освітленні катода (*фотоелектрони*), під дією електричного поля рухаються до анода *A,* створюючи *фотострум*. Напруга між катодом і анодом і струм через фотоелемент реєструються приладами.

Типова ВАХ фотоелемента показана на рис. 1.2, на якому область $U > 0$ відповідає прямій напрузі, коли анод має знак «+» і катод «–», а в області $U < 0$ напруга є зворотною (на аноді «–» і на катоді «+»).

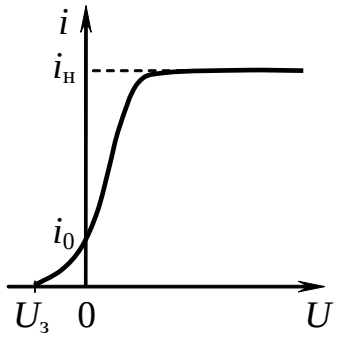


Рис. 1.2

Як видно з рис. 1.2, залежність фотоструму від напруги на фотоелементі має наступні особливості:

1. Наявність деякого струму i_0 при $U = 0$, тобто за відсутності між анодом і катодом електричного поля;
2. Насичення: при збільшенні прямої напруги фотострум зростає тільки до певної величини $i_н$, яка називається *струмом насичення*, і далі лишається практично незмінним;
3. Для припинення струму на фотоелемент необхідно подати зворотню напругу, найменша величина якої $U_з$ називається *затримуючою* або *запірною* напругою фотоелемента.

Аби зрозуміти ці особливості ВАХ перш за все візьмемо до уваги, що фотострум визначається величиною заряду, що переноситься фотоелектронами: $i = ne$, де n – кількість електронів, які потрапляють на анод за одиницю часу, e – елементарний заряд. Оскільки електрони вириваються з катода не електричним полем, а світлом, їхня кількість не залежить від напруги на фотоелементі. Це пояснює причину насичення і визначає величину струму насичення:

$$i_н = n_0 e, \qquad (1.2)$$

де n_0 – кількість електронів, яка виривається з катода світлом за 1 с.

Таким чином,

вимірюючи струм насичення, ми можемо визначити потік фотоелектронів із металу при опроміненні його світлом.

Наявність струму i_0 говорить про те, що фотоелектрони виходять з катода з деякою початковою швидкістю і можуть потрапити на анод «своїм ходом». Зазвичай $i_0 < i_н$, і $n < n_0$, тож не всі вільні електрони, що вилетіли з катода, потрапляють на анод. Для того є дві причини. Перша полягає в тому, що фотоелектрони вилітають по всіх напрямках, тож лише частка їх рухається в напрямку анода і може потрапити на нього. Друга причина пов'язана з тим, що через виліт електронів поверхня катода під час опромінення світлом заряджається позитивно і притягає до себе електрони, що вилетіли. Тому під час опромінення катода одні електрони вилітають з нього, а інші повертаються назад. В результаті навколо позитивно зарядженого катода утворюється шар негативного заряду («електронна хмарина») і локальне електричне поле подібне до поля конденсатора. Це поле перешкоджає виходу електронів із катода та їхньому вільному рухові в напрямку анода. Тому за відсутності прискорюючої напруги на анод потрапляють лише деякі фотоелектрони, що мають достатню для подолання притягання катода кінетичну енергію.

При подаванні на фотоелемент прямої напруги для фотоелектронів створюється прискорююче електричне поле, що збільшує кількість електронів, які потрапляють на анод і створюють струм. Тому при підвищенні напруги струм поступово зростає аж до насичення, яке настає, коли на анод потрапляють усі вирвані з катода електрони.

Аналогічно пояснюється й існування запірної напруги. При подаванні зворотньої напруги між анодом і катодом виникає гальмівне електричне поле, що створює додаткову перешкоду потраплянню фотоелектронів на анод. Тому при збільшенні зворотньої напруги струм поступово зменшується і зовсім зникає, коли жоден фотоелектрон буде не здатний потрапити на анод. Це станеться, коли найшвидші фотоелектрони на шляху від катода до анода будуть повністю витрачати свою кінетичну енергію на роботу проти гальмівного поля. Отже, запірна напруга $U_з$ задовольняє умову:

$$eU_з = \frac{mv^2}{2}, \qquad (1.3)$$

де v – максимальна швидкість, з якою електрони виходять з металу.

Таким чином,

вимірюючи запірну напругу, можна визначити максимальну швидкість і кінетичну енергію фотоелектронів.

Закономірності зовнішнього фотоефекту. Головні результати дослідження вольт-амперних характеристик фотоелементів за різних умов опромінювання якісно показані на рис. 1.3 і зводяться до наступного.

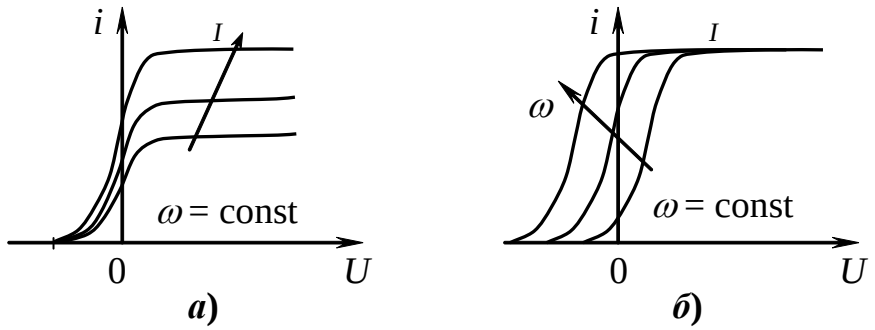


Рис. 1.3

При опроміненні катода світлом однієї частоти, але різної інтенсивності (рис. 1.3*а*), запірна напруга фотоелемента лишається незмінною, тоді як струм насичення змінюється прямо пропорційно інтенсивності світла, що падає на катод:

$$i_н \sim I. \qquad (1.4)$$

У цьому полягає закон Столєтова, на якому ґрунтується електронна фотометрія, тобто техніка вимірювання світлових потоків за допомогою фотоефекту.

Але з цих результатів з урахуванням виразів (1.2) і (1.3) випливають і дві важливі фізичні закономірності явища фотоефекту. А саме:

1. *Кількість електронів, які вириваються з металу за одну секунду (потік фотоелектронів), є прямо пропорційною інтенсивності опромінюючого світла*:

$$N \sim I. \qquad (1.4a)$$

2. *Кінетична енергія, з якою електрони виходять з металу при заданій частоті опромінюючого світла, не залежить від його інтенсивності.*

Запірна напруга фотоелемента залежить від частоти опромінюючого світла, як показують вольт-амперні характеристики рис. 1.3*б*, виміряні при

різних частотах і зведені для більшої наочності до однакової величини струму насичення. Залежність $U_з(\omega)$ виявляється лінійною (рис. 1.4), з чого випливає ще одна закономірність фотоефекту:

3. *Кінетична енергія, з якою електрони вилітають з металу, визначається тільки частотою опромінюючого світла і лінійно залежить від неї.*

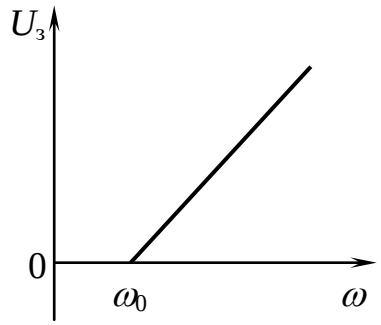


Рис. 1.4

Графік рис. 1.4 перетинає вісь абсцис у деякій точці $\omega_0 > 0$, що відповідає величині $U_з = 0$. При його продовженні далі ми потрапляємо в область позбавлених змісту значень $U_з < 0$, що означає неможливість фотоефекту. Дослід підтверджує такий висновок: при опроміненні фотоелемента світлом із частотою $\omega < \omega_0$ фотострум не з'являється ні за яких умов. Таким чином, існує певна порогова частота світла ω_0, при якій воно ще здатне виривати електрони. Дослідження показали, що величина ω_0 є індивідуальною для кожного металу. Сказане складає ще одну закономірність фотоефекту:

4. *Для кожного металу існує своя «червона межа» фотоефекту – найменша частота* ω_0 (*або найбільша довжина хвилі*[3] λ_0) *опромінюючого світла, при якій ще можливий фотоефект.*

Таким чином виривати електрони з металу може тільки світло, яке задовольняє умову:

$$\omega \geq \omega_0 \quad \text{або} \quad \lambda \leq \lambda_0. \qquad (1.5)$$

Варто зазначити, що для більшості металів червона межа фотоефекту відповідає ультрафіолетовій чи синьо-фіолетовій області спектра. Але

[3] Найбільшим довжинам хвилі видимого світла відповідає червоний колір. Саме з цим пов'язаний термін «червона межа» фотоефекту.

трапляються і випадки, коли червона межа лежить у червоній та навіть близькій інфрачервоній області.

Ще одна важлива властивість фотоефекту полягає в тому, що

5. *Фотоефект є безінерційним.*

На це вказує той факт, що струм у колі фотоелемента з'являється практично одночасно із початком опромінення катода світлом.

Квантова теорія фотоефекту. Рівняння Ейнштейна. Перед розглядом квантової теорії фотоефекту зауважимо, що й класична хвильова теорія не заперечує фотоефекту як такого і пояснює його виходом електронів з металу під дією електромагнітного поля світлової хвилі. Але теоретичні прогнози хвильової теорії щодо конкретних властивостей фотоефекту знаходяться в різкому протиріччі з експериментальними фактами.

Як приклад, проаналізуємо на основі хвильового механізму кінетичну енергію фотоелектронів і, відповідно, запірну напругу фотоелемента. В такій моделі з початком опромінення вільні електрони металу починають здійснювати вимушені коливання, амплітуда яких поступово зростає до величини прямо пропорційної амплітуді напруженості електричного поля світлової хвилі. Відповідно, кожен електрон отримує від світла енергію W*, яка прямо пропорційна квадрату амплітуди його вимушених коливань, отже, – квадрату амплітуди поля та інтенсивності світлової хвилі:*

$$W = \alpha I,$$

де α *– деякий коефіцієнт пропорційності. За рахунок цієї енергії електрон може вийти за межі металу. Але при цьому електрон має витратити певну енергію, що зветься роботою виходу A, на подолання сил, які утримують його всередині металу. Тому кінетична енергія електрона* E_k *на виході з металу мала би дорівнювати*

$$E_k = \alpha I - A.$$

З цього гіпотетичного виразу, який можна б назвати «класичним рівнянням» фотоефекту, випливають два логічно незаперечні, проте помилкові прогнози:

1) Кінетична енергія фотоелектронів і, відповідно до (1.3), запірна напруга фотоелемента мали би лінійно залежати від інтенсивності опромінюючого світла, в той час як насправді ці величини зовсім не залежать від інтенсивності світла.

2) Для кожного металу мала б існувати порогова інтенсивність $I_0 = (A/\alpha)$*, тобто найменша інтенсивність світлового пучка, при якій можливий вихід електронів із металу.*

В дійсності нічого подібного немає: за умови (1.5) світло вириває електрони при як завгодно малій інтенсивності. І навпаки, якщо $\omega < \omega_0$, то навіть при опроміненні потужним пучком жоден електрон не виходить з металу під дією світла.

Подібні суперечності виникають і при спробі пояснення всіх інших закономірностей фотоефекту на основі хвильових уявлень. Приміром, розрахунки показують, що в моделі вимушених коливань електрону навіть при інтенсивному опромінюванні для накопичення достатньої для виходу з металу енергії знадобився б значний час (декілька секунд). Але дослід незаперечно свідчить про безінерційність фотоефекту.

Правильне пояснення фотоефекту дав А. Ейнштейн. Згідно із запропонованим ним квантовим механізмом, електрон вилітає з металу за рахунок енергії ε, отриманої при *поглинанні кванта* опромінюючого світла. Частина цієї енергії витрачається електроном на роботу виходу з металу *A*, а решта складає його кінетичну енергією *K*. Отже,

$$\varepsilon = A + K. \tag{1.6}$$

При фотоефекті енергія квантів $\varepsilon = \hbar\omega$ складає порядку $(1-10)$ еВ, і фотоелектрони є нерелятивістськими. Тому вираз (1.6) можна розгорнуто переписати, як

$$\hbar\omega = A + \frac{mv^2}{2}. \tag{1.7}$$

Це рівняння називається *рівнянням Ейнштейна для фотоефекту*.

Одразу зробимо одне уточнення. Робота виходу *A* за означенням дорівнює найменшій необхідній для виходу електрона з металу енергії. Тому величина v в рівнянні (1.7) означає найбільшу можливу швидкість фотоелектронів. Таку швидкість мають електрони, що виходять з гранично тонкого поверхневого шару металу. Електрони, що поглинають світло в глибших шарах, на шляху до поверхні стикаються з іншими електронами та іонами металу, відтак втрачають деяку енергію ще на шляху до поверхні. Тому фотоелектрони виходять з металу з усіма можливими швидкостями від 0 до v.

Рівняння Ейнштейна, яке по суті є виразом закону збереження енергії для процесу взаємодії кванта світла з електроном металу, пояснює всі закономірності зовнішнього фотоефекту.

По-перше, з рівняння (1.7) безпосередньо випливає, що кінетична енергія фотоелектронів і, згідно з (1.3), запірна напруга фотоелемента лінійно залежать від частоти опромінюючого світла. По-друге, очевидно, що фотоефект можливий тільки за умови $\hbar\omega \geq A$, отже, існує найменша частота світла (червона межа), при якій воно ще здатне виривати електрони з металу. Ця частота дорівнює

$$\omega_0 = \frac{A}{\hbar}, \tag{1.8}$$

а довжина хвилі

$$\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar c}{A} = \frac{hc}{A}. \tag{1.8a}$$

Таким чином, рівняння (1.7) не тільки пояснює існування червоної межі фотоефекту, а й показує її природу.

Інші закономірності фотоефекту формально в рівнянні Ейнштейна не відображені, але вони випливають із самого квантового механізму, на якому ґрунтується рівняння (1.7).

Наприклад, безінерційність фотоефекту пояснюється тим, що при поглинанні кванта електрон отримує необхідну для виходу енергію одномоментно, а не накопичує її поступово, як мало би бути згідно з хвильовою теорією.

Так само природньо пояснюється в квантовій теорії пряма пропорційна залежність потоку фотоелектронів та струму насичення фотоелемента від інтенсивності опромінюючого світла (закон Столєтова). Згадаймо, що інтенсивність світла – то є енергія випромінювання, котра падає перпендикулярно на одиничну площадку за одиницю часу З квантової точки зору вона визначається, як

$$I = \frac{n_{кв}\varepsilon}{S}, \tag{1.9}$$

де S –площа поперечного перерізу світлового пучка, що падає на катод, ε – енергія кванта, і $n_{кв}$ – кількість квантів, які падають на катод за 1 с. Отже,

інтенсивність опромінюючого світла є прямо пропорційною кількості квантів, що падають на катод фотоелемента за одиницю часу.

Ясна річ, не кожен падаючий на катод світловий квант поглинається якимось вільним електроном, так само не кожен електрон, який поглинув квант, виходить з катода. Але очевидно, що існує визначена імовірність виходу електронів при опроміненні даного металу заданим світлом. Вона називається *квантовим виходом* фотоефекту η і визначається відношенням кількості фотоелектронів до кількості квантів, які падають на метал:

$$\eta = \frac{n_0}{n_{кв}}. \qquad (1.10)$$

Отже,

кількість фотоелектронів, які вилітають з катода, є прямо пропорційною кількості квантів, які падають на нього[4]*:*

$$n_0 = \eta n_{кв}. \qquad (1.10a)$$

Звідси, враховуючи вирази (1.9) і (1.2), отримуємо співвідношення (1.4*а*) і (1.4), які виражають закон Столєтова:

$$n_0 = \frac{\eta S}{\varepsilon} I \quad \Rightarrow \quad n_0 \sim I \ \text{ і } \ i_н \sim I.$$

1.3. Гальмівне рентгенівське випромінювання

Згідно з класичною електродинамікою Максвелла, заряджена частинка, що має прискорення, випускає електромагнітне випромінювання. Цим пояснюється так зване *гальмівне рентгенівське випромінювання*, що спостерігається при бомбардуванні металевої пластинки швидкими електронами. На практиці таке випромінювання отримують за допомогою рентгенівської трубки, яка схематично показаної на рис. 1.5*а*. На рис. 5*б* показані фотографії деяких промислових рентгенівських трубок.

[4] Хвильова теорія й тут дає зовсім інший прогноз. У хвильовому механізмі кожне вимушене коливання електрона потенційно є спробою його виходу з металу. Тому кількість електронів, які виходять з металу за 1 с, мала би бути прямо пропорційною частоті опромінюючого світла.

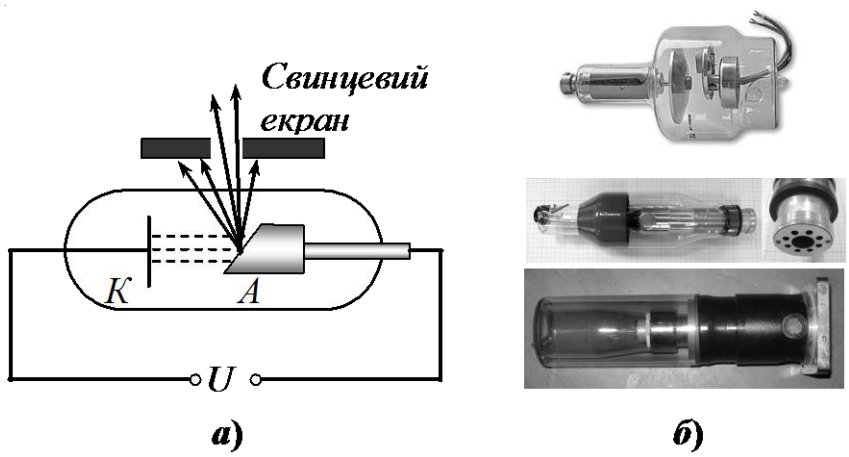


Рис. 1.5

Рентгенівська трубка по суті є потужним вакуумним діодом, на який подається висока напруга U в десятки й сотні тисяч вольт. Тому електрони, що емітуються розжареним катодом *К*, на шляху до анода отримують велику кінетичну енергію

$$K = eU.$$

При зіткненнях із анодом і різкому гальмуванні кінетична енергія електронного пучка майже повністю переходить у внутрішню енергію анода. Тому для запобігання сильному нагріванню і розплавленню анод в трубці примусово охолоджується. Але приблизно 1% кінетичної енергії електронів трансформується в електромагнітне випромінювання рентгенівського діапазону, так що для кожного зіткнення можна записати:

$$eU = W + Q, \qquad (1.11)$$

де W – енергія випромінювання, Q – енергія, що віддана ґратці анода.

Дослід показує, що розподіл енергії гальмівного випромінювання по частотах (спектр) є неперервним (рис. 1.6), але має короткохвильову межу ω_0, так що в спектрі присутнє лише випромінювання з частотами $\omega < \omega_0$. При цьому частота ω_0 не залежить від матеріалу анода трубки і є прямо пропорційною напрузі на ній:

$$\omega_0 = aU, \quad a = const.$$

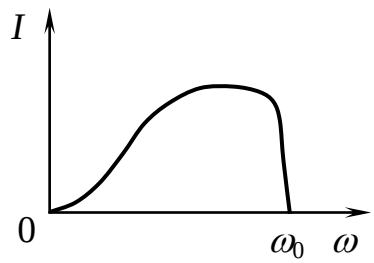


Рис. 1.6

Класична фізика не спроможна пояснити існування короткохвильової межі, бо класична електродинаміка Максвелла не накладає ніяких обмежень на частоту чи довжину хвилі гальмівного випромінювання зарядів. Але в квантовій теорії з цим не виникає жодних проблем. При зіткненні з анодом і гальмуванні електрона випромінюється квант енергії $\varepsilon = \hbar\omega$, отже енергетичний баланс (1.11) має вигляд:

$$eU = \hbar\omega + Q, \tag{1.12}$$

Енергія кванта не може бути більшою, ніж кінетична енергія електрона, за рахунок якої він утворюється:

$$\hbar\omega \le eU,$$

отже, гранична частота випромінювання складає

$$\omega_0 = \frac{e}{\hbar}U. \tag{1.13}$$

Відповідно, мінімальна довжина хвилі в гальмівному спектрі дорівнює

$$\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar c}{eU} = \frac{hc}{eU}. \tag{1.13a}$$

Таким чином, квантова теорія пояснює як саме існування короткохвильової межі в спектрі гальмівного випромінювання, так і її незалежність від матеріалу анода та прямий пропорційний зв’язок із напругою на трубці.

Спектральна крива рис. 1.6 при підході до межової частоти обривається дуже круто, тому в експерименті частоту ω_0 можна надійно виміряти і з великою точністю визначити величину $\hbar$:

$$\hbar = \frac{eU}{\omega_0}.$$

Такий метод є найточнішим з існуючих експериментальних методів визначення сталої Планка.

Наостанок слід сказати, що при підвищенні напруги на трубці на тлі суцільного гальмівного випромінювання починають з'являтися дуже вузькі смуги (спектральні лінії), частоти яких є індивідуальними для кожного хімічного елемента подібно до частот оптичного випромінювання атомів. Таке рентгенівське випромінювання, що називається *характеристичним*, пов'язане з особливостями внутрішньої будови атомів. Детальніше про це сказано в лекції 6.

1.4 Контрольні запитання

1. У чому полягає квантова гіпотеза Планка? Чим визначається енергія кванта?

1. Що таке фотоефект? Чому він відноситься до квантових явищ? Які ще квантові оптичні явища Ви знаєте?

2. Зобразіть вольт-амперну характеристику (ВАХ) вакуумного фотоелемента. Чим пояснюється насичення фотоструму та його наявність при зворотній напрузі на фотоелементі?

3. Що таке запірна напруга $U_з$? Чому при напрузі на фотоелементі $U > U_з$ фотострум не одразу приймає максимальне значення $I_н$, а змінюється поступово, в міру зростання напруги?

4. Як залежать параметри ВАХ фотоелемента ($I_н$, $U_з$) від частоти та інтенсивності опромінюючого світла?

5. Укажіть зв'язок між параметрами ВАХ фотоелемента ($I_н$, $U_з$) та фізичними характеристиками фотоелектронів.

6. Сформулюйте закономірності зовнішнього фотоефекту.

7. Покажіть, що властивості фотоефекту неможливо пояснити на основі хвильових уявлень про світло.

8. Поясніть квантовий механізм фотоефекту та запишіть рівняння Ейнштейна.

9. Поясніть на основі квантового механізму всі закономірності фотоефекту.

10. Запишіть рівняння Ейнштейна (1.7) :

– через запірну напругу фотоелемента $U_з$;

– через частоту опромінюючого світла ω (та ν) і червоної межі фотоефекту ω_0 (та ν_0);

– через довжину хвилі опромінюючого світла λ та червоної межі фотоефекту λ_0;

11. Зобразіть ВАХ фотоелемента при опроміненні його світлом червоної межі;

12. Поміркуйте, чи буде змінюватися струм насичення фотоелемента, якщо змінювати частоту опромінюючого світла при незмінній інтенсивності;

13. Згідно з рівнянням Ейнштейна (1.7) кінетична енергія фотоелектронів лінійно залежить від частоти опромінюючого світла. Чи означає це, що при збільшенні частоти світла вдвічі запірна напруга фотоелемента теж зросте в два рази?

14. Поясніть природу гальмівного рентгенівського випромінювання;

15. Покажіть на рисунку залежність інтенсивності гальмівного випромінювання від його частоти (і довжини хвилі) та напруги на рентгенівській трубці;

16. Чим пояснюється існування короткохвильової межі у гальмівному спектрі та від чого і як залежить її частота (і довжина хвилі)?

1.5. Задачі

Задача 1.1. Фотоелемент, на який подано пряму напругу 2,0 В, опромінюють світлом червоної межі фотоефекту. З якою швидкістю будуть потрапляти фотоелектрони на анод?

Розв'язування. Енергія кванта світла червоної межі дорівнює роботі виходу електрона з катода фотоелемента. Тож згідно з рівнянням Ейнштейна (1.7), початкова кінетична енергія фотоелектронів дорівнює нулю. Тому кінетична енергія, з якою вони потрапляють на анод, визначається тільки роботою прискорюючого поля із заданою напругою *U*. Отже,

$$\frac{mv^2}{2} = eU \quad \Rightarrow \quad v = \sqrt{\frac{2eU}{m}} = 8,4 \cdot 10^5 \text{ м/с}.$$

Задача 1.2. Який відсоток енергії фотона витрачається на роботу виходу електрона з металу, якщо червона межа фотоефекту складає 414 нм, а запірна напруга 2,0 В?

Розв'язування. Електрон вилітає з катода фотоелемента за рахунок енергії поглинутого кванта опромінюючого світла. При цьому частина енергії кванта йде на роботи виходу *A*, а решта реалізується у формі кінетичної енергії фотоелектрона, яка визначає запірну напругу: $K = eU$. Отже,

$$\varepsilon = A + eU.$$

Таким чином, частка енергії фотона, що йде на роботу виходу, складає

$$\eta = \frac{A}{A + eU} = \frac{1}{1 + \left(eU/A\right)}.$$

Робота виходу через довжину хвилі червоної межі фотоефекту виражається формулою (1.8*a*): $A = hc/\lambda_0$. Отже,

$$\eta = \frac{1}{1 + \left(eU\lambda_0/hc\right)} = 0,6 = 60\%.$$

Задача 1.3. Фотоелемент, на який подано зворотну напругу *U* = 2,0 В, опромінюють світлом із довжиною хвилі $\lambda = 400$ нм. З якою швидкістю будуть потрапляти фотоелектрони на анод, якщо робота виходу електронів з катоду *A* = 1,0 еВ?

Розв'язування. Рухаючись у гальмівному полі з напругою *U*, фотоелектрони на шляху до анода виконують роботу *eU* і потрапляють на нього з кінетичною енергією $K = K_0 - eU$, де початкова кінетична енергія визначається рівнянням (1.6): $K_0 = \varepsilon - A$. Отже, виразивши енергію кванта через довжину хвилі, отримаємо:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{hc}{\lambda} - A - eU \quad \Rightarrow \quad v = \sqrt{\frac{2}{m}\left(\frac{hc}{\lambda} - A - eU\right)} = 6,2 \cdot 10^5 \text{ м/с}.$$

Задача 1.4. Якщо на фотоелемент подати зворотню напругу *U* = 2,5 В, то фотоелектрони підлітають до анода зі швидкістю $v_1 = 1,5 \cdot 10^6$ м/с. З якою швидкістю v_2 вони будуть потрапляти на анод, якщо до фотоелемента прикласти таку саму пряму напругу?

Розв'язування. У першому випадку фотоелектрони на шляху до анода виконують роботу *A* = *eU* проти гальмівного поля, а в другому – прискорююче поле саме виконує таку саму роботу над фотоелектронами.

Тому за законом збереження енергії для кінетичних енергій фотоелектронів біля анода можна записати:

$$\begin{cases} K_1 = K_0 - eU \\ K_2 = K_0 + eU \end{cases} \Rightarrow \quad K_2 = K_1 + 2eU,$$

де $K_0 = \left(mv_1^2/2\right)$ – кінетична енергія фотоелектрона при вильоті з катода. Звідси отримуємо відповідь:

$$v_2 = \sqrt{v_1 + \frac{4eU}{m}} = 2 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

Задача 1.5. Фотоелемент опромінюють світлом з енергією фотонів $\varepsilon = 2{,}0$ еВ. Визначити роботу виходу електронів із катода *A*, якщо при збільшенні енергії фотонів у *k* = 2 рази затримуюча напруга фотоелемента зростає в *n* = 5 разів.

Розв'язування. Відповідь отримаємо, записавши для обох випадків рівняння Ейнштейна (1.7) з урахуванням формули (1.3) та умов задачі:

$$\begin{cases} \varepsilon = A + eU \\ k\varepsilon = A + neU \end{cases} \Rightarrow \quad A = \frac{k-n}{k-1} eU = 2{,}5 \text{ еВ}.$$

Задача 1.6. Знайти відношення кінетичних енергій фотоелектронів $\left(K_2/K_1\right)$ при опроміненні фотоелемента світлом спочатку з частотою $\nu_1 = 2\nu_0$ (ν_0 – червона межа), а потім – із удвічі більшою частотою.

Розв'язування. Відповідь отримаємо з рівнянь (1.6) для обох випадків, виразивши в них енергії кванта та роботу виходу через лінійну частоту червоної межі фотоефекту:

$$\begin{cases} 2h\nu_0 = h\nu_0 + K_1 \\ 4h\nu_0 = h\nu_0 + K_2 \end{cases} \Rightarrow \quad \frac{K_2}{K_1} = 3.$$

Зверніть увагу на те, що відношення кінетичних енергій вийшло більшим, ніж відношення частот опромінюючого світла. Це пояснюється тим, що кінетична енергія фотоелектрона залежить від частоти опромінюючого світла хоч і лінійно, та не прямо пропорційно. Тому в другому випадку на роботу виходу витрачається менша частка енергії поглинутого кванта.

Задача 1.7. При почерговому опроміненні металу світлом спочатку із заданою довжиною хвилі λ, а потім – $n\lambda$, виявили, що швидкості фотоелектронів теж відрізняються в n разів. Визначити червону межу λ_0 фотоефекту для цього металу.

Розв'язування. Ця задача за логічною схемою подібна до попередніх. Тому для її розв'язання слід скласти рівняння фотоефекту (1.7) для кожного випадку опромінювання, виразивши в ньому енергію кванта та роботу виходу через довжину хвилі червоної межі. При цьому слід взяти до уваги, що при збільшенні довжини хвилі опромінюючого світла кінетична енергія і швидкість фотоелектронів зменшуються:

$$\begin{cases} \dfrac{hc}{\lambda} = \dfrac{hc}{\lambda_0} + \dfrac{mv^2}{2}; \\ \dfrac{hc}{n\lambda} = \dfrac{hc}{\lambda_0} + \dfrac{mv^2}{2n^2}; \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \dfrac{hc}{\lambda} - \dfrac{hc}{\lambda_0} = \dfrac{mv^2}{2}; \\ \dfrac{hc}{n\lambda} - \dfrac{hc}{\lambda_0} = \dfrac{mv^2}{2n^2}. \end{cases}$$

Для розв'язання системи почленно поділимо рівняння. Тоді після елементарних спрощень отримаємо:

$$\frac{\lambda_0 - \lambda}{\lambda_0 - n\lambda} = n \quad \Rightarrow \quad (n-1)\lambda_0 = (n^2 - 1)\lambda \quad \Rightarrow \quad \lambda_0 = (n+1)\lambda.$$

Задача 1.8. Ультрафіолетове світло із довжиною хвилі 300 нм падає на фотоелемент, який працює в режимі насичення. Чутливість фотоелемента дорівнює $j = 4{,}8\ \text{мА/Вт}$. Визначити квантовий вихід фотоефекту $\eta\,\%$, тобто кількість фотоелектронів, яка припадає на кожні 100 падаючих квантів.

Розв'язування. Чутливість фотоелемента дорівнює відношенню струму насичення до потужності світлового потоку, що падає на катод: $j = I_{\text{н}}/\Phi$. При цьому $I_{\text{н}} = ne$, а $\Phi = \varepsilon n_{\text{кв}}$, де e – елементарний заряд, ε – енергія кванта, а n і $n_{\text{кв}}$ – кількість вирваних за 1 с електронів і падаючих за цей час квантів, відповідно. Отже,

$$j = \frac{en}{\varepsilon n_{\text{кв}}} = \frac{e}{\varepsilon}\eta.$$

Звідси, виразивши енергію кванта за формулою (1.16), отримаємо відповідь:

$$\eta = \frac{\varepsilon j}{e} = \frac{hcj}{e\lambda} = 2\%.$$

Задача 1.9. На поверхню літію (A = 2,39 еВ) падає світловий пучок, в якому напруженість електричного поля змінюється за законом $E(t) = E_0(1+\cos\omega t)\cos\omega_0 t$, де $\omega = 6,0\cdot 10^{14}\ 1/\text{с}$, і $\omega_0 = 3,6\cdot 10^{15}\ 1/\text{с}$. Чи буде при цьому спостерігатися фотоефект і, коли так, то якою буде максимальна швидкість фотоелектронів?

Розв'язування. Аби з'ясувати, чи буде спостерігатися фотоефект, треба порівняти частоту квантів заданого світла з червоною межею фотоефекту – найменшою частотою $\omega_{\min}$ світла спроможного виривати електрони з металу. Ця частота визначається через роботу виходу формулою (1.8) і для літію складає:

$$\omega_{\min} = \frac{\grave{A}}{\hbar} = 3,64\cdot 10^{15}\ \text{ðàä/ñ}.$$

Отримана величина $\omega_{\min}$ більша як за ω, так і за ω_0, і можна подумати, що фотоефекту не буде. Але указані частоти характеризують не окремі кванти, а електромагнітне поле світлового пучка в цілому. Тому наявність у виразі $E(t)$ двох частот указує, що пучок не є монохроматичним і складається з квантів різних «сортів». Аби визначити їхні частоти, треба задане поле подати як суперпозицію монохроматичних полів, кожне з яких створюється квантами одного сорту. Це можна зробити, розкривши дужки у виразі $E(t)$ і використавши відому формулу тригонометрії:

$$E(t) = E_0\cos\omega_0 t + \frac{1}{2}E_0\cos(\omega_0-\omega)t + \frac{1}{2}E_0\cos(\omega_0+\omega)t.$$

Звідси зрозуміло, що в пучку присутні кванти з трьома різними частотами, причому кванти з частотою ω_0 і $\omega' = \omega_0 - \omega$ не можуть виривати електрони, а кванти з частотою $\omega'' = \omega_0 + \omega = 4,2\cdot 10^{15}$ рад/с спроможні це робити. Отже, фотоефект буде спостерігатись, і швидкість фотоелектронів визначиться з рівняння Ейнштейна:

$$\hbar\omega'' = A + \frac{mv^2}{2} \quad\Rightarrow\quad v = \sqrt{\frac{2}{m}(\hbar\omega'' - A)} = 3,6\cdot 10^5\ \text{м/с}.$$

Задача 1.10. На скільки η % треба змінити напругу на рентгенівській трубці, щоби найменша довжина хвилі у спектрі гальмівного випромінювання зменшилася на $\sigma = 20$ %?

Розв'язування. Величина η є відносною зміною напруги трубки, що

відповідає заданій відносній зміні ε довжини хвилі короткохвильової межі гальмівного спектра, тобто:

$$\eta = \frac{U_2 - U_1}{U_1} = \frac{U_2}{U_1} - 1; \quad \varepsilon = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1} = 1 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1}. \qquad (1)$$

У рентгенівській трубці величини U і λ пов'язані обернено пропорційною залежністю (1.13*а*): $(U_2/U_1) = (\lambda_1/\lambda_2)$. Тому виразивши в (1) відношення довжин хвилі через ε і замінивши ним відношення напруг, знайдемо відповідь:

$$\eta = \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} = 0,25.$$

Отже, напругу треба збільшити на 25 %.

Задача 1.11. При збільшенні напруги на рентгенівській трубці в $\eta = 1,5$ рази довжина хвилі короткохвильової межі суцільного рентгенівського спектра змінилася на $\Delta\lambda = 26\,\text{пм}$. Визначити початкову напругу на рентгенівській трубці.

Розв'язування. Уведемо позначення для початкової напруги U та довжини хвилі короткохвильової межі λ. Тоді, згідно із формулою (1.13*а*) і умовою задачі, можемо записати:

$$\begin{cases} \lambda = \dfrac{hc}{eU} \\ \lambda - \Delta\lambda = \dfrac{hc}{e\eta U} \end{cases} \Rightarrow \quad \Delta\lambda = \frac{hc}{eU}\left(1 - \frac{1}{\eta}\right) \quad \Rightarrow \quad U = \frac{\eta - 1}{\eta} \cdot \frac{hc}{e\lambda} = 16\,\text{кВ}.$$

Задача 1.12. Визначити короткохвильову межу λ_0 гальмівного випромінювання рентгенівської трубки, якщо електрони налітають на анод із швидкістю $v = 0,85c$, де c – гранична швидкість.

Розв'язування. Позаяк енергія квантів короткохвильової межі дорівнює кінетичній енергії електронів, які налітають на анод трубки, то:

$$\frac{hc}{\lambda_0} = K \quad \Rightarrow \quad \lambda_0 = \frac{hc}{K}. \qquad (1)$$

За умовою електрони є релятивістськими, тому їхня кінетична енергія визначається відповідною формулою релятивістської механіки:

$$K = (\gamma - 1)mc^2, \text{ де } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-(v/c)^2}}.$$

У цій формулі m – власна маса (маса спокою) електрона.
Підставивши це значення K у вираз (1), отримаємо відповідь:

$$\lambda_0 = \frac{h}{(\gamma - 1)mc} = 2,7 \text{ пм}.$$

Лекція 2. ФОТОНИ

2.1. Властивості фотонів

Енергія та імпульс фотона. Результати експериментального Дослідження залежності запірної напруги від частоти світла (Лекція 1, п. 1.1, рис. 1.4) для фотоелементів з катодами із різних металів, указують на те, що при фотоефекті електрон поглинає всю енергію кванта світла, що випускається джерелом. А це означає, що енергія кванта при випромінюванні джерелом, поширенні до катода та поглинанні електроном лишається зосередженою в мікроскопічній області простору. Тобто,

> *світлові кванти є специфічними мікроскопічними частинками – носіями електромагнітної енергії*.

Уявлення про те, що випромінювання переноситься частинками, ввів Ейнштейн. Пізніше ці частинки по аналогії з носіями електрики – електронами назвали *фотонами*. Таким чином, світло являє собою сукупність не просто дискретних порцій хвильової електромагнітної енергії, а потік елементарних частинок – фотонів.

Фотон, як будь-яка частинка, характеризується визначеною енергією та імпульсом. Але він є дуже специфічними об’єктом не схожим на звичну частинку.

Перш за все, енергія фотона визначається не швидкістю руху, а частотою випромінювання, відповідно до формули Планка:

$$\varepsilon = \hbar\omega, \tag{2.1}$$

або

$$\varepsilon = h\nu. \tag{2.1а}$$

Енергію фотона можна обчислити й через довжину світлової хвилі у вакуумі за формулою:

$$\varepsilon = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda}. \tag{2.1б}$$

Окрім того фотон не має власної маси (маси спокою m_0). До такого висновку приводить формула енергії релятивістської частинки

$$\varepsilon = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \qquad (2.2)$$

та той факт, що швидкість світла у вакуумі, тож і швидкість фотонів, $v = c$. За такої умови формула (2.2) не втрачає зміст тільки при $m_0 = 0$. Отже, фотон є *безмасовою частинкою.*

Імпульс фотона як безмасової частинки, згідно з теорією відносності, визначається тільки його енергією:

$$p = \frac{\varepsilon}{c}. \qquad (2.3)$$

Відповідно до виразів (2.1), (1.2*а*) та (2.1*б*), його можна обчислювати за формулами:

$$p = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{h\nu}{c}, \qquad (2.4)$$

або

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}. \qquad (2.5)$$

Але в теорії імпульс фотона найчастіше виражають через хвильовий вектор випромінювання, носієм якого він є:

$$p = \hbar k \quad \Rightarrow \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}. \qquad (2.6)$$

Таким чином, енергія та імпульс «частинки світла» – фотона визначаються спектральним складом випромінювання, а не швидкістю та масою, як для вільної частинки речовини, приміром, для електрона.

Дослід Боте. Існування фотонів було доведено і прямими дослідами. Одним із таких є дослід Боте, схема котрого наведена на рис. 2.1.

На тонку металеву пластинку (фольгу) *Ф* в торець спрямовувався вузький пучок рентгенівського випромінювання, через що вона сама починала випускати рентгенівські промені[5]. По обидва боки від фольги на однаковій відстані розміщувалися лічильники – прилади, при потраплянні в

[5] Це явище називається рентгенівською люмінесценцією.

які радіації на виході створюється електричний сигнал. Для реєстрації випромінювання лічильники приєднувалися до записуючих пристроїв *ЗП*, які робили відмітки на рухомій стрічці.

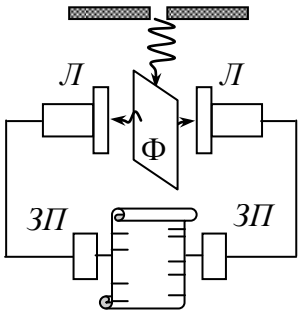


Рис. 2.1

Згідно з гіпотезою Планка світло випромінюється дискретними порціями-квантами, але через велику щільність потоку в пучку воно за звичайних умов сприймається як неперервне. Тому в досліді фольга опромінювалася дуже слабким пучком, й інтенсивність випромінювання, що потрапляло в лічильники, була дуже малою. За таких умов кількість квантів, які потрапляли в лічильники кожної миті теж була малою. Тому від лічильників на записуючі пристрої приходили поодинокі імпульси напруги, котрі чітко реєструвалися на стрічці.

Можливі результати такого досліду легко передбачити апріорі. Якби кванти були просто порціями хвильової енергії (короткими хвильовими імпульсами), то лічильники мали би спрацьовувати одночасно, позаяк хвильове збудження поширюється від джерела по всіх напрямках. У такому разі мітки на стрічці були би строго синхронними. Але насправді лічильники в досліді спрацьовували не узгоджено, і мітки на стрічці не співпадали в часі, за винятком поодиноких випадкових подій. Отже, в кожному випадку фольга випромінює або в один, або в інший бік. А це незаперечно свідчить про те, що випромінювання випускається і поширюється у вигляді частинок – фотонів.

Розсіювання фотонів. Із виразу (2.2) випливає ще одна незвична властивість фотона: при будь-якій швидкості $v \neq c$ виходить $\varepsilon = 0$. Це означає, що рух із граничною швидкістю $c = 3 \cdot 10^8$ м/с – це єдиний стан, в якому може існувати фотон. Тому зіткнення фотонів з іншими частинками (розсіювання) теж є дуже специфічним. Для звичайної кульки відносна зміна швидкості при зіткненні з іншим тілом залежить від співвідношення мас і може бути різною. Тільки в граничному випадку зіткнення із нерухомим

тілом нескінченної маси (стіною) кулька може або повністю втратити швидкість при абсолютно непружному ударі, або відскочити без зміни швидкості, якщо удар абсолютно пружний. А ось фотон так поводиться так завжди, тобто

для фотона при зустрічі з будь-якою частинкою є тільки дві можливості – або непружно зіткнутись і зникнути (поглинутись), або відбитися без зміни швидкості.

Яким саме буде зіткнення залежить від величини енергії та імпульсу фотона і від будови та внутрішніх властивостей частинки, з якою він стикається. При цьому виявляється, що при зіткненні з вільними елементарними частинками фотони за будь-яких умов не можуть поглинатися, бо такий процес є несумісним із законами збереження енергії та імпульсу. Аби в цьому переконатися, розглянемо гіпотетичне непружне зіткнення (поглинання) фотона з енергією ε і імпульсом $\vec{p}$ із вільним нерухомим електроном з енергією спокою[6] E_0. При поглинанні фотона електрон має перебрати на себе всю його енергію та імпульс. Відтак енергія E та імпульс $\vec{p}_e$ електрона після зіткнення повинні дорівнювати:

$$\begin{cases} E = \varepsilon + E_0, \\ p_e = p. \end{cases} \qquad (2.7)$$

Звідси, врахувавши вирази енергії фотона $\varepsilon = pc$ і електрона $E = \sqrt{\left(p_e c\right)^2 + E_0^2}$, після підстановок дістанемо:

$$\varepsilon + E_0 = \sqrt{\varepsilon^2 + E_0^2} \quad \Rightarrow \quad \left(\varepsilon + E_0\right)^2 = \varepsilon^2 + E_0^2.$$

Отримана рівність є очевидно неможливою, що свідчить про несумісність рівнянь (2.7). Це означає, що в розглянутому гіпотетичному процесі поглинання фотона електроном не можливе одночасне збереження енергії та імпульсу, отже, не можливий і сам такий процес. Складається так, що вільний електрон просто не здатен перебрати на себе всю енергію та імпульс фотона.

У такому разі постає питання, чому, попри сказане, при фотоефекті вільні електрони металу таки поглинають фотони. Відповідь у тому, що в металі електрони є вільними умовно, лише в сенсі спроможності рухатися по

[6] Оскільки фотон є ультрарелятивістською частинкою, розсіювання фотонів треба розглядати на основі релятивістської механіки.

всьому об'єму зразка і створювати електричний струм. Але через взаємодію з іонами ґратки вони насправді є зв'язаними з металом, і мірою цього зв'язку є робота виходу електрона. За таких умов поглинання фотона стає можливим, оскільки «зайві» енергія та імпульс передаються всьому металу, збільшуючи його внутрішню енергію. Так само можливе поглинання фотона електроном атома діелектрика, за умови, що енергія фотона достатня для переведення атома у збуджений стан, тобто для зміни його внутрішньої енергії.

2.2. Тиск світла

Як було доведено в електромагнітній теорії Максвелла і підтверджено експериментально в дослідах Лебедєва, світло створює тиск на тіла, на які падає. У фотонній теорії тиск світла пояснюється зіткненнями фотонів із поверхнею тіла, що опромінюється, подібно до того, як тиск газу в посудині є наслідком зіткнень його молекул із стінками посудини.

Розрахуємо тиск світла на поверхню із коефіцієнтом відбивання ρ.

Зіткнення частинок із стінкою. При зіткненні частинки з нерухомою

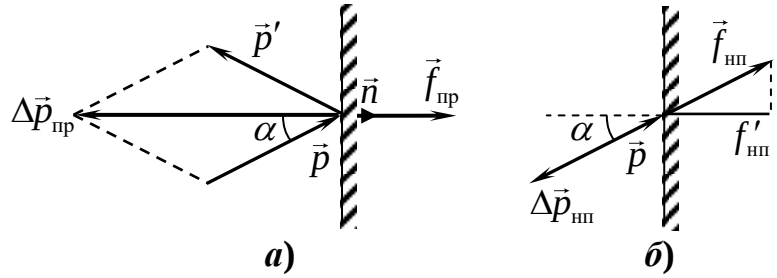


Рис. 2.2

поверхнею (стінкою) між ними виникає сила взаємодії $f = |\Delta\vec{p}|/\Delta t$, де $|\Delta\vec{p}|$ – модуль зміни вектора імпульсу частинки за час взаємодії Δt. Тож можна сказати, що при зіткненні на стінку діє середня сила рівна імпульсу, що передається стінці за одиницю часу. При цьому величина переданого імпульсу, окрім іншого, залежить від характеру зіткнення. У випадку пружного зіткнення частинка симетрично відбивається без зміни модуля імпульсу ($\Delta p = p' - p = 0$), як показано на рис. 2.2*а*. Але вектор імпульсу змінюється, і, як видно з рисунка, модуль його зміни складає:

$$|\Delta\vec{p}|_{пр} = |\vec{p}' - \vec{p}| = 2p\cos\alpha,$$

де α – кут падіння частинки на стінку. При непружному зіткненні $\vec{p}' = 0$ (рис.2.2*б*), і

$$\Delta\vec{p}_{\text{нп}} = -\vec{p} \quad \Rightarrow \quad \left|\Delta\vec{p}\right|_{\text{нп}} = p.$$

Відповідно, в кожному випадку під час зіткнення на стінку діє різна за величиною сила. При пружному зіткненні вона рівна $f_{\text{п}} = \left(2p/\Delta t\right)\cos\alpha$ і напрямлена по нормалі до стінки, а при непружному діє сила $f_{\text{нп}} = \left(p/\Delta t\right)$, яка напрямлена під кутом α до нормалі. Але тиск створює лишень її нормальна складова $f' = f\cos\alpha$. Отже при зіткненнях із стінкою частинки створюють короткочасні мікроскопічні сили тиску

$$f_{\text{пр}} = \frac{2p}{\Delta t}\cos\alpha, \quad \text{або} \quad f'_{\text{нп}} = \frac{p}{\Delta t}\cos\alpha, \tag{2.8}$$

залежно від характеру зіткнення.

Тиск світла. Зазвичай щільність фотонів у пучку є дуже високою, тому вони вдаряють у стінку так часто та близько один від одного, що створюють не окремі мікроскопічні «уколи», а постійну силу тиску F рівномірно розподілену по поверхні стінки. Для підрахунку цієї сили припустимо, що на ділянку стінки з коефіцієнтом відбивання ρ і площею S за час Δt падає ΔN фотонів. Частина з них $\Delta N_{\text{пр}} = \rho\Delta N$ стикається зі стінкою пружно (відбивається), а решта $\Delta N_{\text{нп}} = \Delta N - \Delta N_{\text{пр}} = \left(1-\rho\right)\Delta N$ – непружно (поглинається). Тому, відповідно до виразів (2.8), сумарна сила тиску $F = \Delta N_{\text{пр}} f_{\text{пр}} + \Delta N_{\text{нп}} f'_{\text{нп}}$ визначається, як

$$F = \frac{n\varepsilon}{c}\left(1+\rho\right)\cos\alpha, \tag{2.9}$$

де $n = \left(\Delta N/\Delta t\right)$ – потік фотонів, тобто кількість фотонів, які падають на вибрану ділянку стінки за одиницю часу, і ε – енергія одного фотона. Поділивши цей вираз на площу S виділеної ділянки стінки, отримаємо тиск світла:

$$P = \frac{\Phi}{cS}\left(1+\rho\right)\cos\alpha,$$

де $\Phi = n\varepsilon$ – потік світлової енергії, тобто, енергія, що падає на поверхню S за одиницю часу. Величину Φ можна виразити через інтенсивність світла $I = \left(\Phi/S_{\perp}\right)$, яка за означенням дорівнює потоку енергії, що переноситься через одиницю площі поперечного перерізу пучка. Отже, зробивши у виразі

тиску заміну $\Phi = IS_{\perp}$ і врахувавши, що $(S_{\perp}/S) = \cos\alpha$ (див. рис. 2.3), отримаємо остаточно:

$$P = \frac{IS_{\perp}}{cS}(1+\rho)\cos\alpha \quad \Rightarrow \quad P = \frac{I}{c}(1+\rho)\cos^2\alpha. \qquad (2.10)$$

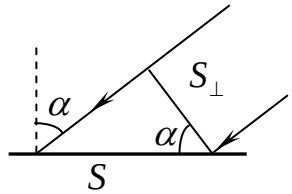


Рис. 2.3

Для крайніх випадків ідеально дзеркальної $(\rho = 1)$ та абсолютно чорної $(\rho = 0)$ поверхні виходить, відповідно:

$$P_{\text{дз}} = \frac{2I}{c}\cos^2\alpha \qquad \text{і} \qquad P_{\text{ч}} = \frac{I}{c}\cos^2\alpha. \qquad (2.10a)$$

А при нормальному падінні світла $(\alpha = 0)$:

$$P = (1+\rho)\frac{I}{c}, \quad P_{\text{дз}} = \frac{2I}{c} \qquad \text{і} \qquad P_{\text{ч}} = \frac{I}{c}. \qquad (2.10б)$$

Слід зазначити, що при звичайних інтенсивностях світла тиск є дуже малим. Приміром, тиск сонячного випромінювання на земній орбіті складає всього $5 \cdot 10^{-6}$ Па. Проте, російський фізик Лебедєв ще на початку XX сторіччя, подолавши низку складних технічних проблем, зміг виміряти тиск світла в лабораторних умовах.

Попри малість, тиск світла спричинює видимі ефекти. Зокрема, тиск світла разом із сонячним вітром[7] є причиною відхилення хвостів комет при проходженні повз Сонце в протилежний від нього бік. На тиску світла ґрунтуються інженерні проекти «сонячного паруса» як засобу приведення в рух космічних пристроїв.

2.3. Ефект Комптона

Яскравим доказом фотонної структури електромагнітного випромінювання є ефект Комптона – квантове явище, яке відкрив і

[7] Так називають потоки різних частинок, які випромінюються Сонцем разом з фотонами.

теоретично пояснив американський фізик А. Комптон і яке полягає в зміні довжини хвилі рентгенівського випромінювання при його розсіюванні на електронах.

Експеримент. Схема досліду Комптона показана на рис. 2.3. Вузький пучок рентгенівських променів із заданою довжиною хвилі, який формується двома малими отворами (діафрагмами), падає на тонку пластинку досліджуваної речовини (мішень) *М*. Спектральний склад розсіяного випромінювання досліджується за допомогою рентгенівського спектрографа, який працює на принципі рентгенівської дифракції і складається з кристала *Кр* і детектора *Д*. Спектрограф дозволяє вимірювати розподіл інтенсивності в розсіяному пучку по довжинах хвилі $I(\lambda)$ при будь-якому заданому куті розсіювання ϑ

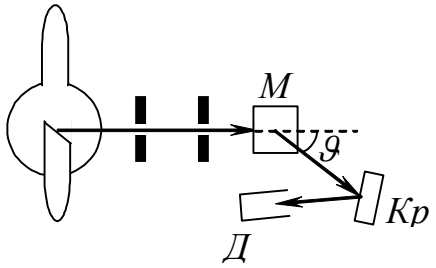


Рис. 2.4

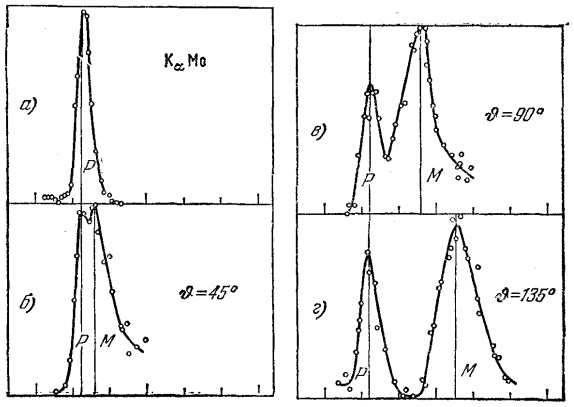


Рис. 2.5

На рис. 2.5 показані результати такого досліду на графіті з використанням K_α-лінії характеристичного рентгенівського випромінювання молібдену. Крива *а*) знята при куті $\vartheta = 0°$ і показує довжину хвилі λ випромінювання, що падає на мішень. Криві *б*) – *г*) відповідають розсіюванню під указаними кутами ϑ.

Із наведених кривих видно, що в розсіяному пучку з'являється випромінювання із зміщеною довжиною хвилі $\lambda' > \lambda$ і тим більшою, чим більший кут розсіювання ϑ. Аналіз таких вимірів при різних кутах розсіювання і на різних мішенях показав, що зміна довжини хвилі – *комптонівський зсув* – $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ не залежить від речовини мішені й визначається тільки кутом розсіювання, згідно з формулою:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c\left(1-\cos\vartheta\right) = 2\lambda_c \sin^2\frac{\vartheta}{2}, \qquad (2.11)$$

де λ_c = 2,43·10^{-12} м = 2,43·пм – універсальна константа, що називається *комптонівською довжиною хвилі електрона*.

Теорія. Насамперед звернімо увагу на те, що на основі хвильових уявлень про випромінювання пояснити ефект Комптона неможливо. Адже в класичній теорії причиною розсіювання є вимушені коливання електронів в речовині під дією електромагнітного поля падаючого випромінювання і зумовлене цим вторинне розсіяне випромінювання. Частота вимушених коливань співпадає з частотою падаючої хвилі, тож частота та довжина хвилі падаючого і розсіяного випромінювання не повинні відрізнятися.

Але в квантовій теорії ефект Комптона легко пояснюється. В рамках фотонної концепції розсіювання випромінювання відбувається внаслідок зіткнень одних частинок – фотонів – з іншими частинками – електронами атомів речовини мішені. У випадку рентгенівського випромінювання енергія фотонів складає ($\left(10^4 - 10^5\right)$ еВ, у той час як енергія зв'язку з ядром для валентних електронів не перевищує 25 еВ. Отже, валентні електрони в будь-якій речовині для рентгенівських фотонів є практично вільними елементарними частинками. Тому при зіткненні рентгенівського фотона з валентним електроном поглинання є неможливим, (див. Лекція 1, п. 1.3). Відбуваються тільки пружні зіткнення, при яких фотон передає частину своєї енергії та імпульсу електрону. Відтак енергія розсіяного фотона стає меншою, а довжина хвилі – більшою, ніж у падаючого. Саме в цьому й полягає ефект Комптона.

Зіткнення між частинками підпорядковані законам збереження енергії та імпульсу. Це дозволяє розрахувати величину зміну довжини хвилі випромінювання внаслідок указаного пружного розсіяння на валентних електронах мішені.

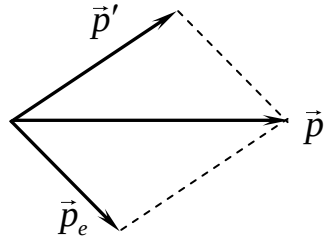


Рис. 2.6

Нехай фотон з енергією ε та імпульсом $\vec{p}$ налітає на нерухомий[8] валентний електрон мішені, який має імпульс $p = 0$ і енергію спокою $E_0 = mc^2$. Після зіткнення фотон відлітає (розсіюється) під деяким кутом ϑ з новими значеннями енергії ε' та імпульсу $\vec{p}'$ (рис. 2.6), а електрон відлітає в інший бік з деяким імпульсом $\vec{p}_e$ та повною енергією $E = \sqrt{p^2{}_e c^2 + m^2 c^4}$.

За законом збереження імпульсу та енергії можна записати:

$$\begin{cases} \vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}_e, \\ \varepsilon + mc^2 = \varepsilon' + \sqrt{\left(p_e c\right)^2 + m^2 c^4}, \end{cases} \tag{2.12}$$

і, виключивши з неї імпульс електрона, знайти імпульс розсіяного фотона p', а отже й довжину хвилі розсіяного випромінювання λ'. Для цього перегрупуємо рівняння (2.12) і піднесемо їх до квадрата:

$$\begin{cases} \left(\vec{p} - \vec{p}'\right)^2 = p_e^2, \\ \left(\varepsilon - \varepsilon' + mc^2\right)^2 = \left(p_e c\right)^2 + m^2 c^4; \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} p^2 + p'^2 - 2pp'\cos\vartheta = p_e^2, \\ \left(\varepsilon - \varepsilon'\right)^2 + 2\left(\varepsilon - \varepsilon'\right)mc^2 = p_e^2 c^2. \end{cases}$$

Далі в другому рівнянні отриманої систем зробимо заміни $\varepsilon = pc$ і $\varepsilon' = p'c$, поділимо його на c^2, після чого прирівняємо ліві частини рівнянь системи і після спрощень отримаємо:

$$mc\left(p - p'\right) = pp'\left(1 - \cos\vartheta\right). \tag{2.13}$$

Імпульс фотона пов'язаний з довжиною хвилі формулою (2.5): $p = h/\lambda$. Відтак з (2.13) отримуємо вираз

$$mc\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) = \frac{\left(1 - \cos\vartheta\right)}{\lambda\lambda'},$$

з якого випливає формула комптонівського зсуву (2.11), в якій

$$\lambda_c = \frac{h}{mc} = \frac{2\pi\hbar}{mc}. \tag{2.14}$$

Підстановка констант дає величину $\lambda_c = 2{,}43 \cdot 10^{-12}$ м $= 2{,}43$ пм, яка співпадає із значенням комптонівської довжини хвилі електрона, знайденим в

[8] Так можна вважати, бо швидкість руху електронів у атомах $v << c$.

експерименті.

Унаслідок зіткнення з рентгенівським фотонами, електрони отримують значну енергію та імпульс і вилітають із мішені. Такі електрони називаються електронами віддачі. Їхню енергію та величину і напрям імпульсу при кожному значенні кута розсіяння також можна теоретично визначити з рівнянь (2.12) та порівняти з результатами відповідних вимірів. Проведені спеціальні експериментальні дослідження і в цьому відношенні повністю підтвердили правильність розглянутої фотонної теорії ефекту Комптона.

Зміна довжини хвилі, в принципі, має відбуватися при пружному розсіюванні будь-яких фотонів на будь-яких вільних частинках. Але, як відомо, для світла ефект Комптона не спостерігається. Причина полягає в малій величині комптонівського зсуву: згідно з (2.11), його максимальна величина (при $\vartheta = 180°$) становить всього $\Delta\lambda_m = 2\lambda_c \approx 5 \cdot 10^{-12}$ì . Для рентгенівських променів ця величина складає порядку (0,5 – 5,0) % від довжини хвилі, тому комптонівський зсув можна зареєструвати і виміряти. А ось для світла ($\lambda \sim 10^{-7}$ м) величина Δ_m становить всього ~ 0,001 %, що знаходиться за межами можливостей оптичних спектрометрів.

При розгляді результатів дослідів Комптона (рис. 2.5) може виникнути ще одне дражливе запитання: чому в спектрі *розсіяного* випромінювання спостерігається й компонента з не зміщеною довжиною хвилі? Відповідь така. Фотони можуть стикатися і пружно розсіюватися не лише на зовнішніх практично вільних електронах, а й на електронах внутрішніх оболонок атомів мішені. Позаяк такі електрони дуже сильно зв'язані з ядром, розсіяний фотон відбивається від усього атома – частинки, маса якої в $\sim\left(10^4 - 10^5\right)$ разів більша, ніж маса електрона. За таких умов комптонівська довжина хвилі (2.14) є меншою за розміри атомного ядра, і говорити про ефект Комптона немає сенсу.

Квантова теорія ефекту Комптона так вичерпно і переконливо пояснила механізм і всі властивості явища, що після її створення існування фотонів було визнане як незаперечний факт.

2.4. Контрольні запитання

1. Які факти свідчать про те, що світло являє собою не просто послідовність дискретних порцій електромагнітної (хвильової) енергії, а потік частинок – фотонів.

2. Згідно з формулою (2.1*б*), енергію фотона можна визначити через довжину хвилі випромінювання. Чи означає це, що, позаяк довжина хвилі при переході світла з вакууму в речовину зменшується, то енергія фотона збільшується?
3. Звідки випливає, що фотон є безмасовою частинкою?
4. Чи може змінюватися величина швидкості фотона?
5. Чим відрізняються зіткнення фотонів із іншими частинками від зіткнень між частинками речовини, наприклад, між атомами
6. Як квантова теорія пояснює існування тиску світла? Від чого він залежить? На яку поверхню світло тисне сильніше – на дзеркальну, чи вкриту сажею?
7. У чому полягає ефект Комптона та якою формулою він виражається? Чому дорівнює максимальний можливий комптонівський зсув довжини хвилі в розсіяному пучку?
8. Якою є причина збільшення довжини хвилі при розсіюванні рентгенівських променів?
9. Поясніть, чому з точки зору класичної фізики ефект Комптона є неможливим.
10. Поясніть, чому в розсіяному рентгенівському пучку є й випромінювання з незміщеною довжиною хвилі.
11. Поясніть, чому ефект Комптона не спостерігається для світла.
12. Відомо, що в ефекті Комптона із збільшенням маси атома речовини мішені інтенсивність зміщеної компоненти у розсіяному пучку зменшується, а незміщеної – зростає. Поміркуйте, з чим це може бути пов’язано.

2.5. Задачі

Задача 2.1. У пучку монохроматичного світла енергія фотона складає $\varepsilon = 2,76\,\text{еВ}$. Визначити довжину хвилі цього світла у склі з показником заломлення n = 1,5.

Розв’язування. Енергія фотона однозначно визначається формулою Планка (1.1) чи (1.1*а*) через частоту випромінювання, або через його довжину

хвилі у вакуумі формулою 1.1*б*. Отже, довжина хвилі даного світла у вакуумі складає $\lambda_0 = (hc/\varepsilon)$, а в склі

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{n} = \frac{hc}{n\varepsilon} = 300 \text{ нм}.$$

Задача 2.2. На якій довжині хвилі працює імпульсний рубіновий лазер, якщо тривалість імпульсу $\tau = 4$ мс, його потужність P = 1,43 кВт, і в імпульсі випускається $N = 2 \cdot 10^{19}$ фотонів?

Розв'язування. Потужність – це енергія, що випромінюється за одиницю часу, отже дорівнює відношенню енергії імпульсу, поділеній на його тривалість:

$$P = \frac{W}{\tau} = \frac{N\varepsilon}{\tau},$$

де ε – енергія одного фотона. Виразивши її через довжину хвилі за формулою (2.1*б*), знайдемо відповідь:

$$P = \frac{Nhc}{\tau\lambda} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{Nhc}{P\tau} = 695 \text{ нм}.$$

Задача 2.3. За сприятливих умов спостереження вночі людина може побачити спалах сірника на відстані декілька кілометрів. Прийнявши цю відстань R = 3,0 км, радіус зіниці ока r = 3,0 мм, потужність випромінювання сірника P = 10 мкВт і довжину світлової хвилі $\lambda = 600$ нм, оцінити чутливість ока, тобто, – найменшу кількість фотонів n_0, яка має потрапляти в око за одиницю часу, щоби людина вже відчувала світло.

Розв'язування. Шукана величина дорівнює відношенню порогової потужності p_0 випромінювання, що потрапляє в око, до енергії фотона ε: $n_0 = (p_0/\varepsilon)$. Величина p_0 складає

$$p_0 = Is = I \cdot \pi r^2,$$

де $s = \pi r^2$ – площа зіниці, I – інтенсивність світла, що потрапляє в око. Інтенсивність дорівнює енергії випромінювання сірника, що проходить через одиницю поверхні і на відстані спостереження R дорівнює

$$I = \frac{P}{S} = \frac{P}{4\pi R^2}.$$

Отже

$$p_0 = P\frac{r^2}{4R^2}. \qquad (1)$$

З іншого боку

$$p_0 = n_0\varepsilon = n_0\frac{hc}{\lambda}, \qquad (2)$$

де $\varepsilon = hc/\lambda$ – енергія фотона, n_0 – шукана чутливість ока.

Підставивши вираз (2) у формулу (1), отримаємо відповідь:

$$n_0 = \frac{P\lambda r^2}{4hcR^2} \approx 30 \text{ квантів за 1 с.}$$

Ця вправа ілюструє гранично високу чутливість ока, дякуючи якій в свій час при прямих візуальних спостереженнях було виявлено переривчастість слабких світлових потоків, що стало одним із доказів фотонної структури випромінювання.

Задача 2.4. Світло з довжиною хвилі $\lambda = 662$ нм, яке падає нормально на поверхню з коефіцієнтом відбивання $\rho = 0{,}8$, створює тиск p = 1,0 мкПа. Яку кількість фотонів N поглинає $S = 1\,\text{см}^2$ поверхні за одиницю часу?

Розв'язування. Кількість поглинутих фотонів N через кількість падаючих N_0 визначається коефіцієнтом відбивання ρ, як

$$N = (1-\rho)N_0. \qquad (1)$$

Тож відповідь отримаємо, виразивши N_0 через інтенсивність світла та енергію фотона, а інтенсивність – через заданий тиск світла.

Інтенсивність дорівнює енергії фотонів, які падають по нормалі на одиничну площадку за одиницю часу:

$$I = \frac{N_0\varepsilon}{S} = \frac{N_0 hc}{S\lambda} \quad \Rightarrow \quad N_0 = \frac{IS\lambda}{hc},$$

а за формулою (2.10*б*) виходить

$$I = \frac{Pc}{1+\rho}.$$

Відтак

$$N_0 = \frac{PS\lambda}{(1+\rho)h}.$$

Підставивши це значення у вираз (1), отримаємо відповідь:

$$N = \frac{P\lambda S}{h} \cdot \frac{1-\rho}{1+\rho} = 10^{21}\,1/\text{с}.$$

Задача 2.5. Який тиск створює лазерний імпульс з енергією W = 10 мкДж і тривалістю $\tau = 0{,}1\,\text{мкс}$, який сфокусовано на дзеркальну поверхню в цятку діаметром d = 1 мкм ?

Розв'язування. Створюваний на дзеркальну поверхню тиск відповідно до формули (2.10*б*) дорівнює

$$P = \frac{2I}{c},$$

а інтенсивність у сфокусованому імпульсі

$$I = \frac{W}{S\tau} = \frac{4W}{\pi d^2 S\tau}.$$

Отже,

$$P = \frac{8W}{\pi d^2 Sc\tau} = 8{,}5 \cdot 10^5 \text{ Па}.$$

Як бачимо, тиск світла реально може бути дуже великим. На цьому ґрунтуються лазерні технології, що застосовуються в науці, медицині та техніці.

Задача 2.6. При якій напрузі на рентгенівській трубці короткохвильова межа гальмівного спектра буде дорівнювати комптонівській довжині хвилі електрона?

Розв'язування. Напруга на рентгенівській трубці пов'язана з довжиною хвилі короткохвильової межі гальмівного спектра співвідношенням (1.13*а*), а комптонівська довжина хвилі визначається формулою (2.14). Тому, згідно з умовою, маємо:

$$\frac{hc}{eU} = \frac{h}{mc} \quad \Rightarrow \quad eU = mc^2 \quad \Rightarrow \quad U = \frac{mc^2}{e} = 5{,}11 \cdot 10^5 \text{ В} = 0{,}511 \text{МВ}.$$

Корисно звернути увагу на те, що кінетична енергія електронів, які бомбардують анод трубки, виявилася рівною енергії спокою електрона. Відповідно, напруга на трубці чисельно дорівнює цій енергії, вираженій в електрон-вольтах.

Задача 2.7. В ефекті Комптона довжини хвиль зміщених компонент випромінювання, розсіяного під кутами $\vartheta_1 = 60°$ та $\vartheta_2 = 120°$, відрізняються одна від одної в $\eta = 2$ рази. Визначити довжину хвилі випромінювання, що падає на мішень.

Розв'язування. Для отримання відповіді достатньо на основі закону (2.11) записати довжини хвилі зміщених компонент і поділити їх одна на одну, врахувавши умову задачі:

$$\begin{cases} \lambda_1' = \lambda + \lambda_c\left(1 - \cos\vartheta_1\right) \\ \lambda_2' = \lambda + \lambda_c\left(1 - \cos\vartheta_2\right) \end{cases} \Rightarrow \quad \frac{\lambda + \lambda_c\left(1 - \cos\vartheta_2\right)}{\lambda + \lambda_c\left(1 - \cos\vartheta_1\right)} = 2.$$

Із цього рівняння легко дістати відповідь:

$$\lambda = \lambda_c\left(2\cos\vartheta_1 - \cos\vartheta_2 - 1\right) = \frac{\lambda_c}{2} = 1{,}21\,\text{пм}.$$

Задача 2.8. Визначити максимальну довжину хвилі розсіяного випромінювання $\lambda'_{\max}$ в ефекті Комптона, якщо фотони, котрі налітають на мішень, мають енергію $\varepsilon = 1{,}0\,\text{МеВ}$.

Розв'язування. Максимальний комптонівський зсув спостерігається при максимальному можливому куті розсіяння $\vartheta = 180°$, отже, згідно з (2.11),

$$\lambda'_{\max} = \lambda + 2\lambda_c.$$

Виразивши довжину хвилі падаючого випромінювання через енергію фотона за формулою (1.16), знайдемо відповідь:

$$\lambda'_{\max} = \frac{hc}{\varepsilon} + 2\lambda_c = 6{,}0\,\text{пм}.$$

Задача 2.9. В ефекті Комптона розсіюються фотони, що мають енергію $\varepsilon = 1{,}0\,\text{МеВ}$. Визначити кінетичну енергію електрона віддачі та кут розсіювання фотона, якщо його довжина хвилі змінюється на $\eta = 25\,\%$.

Розв'язування. Кінетична енергія електрона віддачі дорівнює енергії, втраченій фотоном при розсіюванні: $K = \varepsilon - \varepsilon'$, або через зміщену довжину хвилі

$$K = \varepsilon - \frac{hc}{\lambda'}.$$

Урахувавши, що за умовою $\lambda' = (1+\eta)\lambda$, і що $\lambda = (hc/\varepsilon)$, після викладок отримаємо:

$$K = \varepsilon\left(1 - \frac{1}{(1+\eta)}\right) \quad \Rightarrow \quad K = \frac{\eta}{1+\eta}\varepsilon = 0{,}2 \text{ МеВ}.$$

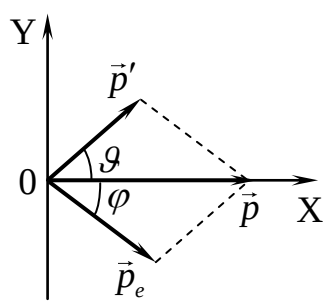
Кут розсіювання ϑ визначимо через формулу комптонівського зсуву (2.11), урахувавши, що за умовою $\lambda' - \lambda = \eta\lambda$ і виразивши через ε:

$$\eta\lambda = 2\lambda_c \sin^2\frac{\vartheta}{2}.$$

Звідси, використавши формули (1.13*a*) для λ і (2.14) для λ_c, отримаємо наступну відповідь:

$$\frac{\eta hc}{\varepsilon} = \frac{2h}{mc}\sin^2\frac{\vartheta}{2} \quad \Rightarrow \quad \sin\frac{\vartheta}{2} = \sqrt{\frac{\eta mc^2}{2\varepsilon}} \quad \Rightarrow \quad \vartheta \approx 29°.$$

Задача 2.10. Фотон з енергією рівною енергії спокою електрона $\varepsilon = mc^2$, розсіявся під кутом $\vartheta = 60°$ на вільному нерухомому електроні. Визначити напрям та величину швидкості електрона віддачі.



Розв'язування. Напрям і величину швидкості електрона віддачі можна знайти через його імпульс $\vec{p}_e$, який пов'язаний з імпульсами фотона $\vec{p}$ до та $\vec{p}'$ після розсіювання (див. рис.) законом збереження $\vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}_e$, або в проекціях

$$\begin{cases} p = p'\cos\vartheta + p_e\cos\varphi, \\ 0 = p'\sin\vartheta - p_e\sin\varphi; \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} p - p'\cos\vartheta = p_e\cos\varphi, \\ p'\sin\vartheta = p_e\sin\varphi. \end{cases} \qquad (1)$$

Для визначення напрямку руху електрона віддачі поділимо ці рівняння, врахувавши вираз імпульсу фотона (2.5) і закон комптонівського розсіювання (2.11):

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{p'\sin\vartheta}{p - p'\cos\vartheta} = \frac{\sin\vartheta}{(\lambda'/\lambda) - \cos\vartheta} = \frac{\sin\vartheta}{\left(1 + (\lambda_c/\lambda)\right)(1 - \cos\vartheta)}. \qquad 2)$$

Цей вираз можна суттєво спростити, скориставшися формулами (2.14) і (1.1*б*) та врахувавши умову $\varepsilon = mc^2$. Відтак матимемо: $\left(1 + (\lambda_c/\lambda)\right) = 2$. Тепер, зробивши в (2) відомі заміни $\sin\vartheta = 2\sin(\vartheta/2)\cos(\vartheta/2)$ і $(1 - \cos\vartheta) = 2\sin^2(\vartheta/2)$, отримаємо відповідь:

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{1}{2}\operatorname{ctg}\frac{\vartheta}{2} \quad \Rightarrow \quad \vartheta \approx 41°.$$

Для визначення модуля імпульсу електрона віддачі піднесемо рівняння системи (1) до квадрата та додамо. Тоді

$$p_e^2 = \left(p - p'\cos\vartheta\right)^2 + \left(p'\sin\vartheta\right)^2 = p^2 - 2pp'\cos\vartheta + p'^2.$$

Виразивши імпульси фотона через енергію та врахувавши умову $\vartheta = 60°$, отримуємо:

$$p_e^2 = \frac{1}{c^2}\left(\varepsilon^2 - \varepsilon\varepsilon' + \varepsilon'^2\right). \qquad 3)$$

Далі, враховуючи формули (1.1б), (12.11), знаходимо:

$$\varepsilon' = \frac{hc}{\lambda'} = \frac{hc}{\lambda + 2\lambda_c\sin^2(\vartheta/2)} = \frac{hc}{(hc/\varepsilon) + 2\lambda_c\sin^2(\vartheta/2)}.$$

Звідси за формулою (2.14) і умови $\varepsilon = mc^2$, $\vartheta = 60°$ дістанемо:

$$\varepsilon' = \frac{2}{3}\varepsilon = \frac{2}{3}mc^2.$$

Для визначення величини швидкості електрона підставимо цей результат і формулу релятивістського імпульсу

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1-(v/c)^2}} = \frac{mc\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}$$

у вираз (3), і після елементарних викладок отримаємо:

$$\frac{\beta^2}{1-\beta^2} = \frac{7}{9} \quad \Rightarrow \quad \beta = \frac{\sqrt{7}}{4} \quad \Rightarrow \quad v = 0,66c \approx 2 \cdot 10^8 \text{ м/с}.$$

ЛЕКЦІЯ 3. Хвильові властивості частинок

3.1. Постулати Бора

Неможливість класичної теорії будови атома. Так склалося, що в роки становлення квантової теорії випромінювання були зроблені не менш революційні відкриття і в царині мікроскопічної будови речовини. Відкриття електрона (Дж. Дж. Томсон, 1898 р.) та атомного ядра (Ернест Резерфорд, 1913 р.) незаперечно довели, що атом не є неподільним[9] і складається з малого масивного[10] позитивно зарядженого ядра та відповідної кількості легких негативно заряджених електронів, які рухаються навколо ядра під дією кулонівської сили притягання.

Ядерна модель атома нагадує сонячну систему, в якій «маленькі і легенькі» планети рухаються по орбітах навколо масивного «ядра» – Сонця під дією сили гравітаційного притягання. Але, попри уявну схожість, атом принципово відрізняється від планетарної системи тим, що «планети» – електрони мають електричний заряд. Тому, згідно із законами класичної електродинаміки, при обертанні навколо ядра електрони повинні неперервно випускати електромагнітне випромінювання з частотою рівною частоті обертання. При цьому електрони через утрату енергії мали би, поступово наближатися до ядра і врешті впасти на нього, утворивши нейтральну частинку із розмірами атомного ядра. За розрахунками такий колапс мав би відбуватися практично миттєво (див. п. 3.6, Задача 3.2). Крім того через неперервне збільшення частоти обертання електронів при наближенні до ядра в спектрі випромінювання атомів мала би спостерігатися широка неперервна смуга частот.

В дійсності нічого подібного немає. Атоми є стабільними і, за винятком радіоактивних елементів[11], без зовнішнього впливу необмежено довго зберігають свої індивідуальні властивості. Спектри випромінювання атомів теж не є неперервними: вони містять індивідуальні для кожного хімічного елемента дискретні частоти.

Постулати Бора. Оскільки ядерна будова атома неспростовно випливає з дослідів Резерфорда, маємо констатувати, що класична фізика не

---

[9] Термін атом походить від грецького «атомос» – неподільний.

[10] Маса ядра складає 99,95% маси атома, а лінійні розміри ~10^{-4} розмірів атома (див. п. 3.6, Задача 3.1).

[11] Самодовільна зміна атомів цих елементів теж зумовлена не падінням електронів на ядро, а процесами в самому ядрі.

може пояснити не лише властивості, а саме існування атомів. Це означає, що в атомах діють закони відмінні від законів класичної фізики. Перший крок на шляху до цих законів зробив Нільс Бор, який сформулював наступні *постулати Бора*:

1. *Атом може перебувати тільки в деяких стаціонарних (квантових) станах, енергії яких утворюють дискретний набір* $E_1, E_2, E_3, \ldots$. *У стаціонарних станах електрони атомів не випромінюють енергію.*
2. *Перехід атома із стаціонарного стану з енергією* E_m *в стан з меншою енергією* E_n *відбувається стрибком і супроводжується випромінюванням одного кванта світла з енергією*:

$$h\nu \equiv \hbar\omega = E_m - E_n. \qquad (3.1)$$

Це співвідношення, яке спирається на квантову гіпотезу Планка, називається *правилом частот*.

Обидва постулати Бора різко суперечать законам класичної фізики, декларуючи, по-перше, що попри наявність прискорення, електрон в стаціонарному стані атома не випускає електромагнітного випромінювання і, по-друге, що частота випромінювання атома не має відношення до частоти обертання електрона навколо ядра.

На основі вказаних постулатів і законів класичної механіки Бор розрахував розміри атома та частоти в спектрі випромінювання найпростішого з атомів – атома Гідрогену і отримав блискучий збіг теоретичних результатів з експериментальними даними (див. п. 3.6, Задача 3.3). Це показало, що постулати Бора правильно відображають існуючий стан речей. Але спроба застосувати борівську теорію до інших атомів не дала помітних результатів.

3.2. Хвилі де Бройля

Гіпотеза де Бройля. Глибинні причини неспроможності класичної фізики та обмеженості борівської атомної теорії відкрив французький фізик Луї де Бройль, який дійшов думки, що так само як випромінювання має властивості частинок, частинки речовини мають властивості хвиль. Відповідно до цього, де Бройль у 1924 р. сформулював наступне твердження, відоме як *гіпотеза де Бройля*:

з кожною частинкою, що має енергію E та імпульс p, пов'язана певна хвиля з частотою

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \tag{3.2}$$

і довжиною хвилі

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \equiv \frac{h}{p}. \tag{3.3}$$

Такі асоційовані з частинками хвилі називають хвилями де Бройля, а вираз (3.3) – співвідношенням де Бройля. Із співвідношення (3.3) випливає зв'язок між хвильовим вектором $\vec{k}$ $\left(k = (2\pi/\lambda)\right)$ дебройлівської хвилі та імпульсом частинки:

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}. \tag{3.4}$$

Вирази (3.2), (3.3) і (3.4) за змістом співпадають із відповідними співвідношеннями для фотонів (Лекція 2, формули (2.1), (2.4), (2.6)). Отже, гіпотеза де Бройля по суті стверджує, що

частинки матерії будь-якої природи виявляють і корпускулярні, і хвильові властивості, між якими існує універсальний зв'язок.

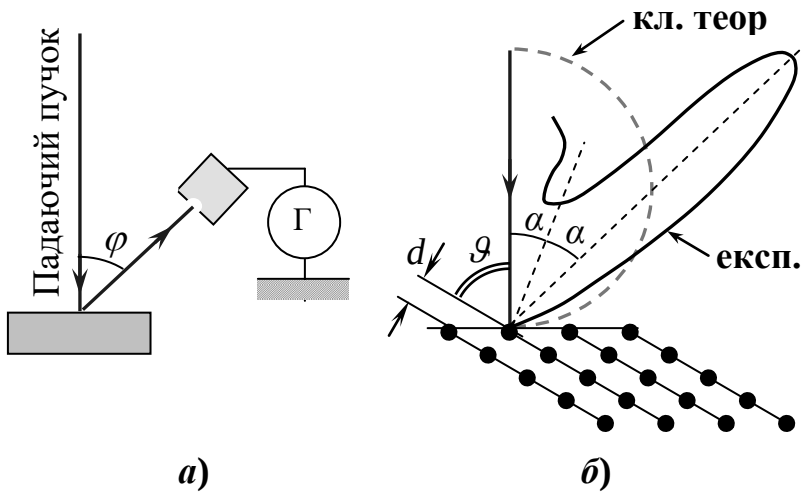


Рис. 3.1

Дифракція частинок. Гіпотеза де Бройля майже одразу отримала визнання й лягла в основу квантової механіки – теорії, що адекватно відображає некласичну поведінку мікрочастинок. Цьому сприяло досить швидке (1927 р.) пряме експериментальне підтвердження гіпотези де Бройля

Девіссоном і Джермером у дослідах по розсіюванню електронів. Схема їхніх дослідів така. Вузький пучок електронів, які проходили прискорююче електричне поле із заданою напругою U і набували кінетичну енергію $K = eU$, спрямовувався по нормалі на відполіровану плоску поверхню досліджуваної пластинки-мішені (рис. 3.1*а*) і вимірювався розподіл відбитих електронів по кутах розсіювання φ. Для уловлювання розсіяних електронів використовувався металевий порожнистий циліндр із малим отвором, заземлений через гальванометр Г. Кількість розсіяних під заданим кутом φ електронів $N(\varphi)$ визначалася за величиною струму через гальванометр. З класичної точки зору розсіювання електронів на пластинці зумовлене зіткненням одних мікроскопічних кульок – електронів з іншими мікроскопічними кульками – атомами поверхневого шару мішені. За таких умов кількість відбитих частинок є максимальною у зворотному напрямку ($\varphi = 0°$) і монотонно зменшується до нуля при $\varphi = 90°$, як показано в полярних координатах на рис. 3.1*б* штриховою кривою, що називається індикатрисою[12]. При цьому закон розподілу (форма кривої) не має залежати від кінетичної енергії та імпульсу частинок. Але при опроміненні електронами монокристалів Девіссон і Джермер спостерігали на індикатрисах піки (рис 3.1*б*), положення яких залежить від речовини мішені та енергії електронів. Зокрема, в одному з дослідів при опроміненні нікелю електронами з енергією K = 54 еВ було отримано значення $\varphi = 50°$.

Указані піки є подібними до дифракційних максимумів рентгенівських променів при відбиванні від кристалів, які визначаються умовою Вульфа-Бреґґа:

$$2d \sin \vartheta = \lambda, \qquad (3.5)$$

де d – відстань між атомними площинами, від яких відбиваються рентгенівські промені, ϑ – кут ковзання, тобто кут між цими площинами та напрямком променів (див. рис. 3.1*б*), λ – довжина хвилі рентгенівських променів.

Це наштовхнуло Девіссона і Джермера на думку, що пік розсіяння електронів має аналогічне походження й зумовлений *дифракцією дебройлівських хвиль* електронів на кристалічній ґратці мішені. Для перевірки такого припущення було визначено орієнтацію найщільніше заповнених

[12] Кількість розсіяних на заданий кут електронів визначається відстанню від відповідної точки індикатриси до початку координат.

атомами площин у мішені та відстань d між ними[13]. З'ясувалося, що $d = 9{,}1 \cdot 10^{-11}$ м, і кут ковзання $\vartheta = 65°$. Останнє означає, що кут падіння пучка на атомні площини $\alpha = \varphi/2$, тож максимум розсіяння спостерігається в напрямку дзеркального відбивання електронів. У такому разі, згідно з умовою (3.5), довжина хвилі, що дифрагує, складає $\lambda = 2 \cdot 9{,}1 \cdot 10^{-11} \cdot \sin 65^{\circ} = 1{,}67 \cdot 10^{-10}$ м. Цю величину можна порівняти з дебройлівською довжиною хвилі $\lambda_{Б}$ (формула (3.3)) електронів, які падають на мішень, урахувавши, що їхній імпульс $p = \sqrt{2mK} = \sqrt{2meU}$. При U = 54 В, як було в досліді, обчислення дають $\lambda_{Б} = 16{,}5$ нм. Майже точний збіг величин $\lambda_{Б}$ і λ доводить дифракційну природу піків розсіяння в дослідах Девіссона і Джермера, і отже, правильність гіпотези де Бройля. Варто відмітити, що невеличка різниця між розрахунковим $\lambda_{Б}$ і виміряним λ значеннями теж знайшла пояснення: вона зумовлена деякою зміною дебройлівської довжини хвилі електронів у мішені порівняно з вакуумом.

Пізніше інші дослідники спостерігали дифракцію нейтронів та легких атомів і молекул. Це свідчить про те, що хвильові властивості притаманні всім мікрочастинкам, а не лише електронам. Більш за те, хвильові властивості частинок знайшли практичне застосування в таких галузях експериментальної та прикладної фізики, як електронна мікроскопія, електронографія та нейтронографія, електронна та нейтронна дефектоскопія, тощо.

3.3. Хвильова функція

Швидкість хвиль де Бройля. Як невід'ємна приналежність частинки дебройлівська хвиля є невіддільною від неї. Тому швидкість дебройлівської хвилі має співпадати із швидкістю руху частинки. Спочатку визначимо фазову швидкість $v_{ф} = \omega/k$ хвилі де Бройля, котра, згідно з (3.2) і (3.4), визначається енергією E та імпульсом p частинки, як

$$v_{ф} = \frac{E}{p}.$$

[13] Такі дослідження виконуються методом рентгеноструктурного аналізу за допомогою рентгенівської дифракції.

Для будь-яких рухів, включно з релятивістськими, енергія частинки пов'язана з імпульсом співвідношенням

$$E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2},$$

де m – власна маса (маса спокою) частинки. Відповідно, для фазової швидкості виходить:

$$v_{\text{ф}} = \frac{c\sqrt{p^2 + m^2c^2}}{p} = c\sqrt{1 + \left(mc/p\right)^2} \quad \Rightarrow \quad v_{\text{ф}} > c.$$

Отже, фазова швидкість хвиль де Бройля завжди більша за c. Саме по собі це не є чимось неможливим, бо фазова швидкість – то формальна величина, що не характеризує реальної швидкості хвилі, тобто швидкості поширення коливань і перенесення енергії. Такою реальною швидкістю є групова швидкість $u = \mathrm{d}\omega/\mathrm{d}k$, для якої, з урахуванням співвідношень (3.2) і (3.4), отримаємо:

$$u = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\left(c\sqrt{p^2 + m^2c^2}\right) = \frac{c}{\sqrt{1 + \left(mc/p\right)^2}}. \qquad (3.6)$$

Підставивши сюди вираз релятивістського імпульсу $p = mv\Big/\sqrt{1 - \left(v/c\right)^2}$, після нескладних перетворень отримаємо $u = v$, тобто швидкість руху частинки дорівнює груповій швидкості дебройлівської хвилі.

Хвильова функція. Отриманий результат дозволяє трактувати асоційовану хвилю як хвильовий пакет[14], який рухається разом з частинкою. Тож асоційована хвиля несе інформацію як про швидкість, так і про місцеположення частинки. Це дозволяє визначати рух частинки, розглядаючи її не класично, як матеріальну точку, а досліджуючи поширення асоційованої з нею хвилі.

Саме такий підхід використовується у квантовій (хвильовій) механіці. Відповідно, основним поняттям квантової механіки є хвильова функція $\Psi(x,t)$ – функція координат і часу[15], що визначає параметри асоційованої з частинкою хвилі в будь-якій точці простору й у будь-який момент часу.

[14] Хвильовим пакетом, або групою хвиль, називається локалізоване в просторі хвильове утворення («згусток» коливань), яке переміщується із груповою швидкістю.

[15] Тут і далі задля спрощення будемо вважати, що хвильова функцію залежить тільки від однієї координати.

Відтак набуває принципового значення питання про зміст хвильової функції, інакше – про природу дебройлівських хвиль.

На перший погляд може здатися, що відповідь є досить простою: частинка – то і є хвильовий пакет, тобто мікроскопічний згусток хвиль. Але таке уявлення не витримує критики хоча б тому, що частинка є неподільною, а хвиля на межі поділу двох середовищ діляться, частково відбиваючись і частково проходячи крізь межу поділу. До того ж з'ясувалося, що хвильова функція є суттєво комплексною, причому і дійсна, і уявна її складові містять інформацію про фізичний стан частинки[16]. Це змушує визнати, що дебройлівська хвиля як така не може бути якимось фізичним процесом у самій частинці чи в прилеглому до неї просторі.

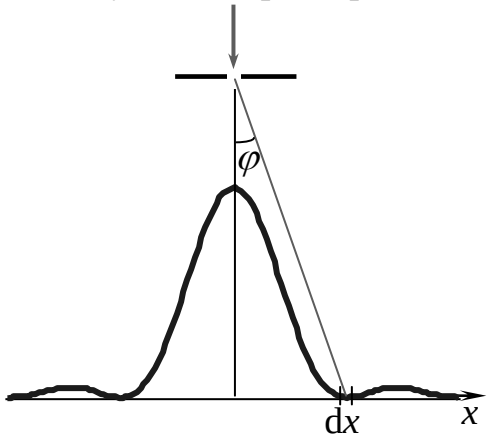


Рис. 3.2

Загально прийнята інтерпретація хвильової функції належить М. Борну. Для кращого її розуміння проаналізуємо досліди по дифракції електронів на щілині. Пучок електронів із заданою дебройлівською довжиною хвилі (монохроматичний пучок) спрямовується нормально на вузьку щілину і вимірюється розподіл електронів на розміщеному за щілиною екрані-детекторі (рис. 3.2). Таким детектором може бути чутлива фотопластинка, на якій в місці потрапляння електронів виникає почорніння, або люмінесцентний екран із чутливим фотоприймачем, який дозволяє реєструвати короткі спалахи світла в місцях потрапляння на екран електронів. Досліди показали, що при інтенсивному опроміненні щілини електрони на екрані утворюють систему максимумів і мінімумів інтенсивності $I(x)$, положення яких визначається законом дифракції на щілині дебройлівських хвиль електронів.

[16] У цьому зв'язку відмітимо, що при описі реальних хвиль, таких як механічні чи електромагнітні, також використовують комплексні функції, але тільки як зручний математичний прийом. При цьому інформацію про фізичні характеристики хвилі несе лише дійсна частина комплексної хвильової функції.

Інтенсивність пучка в заданій точці екрана $I(x)$ – то є кількість електронів $\mathrm{d}N_{\mathrm{x}}$, які потрапляють у задану елементарну смужку на екрані, віднесена до її ширини dx:

$$I(x) = \frac{\mathrm{d}N_x}{\mathrm{d}x}.$$

З іншого боку $I(x)$ визначається законом дифракції дебройлівських хвиль, отже має бути прямо пропорційною квадрату їхньої амплітуди[17]:

$$I(x) \sim \left|\Psi(x)\right|^2 \equiv \Psi(x)\Psi^*(x).$$

Отже, кількість електронів, що потрапляють у дане місце на екрані є прямо пропорційною квадрату модуля хвильової функції у цьому місці:

$$\mathrm{d}N_x \sim \left|\Psi(x)\right|^2 \mathrm{d}x. \qquad (3.7)$$

Апріорі можна припустити, що причиною “хвильової” поведінки електронів у пучку є якась специфічна взаємодія між ними. Для перевірки такого припущення описаний дослід було повторено при гранично слабкому потоці електронів, коли електрони проходили крізь щілину по одному з інтервалом часу в десятки тисяч разів більшим, ніж час їхнього прольоту через всю установку. Тож будь-яка взаємодія між електронами виключалась. Результати досліду були такими:

1). Кожен окремий електрон потрапляє в певну точку екрана, а не створює мікроскопічну дифракційну картину. Отже, при взаємодії з екраном електрон виявляє себе не як хвиля, а як корпускула (частинка).

2). Окремі електрони потрапляють у різні точки екрана не завбачувано, так що неможливо знати, в яку саме точку потрапить наступний електрон.

3). Але в різні області екрана електрони потрапляють не однаково часто, так що після тривалого опромінювання щілини утворюється така сама дифракційна картина, як і при опроміненні щільним пучком.

З наведених результатів випливає, що потрапляння окремого електрона в задану область екрана відбувається не обов’язково, а лише з певною ймовірністю. Тому для кількості електронів $\mathrm{d}N_{\mathrm{x}}$, які потрапляють у

[17] Оскільки амплітуда хвильової функції ψ в загальному випадку є комплексною, її квадрат визначається як квадрат модуля ψ за правилами алгебри комплексних чисел, за якими спряжену функцію ψ^* отримують із ψ заміною знаку скрізь перед уявною одиницею i на протилежний.

гранично вузьку область ширини dx (рис. 3.2) можна записати $\mathrm{d}N_{\mathrm{x}} = N\mathrm{d}P_{\mathrm{x}}$, де N – загальна кількість електронів, які пройшли крізь щілину, і $\mathrm{d}P_{\mathrm{x}}$ – імовірність потрапляння окремого електрона в дану область dx. Зрозуміло, що ця ймовірність є прямо пропорційною ширині смужки, тож можна записати:

$$\mathrm{d}P_x = \rho(x)\mathrm{d}x, \tag{3.8}$$

де величина

$$\rho(x) = \frac{\mathrm{d}P_x}{\mathrm{d}x}.$$

називається *густиною ймовірності* і визначає ймовірність потрапляння окремого електрона в смужку одиничної ширини, розташовану в околі даної точки. Відповідно, імовірність перебування частинки в заданій області шириною $[x_1, x_2]$ визначається, як

$$P = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x)\,\mathrm{d}\,x. \tag{3.8a}$$

Таким чином, кількість електронів, які потрапляють в елементарну область dx на екрані, виражається через густину імовірності, як

$$\mathrm{d}\,N_x = N\rho(x)\,\mathrm{d}\,x.$$

Порівнюючи цей вираз із виразом (3.7), доходимо висновку, що густина імовірності потрапляння електрона в дану точку екрана є прямо пропорційною квадрату модуля його хвильової функції в цій точці:

$$\rho(x) \sim |\Psi(x)|^2\,\mathrm{d}\,x.$$

Сама ж хвильова функція, як відмічалося вище, безпосереднього фізичного змісту не має. Це дозволяє підбирати (нормувати) амплітуду хвильової функції так, щоб виконувалася рівність $\rho(x) = |\Psi(x)|^2$. Відтак можна сказати, що

> *квадрат модуля хвильової функції частинки в будь-якій точці простору в будь-який момент часу дорівнює густині ймовірності перебування частинки в цій точці у відповідний момент*:

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2 \equiv \Psi(x,t)\Psi^*(x,t) = \rho\left(x,t\right). \qquad (3.9)$$

Таке статистичне трактування хвильової функції, запропоноване М.Борном, підтверджено всім розвитком квантової механіки і є загальновизнаним.

Таким чином, дебройлівські хвилі є не реальними фізичними хвилями, а “хвилями імовірності”, або “хвилями інформації”. Такий статистичний зміст накладає на хвильову функцію частинки досить жорсткі математичні обмеження:

1. Імовірність події, що може відбутися в даному місці і в даний час, не може мати одразу двох або більше значень. Тому хвильова функція завжди має бути *однозначною*.
2. Положення та швидкість частинки не можуть змінюватися миттєво, тому хвильова функція разом із своїми похідними повинна бути *неперервною*.
3. Імовірність (шанси) за означенням не може бути більшою за одиницю, отже, хвильова функція має бути *обмеженою*.

Ця вимога виражається *умовою нормування хвильової функції*:

$$\int \left|\Psi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}\,x = 1, \qquad (3.10)$$

де інтегрування ведеться по всій області існування підінтегральної функції, тобто по області, де може знаходитися частинка. Умова (3.10) має простий зміст – вона формально виражає сам факт присутності частинки в заданій області простору протягом заданого інтервалу часу.

Таким чином, хвильова функція частинки завжди має бути однозначною, гладкою (неперервною разом з першими похідним) і квадратично інтегрованою (обмеженою).

3.4. Принцип невизначеності

Імовірнісна природа хвильових властивостей частинок накладає принципові обмеження на можливість використання прийнятого в класичній механіці способу опису руху частинок. Це відображає сформульоване В. Гайзенбергом і Н. Бором одне із засадничих положень квантової теорії – принцип невизначеності.

Співвідношення Гайзенберга. У класичній механіці вважається, що рухома частинка у кожну мить має заданий радіус-вектор $\vec{r}(x,y,z)$ та

імпульс $\vec{p}(p_x, p_{y,} p_z)$, тобто її положення у просторі і напрям руху є однозначно визначені в кожен момент часу. Це означає, що частинка рухається по визначеній лінії – траєкторії. Але положення мікрочастинки не визначене однозначно, вона може бути виявлена в будь-якій точці деякої області $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$, де її хвильова функція відмінна від нуля. Так само хвильовий пакет, яким зображується хвильова функція частинки, характеризується не одним значенням хвильового вектора $\vec{k}(k_x, k_y, k_z)$, а деяким неперервним інтервалом $\Delta\vec{k}$. При цьому в хвильовій теорії показано, що геометричні розміри будь-якого хвильового пакета $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ та його спектральна ширина $(\Delta k_x, \Delta k_y, \Delta k_z)$ є пов'язані між собою. А саме, чим менші розміри, тим більша спектральна ширина пакета, причому їхній добуток не може бути меншим за певної величину, залежну від виду пакета.

$$\Delta x \cdot \Delta k_x \geq \pi,$$
$$\Delta y \cdot \Delta k_y \geq \pi,$$
$$\Delta z \cdot \Delta k_z \geq \hbar.$$

Оскільки для мікрочастинки хвильовий вектор пов'язаний співвідношенням де Бройля (3.4) з імпульсом, сказане означає, що частинка локалізована в області обмеженій інтервалом координат $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$, може мати будь-який імпульс із проекціями у деякому інтервалі $(\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z)$. Як показано в теорії, ці інтервали задовольняють умови:

$$\begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p_x &\geq \hbar, \\ \Delta y \cdot \Delta p_y &\geq \hbar, \\ \Delta z \cdot \Delta p_z &\geq \hbar. \end{aligned} \tag{3.11}$$

Таким чином, через наявність у частинки хвильових властивостей неможливо одночасно точно визначити її координати та імпульс. Подібні обмеження існують і для деяких пар інших фізичних величин, що визначають стан мікрочастинки. В цьому полягає основних положень квантової фізики – *принцип невизначеності*:

> *існують такі пари фізичних величин, які характеризують стан мікрочастинки, котрі разом указати точно принципово не*

можливо. Такі величини можна задати тільки з невизначеностями, добуток яких не може бути меншим за величину порядку сталої Планка.

Математичним виразом цього принципу для пари координата-імпульс є вирази (3.11), які називаються *співвідношеннями невизначеностей* або *нерівностями Гайзенберга*.

З інших величин наведемо нерівності Гайзенберга для пари *енергія-час*:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar, \qquad (3.12)$$

де Δt – тривалість процесу або стану частинки, ΔE – невизначеність енергії частинки в цьому процесі чи стані.

Із приводу нерівностей Гайзенберга треба зауважити таке. Не лише координати, а й область локалізації квантової частинки не визначена точно Тому критерії розмірів хвильової функції вибираються окремо і в різних випадках відрізняються. Через це в теоретичні фізиці в (3.11) і (3.12) замість $\hbar$ пишуть $\hbar/2$, а в літературі із загальної фізики замість $\hbar$ можна зустріти також величину h.

Те, як “працює” принцип невизначеності можна прослідкувати на прикладі розглянутого вище дифракційного досліду з електронами. Положення кожного електрона в момент прольоту крізь щілину відоме з невизначеністю, рівною ширині щілини: $\Delta x = b$. При цьому імпульс електрона при підльоті до щілини, в принципі, точно відомий: він визначається формулою $p = \sqrt{2meU}$ через прискорюючу напругу U, яку проходять електрони перед потраплянням на щілину. Тому може здатися, що, зменшуючи ширину щілини, можна з будь-якою потрібною точністю визначити як імпульс, так і координату електрона в момент проходження крізь щілину. Але така можливість є примарною. Внаслідок дифракції при прольоті крізь щілину імпульс електрона неконтрольовано змінюється так, що він може потрапити в будь-яку точку на екрані, згідно із законом дифракції. Це означає, що в момент проходження електроном щілини виникає невизначеність його імпульсу Δp_x, рівна (див. рис. (3.3))

$$\Delta p_x = p \operatorname{tg} \varphi. \qquad (3.13)$$

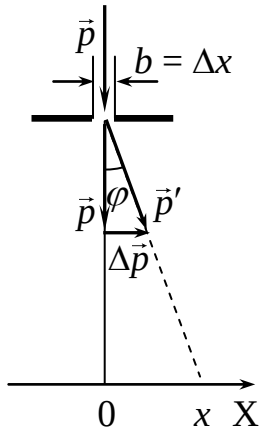


Рис. 3.3

Принципово кут дифракції φ, може бути яким завгодно. Але, зважаючи на те, що переважна кількість електронів потрапляє на екран у вузьку зону між першими дифракційними мінімумами, можна прийняти $\mathrm{tg}\varphi \approx \sin\varphi$ і, згідно з умовою дифракційного мінімуму, $\mathrm{tg}\varphi = (\lambda/b) = (\lambda/\Delta x)$. Тоді вираз (3.13) можна переписати, як

$$\Delta x \Delta p_x \approx p\lambda,$$

або, з урахуванням формули де Бройля (3.3),

$$\Delta x \Delta p_x \approx h,$$

що узгоджується із співвідношеннями невизначеності (3.11).

Зміст принципу невизначеності. Аналізуючи розглянутий приклад, можна подумати, що невизначеності координати та імпульсу частинки є звичайними похибками вимірювань, яких можна уникнути, визначаючи положення частинки іншим методом, наприклад, за допомогою мікроскопа. Але це не так. При спостереженні під мікроскопом об’єкт опромінюється світлом, тобто потоком фотонів, і реєструються відбиті від нього фотони, що потрапляють в об’єктив мікроскопа. З теорії відомо, що точність визначення положення частинки за допомогою мікроскопа обмежена довжиною хвилі використаного світла, так що $\Delta x \approx l$. З іншого боку, відбиваючись від частинки, фотон передає їй імпульс, вносячи невизначеність $\Delta p_x \approx p = h/l$. Отже, знову маємо $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h$.

Аналіз й інших принципово можливих способів одночасного визначення координат та імпульсу частинки теж приводить до співвідношення невизначеностей. Така універсальність співвідношень (3.11) свідчить, що принцип невизначеності пов’язаний не з обмеженою точністю

вимірювань, а із самою природою мікрочастинок. Електрон не є частинкою в класичному сенсі (корпускулою), тому до нього не можна вповні застосовувати поняття та уявлення класичної фізики. Зокрема, зміну положення мікрочастинки в просторі з плином часу принципово не можна трактувати як рух точки по визначеній траєкторії. Відповідно, нерівності Гайзенберга задають обмеження, які накладає природа мікрочастинок на застосування понять класичної механіки при описі їх руху. А в широкому розумінні

> *принцип невизначеності висвітлює обмежену можливість використання законів класичної фізики для адекватного відображення властивостей матерії на субмікроскопічному рівні*.

Деякі наслідки принципу невизначеності. Із співвідношень Гайзенберга (3.11) випливає цікавий наслідок. Якщо частинка є вільною, тобто може знаходитись у будь-якій точці простору, то її положення є повністю невизначеним, тож $\Delta x = \infty$, а $\Delta p = 0$. При цьому частинка може як рухатися, так і перебувати в спокої. Але коли частинка заперта в обмеженій області простору, то її положення визначається розмірами цієї області, тож $\Delta x \neq \infty$. при цьому в будь-якому стані невизначеність імпульсу $\Delta p \neq 0$, тож і $p \neq 0$. Отже, якщо квантова частинка знаходиться в обмеженій області простору, вона не може перебувати *у* стані спокою. При цьому, якщо $\Delta x \approx \lambda$, то $\Delta p \approx \hbar/\lambda \sim p$, тобто,

> *коли невизначеність місцеположення частинки є величиною порядку дебройлівської довжини хвилі, то невизначеність її імпульсу за порядком величини дорівнює самому імпульсу.*

Зокрема, така ситуація є характерною для електрона в атомі, що перебуває в незбудженому або невисокому збудженому квантовому стані. Тому можна записати

$$rp = rmv \approx \hbar,$$

де r – “радіус” атома (середня відстань електрона від ядра), m – маса електрона, v – швидкість електрона.

У не збудженому атомі водню швидкість електрона $v \approx 2 \cdot 10^6$ м/с, тому з цього співвідношення поперечника атома водню виходить оцінка $d = 2r \approx 10^{-10}$ м, що співпадає з експериментальними даними.

Наведемо також приклад конструктивного використання співвідношень (3.11) з області ядерної фізики. Після відкриття атомного ядра швидко з'ясувалося, що маса ядра ізотопу будь-якого хімічного елемента є з великою точністю є кратною масі протона m_p – ядра найлегшого ізотопу Гідрогену H, так що $m_я = Am_p$. Заряд ядра є кратним величині заряду електрона e: $q_я = Ze$, причому число A завжди суттєво перевищує Z (для легких елементів $A \approx 2Z$). Тому спочатку думали, що ядро складається з A масивних протонів і ($A - Z$) легеньких електронів, які компенсують відповідну частку позитивного заряду ядра, практично не впливаючи на його масу. Але принцип невизначеності змусив відкинути таку можливість. Розміри атомного ядра $r_я \sim 10^{-14}$ м, отже, згідно з (3.11), електрони в ядрі мають рухатись із субсвітловою швидкістю $v \approx 3 \cdot 10^8$ м/с. А при таких швидкостях сили притягання з боку протонів не здатні утримати електрон у ядрі (див. п. 3.6, Задача 3.9) і тому електрони не можуть бути складовою частиною ядра[18].

Одним із проявів співвідношення невизначеностей «енергія-час» (3.12) є так зване природнє розширення спектральних ліній атомів. Як відзначалося в п. 3.1, атоми випромінюють світло у вигляді квантів (фотонів) при переходах електронів із одних дискретних енергетичних рівнів на інші. Тому спектри випромінювання атомів складаються з окремих спектральних ліній, частоти яких мали би точно визначатися правилом частот (3.1). Але збуджені стани атома є нестабільними – електрон перебуває на збудженому енергетичному рівні в середньому протягом так званого «часу життя рівня» $\tau \approx 10^{-8}$с, після чого спонтанно переходить на якийсь із нижчих рівнів. Тому згідно з (3.12), енергії рівнів мають невизначеність $\Delta E \approx \hbar/\tau$, яка спричинює відповідну невизначеність частоти фотонів, що випромінюються:

$$\Delta\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} \approx \frac{1}{\tau} \approx 10^8 \text{с}^{-1}.$$

Це означає, що при переході електрона між заданими двома рівнями за будь-яких умов випромінюються фотони не з однією, а з усіма частотами в указаному інтервалі $\Delta\omega \sim 10^8$ с$^{-1}$. Тому спектральні лінії атомів являють собою не буквально лінії, а вузькі смуги. Слід зауважити, що в дійсності ширина спектральних ліній атомів ще більша, оскільки є й інші причини

[18] Як з'ясувалося пізніше, до складу ядра крім протонів входять не електрони, а нейтрони – незаряджені частинки з масою, що маже рівна масі протона.

розширення, зокрема, тепловий рух атомів. Але, оскільки частоти видимого світла мають порядок $10^{15}\ \text{с}^{-1}$, реальний ступінь монохроматичності випромінювання атомів є дуже високим. І все ж таки строго монохроматичне випромінювання є неможливим. Таким чином, відома з оптики принципова немонохроматичність світла, має фундаментальну квантовомеханічну природу.

Межі застосовності класичного способу опису. Дифракційні ефекти спостерігаються не лише для електронів або нейтронів, а й для складних систем – атомів і молекул. Тому співвідношення де Бройля (3.3) і Гайзенберга (3.11), (3.12) слід трактувати як фундаментальні і принципово чинні для будь-якого матеріального об'єкта. Але добре відомо, що в багатьох випадках, наприклад, при аналізі теплового руху молекул газу в посудині або розрахунках руху електронів в електронній лампі, не виникає жодної потреби враховувати їх хвильові властивості. А ось при розгляді руху електронів у атомі без цього неможливо обійтися. Для з'ясування, чому це так, розглянемо декілька прикладів.

Приклад 1. Нехай маємо броунівську частинку – порошинку масою $m = 10^{-10}$ кг, яка рухається зі швидкістю v = 1 см/с. При густині $\rho = 2\ \text{г/см}^3$ її розмір складає $d \approx 0{,}05$ мм. Одразу відмітимо, що хоча її можна побачити тільки в мікроскоп, вона складається з приблизно 10^{15} молекул, тобто є *макроскопічною* частинкою.

Згідно з (3.3), довжина хвилі де Бройля такої частинки становить $\lambda_Б \approx 10^{-22}$ м, що в сто мільйонів разів менше, ніж розміри атомного ядра. За таких умов ні про які хвильові властивості порошинки немає мови. Спостерігаючи за частинкою через мікроскоп, ми можемо фіксувати її положення з невизначеністю $\Delta x \approx 0{,}5$ мкм (довжина світлової хвилі), що становить всього 1 % від розмірів частинки. При цьому, згідно з (3.11), невизначеність швидкості $\Delta v \approx \hbar / m\Delta x = 2 \cdot 10^{-19}$ м/с. Отже, можна практично точно визначати положення частинки та її імпульс у кожен момент часу й описувати її рух на основі законів класичної механіки.

Приклад 2. Розглянемо тепер електрон ($m = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ кг) в атомі Гідрогену, де його швидкість складає $v \approx 2 \cdot 10^6$ м/с. При такій швидкості дебройлівська довжина хвилі електрона $\lambda \approx 3 \cdot 10^{-10}$ м/с є сумірною з поперечником атома $d \approx 1 \cdot 10^{-10}$ м. Очевидно, що за таких умов ігнорувати

хвильові властивості електрона й говорити про його рух навколо ядра по певній траєкторії (орбіті) не можна. Справді, аби говорити про орбіту електрона навіть наближено, його положення в кожен момент часу має бути задане хоча б не гірше, ніж із невизначеністю $\Delta x \sim 0{,}1d = 10^{-11}$ м. При цьому, згідно з (3.11), невизначеність швидкості електрона $\Delta v \sim 10^{7}$ м/с. Отже, невизначеність швидкості $\Delta v >> v$, і говорити про траєкторію позбавлено сенсу. Тому вживаний зворот «орбітальний рух електронів у атомах» є умовним.

Приклад 3. Розглянемо ще й випадок, коли елементарна частинка переміщується на велику відстань. Прикладом може бути електронно-променева трубка, в якій зображення створюється на люмінесцентному екрані при його бомбардуванні електронами із швидкістю $v \sim 10^{6}$ м/с. Екран трубки має мозаїчну структуру і складається з безлічі зерен – мікрокристаликів люмінесцентної речовини розміром $d \sim 10^{-6}$ м. При цьому незалежно від місця влучання електрона спалахує весь мікрокристалик. Тому при русі електронів у трубці допустима невизначеність координати складає саме величину $\Delta x \sim 10^{-6}$ м, а згідно з (3.11), невизначеність швидкості при цьому дорівнює $\Delta v \sim 10^{2}$ м/с. Якщо відстань від електронної гармати, що формує електронний пучок, до екрана дорівнює $l \sim 10$ см, і швидкість електронів $v \sim 10^{6}$ м/с, відносні невизначеності складають $(\Delta x/l) \sim 10^{-5}$ і $(\Delta v/v) \sim 10^{-4}$. Ці величини становлять теоретичні похибки розрахунку руху електронів по визначеній траєкторії за законами класичної механіки і є очевидно не істотними.

Так само можна чинити й при розгляді руху молекул газу в посудині. Але навіть у таких випадках класичний підхід не можна застосовувати беззастережно, бо можуть виявитися істотними внутрішні квантові властивості мікрочастинок. Через це, наприклад, не можлива послідовно класична електронна теорія металів, попри те, що рух вільних електронів відбувається в об’ємі всього зразка, тобто в макроскопічній області простору.

Аналізуючи наведені приклади, можна зробити певні загальні висновки:

– матеріальні точки й тіла класичної механіки не виявляють хвильових властивостей в силу своєї макроскопічності, тобто, через те, що вони складаються із гігантської кількості мікроскопічних частинок;

– якщо істинно мікроскопічні (елементарні) частинки рухаються в макроскопічній області простору, то з певними застереженнями їх теж можна розглядати як матеріальні точки й застосовувати до них закони класичної механіки;

– але мікрочастинки, що локалізовані в мікроскопічних областях простору, демонструють яскраво виражену некласичну поведінку, і їх рух можна досліджувати тільки на основі законів квантової механіки.

3.5. Контрольні запитання

1. Звідки випливає, що електрони в атомі знаходяться поза ядром і рухаються навколо нього?

2. Які факти стосовно будови атома не здатна пояснити класична фізика? Чому?

3. У чому полягає причина неспроможності класичної фізики в поясненні ядерної моделі атома?

4. Які факти стосовно будови атома безпосередньо відображають постулати Бора?

5. Сформулюйте гіпотезу де Бройля та запишіть співвідношення, що її виражають.

6. За допомогою виразу (3.6) покажіть, що швидкість руху частинки дорівнює груповій швидкості її дебройлівської хвилі.

7. Що таке «хвильова функція» мікрочастинки. Який зміст має її квадрат модуля?

8. Які математичні критерії має задовольняти хвильова функція частинки, виходячи з її змісту?

9. Обґрунтує умову нормування хвильової функції мікрочастинки (3.10).

10. Сформулюйте принцип невизначеності та запишіть співвідношення, що його виражають.

11. Чи можна трактувати величини, що входять у співвідношення невизначеностей (3.11), як похибки вимірювання відповідних величин? Чому?

12. До відкриття нейтрона розглядалася можливість того, що ядро атома складається з протонів та електронів. Спростуйте таку модель на основі принципу невизначеності.

13. За яких умов можна розглядати руху мікрочастинок класично, тобто як рух матеріальних точок по визначених траєкторіях?

3.5. Задачі

Задача 3.1. Визначити мінімальну відстань, на яку α-частинка (заряд $q_\alpha = 2e$) з енергією K = 7,7 МеВ ($1\,\text{еВ} = 1{,}6\cdot10^{-19}$ Дж) може наблизитися до ядра атома золота ($q_я = Ze$, Z = 79) при лобовому зіткненні.

Розв'язування. α-частинка рухається в потенціальному кулонівському полі ядра, тому вся її початкова кінетична енергія K на момент максимального наближення до ядра переходить у потенціальну енергію U взаємодії з ядром:

$$K = U = k\frac{q_\alpha q_я}{r_0}, \quad k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} = 9\cdot10^9\,\text{м/Ф}.$$

Урахувавши величину заряду α-частинки та ядра, отримуємо відповідь:

$$K = \frac{2kZe^2}{r_0} \quad \Rightarrow \quad r_0 = \frac{2kZe^2}{K}.$$

Обчислення дають $r_0 = 3{,}0\cdot10^{-14}$ ì . Ця величина дає уявлення про порядок розмірів ядер атомів – вони в десятки тисяч разів менші за розміри самих атомів. Саме цей результат дослідів Резерфорда незаперечно доводить, що електрони в атомі знаходяться поза ядром, і отже, рухаються навколо нього, аби не впасти під дією кулонівського притягання.

Задача 3.2. Згідно з класичною електродинамікою, будь-яка заряджена частинка, що має прискорення a, випускає електромагнітну енергію з потужністю $P = \left(2ke^2a^2/3c^3\right)$, c – швидкість світла, e – заряд частинки, $k = 1/4\pi\varepsilon_0$. Виходячи з цього і вважаючи, що електрон в атомі водню рухається по коловій орбіті, оцінити, за який час τ він мав би впасти на ядро при початковій відстані від ядра $r_0 = 5{,}1\cdot10^{-11}$ м.

Розв'язування. Потужність випромінювання електрона – то є втрата його енергії –(dE/dt), отже

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = -\frac{2ke^2a^2}{3c^3}. \qquad (1)$$

Формально завдання задачі полягає у визначенні часу τ, за який відстань r електрона до ядра зменшиться від початкової величини r_0 до

радіуса ядра $r_я$. Це можна зробити, якщо виразити в рівнянні (1) величини E та a через r і розв'язати його.

Кулонівська сила $F = \left(ke^2/r^2\right)$ надає електрону нормального прискорення $a = \left(v^2/r\right)$, отже

$$a = \frac{F}{m} \quad \Rightarrow \quad a = \frac{v^2}{r} = \frac{ke^2}{mr^2}. \tag{2}$$

Звідси можна виразити через r також кінетичну енергію електрона $K = \left(mv^2/2\right)$:

$$K = \frac{ke^2}{2r}.$$

Повна енергія електрона E складається з його кінетичної енергії K та потенціальної енергії взаємодії з ядром $U = \left(-ke^2/r\right)$, отже,

$$E = K + U = -\frac{ke^2}{2r}. \tag{3}$$

Звідси для похідної ($\mathrm{d}E/\mathrm{d}t$) знаходимо:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = \frac{2ke^2}{r^2}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}. \tag{4}$$

Підставивши цей вираз та вираз прискорення (2) в рівнянні (1), після простих перетворень отримаємо:

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = -\frac{\alpha}{r^2} \quad \Rightarrow \quad \alpha \mathrm{d}t = -r^2 \mathrm{d}r, \quad \text{де} \quad \alpha = \frac{4k^2e^4}{3m^2c^3r^2}.$$

Для визначення гіпотетичного часу падіння електрона на ядро треба проінтегрувати це рівняння по часу від 0 до τ і по відстані від r_0 до $r_я$. Але, враховуючи, що $r_я \ll r_0$, можна покласти $r_я = 0$ і наближено записати:

$$\alpha \int_0^{\tau} \mathrm{d}t \approx -\int_{r_0}^{0} r^2 \,\mathrm{d}r \quad \Rightarrow \quad \tau \approx \frac{r_0^3}{3\alpha} = \frac{m^2 r_0^3 c^3}{4k^2e^4} \approx 1{,}5 \cdot 10^{-11}\,\text{с}.$$

Цей результат ілюструє повну неспроможність класичної фізики в поясненні ядерної будови атома.

Задача 3.3. Згідно з першим постулатом Бора електрони в атомах рухаються навколо ядра за законами класичної механіки, але лише по таких колових орбітах, на яких момент імпульсу електрона є кратним до сталої Планка: $mvr_n = n\hbar$, n = 1, 2, ... Виходячи з цього *правила квантування електронних орбіт*, визначити найменші можливі розміри та енергію атома водню.

Розв'язування. Енергія атома водню складається з кінетичної енергії електрона та потенціальної енергії його взаємодії з ядром (протоном):

$$E = K + U = \frac{mv^2}{2} - \frac{ke^2}{r}, \qquad (1)$$

де враховано, що $U = \left(kq_{\text{е}}q_{\text{я}}/r\right)$, і $q_{\text{е}} = -e,\ q_{\text{я}} = e$.

При русі електрона по коловій орбіті радіуса r кулонівська сила $F = ke/r^2$ надає йому нормального прискорення $a = v^2/r$, отже,

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{ke^2}{r^2} \quad \Rightarrow \quad m^2v^2r^2 = kme^2r. \qquad (2)$$

Із цих співвідношень випливає також наступний вираз кінетичної енергії електрона:

$$K = \frac{mv^2}{2} = \frac{ke^2}{2r^2}.$$

Відтак для повна енергії атома, згідно з (1), маємо:

$$E = -\frac{ke^2}{2r}. \qquad (3)$$

Урахувавши наведене в умові задачі правило квантування орбіт, із співвідношення (2) отримаємо:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{kme^2}n^2 = r_0n^2, \quad n = 1, 2, \ldots,$$

де число

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{kme^2} = 5{,}3 \cdot 10^{-11} \text{ м}$$

називається першим борівським радіусом і визначає найменші можливі розміри атома водню.

Підставивши цю величину в формулу (3), визначимо й найменшу можливу енергію атома водню:

$$E_0 = -\frac{k^2 me^4}{2\hbar^2} \approx -13{,}6 \text{ еВ}.$$

Задача 3.4. Визначити дебройлівську довжину хвилі електрона, що прискорений напругою: а) $U_1 = 2{,}0$ В і б) $U_2 = 200$ кВ.

Розв'язування. Дебройлівська довжина хвилі частинки визначається через її імпульс співвідношенням (3.3), в якому імпульс електрона можна виразити через його кінетичну енергію $K = eU$. У першому випадку кінетична енергія $K_1 = 2{,}0$ еВ, а в другому $K_2 = 200$ кеВ, тоді як енергія спокою електрона $E_0 = mc^2 \approx 500$ кеВ. Тож у першому випадку електрон є нерелятивістською, а в другому – релятивістською частинкою. Тому його імпульс пов'язаний з кінетичною енергією формулами, відповідно:

$$p_1 = \sqrt{2mK_1} = \sqrt{2meU_1}, \quad p_2 = \frac{1}{c}\sqrt{eU_2(eU_2 + 2mc^2)}. \qquad (1)$$

Підставивши ці вирази в (3.3), отримаємо:

$$\lambda_1 = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU_1}} = 8{,}7 \cdot 10^{-10} \text{м}; \quad \lambda_2 = \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{eU_2(eU_2 + 2mc^2)}} = 2{,}5 \cdot 10^{-12} \text{м}. \qquad (2)$$

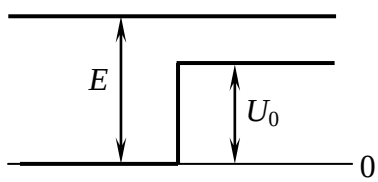
Аналізуючи отримані результати, звернемо увагу на таке. В першому випадку довжина дебройлівської хвилі електрона $\lambda_Б$ за порядком величини є такою, як у дослідах Девіссона та Джермера. Тож хвильові властивості електронів є добре вираженими. А ось у другому випадку величина $\lambda_Б$ настільки мала, що спостерігати дифракцію неможливо. Це відображає загальну тенденцію: чим більша енергія частинок, тим слабше виражені їхні хвильові властивості, причому це стосується як частинок речовини, так і частинок випромінювання – фотонів.

Задача 3.5. Знайти швидкість релятивістського електрона, в якого дебройлівська довжина хвилі дорівнює комптонівській.

Розв'язування. Комптонівська довжина хвилі визначається формулою (3.3), а дебройлівська – формулою (2.14) через релятивістський імпульс електрона $p = \left(mv \Big/ \sqrt{1-(v/c)^2} \right)$. Тому, згідно з умовою,

$$mc = \frac{mv}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \quad \Rightarrow \quad v = \frac{c}{\sqrt{2}} \approx 2{,}1 \cdot 10^8 \text{ м/с}.$$

Задача 3.6. Вільна нерелятивістська частинка з енергією E рухається в напрямку потенціального бар'єра типу «сходинка» (див. рис.) висоти $U_0 = \eta E$, де $\eta = 0{,}75$. Визначити, як і у скільки разів зміниться дебройлівська довжина хвилі частинки після подоланні бар'єра.



Розв'язування. Згідно з формулою (3.3), відношення довжин дебройлівської хвилі частинки до та після подолання бар'єра дорівнює оберненому відношенню її імпульсів:

$$\frac{\lambda_0}{\lambda} = \frac{p}{p_0}.$$

Оскільки частинка не релятивістська, її імпульс пов'язаний з кінетичною енергією класичною формулою:

$$K = \frac{p^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad p = \sqrt{2mK}.$$

Отже,

$$\frac{\lambda_0}{\lambda} = \sqrt{\frac{K}{K_0}}.$$

Повна енергія частинки, що дорівнює сумі кінетичної та потенціальної енергії, зберігається. Тому кінетична енергія $K = E - U$ до бар'єра (U = 0) $K_0 = E$, а після бар'єра ($U = \eta E$) $K = (1-\eta)E$. Отже,

$$\frac{\lambda_0}{\lambda} = \sqrt{1-\eta} = 0{,}5,$$

тобто, дебройлівська довжина хвилі зменшиться вдвічі.

Задача 3.7. Довести, що дебройлівська довжина хвилі $\lambda_Б$ електронів, які налітають на антикатод рентгенівської трубки, є завжди меншою, ніж найкоротша довжина хвилі $\lambda_{\min}$ у спектрі випромінювання трубки.

Розв'язування. Знайдемо відношення $\lambda_Б/\lambda_{\min}$, використавши для $\lambda_Б$ другий вираз (1) із задачі 3.4 та формулу (1.13а):

$$\frac{\lambda_Б}{\lambda_{\min}} = \frac{eU}{\sqrt{eU\left(eU + 2mc^2\right)}} \Rightarrow \frac{\lambda_Б}{\lambda_{\min}} = \frac{1}{\sqrt{1+\left(2mc^2/eU\right)}}.$$

Отже, при будь яких значеннях U $\lambda_Б < \lambda_{\min}$, що й потребувало доведення.

Задача 3.8. Дебройлівська довжина хвилі електронів, які налітають на антикатод рентгенівської трубки, $\lambda_Б = 8{,}7$ пм. Визначити короткохвильову межу $\lambda_{\min}$ у спектрі випромінювання трубки.

Розв'язування. Згідно з теорією гальмівного випромінювання (Лекція 1, п. 1.3), максимальна енергія рентгенівських фотонів, які може випромінювати трубка, дорівнює кінетичній енергії електронів *K*, які налітають на антикатод. Отже, згідно з формулою Планка,

$$\hbar\omega_{\max} = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_{\min}} = K \quad \Rightarrow \quad \lambda_{\min} = \frac{2\pi\hbar c}{K}. \qquad (1)$$

Величину *K* можна визначити через імпульс електрона, який, згідно з формулою (3.3), дорівнює

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_Б} = 7{,}62\cdot 10^{-23}\ \text{кг}\cdot\text{м/с}.$$

При цьому треба врахувати, що напруга на рентгенівській трубці складає $\sim 10^5$ В, і електрони є релятивістськими[19]. Тому кінетична енергія електрона дорівнює різниці його повної енергії $E = c\sqrt{p^2 + (mc)^2}$ та енергії спокою $E_0 = mc^2$:

$$K = E - E_0 = c\left(\sqrt{p^2 + (mc)^2} - mc\right).$$

Підставивши цей вираз у (1), отримаємо:

$$\lambda_{\min} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{p^2 + (mc)^2} - mc} = 63{,}5 \text{ пм}.$$

Задача 3.9. При вимірюванні розмірів і положення частинки за допомогою мікроскопа теоретична похибка (невизначеність координати) визначається довжиною світлової хвилі, що використовується: $\Delta x \approx \lambda$.

Прийнявши $\lambda = 0{,}6$ мкм і масу та густину мікроскопічної порошинки m = 0,1 мг і $\rho = 2{,}5\,\text{г/см}^3$, оцінити невизначеність швидкості порошинки та зробити висновок про необхідність розглядати порошинку як квантову частинку.

Розв'язування. Згідно з нерівностями Гайзенберга (3.11), невизначеність швидкості порошинки можна оцінити як

$$\Delta v \approx \frac{\hbar}{m\Delta x} \approx 2 \cdot 10^{-21} \text{ м/с},$$

тобто за вказаних умов невизначеність швидкості є абсолютно не суттєвою.

А щоби зрозуміти наскільки вагомою є невизначеність координати, треба знайти її відношення лінійних розмірів порошинки d. Величину d можна оцінити за об'ємом порошинки, як

$$d \approx \sqrt[3]{V} = \sqrt[3]{\frac{m}{\rho}} \approx 0{,}3 \text{ мм}.$$

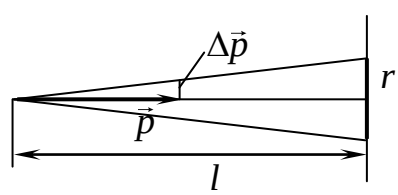
[19] Якщо це не очевидно, то слід попередньо оцінити швидкість частинки за класичними формулами. Так, у нашому випадку $v_{кл} = 2\pi\hbar/m\lambda_Б \approx 0{,}3c$.

Отже, $(\Delta x/d)$ складає всього ≈ 0,2%. Тож розглядати порошинку як квантову частинку немає жодної потреби.

Задача 3.10. Електрони в електронно-променевій трубці створюють на екрані світну цятку радіусом r = 0,1 мм. Використовуючи співвідношення (3.11), оцінити невизначеність координати електрона на екрані, якщо відстань від екрана до точки вильоту електронів l = 20 см і прискорююча напруга в трубці U = 10 кВ. Чи треба при розрахунку руху електронів у трубці використовувати закони квантової механіки?

Розв'язування. Через невизначеність поперечної складової імпульсу Δp, електрони в трубці рухаються не в точно заданому напрямку, а в межах деякого конуса, утворюючи на екрані світний кружок певного радіуса r (рис.). Із рисунка зрозуміло, що

$$\frac{r}{l} = \frac{\Delta p}{p} \quad \Rightarrow \quad \Delta p = \frac{r}{l}\, p. \qquad (1)$$



Величина Δp, пов'язана співвідношенням (3.11) із шуканою невизначеністю Δx координати точки потрапляння електрона на екран: $\Delta p \approx \hbar/\Delta x$. Отже,

$$\Delta x \approx \frac{l\hbar}{rp}.$$

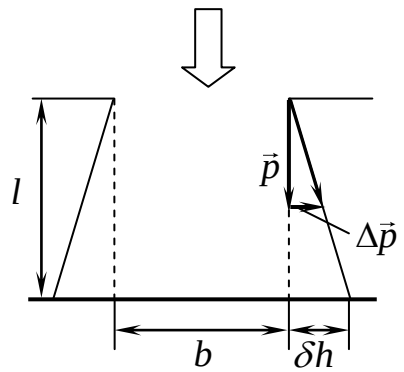
Імпульс електрона можна знайти через кінетичну енергією $K = eU$, яку він отримує від поля на шляху до екрана: $p = \sqrt{2mK} = \sqrt{2meU}$. Таким чином,

$$\Delta x \approx \frac{l\hbar}{r\sqrt{2meU}} \approx 4 \cdot 10^{-9} \text{ м}.$$

Ця величина є несуттєвою, бо $(\Delta x/r) \approx 4 \cdot 10^5$, і невизначеність координати не впливає на розміри світної цятки, що утворюється на екрані при потраплянні електрона. Так само неістотною є й невизначеність імпульсу

електрона, позаяк $(\Delta p/p)=(r/l)=5\cdot 10^{-4}$. Зрозуміло, що в даному випадку квантові властивості електронів є не істотними, і їхній рух з високою точністю визначається законами класичної механіки. “Класична” поведінка електронів у даному випадку зумовлена макроскопічними розмірами області простору, в якій вони рухаються.

Задача 3.11. Паралельний пучок теплових (повільних) нейтронів, що мають швидкість $2\cdot 10^3$ м/с, проходить крізь вузьку щілину й потрапляє на екран, який віддалений від щілини на відстань 2,0 м. Оцінити ширину щілини, при якій ширина смуги на екрані, в яку потрапляють нейтрони, буде найменшою.



Розв’язування. В момент проходження нейтрона крізь щілину виникає невизначеність імпульсу $\Delta\vec{p}$ (див. рис.)

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{b},$$

де b – невизначеність координати, рівна ширині щілини. Через це нейтрони можуть відхилятися на невеликі кути

$$\varphi \le \frac{\Delta p}{p} \approx \frac{\hbar}{mvb}.$$

Як наслідок, слід пучка нейтронів на екрані з кожного боку розширюється на величину (див. рис.)

$$\delta h = l\varphi \approx \frac{l\hbar}{mvb}.$$

Тому шукана ширина смуги на екрані

$$d = b + 2\delta h \approx b + \frac{2l\hbar}{mvb}. \qquad (1)$$

Інакше кажучи, ширина смуги складається з геометричної тіні щілини (перший доданок) і дифракційного розширення (другий доданок). Тому при широкій щілині, коли дифракція є неістотною, $d \approx b$ і зменшується при звуженні щілини. Але при достатньо малій ширині щілини починає домінувати дифракційне розширення, і при звуженні щілини ширина смуги на екрані зростає. Отже, при певному значенні ширини щілини b_0 ширина смуги на екрані є найменшою. Для визначення величини b_0 треба взяти похідну від (1) і прирівняти її до нуля:

$$d' \approx 1 - \frac{2l\hbar}{mvb^2} \quad \Rightarrow \quad 1 - \frac{2l\hbar}{mvb_0^2} \approx 0 \quad \Rightarrow \quad b_0 \approx \sqrt{\frac{2l\hbar}{mv}} \approx 0{,}01\,\text{мм}.$$

Задача 3.12. За допомогою принципу невизначеності довести, що до складу атомного ядра не можуть входити електрони. Прийняти розміри ядра $d \approx 10^{-14}$ м і відстань між нуклонами $r \approx 10^{-15}$ м.

Розв'язування. Згідно з (3.11), мінімальний імпульс електрона, що знаходиться в області простору розмірами *d*, складає

$$p \approx \frac{\hbar}{d}.$$

За класичною формулою $p = mv$ це відповідає швидкості $v_{\text{кл}} \approx \hbar/md \approx 10^{10}$ м/с $\gg c$. Це означає, що насправді швидкість електрона є близькою до c. При таких швидкостях повна енергія електрона набагато перевищує енергію спокою, тому $E = \sqrt{(p_e c)^2 + E_0^2} \approx p_e c$ і є близькою до кінетичної енергії. Отже, мінімальна кінетична енергія електрона складає:

$$K \approx pc \approx \frac{\hbar c}{d} = \frac{1{,}05 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{10^{-14} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}} \approx 20\,\text{МеВ}.$$

З іншого боку, енергія зв'язку електрона з протоном завдяки кулонівському притяганню, на відстані *r* складає

$$U = \frac{ke^2}{r} = \frac{9 \cdot 10^9 \cdot \left(1,6 \cdot 10^{-19}\right)^2}{10^{-15} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \approx 1,5\,\text{МеВ}$$

Як бачимо, ця енергія щонайменше на порядок менша, ніж необхідно для утримання електрона в ядрі.

Задача 3.13. За допомогою принципу невизначеності оцінити мінімальний розміри та енергію основного (не збудженого) стану атома Гідрогену. *Примітка:* основним називається стан із найменшою можливою енергією.

Розв'язування. Енергія атома Гідрогену E складається з кінетичної енергії електрона $K = \left(p^2/2m\right)$, що визначається його імпульсом p, та потенціальної енергії взаємодії з ядром (протоном), яка визначається відстанню r електрона від ядра відомою формулою $U = \left(kq_{\text{е}}q_{\text{я}}/r\right)$, де $k = \left(1/4\pi\varepsilon_0\right) = 9 \cdot 10^9$ м/Ф. Отже, враховуючи, що $q_{\text{е}} = -e$, і $q_{\text{я}} = e$, маємо:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{ke^2}{r}, \qquad (1)$$

Розміри атома визначаються відстанню r. Отже, згідно з умовою, треба знайти відстань r_0

$$r \cdot p \approx \hbar \quad \Rightarrow \quad p \approx \frac{\hbar}{r}. \qquad (2)$$

Відтак

$$E \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{ke^2}{r}, \qquad (3)$$

Дослідивши цю функцію на екстремум за стандартним алгоритмом, знайдемо відповіді:

$$E'(r) \approx -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{ke^2}{r^2}; \quad E'(r_0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2}{mr_0} \approx ke^2 \quad \Rightarrow$$
$$r_0 \approx \frac{\hbar^2}{kme^2} = 5,3 \cdot 10^{-11}\text{м}; \quad E_0 = E(r_0) \quad \Rightarrow \quad E_0 \approx -\frac{k^2me^4}{2\hbar^2} = -13,6\ \text{еВ}. \qquad (4)$$

Слід зауважити, що отримані відповіді точно співпадають із результатами борівської теорії атома водню та строгої квантової механіки. Такий збіг, природньо, є випадковим, бо ключовий вираз (3) був отриманий не точно, а з наближеного співвідношення (2). Проте він засвідчує інформативність оцінок, які ґрунтуються на принципі невизначеності.

Лекція 4. РІВНЯННЯ ШРЬОДІНГЕРА

4.1. Рівняння Шрьодінгера

При розгляді руху частинки основним завданням є визначення її місцеположення в будь-який момент часу. В механіці Ньютона воно вирішується шляхом розв'язування основного рівняння класичної механіки – диференціального рівняння, яке виражає другий закон Ньютона:

$$\frac{\mathrm{d}^2\vec{r}}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\vec{F}\left(\vec{r},t\right)}{m}.$$

Інтегруванням цього рівняння, можна визначити закон руху $\vec{r} = \vec{r}\left(t\right)$, а по тому й рівняння імпульсу частинки $p\left(t\right) = m\left(\mathrm{d}\vec{r}/\mathrm{d}t\right)$. Тому для класичної частинки можна точно встановити положення та імпульс у будь-який момент часу, а відтак й інші величини, що визначають її механічний стан. Але для мікрочастинки можна говорити не про точні значення $\vec{r}$ і $\vec{p}$ у кожен момент часу, а тільки про ймовірності їхніх можливих значень. Ця та інша інформація про стан частинки, тому основним завданням квантової механіки є визначення хвильової функції $\Psi(\vec{r},t)$ частинки, що рухається в заданому силовому полі.

Існують різні підходи й математичні методи вирішення цього завдання і, відповідно, – різні версії квантової механіки. Найпростішою й наочною є так звана хвильова механіка, що ґрунтується на *рівнянні Шрьодінгера* – диференціальному рівнянні, яке задовольняє хвильова функція частинки в загальному випадку. В декартових координатах воно має вигляд:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) - U\Psi = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \qquad (4.1)$$

Тут $\Psi = \Psi(x,y,z,t)$ - хвильова функція частинки; $U = U(x,y,z,t)$ - функція потенціальної енергії частинки, що визначає силове поле, в якому вона знаходиться; $i = \sqrt{-1}$ – уявна одиниця; $\hbar$ – стала Планка, m – маса частинки.

Рівняння (4.1) можна записати згорнуто та інваріантно відносно вибору системи координат через оператор Лапласа[1]:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi - U\Psi = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \qquad (4.2)$$

Стосовно цього рівняння відразу слід зауважити таке. По-перше, його не можна вивести математично з якихось інших формальних положень, тому

рівняння Шрьодінгера (4.2) є основним рівнянням квантової (хвильової) механіки,

тобто – постулатом, вірогідність якого доводиться тим, що його наслідки підтверджуються дослідом. По-друге, механіка Шрьодінгера є нерелятивістською теорією, тобто, рівняння (4.2) не є чинним при швидкостях сумірних із граничною швидкістю *c*.

У квантовій механіці важливе місце посідає дослідження частинок, які знаходяться в стаціонарних (не залежних від часу) силових полях $U = U(x,y,z)$. У цьому випадку розподіл імовірностей для величин, які визначають стан частинки, теж є стаціонарним і, як доводиться в математиці, хвильову функцію частинки можна записати у вигляді:

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z,)e^{-i\omega t}, \qquad (4.3)$$

де $\omega = E/\hbar$, $i = \sqrt{-1}$, $\psi(x,y,z)$ – “координатна” хвильова функція, що підлягає визначенню.

Підстановка цього виразу в рівняння (4.1) після нескладних викладок дає так зване *стаціонарне рівняння Шрьодінгера*:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0, \qquad (4.4)$$

де E – повна енергія частинки.

Слід зазначити, що інтегрування рівнянь (4.2) і (4.4) звичайно пов’язане з великими математичними труднощами. Тому далі повний розгляд проводиться тільки для деяких найпростіших задач, які дозволяють зрозуміти загальні риси поведінки мікрочастинок і специфіку квантовомеханічного способу їх дослідження.

4.2. Частинка в одновимірному потенціальному ящику

Постановка задачі. Уявімо маленьку пружну кульку, котра рухається без тертя всередині ящика у вигляді прямого паралелепіпеда з абсолютно жорсткими непроникними стінками, що лежить на горизонтальній площині. За таких умов усередині ящика кулька рухається, як вільна частинка, і зіткнення зі стінками відбуваються пружно, без зміни величини імпульсу та

кінетичної енергії. Задля спрощення викладок будемо вважати, що рух відбувається вздовж одного з ребер ящика довжини l.

При пружному зіткненні із непроникною стінкою ящика кінетична енергія кульки, якою б вона не була, повністю переходить у потенціальну енергію пружної деформації, а потім на стадії відскоку відновлюється до вихідної величини. Але при необмеженій жорсткості стінок деформації є гранично малими, тому перетворення енергії відбуваються в одній точці – точці дотику кульки до стінки ящика. В такому разі можна вважати, що потенціальна енергія кульки $U(x)$ скрізь всередині ящика дорівнює нулю, а на стінках стрибком зростає і може бути якою завгодно, як показано на рис. 4.1. Отже, можна говорити, що частинка в ящику рухається в такому силовому полі, де її потенціальна енергія $U = 0$ в області шириною l і $U \to \infty$ за її межами. Фраза досить громіздка. Тому для характеристики типових силових полів використовують відповідні жаргонні тебрміни. Зокрема, описане поле називають *потенціальним ящиком* або *потенціальною ямою з нескінченно високими вертикальними стінками.*

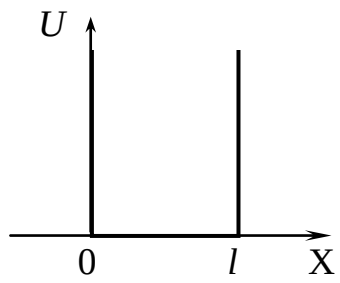


Рис. 4.1

Характеристики руху кульки в ящику – енергія та імпульс – ніяк не залежать від її маси та розмірів ящика. Вони задаються із зовні при приведенні культи в рух. Це стосується й мікрочастинки за умов, коли вона не виявляє квантових властивостей (див. Лекція 3, п. 3.4). Приміром, енергія молекул газу в посудині визначається не розмірами посудини чи масами молекул, а температурою газу.

Але поведінка мікрочастинки, що заперта в мікроскопічному “ящику”, не є очевидною. Вона підпорядкована законам не класичної, а квантової механіки, і її треба розглядати на основі рівняння Шрьодінгера (4.4). Складемо його, спрямувавши координатну вісь OX уздовж напрямку руху частинки. В такому разі хвильова функція є функцією тільки однієї змінної $\psi(x)$ і $\nabla^2\psi = \left(\mathrm{d}^2\psi / \mathrm{d}x^2\right)$. Через непроникність стінок частинка не може

опинитися за межами ящика ні за яких умов. Отже, хвильова функція існує тільки в області $x \in [0; l]$, де $U(x) = 0$. Тому рівняння (4.4) має вигляд:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi = 0, \tag{4.5}$$

де

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{4.6}$$

При цьому з вимоги неперервності хвильової функції випливає, що вона дорівнює нулю не тільки за межами ящика, а й на його стінках:

$$\psi(0) = \psi(l) = 0. \tag{4.7}$$

Хвильові функції. Квантові стани. З математики відомо, що розв'язками рівняння (4.5) є гармонічні функції, тож можна записати:

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha), \tag{4.8}$$

де A та α – довільні константи (сталі інтегрування). Але з усієї множини розв'язків (4.8) хвильовими функціями частинки є лише ті, що задовольняють вимоги однозначності, неперервності та обмеженості (див. Лекція 3, п. 3.3).

Усі функції (4.8) є однозначними та обмеженими, але неперервними з них є лише ті, що задовольняють умови (4.7). При цьому з умови $\psi(0) = 0$ випливає $A\sin\alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0$, отже

$$\psi(x) = A\sin kx. \tag{4.9}$$

А з другої умови $\psi(l) = 0$, маємо:

$$\sin kl = 0 \quad \Rightarrow \quad kl = \pm\pi n.$$

Отже, параметр k може мати лише дискретні значення

$$k_n = \pm\frac{\pi}{l}n, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{4.10}$$

і зі всієї множини розв'язків (4.8) хвильовими функціями частинки є лише окремі (дискретні) функції

$$\psi_n(x) = \pm A \sin\left(\frac{\pi x}{l} n\right), \quad n = 1, 2, \ldots .$$

Відмітимо, що у множині чисел n відсутнє значення n = 0, хоча формально воно задовольняє вимозі $\psi(l) = 0$. Це й зрозуміло, адже при n = 0 хвильова функція $\psi_0(x) = 0$ при будь-якому значенні x, що означає відсутність частинки.

Амплітуди A хвильових функцій визначаються з умови нормування (4.7):

$$A^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi x}{l} n\right) \mathrm{d}x = 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{A^2 l}{2} = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Таким чином, *хвильові функції частинки в ящику утворюють дискретний набір*:

$$\psi_n(x) = \pm\sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi x}{l} n\right), \; n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (4.11)$$

Хвильова функція повністю визначає стан мікрочастинки. Тому дискретність функцій (4.11) означає, що для частинки в ящику можливі не будь-які, а лише в окремі дозволені стани. Це явище називається *квантуванням*, а самі дозволені стани – *квантовими станами*.

Енергетичний спектр. Кожна хвильова функція ψ_n і кожен квантовий стан частинки в ящику визначається відповідним значенням параметра k_n, який пов'язаний із енергією частинки формулою (4.6). Тому, врахувавши вираз (4.10), отримаємо:

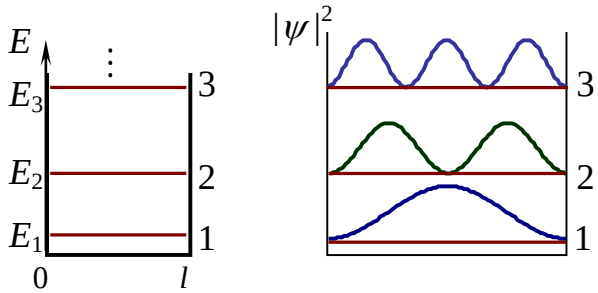
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (4.12)$$

Отже, енергія частинки в ящику теж є квантованою: в кожному дозволеному стані вона може мати тільки відповідне значення з набору (4.12), який називається *енергетичним спектром* частинки. Кожне дозволене значення енергії E_n утворює відповідний *енергетичний рівень*, а число n називається *квантовим числом* цього рівня. Наочно енергетичні рівні зображують горизонтальними відрізками на енергетичній діаграмі (рис. 4.2а).

Іншою особливістю енергетичного спектра (4.12) є те, що найнижчий енергетичний рівень не дорівнює нулю:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}. \qquad (4.12a)$$

Оскільки енергія частинки в ящику є чисто кінетичною, це означає, що частинка ні за яких умов не може перебувати у стані спокою. Такий висновок є дуже дивним для класичної механіки, але він повністю узгоджується із принципом невизначеності. Справді, якщо частинка нерухома, то її імпульс відомий точно: $p = 0$, і невизначеність імпульсу $\Delta p = 0$. Але це суперечить співвідношенням Гайзенберга (3.10): оскільки невизначеність координати частинки в ящику $\Delta x \le l$, то повинно бути $\Delta p \ge \hbar / l$. Якщо прийняти мінімальний імпульс частинки $p_{\min} \sim \hbar / l$ (див. Лекція 3, п. 1.3), то для мінімальної енергії частинки отримаємо $E_{\min} \sim \hbar^2 / 2ml^2$, що за порядком величини узгоджується з виразом (4.12*a*).



***а*)** ***б*)**

Рис. 4.2

Розглянуті особливості поведінки частинок не спостерігаються в класичній механіці, навіть якщо йдеться про рух мікроскопічних частинок, наприклад, молекул газу в посудині. Для з'ясування причин цього оцінимо найменшу можливу кінетичну енергію E_1 та швидкість руху v_1 електрона ($m \approx 10^{-30}$ кг) в ящику ширини $l = 10^{-10}$ м і молекули кисню O_2 ($m \approx 5{,}3 \cdot 10^{-26}$ кг) в посудині розміром $l = 10$ см.

Для електрона маємо:

$$E_1 = \frac{mv_1^2}{2} = \frac{3{,}14^2 \cdot 1{,}05^2 \cdot 10^{-68}}{2 \cdot 9{,}1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-20}} = 6 \cdot 10^{-18}\,\text{Дж} \approx 37\,\text{еВ}, \text{ і } v_1 = 3{,}6 \cdot 10^6\ \text{м/с}.$$

Це дуже багато. Наприклад, величина E_1 більш ніж у 100 разів перевищує енергію теплового руху частинок при кімнатній температурі. Натомість аналогічні розрахунки для молекули кисню в посудині дають недоступні для спостереження величини $E_1 \approx 10^{-40}$ Дж і $v_1 \approx 6 \cdot 10^{-8}$ м/с.

Сказане стосується й дискретності енергетичного спектра. Для переведення електрона в ящику ширини 10^{-10} м з першого на другий рівень необхідно надати йому енергію ~ 100 еВ (в атомі водню ≈ 10 еВ). Ця величина відповідає енергії фотонів жорсткого ультрафіолетового випромінювання і в $\sim 10^4$ разів перевищує середню енергію, якою обмінюються частинки внаслідок теплового руху. А для молекули O_2 в посудині розміром $l = 10$ см треба всього $\sim 10^{-21}$ еВ, тобто, ні про яку дискретність рівнів говорити не доводиться. Зауважимо також, що фактична відсутність квантових властивостей у молекули газу зумовлена макроскопічними розмірами ящика (посудини), в якому знаходиться молекула.

Рух частинки в ящику. Частинка в ящику рухається між стінками із сталою швидкістю. Тому класична частинка (кулька) в усіх точках, окрім стінок, буває однаково часто, тобто з однаковою імовірністю. Біля стінок ця імовірність більша, оскільки під час зіткнення частинка витрачає певний час на гальмування та наступний розгін при відскоку. А от квантова частинка і в цьому відношенню поводиться інакше. Згідно з (4.11), густина ймовірності перебування частинки в заданій точці ящика визначається функцією

$$\left|\psi(x)\right|^2 = \frac{2}{l}\sin^2\left(\pi n x/l\right).$$

Із цього виразу випливає, що для квантової частинки в ящику існують точки, в яких $\left|\psi\right|^2 = 0$. Положення таких точок визначається умовою

$$\frac{\pi n x_i}{l} = i\pi \quad \Rightarrow \quad x_i = i\frac{l}{n}, \quad i = 0, 1, 2, \ldots n.$$

Наявність таких точок ілюструє рис. 4.2б, на якому зображено графік $\left|\psi(x)\right|^2$ для трьох перших квантових станів частинки в ящику.

Таким чином для всіх станів, окрім першого (n = 1), *всередині* ящика є точки, в яких частинку не можна виявити *ні за яких умов*. Така поведінка частинки є несумісною з поняттям руху по заданій траєкторії. Але її можна

збагнути на основі хвильових уявлень. А саме. Енергія частинки в ящику є чисто кінетичною

$$E = \frac{p^2}{2m},$$

тож зробивши таку заміну у виразі (4.6), отримаємо:

$$k^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad k = \pm\frac{p}{\hbar} = \pm\frac{2\pi}{\lambda} \ ,$$

де, відповідно до (3.3), λ – дебройлівська довжина хвилі частинки. Це означає, що параметр k в рівнянні (4.9) є хвильовим числом дебройлівських хвиль, які разом із частинкою поширюються в ящику і відбиваються від його стінок. Але теорія хвиль говорить[20], що між двома відбиваючими стінками можуть існувати лише хвилі із дискретними довжинами λ_n, при накладанні яких утворюються стаціонарні стоячі хвилі. При цьому на відстані між стінками має укладатися ціла кількість півхвиль:

$$l = n\frac{\lambda_{\text{n}}}{2} \quad \Rightarrow \lambda_n = \frac{2l}{n}, \ n = 1, 2, 3, \ldots \ .$$

І якщо підставити сюди співвідношення де-Бройля (3.3), то для імпульсу частинки вийде

$$p_n = \frac{\pi\hbar}{l}n, \tag{4.13}$$

а для енергії –

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2,$$

що співпадає з виразом (4.12). Отже, ефект квантування станів можна трактувати як наслідок утворення стоячих дебройлівських хвиль при відбиванні частинки від стінок ящика. При цьому точки, в яких $\left|\psi\left(x\right)\right|^2 = 0$, є вузлами вказаних стоячих хвиль.

На завершення зазначимо, що хвильове поле на кшталт асоційованих із частинкою стоячих хвиль із дискретним набором довжин хвилі утворюється

[20] Про це можна прочитати в будь-якому підручнику з фізики для вишів.

не лише при вільному русі частинки між перпендикулярними до напрямку руху «стінками», а й у більш складних силових полях, які утримують частинку в обмеженій області простору. Відповідно, стани частинки теж квантуються, але хвильові функції та правила квантування є складнішими. Отже,

> *квантування станів є універсальним ефектом і спостерігається завжди, коли мікрочастинка може рухатися тільки в обмеженій області простору.*

Одним із проявів цього ефекту є дискретність станів електронів в атомах, які утримуються в околі ядра кулонівською силою.

Таким чином, у квантовій механіці існування дискретних дозволених станів електронів у атомах не постулюється, як в теорії Бора, а природньо випливає з основного рівняння квантової механіки.

4.3. Частинка у тривимірному ящику

Квантові стани. Розглянемо тепер випадок, коли частинка перебуває в тривимірному ящику з ребрами l_1, l_2, l_3 рис. 4.3 і може в ньому вільно рухатись у будь-якому напрямку. В цьому випадку її хвильова функція є функцією трьох змінних (x, y, z), тож рівняння Шрьодінгера має вигляд:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+k^2\psi=0, \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{4.14}$$

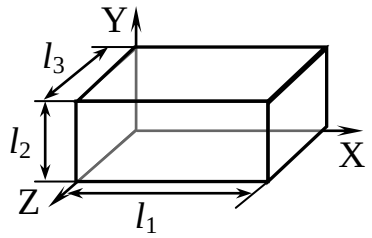


Рис. 4.3

Це рівняння легко розв’язується методом поділу змінних. А саме. Всередині ящика $U(x, y, z) = 0$, і ніякі сили на частинку не діють. Тому координати частинки є незалежними: на можливі значення однієї з них ніяк не впливають дві інші. На мові теорії ймовірностей те, що частинка має задане значення однієї координати при будь-яких інших, є незалежною простою подією, а ймовірність перебування частинки в заданому місці, тобто

того, що вона одночасно має задані значення всіх трьох координат, є складною подією. При цьому в теорії доводиться, що ймовірність складної події дорівнює добутку імовірностей простих незалежних подій, з яких вона «складається». Це враховуючи ймовірнісний зміст хвильової функції, дозволяє шукати розв'язки рівняння розв'язки рівняння (4.14) у вигляді добутку "однокоординатних" функцій, кожна з яких визначає положення частинки тільки відносно однієї координатної осі:

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z).$$

Тоді, підставляючи цей вираз у рівняння (4.14), отримуємо:

$$\begin{gathered} \psi_2\psi_3 \frac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2} + \psi_1\psi_3 \frac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}y^2} + \psi_1\psi_2 \frac{\mathrm{d}^2\psi_3}{\mathrm{d}z^2} = -k^2\psi_1\psi_2\psi_3 \quad \Rightarrow \\ \frac{1}{\psi_1}\frac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{\psi_2}\frac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}y^2} + \frac{1}{\psi_3}\frac{\mathrm{d}^2\psi_3}{\mathrm{d}z^2} = -k^2. \end{gathered} \tag{4.15}$$

Ця рівність містить не числа, а функції $\psi_1(x), \psi_2(y), \psi_3(z)$ і має бути чинною при всіх значеннях змінних *x, y, z*. А це можливо лише за умови, що аналогічні рівності виконуються окремо для кожної з функцій:

$$\frac{1}{\psi_1}\frac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2} = -k_x^2; \qquad \frac{1}{\psi_2}\frac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}y^2} = -k_y^2; \qquad \frac{1}{\psi_3}\frac{\mathrm{d}^2\psi_3}{\mathrm{d}z^2} = -k_z^2,$$

або

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2} + k_x^2\psi_1 = 0; \\ \dfrac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}y^2} + k_y^2\psi_2 = 0; \\ \dfrac{\mathrm{d}^2\psi_3}{\mathrm{d}z^2} + k_z^2\psi_3 = 0. \end{cases} \tag{4.16}$$

При цьому, відповідно до (4.15), параметри k_x, k_y, k_z повинні задовольняти умову:

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2. \tag{4.17}$$

Як бачимо, вихідне рівняння (4.14) трансформувалося в систему з трьох “однокоординатних” рівнянь (4.16), кожне з котрих є ідентичним рівнянню (4.5) з усіма наслідками. Зокрема, однокоординатні хвильові функції мають вигляд (4.11), відповідно до чого повні хвильові функції частинки в тривимірному ящику виражаються, як

$$\psi(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{l_1 l_2 l_3}}\sin\left(\frac{\pi x}{l_1}n_1\right)\cdot\sin\left(\frac{\pi y}{l_2}n_2\right)\cdot\sin\left(\frac{\pi z}{l_3}n_3\right). \qquad (4.18)$$

Так само енергія частинки, згідно з (4.12) і (4.17), виражається, як

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2+k_y^2+k_z^2\right),$$

або, враховуючи вираз (4.10, як

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{l_1^2}+\frac{n_2^2}{l_2^2}+\frac{n_3^2}{l_3^2}\right), \quad n_1,\ n_2,\ n_3\ =\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots\ , \qquad (4.19)$$

де квантові числа $n_1,\ n_2,\ n_3$ *не залежать одне від одного*.

Вираз (4.19) є досить прозорим. Якщо в ньому розрити дужки і врахувати співвідношення (4.13), то вийде:

$$E=\frac{\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)}{2m}=\frac{p^2}{2m},$$

де $\left(p_x, p_y, p_z\right)$ – проекції, а p – модуль імпульсу частинки.

Це висвітлює фізичний зміст проведеної для розв’язування рівняння (4.14) процедури поділу змінних. Вона по суті означає типовий для механіки поділ руху частинки в довільному напрямі на три складові рухи уздовж координатних осей. При цьому кожна однокоординатна хвильова функція ψ_1, ψ_2, або ψ_3 визначає один із таких рухів.

Виродження. Можливість руху в довільному напрямку урізноманітнює квантові стани частинки в тривимірному ящику й ускладнює її енергетичний спектр. Для спрощення розглянемо окремий випадок частинки в кубічному ящику, коли $l_1=l_2=l_3=l$, і енергетичні рівні (4.19) визначаються формулою

$$E=E_0(n_1^2+n_2^2+n_3^2), \quad E_0=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}.$$

Відповідно до цього виразу в таблиці 1 подані енергії та значення квантових чисел для декількох перших енергетичних рівнів частинки в кубічному ящику.

Таблиця 1.

Рівень	Енергія	Квантові числа			Кратність K
		n_1	n_2	n_3	
1	$3E_0$	1	1	1	1
2	$6E_0$	2 1 1	1 2 1	1 1 2	3
3	$9E_0$	2 1 2	2 2 1	1 2 2	3
4	$11E_0$	3 1 1	1 3 1	1 1 3	3
5	$12E_0$	2	2	2	1

Впадає в око, що для деяких рівнів є декілька наборів чисел n_1, n_2, n_3, отже, і хвильових функцій (4.18) та квантових станів частинки. різним значенням проекцій імпульсу, тож і

Різні квантові стани, що відповідають одному й тому самому енергетичному рівню, як і самі такі рівні, називаються виродженими.

Відповідно,

кількість станів із заданим значенням енергії називається кратністю виродження К енергетичного рівня. Для невиродженого рівня К = 1.

Кратності виродження розглянутих рівнів частинки в тривимірному ящику вказані в останній колонці табл. 1.

Виродження станів квантової частинки в ящику є дуже специфічним ефектом. При кожному значенні енергії та імпульсу існує тільки K різних комбінацій чисел n_1, n_2, n_3 і проекцій (4.13) імпульсу на осі. А це означає, що, хоча всередині ящика на частинку не діють ніякі сили, для неї є лише декілька дозволених напрямків руху. Класична частинка (кулька) за таких

умов може рухатися з в будь-якому з нескінченної кількості напрямків. Тому в класичній механіці поняття виродження станів є позбавленим змісту.

Зауважимо також, що ефект виродження станів є типовим і відіграє істотну роль у різних фізичних явищах у різних квантових системах.

4.4. Лінійний гармонічний осцилятор

Класичний осцилятор. У класичній механіці лінійним гармонічним осцилятором називають матеріальну точку, що здійснює вільні гармонічні коливання вздовж однієї осі (лінії), тобто, рухається за законом:

$$x = x_m \cos(\omega t + \varphi).$$

Цей рух здійснюється під дією сили

$$F_x = m\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} = -m\omega^2 x_m \cos(\omega t + \varphi),$$

або

$$F_x = -kx, \quad k = m\omega^2. \tag{4.20}$$

Така сила є консервативною й утворює потенціальне поле $U(x) = -\int F_x \,\mathrm{d}x$, яке визначається формулою

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} \tag{4.21}$$

і на графіку зображується параболою (рис. 4.3). Тому поле виду (4.21) називають параболічним або осциляторним полем.

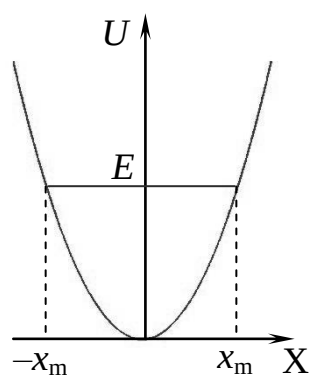


Рис. 4.3

Повна енергія осцилятора зберігається ($E = \text{const}$) і на рис. 4.3а зображується горизонтальним відрізком. Координати точок його перетину з параболою $U(x)$ визначають амплітуду коливань осцилятора: $A = x_{\text{m}}$. При цьому повна енергія E і амплітуда A залежать тільки від початкових умов (початкового відхилення осцилятора від положення рівноваги або наданої йому початкової швидкості) і можуть бути якими завгодно.

Відповідно до виразу (4.20), частота осцилятора ω визначається силовою константою поля k та масою осцилятора m:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \qquad (4.22)$$

Враховуючи цю формулу, вираз потенціальної енергії осцилятора (4.21) можна записати у вигляді:

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \qquad (4.23)$$

Квантовий осцилятор. Енергетичний спектр. Для мікрочастинок сила не є визначеною, тому в квантовій механіці лінійний гармонічний осцилятор означають як частинку, що знаходиться в параболічному силовому полі (4.23). Відповідно, рівняння Шрьодінгера (4.4) для лінійного осцилятора має вигляд:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi = 0. \qquad (4.24)$$

Розв’язування цього рівняння та його розв’язки – хвильові функції квантового осцилятора – є досить складними. Але й без строгого математичного дослідження можна передбачити, що стаціонарні стани квантового осцилятора є квантованими. Справді, при віддаленні від положення рівноваги потенціальна енергія осцилятора зростає необмежено, тож він ні за яких умов не може необмежено віддалитися від положення рівноваги $x = 0$. Тож осцилятор можна розглядати як частинку в потенціальному ящику з параболічними стінками. Тому його стани мають бути квантованими, як про це говорилося в п. 4.2.

Математика підтверджує такий прогноз: однозначні й неперервні розв’язки рівняння (4.24) – хвильові функції осцилятора $\psi_\upsilon(x)$ – існують

лише при окремих значеннях параметра E, що утворюють дискретний енергетичний спектр осцилятора відповідно до умови:

$$E_\upsilon = \left(\upsilon + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad \upsilon = 0, 1, 2, ..., \tag{4.25}$$

де υ – квантове число осцилятора, або *коливальне квантове число*, а величина $\omega = \sqrt{k/m}$ по аналогії з класичним осцилятором називається циклічною частотою квантового осцилятора.

На рис. 4.4а показана картина енергетичних рівнів, яка ілюструє типові риси та деякі особливості енергетичного спектра квантового гармонічного осцилятора. Зокрема, вираз (4.25) показує, що осцилятор, як і частинка в прямокутному ящику, не може перебувати у стані спокою. Мінімальна енергія його коливань (енергія основного стану) дорівнює

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{4.25a}$$

Такими квантовими осциляторами є атоми в твердих тілах і рідинах, оскільки їхній тепловий рух являє собою малі коливання навколо положень рівноваги. Отже навіть при температурі $T = 0$ К рух атомів не припиняється – вони здійснюють так звані «нульові коливання» з енергією E_0. Але атоми не можуть передавати цю енергію один одному, тому квантові нульові коливання не мають нічого спільного з тепловим рухом атомів і не суперечать поняттю абсолютного нуля температури, так само як не суперечить йому рух електронів всередині атомів.

Енергетичні рівні збуджених станів осцилятора, які можна записати у вигляді

$$E_\upsilon = E_0 + n\hbar\omega, \quad n = 1, 2, \ldots,$$

є еквідистантними – вони розташовані в енергетичній шкалі на однаковій відстані (рис. 4.4а)

$$\Delta E = E_{\upsilon+1} - E_\upsilon = \hbar\omega. \tag{4.26}$$

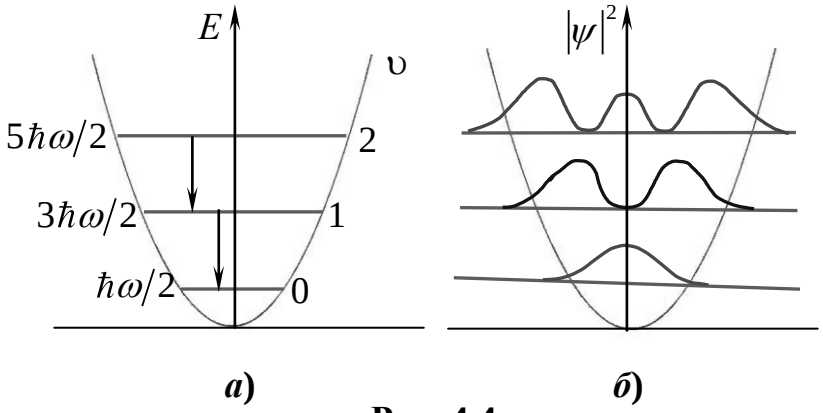


Рис. 4.4

Отже, при переході гармонічного осцилятора з будь-якого енергетичного рівня на нижчий сусідній рівень, згідно із законом збереження енергії, випромінюється порція (квант) енергії $\hbar\omega$. Це пояснює квантову гіпотезу Планка та правило частот Бора.

Теорія і дослід показують, що можливі тільки такі зміни стану осцилятора, при яких коливальне квантове число змінюється на одиницю:

$$\Delta\upsilon = \pm 1.$$

Згідно з цим “правилом відбору”, можливі переходи лише між сусідніми енергетичними рівнями осцилятора, і згідно з (4.26), атоми твердого тіла мали б обмінюватися квантами енергії однієї єдиної частоти. Але насправді так відбувається тільки при дуже низьких температурах. У загальному ж випадку в спектрах коливань атомів присутні цілі смуги близьких частот. Це пов’язано з ангармонізмом – відхиленням взаємодії між атомами від гармонічного закону (4.21) при підвищених температурах. Слід зазначити, що величина квантів коливальної енергії набагато менша, ніж енергія, що випромінюється чи поглинаються при переходах електронів між рівнями в атомах. Тому частоти коливальних переходів атомів лежать у далекій інфрачервоній області спектра.

Атоми здійснюють коливання не тільки в конденсованій речовині, а і в окремих молекулах. Тож при зміні стану молекули відбувається не тільки перехід електронів в атомах з одних електронних рівнів на інші, а й перехід самих атомів із одних коливальних рівнів на інші. Через це при переходах електронів у молекулах між заданими двома рівнями випромінюються (чи поглинаються) фотони не з однією частотою, а з цілою низкою близьких частот, які відповідають переходам атомів між різними коливальними

рівнями. Тому молекулярні спектри є не лінійчастими, як атомарні, а смугастими.

Принагідно зазначимо, що експериментальні дослідження молекулярних спектрів не лише підтверджують квантову теорію осцилятора, а й дають цінну інформацію про взаємодію та розташування атомів у молекулах.

Хвильові функції. Із рівняння (4.24) можна отримати аналітичні вирази хвильових функцій гармонічного осцилятора $\psi_\upsilon(x)$, і визначити розподіл ймовірностей $|\psi(x)|^2$ знаходження осцилятора в різних точках простору для різних квантових станів.

Для перших трьох станів ($\upsilon = 0, 1, 2$) графіки $|\psi(x)|^2$ показано на рис. 4.4б. Загалом вони нагадують аналогічні графіки рис. 4.2б для частинки в ящику з вертикальними стінками. Зокрема, в області руху існують точки з максимальною імовірністю знаходження осцилятора та «заборонені точки», в яких осцилятор виявити неможливо. Проте є й істотна відміна: графіки $|\psi(x)|^2$ виходять за межі графіка $U(x)$, що означає можливість перебування осцилятора в точках з координатами $|x| > x_{\mathrm{m}}$. У таких точках $E < U$, що дає для кінетичної енергії неможливі значення $(p^2/2m) = E - U < 0$. Але цей парадокс пов'язаний із принципом невизначеності і є удаваним. Дійсно, кінетична енергія K визначається імпульсом, а потенціальна U – координатами, тобто величинами, що одночасно на можуть бути точно визначеними (див. лекція 3, п. 3.4). Тому поділ повної енергії $E = K + U$ на кінетичну та потенціальну є певною мірою умовним. При цьому, як доводять розрахунки, у "забороненій зоні" квантовомеханічна невизначеність кінетичної енергії осцилятора ΔK ніде не перевищує «дефіцит» $U - E$. Тому можливість виходу осцилятора в класично заборонену зону $|x| > x_{\mathrm{m}}$ зовсім не означає від'ємність його кінетичної енергії.

4.5. Тунельний ефект

Бар'єри. Якщо на шляху частинки трапляється силове поле, що перешкоджає її рухові, то таке поле називають *потенціальним бар'єром*.

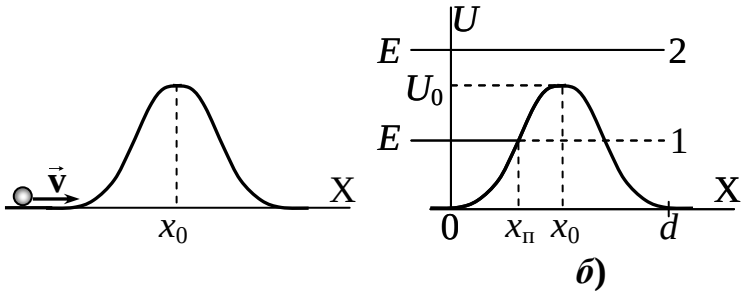


Рис. 4.5

Наприклад, гірка на шляху кульки, що вільно рухається по горизонтальній поверхні (рис. 4.5*а*), створює потенціальний бар'єр, показаний на рис. 4.5*б* графіком залежності $U(x)$ потенціальної енергії кульки від координати. Бар'єр характеризується *висотою* U_0 (максимальною величиною потенціальної енергії) та шириною d (розміром області, в якій існує силове поле[21])

При розгляді руху частинки в напрямку бар'єра виникає природнє запитання – чи подолає вона бар'єр і буде продовжувати рух у тому ж напрямку, чи ні? Для класичної частинки відповідь є однозначною й залежить від співвідношення між повною енергією частинки та висотою бар'єра. При русі частинки в потенціальному полі повна енергія, що складається з кінетичної та потенціальної, зберігається: $E = K + U = \text{const}$. Тому, якщо $E < U_0$ (горизонтальна лінія 1 на рис. 4.5*б*), то частинка *відіб'ється* від бар'єра, тобто дістанеться тільки точки $x = x_п$, де $U = E$ і $K = 0$, і почне рухатись у зворотному напрямі. Якщо ж $E > U_0$ (лінія 2), то навіть при $x = x_0$ (на вершині гірки) кінетична енергія кульки $K = E - U_0 > 0$. Тож при $E > U_0$ кулька обов'язково подолає бар'єр і продовжуватиме рухатися далі. В окремому випадку $E = U_0$ в точці $x = x_0$ кінетична енергія $K = 0$, тобто кулька дістанеться вершини і зупиниться. Отже, формально вона подолає бар'єр, бо не буде відкинута назад. Але рівновага кульки в точці максимуму потенціальної енергії (на вершині гірки) є нестійкою, і в дійсності вона неконтрольовано скотиться в той чи інший бік. Тому цей випадок не являє інтересу.

[21] Зазвичай ця область не визначена точно, тому в кожному випадку вводять певну *ефективну ширину* бар'єра.

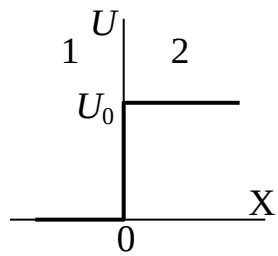


Рис. 4.6

Розглянемо тепер рух квантової частинки за наявності потенціального бар'єра. Для цього треба скласти та розв'язати рівняння Шрьодінгера (4.4). Аби максимально спростити математику, розглянемо бар'єр у вигляді прямокутної сходинки (рис. 4.6). У такому ідеалізованому полі потенціальну енергію в усьому просторі неможливо виразити аналітично, тобто якоюсь однією функцією $U(x)$. Тому рух частинки до бар'єра (область 1, $x < 0$) і в області бар'єра (область 2, $x \geq 0$) описують окремими рівняннями (4.5) для кожної області:

$$\begin{aligned} &\textit{область}\,1: \quad \psi_1'' + k_1^2\psi_1 = 0, \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar; \\ &\textit{область}\,2: \quad \psi_2'' + k_2^2\psi_2 = 0, \quad k_2 = \sqrt{2m(E-U_0)}/\hbar. \end{aligned} \tag{4.26}$$

При цьому, позаяк $\psi_1(x)$ і $\psi_2(x)$ є "половинками" хвильової функції тієї самої частинки, вони на межі областей ($x = 0$) повинні «зшиватися» – гладко переходити одна в одну, тобто задовольняти умови

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0). \tag{4.27}$$

Із математики відомо, що загальні розв'язки рівнянь (4.26) мають вигляд

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 \mathrm{e}^{ik_1x} + B_1 \mathrm{e}^{-ik_1x}, \\ \psi_2 &= A_2 \mathrm{e}^{ik_2x} + B_2 \mathrm{e}^{-ik_2x}. \end{aligned} \tag{4.28}$$

Фізичний зміст цих розв'язків стає зрозумілим, якщо записати вираз повної хвильової функції $\Psi(x,t)$, згідно з формулою (4.2):

$$\Psi(x,t) = A\mathrm{e}^{-i(\omega t - kx)} + B\mathrm{e}^{-i(\omega t + kx)}.$$

Така функція описує сукупність двох хвиль, які поширюються у протилежних напрямках осі X. Отже у виразах (4.28) перший доданок

функції ψ_1 відповідає рухові частинки у напрямку бар'єра, а другий – її рухові у зворотньому напрямку після відбивання від стінки бар'єра. Так само перший доданок у ψ_2 відповідає рухові частинки в області бар'єра після подолання стінки. А от другого доданку в ψ_2, себто зворотньої хвилі, не може бути, бо далі ніяких перешкод на шляху частинки немає. Тому $B_2 = 0$, і $\psi_2 = A_2 \mathrm{e}^{ik_2x}$.

Суттєво також, що реально прослідкувати за окремою частинкою в потоці, що падає на бар'єр, неможливо. Можна говорити лише про коефіцієнти відбивання та проходження – відсотки частинок, які відбиваються від бар'єра та долають його. Ці коефіцієнти визначаються відносними амплітудами хвильових функцій $b_1 = B_1/A_1$ і $a_2 = A_2/A_1$. Відтак розв'язки (4.28) можна подати, як

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \mathrm{e}^{ik_1x} + b_1 \mathrm{e}^{-ik_1x}, \\ \psi_2 &= a_2 \mathrm{e}^{ik_2x}. \end{aligned} \qquad (4.28a)$$

Накладаючи на ці функції умови «зшивання» (4.27), визначимо відносні амплітуди:

$$\begin{aligned} 1 + b_1 &= a_2, \\ k_1(1 - b_1) &= k_2 a_2; \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad a_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, \quad b_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}. \qquad (4.29)$$

Ці вирази дозволяють аналізувати поведінку потоку частинок, що налітають на бар'єр, у залежності від значень k_1 і k_2 (формули (4.26)), тобто від енергії частинок E та висоти бар'єра U_0. Зосередимося лише на випадку $E < U_0$. За такої умови величина k_2 є уявною. В такому разі її доцільно записати, як

$$k_2 = ik, \text{ де } \; k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}, \; i = \sqrt{-1}. \qquad (4.30)$$

Тоді амплітуда b_1 у виразах (4.29) дорівнює:

$$b_1 = \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik}.$$

При цьому ймовірність відбивання

$$\left|b_1 \mathrm{e}^{-ik_1x}\right|^2 = b_1 \mathrm{e}^{-ik_1x} \cdot b_1^* \mathrm{e}^{ik_1x} = b_1 b_1^* = \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik} \cdot \frac{k_1 + ik}{k_1 - ik} = 1.$$

Отже, всі частинки, що налітають на бар'єр, відбиваються від нього. Оскільки $E < U_0$, такий результат є цілком очікуваним. Але при цьому, згідно з виразами (4.28*a*) і (4.30), $\psi_2 = a_2 \mathrm{e}^{-kx}$, де k – дійсне число. Тому

$$\left|\psi_2\right|^2 = \left|a_2\right|^2 \cdot \mathrm{e}^{-2kx} \neq 0. \qquad (4.31)$$

Отже, існує ймовірність проникнення частинки в заборонену в класичній механіці область "під бар'єром". Пояснення цього суто квантового феномена таке саме, як і у випадку квантового осцилятора (п. 4.4).

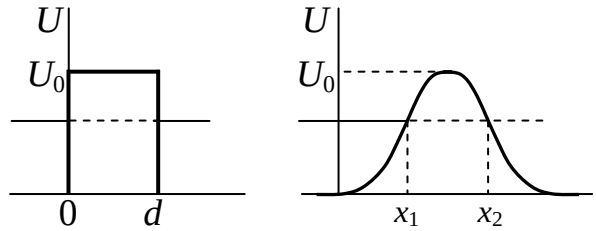
Тунельний ефект. Як випливає з (4.31), імовірність заглиблення частинки під бар'єр стрімко спадає із збільшенням відстані x. Тому частинки, після подолання стінки заглиблюються в область бар'єра тільки на дуже малу відстань і повертаються назад. При цьому глибина заглиблення тим більша, чим менша величина k (4.31), тобто чим більша початкова кінетична енергія $K_0 = E$ (і швидкість) частинки. Описана поведінка квантової частинки зовні нагадує відбивання від поверхні води легкої кульки, що падає з деякої висоти: вона спочатку занурюється на певну глибину, а потім вискакує назад. При цьому глибина занурення зростає при збільшенні швидкості входження кульки у воду.

Якщо на шляху частинки трапляється бар'єр скінченної, причому дуже малої ширини d, існує помітна імовірність того, що вона заглибиться в область бар'єра на відстань $x = d$. В такому разі частинка подолає бар'єр і зможе рухатися далі, хоча при $E < U_0$ її енергія для цього формально є недостатньою.

> *Проходження частинок крізь бар'єр при енергії, меншій за його висоту, називається тунельним проходженням або тунельним ефектом.*

Імовірність тунельного проходження, інакше – *прозорість* бар'єра D, є пропорційною ймовірності проникнення частинки під бар'єр на відстань $x = d$ і для прямокутного бар'єра (рис. 4.7*a*) наближено виражається формулою

$$D \approx \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)} \cdot d} \qquad (4.32)$$



***а*)** ***б*)**

Рис. 4.7

У випадку бар'єра довільної заданої форми $U = U(x)$ (рис. 4.7*б*) прозорість виражається (див. п. 4.7, задача 4.5), як

$$D \approx \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U(x)-E)}\cdot \mathrm{d}x} \qquad (4.32a)$$

З наведених формул видно, що ймовірність тунелювання є дуже чутливою до маси частинки та характеристик бар'єра, зокрема, ширини. Наприклад, для електронів при *ефективній висоті* прямокутного бар'єра $U_0 - E = 1{,}0$ еВ розрахунки за формулою (4.32) для різної ширини *d* дають:

d, нм	0,2	0,5	1,0	2,0
D	0,135	0,007	$4{,}5\cdot 10^{-5}$	$2{,}1\cdot 10^{-10}$

Отже, прозорість бар'єра є помітною лише при гранично малій його ширині, і може здатися, що на практиці спостерігати тунельний ефект неможливо. Але це не так. Достатньо вузькі й помірно високі бар'єри створюються для валентних електронів ядрами атомів у твердих тілах. При цьому через велику концентрацію електронів ($\sim 10^{23}\ 1/\text{см}^3$), навіть при дуже малій прозорості бар'єрів відбувається велика кількість тунельних переходів. Це зумовлює низку характерних тунельних явищ, які не лише спостерігаються в експериментах, а й використовуються на практиці.

Тунельні явища. Одним із проявів тунельного ефекту є виникнення так званої *контактної різниці потенціалів* при дотику двох різних металів або інших електропровідних матеріалів.

У кожному металі для вільних електронів на межі з вакуумом існує потенціальний бар'єр типу сходинка. Для його подолання і виходу з металу електрон має виконати роботу виходу *A*, яка щонайменше в десятки разів перевищує середню енергію теплового руху електронів при кімнатній

температурі. Тому електрони не здатні вільно виходити з металу. Але при дотику двох металів ситуація істотно змінюється – потенціальний бар'єр для електронів, звичайно, не зникає, проте стає дуже вузьким. І, хоча долати бар'єр «класично» за рахунок теплової енергії електрони не можуть, вони стають здатні подолати його тунельно. Тому частина електронів із металу, в якому зайняті більш високі енергетичні рівні, переходить на вільні енергетичні рівні другого металу. Відтак перший заряджається позитивно, а другий негативно, і між металами виникає відповідна контактна різниця потенціалів. Доказом саме тунельного, а не теплового механізму переходу електронів є те, що контактна різниця потенціалів установлюється практично миттєво при будь-яких температурах, включно з близькими до 0 К.

Вузький потенціальний бар'єри для електронів на межі метал-вакуум можна створити також за допомогою сильного неоднорідного електричного поля. Для цього виготовляють вакуумні лампи з катодом (негативним електродом) у вигляді гострої голки. При подаванні на таку лампу прямої напруги («+» на аноді) біля вістря (катода) виникає дуже сильне електричне поле (до 10^7 В/см і більше). Це поле напрямлене до вістря, тому при віддаленні від нього потенціал стрімко зростає, а потенціальна енергія електрона відповідно зменшується. Таким чином створюється вузький потенціальний бар'єр, крізь який електрони можуть тунелювати з катода і далі прискорено рухаючись до анода, створювати в лампі електричний струм (детальніше див. п. 4.7, задача 4.6). Це явище називається автоелектронною (або «холодною») емісією. Воно використовується у так званих лампах із холодним катодом, які мають великі переваги перед іншими аналогічними функціональними елементами в деяких спеціальних електронних схемах.

Ще одним електронним приладом, де використовується тунельний ефект, є так званий тунельний діод, у якому струм зумовлений тунельним проходження носіїв крізь бар'єр із керованими параметрами (шириною та висотою).

У діелектриках теж має місце тунельний ефект, хоча прийнято вважати, що електрони в діелектрику «прив'язані» до своїх ядер. Насправді це не зовсім так, оскільки через малу відстань між атомами ($\sim 10^{-10}$ м) ядра створюють для електронів вузькі і достатньо прозорі потенціальні бар'єри. Тому валентні електрони не тільки в металах, а й у діелектриках інтенсивно рухаються від атома до атома. Але це не спричинює електропровідності, бо такий тунельний рух в діелектрику можливий тільки внаслідок обміну

електронами між сусідніми атомами і не створює перенесення електричного заряду, себто струму.

На завершення зазначимо, що тунельний ефект спостерігається не лише для електронів, а й для масивних частинок, але з набагато меншою ймовірністю. Як приклад можна навести радіоактивний α- розпад атомних ядер, при якому з ядра самовільно вилітають масивні α- частинки (ядра атомів гелію). Між нуклонами в ядрі діють надзвичайно потужні ядерні сили зчеплення, тому вихід α- частинки з ядра за рахунок кінетичної енергії виключається, і можливе лише тунельне проходження. Правда, через велику висоту бар'єра $\left(\sim 10^{6}\ \text{åÂ}\right)$ і масу α- частинки $\left(\sim 10^{-26}\ \text{êã}\right)$ імовірність такого процесу дуже мала. Цим пояснюється те, що для багатьох α- активних елементів час, за який розпадається помітна частка ядер, вимірюється тисячами і десятками тисяч років.

4.6. Контрольні запитання

1. Отримайте рівняння Шрьодінгера для стаціонарних станів (4.4) із загального рівняння (4.2) за допомогою підстановки (4.3).
2. Чим поведінка мікроскопічної частинки в потенціальному ящику принципово відрізняється від руху маленької кульки між стінками всередині маленької коробочки?
3. Отримайте енергетичний спектр (4.12) частинки в одновимірному ящику за допомогою співвідношень де-Бройля (3.3).
4. Доведіть за допомогою принципу невизначеності, що мікрочастинка в потенціальному ящику не може перебувати в стані спокою.
5. Оцініть найменшу можливу енергію частинки в одновимірному потенціальному ящику за допомогою принципу невизначеності.
6. Запишіть формулу енергетичних рівнів частинки маси m, яка знаходиться в двовимірному квадратному потенціальному ящику зі стороною a. Чому дорівнює енергія основного стану такої частинки?
7. Які енергетичні рівні називаються виродженими? Що таке кратність виродження?
8. Чому дорівнює максимальна можлива кратність виродження енергетичного рівня для частинки в квадратному потенціальному ящику?

9. Згідно з (4.25) і (4.25*а*), атоми твердого тіла, котрі можна трактувати як квантові осцилятори, навіть при температурі $T = 0$ К перебувають у русі. Як це узгоджується з уявленням про абсолютний нуль температури як температуру, при якій припиняється тепловий рух частинок речовини?

10. Скільки частот можна спостерігати в спектрі випромінювання лінійного гармонічного квантового осцилятора?

11. Чим принципово відрізняється поведінка квантової частинки та матеріальної точки (класичної частинки), коли на шляху їхнього руху трапляється потенціальний бар'єр?

12. Чим відрізняється поведінка класичної та квантової частинок при зіткненні з потенціальним бар'єром типу сходинка, висота якого більша за кінетичну енергію частинки?

13. У чому полягає тунельний ефект? Що називається прозорістю бар'єра?

14. Як і в скільки разів зміниться потік частинок, які тунелюють крізь прямокутний бар'єр, якщо в 10 разів збільшиться: а) ширина бар'єра; б) його ефективна висота.

15. Порівняйте імовірності тунельного проходження крізь один і той самий бар'єр для електрона ($m_e = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ кг) і для та протона ($m_p = 1{,}66 \cdot 10^{-27}$ кг).

4.7. Задачі

Задача 4.1. Розглядаючи електрон як частинку в потенціальному ящику ширини l, оцінити енергію (в еВ), необхідну для переведення електрона з основного на перший збуджений рівень:

1) у кусочку металу розміром l = 1,0 мм;

2) в атомі Гідрогену, прийнявши $l = 10^{-10}$ м.

Розв'язування. Згідно з формулою (4.12), для переведення частинки з певного енергетичного рівня на наступний потрібна енергія

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}\left((n+1)^2 - n^2\right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}(2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2} n.$$

У заданому випадку n = 1, то ж

$$\Delta E \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{ml^2} \quad \Rightarrow \quad \Delta E_1 \approx 7{,}5\cdot 10^{-13}\,\text{еВ}, \quad \Delta E_2 \approx 75\,\text{еВ}.$$

Як видно, для металу відстань між енергетичними рівнями є гранично малою, тому в багатьох задачах електронної теорії металів можна нехтувати дискретністю енергетичного спектра, і розглядати електрон як класичну частинку. Що ж до атома, то в ньому квантові ефекти є визначальними. Правда, слід зазначити, що отримана оцінка суттєво відрізняється від істинної величини $\Delta E \approx 10\,\text{еВ}$, яку дає точний квантовомеханічний розрахунок. Це пояснюється тим, що прийняте в задачі трактування електрона в атомі як вільної частинки в ящику з вертикальними стінками є досить грубим.

Задача 4.2. На якому енергетичному рівні знаходиться частинка в одновимірному потенціальному ящику, якщо відстані ΔE між ним і найближчими сусідніми рівнями відрізняються в $\eta = 1{,}4$ рази?

Розв'язування. За умовою задачі

$$\eta = \frac{\Delta E_2}{\Delta E_1} = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n - E_{n-1}}.$$

Виразивши енергії за формулою (4.12), отримаємо:

$$\begin{aligned} \Delta E_1 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n-1) \\ \Delta E_2 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n+1) \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \eta = \frac{\Delta E_1}{\Delta E_2} = \frac{2n+1}{2n-1}.$$

Звідси знаходимо відповідь:

$$n = \frac{\eta + 1}{2(\eta - 1)} = 3.$$

Задача 4.3. Частинка маси m перебуває в першому збудженому стані в одновимірному ящику ширини l. Визначити ймовірність знаходження частинки в зоні шириною $l/4$, яка: 1) прилягає до стінки ящика; 2) розміщена симетрично посередині.

Розв'язування. Імовірність P знаходження частинки в заданій області простору $[x_1, x_2]$, згідно з виразами (3.8*а*) і (3.9), визначається через хвильову функцію, як

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x.$$

Хвильова функція частинки в ящику в першому збудженому стані визначається виразом (4.11) при $n = 2$. Отже,

$$P = \frac{2}{l} \int_{x_1}^{x_2} \sin^2 \frac{2\pi x}{l} \cdot \mathrm{d}x = \frac{1}{l} \left((x_2 - x_1) - \frac{l}{4\pi} \cos \frac{4\pi x}{l} \right)_{x_1}^{x_2}. \qquad (1)$$

Згідно з умовою, для першої зони $x_1 = 0$, $x_2 = l/4$, а для другої $x_1 = 3l/8$, $x_2 = 5l/8$. Підставивши ці значення в (1), отримаємо:

$$P_1 = 0{,}33; \quad P_2 = 0{,}09.$$

Задача 4.3. За допомогою принципу невизначеності оцінити мінімальну енергію (енергію «нульових коливань») квантового лінійного осцилятора з частотою ω.

Розв'язування. Енергія гармонічного осцилятора

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{kx_0^2}{2}, \qquad (1)$$

де p – максимальний імпульс, а x_0 – максимальне відхилення від точки рівноваги $x = 0$, яке є мірою невизначеності координати осцилятора. Оскільки у принципі невизначеності фігурують як імпульс, так і координата, вираз (1) доцільно переписати симетрично:

$$E = \frac{1}{2} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{kx_0^2}{2} \right). \qquad (2)$$

У теорії говорилося, що в основному стані невизначеність координати за порядком величини дорівнює дебройлівській довжини хвилі частинки, а невизначеність імпульсу – самому імпульсу. В такому випадку із співвідношень Гайзенберга (3.11) випливає:

$$x_0 p \approx \hbar \quad \Rightarrow \quad p \approx \frac{\hbar}{x_0}.$$

За допомогою такої підстановки у формулу (2) можна отримати оціночний вираз енергії осцилятора тільки через величину x_0:

$$E \approx \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} + \frac{kx_0^2}{2}\right). \qquad (3)$$

Оскільки енергія осцилятора в основному стані є мінімальною, величину x_0 знайдемо, наклавши умову (dE/dt) = 0 на вираз (3):

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x_0} \approx \frac{1}{2}\left(-\frac{\hbar^2}{mx_0^3} + kx_0\right) \approx 0 \quad \Rightarrow \quad x_0^2 \approx \frac{\hbar}{\sqrt{km}}.$$

Підставляючи отриману величину x_0 у вираз (3) враховуючи формулу (4.22), можна знайти й оцінку мінімальної енергії осцилятора E_0, але простіше зробити це за допомогою формули (1):

$$E_0 \approx \frac{k}{2} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{km}} = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2}\hbar\omega.$$

Слід зауважити, що отримане оціночне значення E_0 співпадає з точним (4.25*a*), але такий збіг є випадковим.

Задача 4.4. Однорідний потік електронів з енергією E = 8,5 еВ і густиною потоку $n_0 = 10^{20}\ 1/\mathrm{c}\cdot\text{ñì}^{\ 2}$ налітає на прямокутний потенціальний бар'єр висоти U = 9,0 еВ і ширини d = 1,0 нм. Оцінити густину створюваного електронами тунельного струму j.

Розв'язування. Густина тунельного струму j, що створюється пучком електронів, які проходять крізь бар'єр, дорівнює кількості електрики, яку вони переносять через одиничну площадку за одиницю часу. Отже $j = ne$, де e – елементарний заряд, і n – густина потоку в електронному пучку на виході з бар'єра, яка дорівнює $n = n_0 D$, де імовірність тунельного проходження електрона D (прозорість бар'єра) задається формулою (4.32): $D \approx \left(\exp\left(-2\sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar\right)\right)$. Отже шукана густина тунельного струму

$$j \approx en_0 \cdot \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}\cdot d}.$$

Обчислення дають:

$$j \approx 1{,}6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^{20} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{2}{1{,}05\cdot 10^{-34}}\sqrt{2\cdot 9{,}1\cdot 10^{-31}\cdot(9-8{,}5)\cdot 1{,}6\cdot 10^{-19}}\cdot 10^{-9}} \approx 1 \text{ мкА/см}^2.$$

Задача 4.5. Виходячи з формули (4.31), знайти вираз (4.31*а*) прозорості бар'єра довільної форми $U = U(x)$.

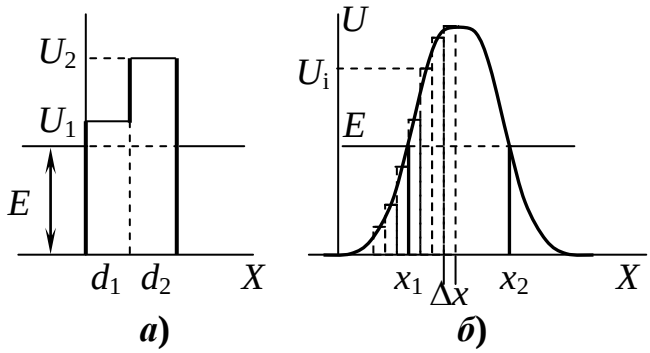


Рис. 4.7

Розв'язування. Розглянемо спочатку прозорість бар'єра, показаного на рис. 4.7*а*. Подолати такий бар'єр означає для частинки послідовно пройти крізь два прямокутних бар'єра різної висоти. При цьому, якщо прозорість другого прямокутного бар'єра складає D_2, то кількість частинок на виході $n_2 = n_1 D_2$, де n_1 – кількість частинок, які подолали перший бар'єр. Величина n_1 визначається так само через кількість частинок *n*, які налітають на подвійну сходинку, та прозорість D_1 першого бар'єра: $n_1 = nD_1$. Тому кількість частинок, які подолають такий ступінчастий бар'єр, дорівнює

$$n_2 = nD_1D_2.$$

Звідси випливає, що прозорість (імовірність подолання) розглянутого бар'єра, рівна n_2/n, виражається, як $D = D_1D_2$. Міркуючи так само, отримаємо для ступінчастого бар'єра із довільною кількістю сходинок *n*:

$$D = D_1 \cdot D_2 \cdots D_i \cdots D_n \equiv \prod_i D_i. \qquad (1)$$

Отриманий результат можна поширити й на бар'єр із гладкою залежністю $U(x)$, рис. 4.7*б*. Для цього спочатку подумки замінимо його послідовністю вузеньких бар'єрів ширини Δx_i, і відповідної висоти U_i

(штрихові лінії на рисунку). Тоді прозорість D, згідно з виразом (1) і формулою (4.32), наближено запишеться, як

$$D \approx \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\sum_i \sqrt{2m(U_i - E)}\cdot \Delta x_i}. \qquad (2)$$

Очевидно, що при зменшенні ширини Δx_i та висоти ΔU_i сходинок і наближенні ступінчастої лінії до гладкої кривої $U(x)$, вираз (2) буде ставати все точнішим і стане зовсім точним у границі $\Delta x_\mathrm{i} \to 0$. При цьому сума в показнику експоненти трансформується в інтеграл. У підсумку отримуємо вираз (4.32*a*):

$$D \approx \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)}\mathrm{d}x}.$$

Задача 4.6. Відомо, що при вміщенні металу в сильне електричне поле $\vec{\mathcal{E}}$, напрямлене до поверхні, на межі метал-вакуум створюється вузький потенціальний бар'єр, і спостерігається автоелектронна емісія – вихід електронів завдяки тунельному ефекту. Вважаючи поле однорідним, оцінити ймовірність виходу електрона (прозорість бар'єра) в залежності від величини напруженості поля $\mathcal{E}$ та роботи виходу W електрона з металу.

Розв'язування. При виході з металу кінетична енергія електрона зменшується, а потенціальна збільшується на величину роботи виходу W. Тому на межі метал-вакуум для електронів створюється потенціальний бар'єр типу "сходинка" висоти W (штрихова лінія на рис. 4.8), для подолання якого необхідно виконати роботу виходу $W = U_0 - E$ порядку 1 еВ. Ця величина щонайменше в десятки разів перевищує середню енергію теплового руху електронів, тому вони не здатні виходити з металу.

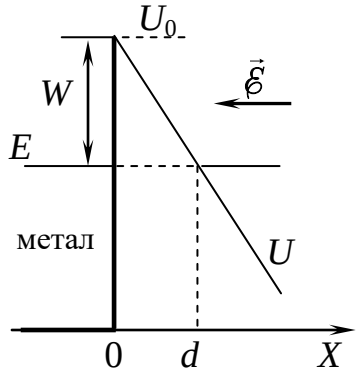


Рис. 4.8

Але ситуація суттєво змінюється, якщо метал вмістити в зовнішнє електричному полі $\vec{\mathcal{E}}$ напрямлене до поверхні. У такому випадку після виходу з металу електрон буде прискорено відділятися під дією сили $\vec{F} = -e\vec{\mathcal{E}}$ з боку поля. При цьому за законом збереження енергії кінетична енергія електрона буде збільшуватись, а потенціальна зменшуватися на величину роботи поля: $\Delta K = -\Delta U = A$. Оскільки за умовою поле однорідне $\left(\vec{\mathcal{E}} = \text{const}\right)$, його робота на відстані x дорівнює $A = Fx = e\mathcal{E}x$. Відповідно,

$$-\Delta U = U_0 - U(x) = e\mathcal{E}x \quad \Rightarrow \quad U(x) = U_0 - e\mathcal{E}x. \qquad (1)$$

Цей вираз показує, що на межі метал-вакуум створюється бар'єр у формі «зубця», (суцільна лінією на рис. 4.8). Його прозорість можна знайти з виразу (4.32*a*)

$$D \approx \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^d \sqrt{2m\left(U(x)-E\right)}\cdot \mathrm{d}x},$$

попередньо визначивши параметри бар'єра.

Величина $U(x) - E$, згідно з виразом (1), дорівнює

$$U_0 - e\mathcal{E}x - E = W - e\mathcal{E}x.$$

Ефективна ширина бар'єра d залежить від енергії електрона і визначається умовою $U(d) = E$:

$$U_0 - e\mathcal{E}d = E \quad \Rightarrow \quad d = \frac{U_0 - E}{e\mathcal{E}} = \frac{W}{e\mathcal{E}}, \qquad (2)$$

де W – робота виходу. Отже, шукана прозорість бар'єра визначається, як

$$D \approx \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^d \sqrt{2m(W-e\mathcal{E}x)}\cdot \mathrm{d}x}. \qquad (3)$$

Інтеграл у показнику експоненти легко обчислюється:

$$\int_0^d \sqrt{2m(W - e\mathcal{E}x)} \cdot \mathrm{d}x = -\frac{2\sqrt{2m}}{3e\mathcal{E}}(W - e\mathcal{E}x)^{3/2}\Big|_0^d = \frac{2\sqrt{2m}\cdot W^{3/2}}{3e\mathcal{E}},$$

де враховано вираз (2). Підставивши отримане значення інтеграла у вираз (3), дістанемо остаточно:

$$D \approx \mathrm{e}^{-\frac{\alpha}{\mathcal{E}}}, \quad \text{де} \quad \alpha = \frac{4\sqrt{2m} \cdot W^{3/2}}{3e\hbar}.$$

Коментуючи отриманий результат, зауважимо, що величина D зростає при збільшенні напруженості поля $\mathcal{E}$. При цьому в сильних, але реально досяжних полях спостерігаються помітні потоки тунельних електронів, що дозволяє використовувати тунельну (автоелектронну) емісію на практиці.

Лекція 5. АТОМ ГІДРОГЕНУ

Атоми – найменші частинки речовини, що відображають усі фізико-хімічні властивості хімічних елементів – мають мікроскопічні розміри $\sim 10^{-10}$ м і маси $\sim \left(10^{-27} \div 10^{-25}\right)$ кг. Тому послідовна теорія атома можлива лише на основі квантової механіки.

Найпростішим із атомів є атом Гідрогену. Він складається з одного електрона, котрий рухається навколо ядра[22] під дією кулонівської сили. За допомогою рівняння Шрьодінгера задача про атом Гідрогену розв'язується точно, але математично є досить складною. Тому далі розглядаються тільки кінцеві теоретичні результати та обговорюється їх зміст.

5.1. Квантові числа

Електрон в атомі Гідрогену знаходиться в полі ядра

$$U\left(\vec{r}\right) = k\frac{q_e q_{\ddot{y}}}{r} = -k\frac{e^2}{r}, \quad k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0},$$

де r – відстань електрона від центра ядра.

Це поле є центральним, тому задачу розглядають у сферичних координатах, і рівняння Шрьодінгера (4.4) має вигляд:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{ke^2}{r^2}\right)\psi = 0, \quad k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}. \qquad (5.1)$$

На рис. 5.1 показаний графік залежності $U(r)$ у будь-якій площині, що проходить через центр ядра. Розглядаючи його, можна зробити деякі правдоподібні припущення щодо поведінки електрона, не розв'язуючи рівняння (5.1). А саме. Якщо повна енергія електрона $E < 0$, (лінія 1 на рис. 5.1) то при віддаленні від ядра на відстань r_0 кінетична енергія електрона $K = E - U$ поступово зменшується аж до нуля так, що він не може віддалитися від ядра далі, ніж на відстань $r = r_0$. Отже, при $E < 0$ електрон є зв'язаним із ядром, іншими словами, – знаходиться в потенціальній ямі. Тому його стани мають бути квантованими. А ось при $E \geq 0$ (лінія 2 на рис. 5.1) електрон має достатню кінетичну енергію аби віддалитися від ядра на

[22] Строго говорячи, обидві частинки рухаються навколо спільного центра мас. Але через велику масу швидкість ядра майже в 2000 разів менша, ніж швидкість електрона. Тому в першому наближенні можна вважати, що електрон рухається навколо нерухомого ядра.

необмежену відстань. Такі стани є не квантованими і означають іонізацію атома.

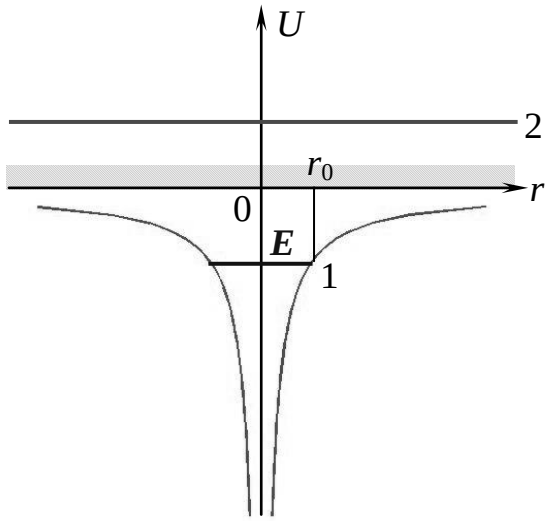


Рис. 5.1

Розв'язування рівняння Шрьодінгера для атома Гідрогену підтверджує сказане: однозначні та неперервні і гладкі розв'язки рівняння (5.1) існують при будь яких значеннях енергії $E \geq 0$, але лише при дискретних значеннях $E = E_{\text{n}}$, якщо $E < 0$. Отже, не іонізований атом може перебувати тільки в деяких дозволених квантових станах. Дозволеним станам відповідає дискретний набір хвильових функцій $\psi(\vec{r}) = \psi_{n,l,m_l}(\vec{r})$, кожна з яких визначається *трьома квантовими числами – головним* ***n****, орбітальним* ***l*** *і магнітним* $\boldsymbol{m_l}$. При цьому, позаяк рух електрона в полі ядра не є вільним, існує певна ієрархія квантових чисел. А саме. Головне квантове число ***n*** може набувати будь-яких значень. Натомість можливі значення ***l*** обмежені величиною ***n***, а значення $\boldsymbol{m_l}$ – величиною ***l***, відповідно до наступних умов:

$$
\begin{aligned}
&n = 1, 2, 3, \ldots; \\
&l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1) \quad - \quad \textit{всього } n \textit{ значень}; \\
&m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l \quad - \quad \textit{всього } 2l+1 \textit{ значень.}
\end{aligned}
\tag{5.2}
$$

5.2. Енергетичний та оптичний спектри атома Гідрогену

Головне квантове число n визначає можливі значення енергії (енергетичний спектр) атома Гідрогену, згідно із формулою:

$$E_{\text{n}} = -\frac{k^2 m e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \qquad k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}. \tag{5.3}$$

Для розрахунків зручно користуватися виразом (5.3) в числовому вигляді:

$$E_{\text{n}} = -\frac{13{,}6}{n^2}\ (\text{еВ}). \tag{5.3а}$$

Принагідно відмітимо, що іони, котрі мають тільки один електрон (так звані воднево-подібні іони) відрізняються від атома Гідрогену лише величиною заряду ядра: $q_{\text{я}} = Ze$, де Z – порядковий номер елемента в таблиці Менделеєва. Тому вони мають аналогічний енергетичний спектр:

$$E_{\text{n}} = -\frac{k^2 m Z^2 e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \tag{5.3б}$$

Схема енергетичних рівнів атома Гідрогену показана на рис. 5.2. Енергія основного рівня (n = 1) $E_1 = -13{,}6\ \text{еВ}$. Щоб іонізувати атом (відривати електрон від ядра), електрон необхідно перевести в стан з енергією $E \geq 0$. Мінімальна необхідна для цього енергія, що називається *енергією іонізації*, дорівнює $E_{\text{i}} = -E_1 = 13{,}6\ \text{еВ}$. Це теоретичне значення співпадає з величиною, знайденою дослідним шляхом.

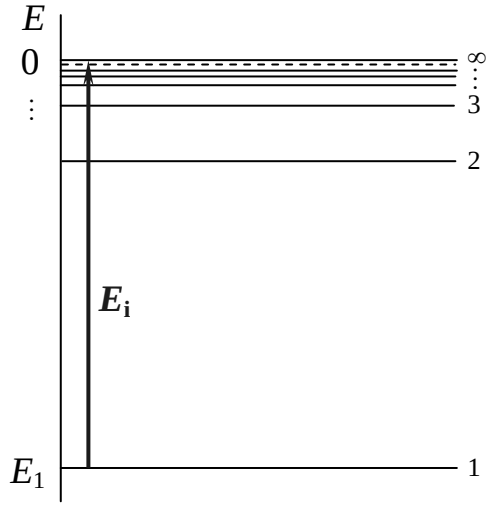


Рис. 5.2

З енергетичного спектра можна отримати й оптичний спектр атомарного Гідрогену – визначити всі частоти або довжини хвиль, які можуть випромінювати збуджені атоми. Енергія фотона, що випромінюється,

дорівнює зміні енергії атома при переході електрона з якогось рівня n_2 на будь-який інший рівень $n_1 < n_2$: $\hbar\omega = E_{n_2} - E_{n_1}$. Тож із виразу (5.3) випливає наступна загальна спектральна формула:

$$\omega = \frac{k^2 m e^4}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right). \qquad (5.4)$$

Отже, спектр атома складається з окремих частот (спектральних ліній), тобто є лінійчастим. Вираз (5.4) записують компактніше, увівши так звану *сталу Рідберґа*:

$$R = \frac{k^2 m e^4}{2\hbar^3} = 2{,}07 \cdot 10^{16} \text{ рад/с}.$$

Відтак

$$\omega = R\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right). \qquad (5.5)$$

Зауважимо, що ця формула, котра називається *узагальненою формулою Бальмера*, була відома з дослідів ще до створення квантової механіки. При цьому теоретичне та експериментальне значення сталої Рідберга R збігаються. Зважаючи на високу точність спектроскопічних вимірювань, це свого часу стало важливим свідченням достовірності рівняння Шрьодінгера.

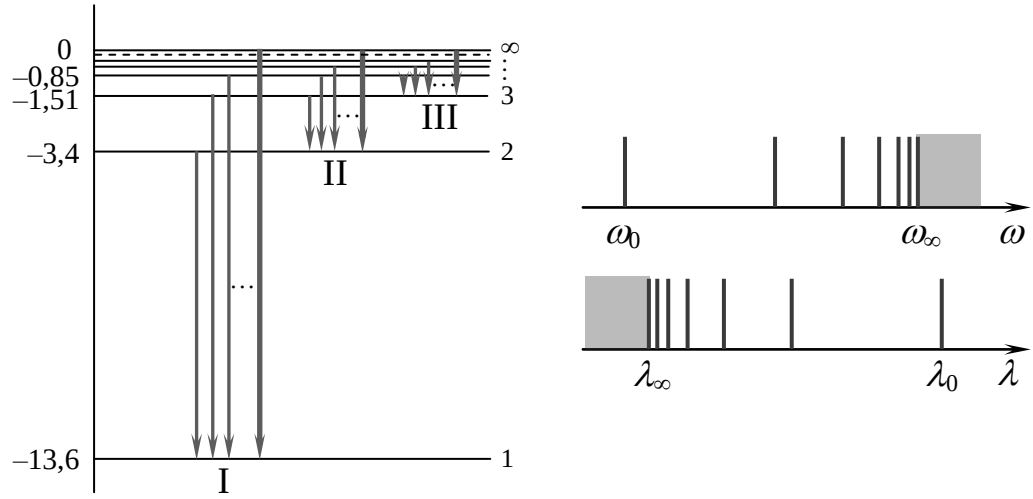
Для водневоподібних іонів спектральна формула має вигляд

$$\omega = RZ^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right), \qquad (5.5a)$$

де Z – порядковий номер елемента в періодичній системі Менделеєва.

Згідно з (5.5) і (5.5а), спектральні лінії (частоти) випромінювання Гідрогену та воднево-подібних іонів природньо групуються у *спектральні серії* – виділені сукупності, зумовлені переходами електрона на заданий рівень n_i з усіх більш високих рівнів $n > n_i$, як показано на рис. 5.3а для перших трьох серій. Лінії кожної серії в шкалі частот (або довжин хвилі) розташовані упорядковано й однотипно, як це схематично показано на рис. 5.3б. Серія починається *головною лінією*, що зумовлена переходом електрона на заданий рівень n_i з наступного рівня $n_i + 1$. Ця лінія має

найменшу частоту ω_0 і найбільшу довжину хвилі λ_0 в серії. Далі частоти поступово збільшуються, а довжина хвилі зменшуються так, що спектральні лінії подібно до енергетичних рівнів, поступово зближуються і при частоті ω_∞ (або довжині хвилі λ_∞) при частоті (або довжині хвилі) переходять у суцільну смугу. Величини ω_∞ і λ_∞ визначають *короткохвильову межу* серії й у виразі (5.5) відповідають умові $n_2 \to \infty$[23].



а) ***б***)

Рис. 5.3

Для ілюстрації нижче наведені конкретні спектральні формули та величини λ_0 і λ_∞ для перших трьох серій атома водню: 1) серії Лаймана ($n_1 = 1$), 2) серії Бальмера ($n_1 = 2$) і 3) Серія Пашена ($n_1 = 3$):

$$\omega = R\left(1 - \frac{1}{n^2}\right), n = 2,3,...,\infty \quad \Rightarrow \quad \omega_0 = \frac{3R}{4},\ \omega_\infty = R \quad \Rightarrow$$

.

$$\Rightarrow \lambda_0 \approx 121\,\text{нм},\ \lambda_\infty \approx 91\,\text{нм}.$$

$$\omega = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right), n = 3,4,...,\infty \quad \Rightarrow \quad \omega_0 = \frac{5R}{36},\ \omega_\infty = \frac{R}{4} \quad \Rightarrow$$

.

$$\Rightarrow \lambda_0 \approx 656\,\text{нм},\ \lambda_\infty \approx 364\,\text{нм}.$$

$$\omega = R\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right), n = 4,5,...,\infty \quad \Rightarrow \quad \omega_0 = \frac{7R}{144},\ \omega_\infty = \frac{R}{9} \quad \Rightarrow$$

.

$$\Rightarrow \lambda_0 \approx 1873\,\text{нм},\ \lambda_\infty \approx 819\,\text{нм}.$$

[23] Насправді через обмежену роздільну здатність ока лінійчастий спектр не має чіткої межі і переходить у неперервний раніше, при скінченній величині n_2.

Із наведених розрахунків видно, що вся перша спектральна серія водню знаходиться в ультрафіолетовій, а вся третя серія (і наступні) – в інфрачервоній області спектра, тому безпосередньо спостерігати їх оком не можна. Натомість частина ліній другої (бальмерівської) серії потрапляє у видиму область і є доступною для візуального спостереження.

На завершення зауважимо, що такі самі результати стосовно енергетичного та оптичного спектрів атома водню дає і внутрішньо суперечлива напівкласична борівська теорія. Але на відміну від неї, квантовомеханічний розгляд є послідовним, не вимагає спеціальних припущень на кшталт постулатів Бора і дає багато іншої інформації про атом, яка є недоступною для борівської теорії.

5.3. Квантування моменту імпульсу

Орбітальний момент імпульсу електрона. Рух класичної частинки по замкненій траєкторії (орбіті) визначається вектором моменту імпульсу, що дорівнює векторному добутку радіуса-вектора частинки та вектора імпульсу:

$$\vec{L} = [\vec{r}\ \vec{p}] \equiv [\vec{r}, m\vec{v}].$$

Вектор $\vec{L}$ напрямлений перпендикулярно до площини орбіти (рис. 5.4), тож визначає її просторову орієнтацію.

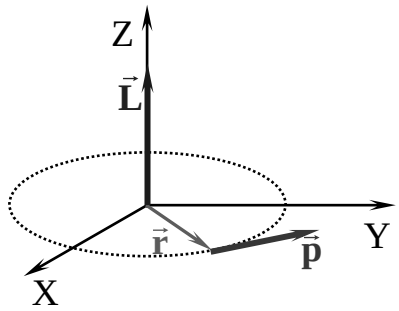


Рис. 5.4

Рух електрона в атомі навколо ядра (*орбітальний*[24] рух) теж є замкненим і характеризується *орбітальним моментом імпульсу*. При цьому з рівняння Шрьодінгера (5.1) випливає, що як енергія, так і орбітальний момент імпульсу електрона в атомі Гідрогену є квантованим

Квантування модуля моменту імпульсу. Можливі числові значення L орбітального моменту імпульсу електрона визначаються орбітальним

[24] Цей досить уживаний термін є умовним, оскільки електрон в атомі не має визначеної траєкторії руху, тобто орбіти.

квантовим числом l, згідно з наступною *умовою квантування модуля моменту імпульсу*:

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \quad l = 0, 1, 2, \ldots, n-1. \tag{5.6}$$

Отже, при заданому значенні n (тобто, на заданому енергетичному рівні E_n) електрон може мати лише n різних числових значень орбітального моменту імпульсу. При цьому в основному стані ($n = 1$, $l = 0$) єдиним значенням є $L = 0$. В класичній механіці відсутність моменту імпульсу при замкненому русі частинки є неможливою, що зайвий раз ілюструє непридатність для електрона в атомі уявлення про рух по визначеній траєкторії.

Просторове квантування. Розв'язки рівняння Шрьодінгера показують, що не тільки модуль, а й проекція моменту імпульсу L_z є квантованою. При цьому можливі значення L_z задаються магнітним квантовим числом m_l, відповідно до *умови квантування проекції моменту імпульсу*:

$$L_z = \hbar m_l, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \ldots, \pm l. \tag{5.7}$$

Квантування проекції означає, що вектор моменту імпульсу $\vec{L}$ може бути напрямленим тільки під такими кутами ϑ до осі OZ, для яких

$$\cos\vartheta = \frac{L_z}{L} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}. \tag{5.8}$$

Іншими словами – можливі не всі орієнтації вектора моменту імпульсу в просторі. Тому ефект квантування проекції моменту імпульсу називають *просторовим квантуванням*.

Із умови (5.7) випливає, що можливі орієнтації моменту імпульсу є симетричними відносно площини, перпендикулярної до осі просторового квантування OZ і їх кількість дорівнює $2l + 1$. Наприклад, при $l = 1$ $m_l = 0, \pm 1$. При цьому проекція може мати тільки значення $L_z = 0, \pm\hbar$, які відповідають кутам $\vartheta = 90°, 45°$ і $135°$ (рис. 5.5).

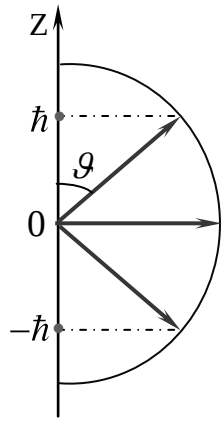


Рис. 5.5

Просторове квантування ставить два принципові запитання. Перше. Відомо, що для однозначного визначення вектора у тривимірному просторі треба задати три числа, наприклад, проекції на три осі координат, або модуль і проекції на дві осі. Натомість умови квантування (5.6) і (5.7) дають тільки дві величини – L і L_z і відтак визначають не один, а нескінченну множину векторів $\vec{L}$, напрямлених під заданим кутом ϑ до осі OZ. Тому може здатися, що рівняння Шрьодінгера не дає всіх відомостей про орбітальний момент імпульсу електрона в атомі. Але через принцип невизначеності повніша інформація є принципово недоступною. Дійсно, уявімо що напрям вектора $\vec{L}$ відомий точно, як у випадку класичної частинки (рис. 5.4). Тоді, спрямувавши координатну вісь OZ уздовж $\vec{L}$, можна було б сказати, що імпульс електрона $\vec{p}$ перпендикулярний до осі OZ і траєкторія лежить у площині XOY. В такому разі координата z і проекція імпульсу p_z в будь-який момент часу мали би нульові значення, тобто були б задані точно. Але це неможливо, і маємо зробити висновок про те, що

момент імпульсу мікрочастинки принципово не може мати однозначно заданого напрямку.

Друге питання стосується напрямку осі OZ, відносно якої відбувається просторове квантування. Позаяк вільний простір є ізотропним, то всі напрямки в ньому рівноправні, і координатну вісь OZ (вісь просторового квантування) можна спрямувати як забажається. Відтак напрошується парадоксальна думка, що напрямки вектора $\vec{L}$ електрона залежить від нашого бажання. Але ніякого парадоксу насправді немає, позаяк сама постановка питання про напрям моменту імпульсу електрона у вільному просторі позбавлена реального змісту. Аби взнати, яким є вектор $\vec{L}$, треба провести відповідні вимірювання, тобто здійснити контрольований вплив на

атом і зареєструвати реакцію (відгук) атома на цей вплив[25]. Такий вплив здійснює силове поле, що обов'язково створюється вимірювальним приладом або установкою в процесі вимірювання. Але при наявності поля ізотропність простору порушується, і в ньому з'являється фізично виділений напрям – напрям створеного в приладі силового поля. Саме відносно цього напрямку реально і відбувається просторове квантування.

Наостанку скажемо, що умови (5.6), (5.7) є універсальними – вони виконуються не лише для орбітального моменту імпульсу електрона в атомі водню, а й для моменту імпульсу будь-якого іншого походження. Це свідчить про те, що момент імпульсу за самою природою є дискретною (квантованою) фізичною величиною, так, як, скажімо, електричний заряд. При цьому стала Планка $\hbar$, подібно до елементарного заряду e, виступає як природня міра (квант) моменту імпульсу. Але через гранично малу величину $\hbar$ дискретність моменту імпульсу є суттєвою лише для елементарних частинок.

5.4. Виродження енергетичних рівнів

Кратність виродження рівня. Згідно з формулою (5.3), енергія електрона в атомі водню залежить тільки від головного квантового числа n. Натомість хвильові функції, тож і квантові стани, визначаються ще й орбітальним l і магнітним m_l числами, котрі за умовами (5.2) при заданому n можуть мати декілька різних значень. Тому квантові стани та енергетичні рівні електрона в атомі водню є виродженими (див. Лекція 4, п. 4.3). Виняток становить основний рівень, якому відповідає єдиний квантовий стан ($n=1$, $l=0$, $m_l=0$).

Підрахуємо кратність виродження K енергетичних рівнів у атомі водню. Згідно із (5.2), (5.6) і (5.7), кожному можливому значенню модуля моменту імпульсу електрона L і квантового числа l відповідає $N_l = 2l+1$ квантових станів, які відрізняються значеннями L_z, тобто – орієнтацією моменту імпульсу відносно осі квантування. Отже, загальна кількість станів K, які відповідають заданому енергетичному рівню, складає

$$K = \sum_l N_l = \sum_0^{n-1} (2l+1).$$

Доданки в цій сумі утворюють арифметичну прогресією з першим членом 1 і останнім $2n-1$. Тому, згідно з відомою формулою суми

[25] У цьому полягає сутність процесу вимірювання як такого.

арифметичної прогресії, виходить

$$K = n^2. \qquad (5.9)$$

Одразу зауважимо, що в дійсності кількість станів, які відповідають заданому значенню n, є вдвічі більшою:

$$N = 2n^2. \qquad (5.9a)$$

Це пов'язано з тим, що рівняння Шрьодінгера не враховує існування в електрона власного моменту імпульсу – спіну (див. далі, Лекція 6, п. 6.3).

Для позначення вироджених станів електрона в атомі використовують спеціальну символіку, в якій відображають головне квантове число n та орбітальне квантове число l, причому головне – цифрою, а орбітальне – латинською літерою за такою схемою:

l	0	1	2	3	4	5
Символ	s	p	d	f	g	h

Згідно з цією схемою, основний стан електрона в атомі водню (n = 1, l = 0) позначається як 1s, стан з n = 2, l = 1 – як 2p, стан з n = 4, l = 2 – як 4d, тощо.

Правила відбору. Як відмічалося раніше, при переході електрона з даного енергетичного рівня на нижчий випромінюється фотон відповідної енергії. Але фотон, як і електрон, має власний момент імпульсу (спін), і відносить з атома не лише енергію, а й момент імпульсу. Тому при переході електрона в атомі з одного енергетичного рівня на інший можливі лише такі зміни його стану, що відповідають величині та можливим орієнтаціям власного моменту імпульсу випущеного фотона і узгоджуються із законом збереження моменту імпульсу. Через це електронні переходи в атомі задовольняють певним *правилам відбору* – обмеженням на можливі зміни квантових чисел. Для атома водню вони такі:

$$\Delta l = \pm 1; \quad \Delta m_l = 0, \pm 1. \qquad (5.10)$$

Для головного квантового числа n ніяких обмежень не існує.

Завдяки правилам відбору можливі переходи тільки між «сусідніми» квантовими станами: із s-станів можливі переходи тільки в p-стани, із p-станів – тільки в s- або d-стани, тощо. Через виродження рівнів це не впливає на частоти випромінювання вільних атомів водню, але суттєво відбивається на спектрах багатоелектронних атомів і на поведінці атомів у магнітному та електричному полях.

5.5. Розподіл електронної густини в атомі водню

У напівкласичній борівській теорії вважається, що електрони в атомах рухаються по певних стаціонарних орбітах. Але, як вже не раз говорилося, таке уявлення не відповідає дійсності: просторова локалізація електронів у атомі визначається не траєкторіями, а конфігурацією хвильових функції, або інакше – *орбіталями*.

Із рівняння Шрьодінгера (5.1) випливає, що хвильові функції електрона в атомі водню визначаються квантовими числами n, l, m_l і є досить складними, тому не будемо їх виписувати та детально аналізувати. Відмітимо лише, що головне квантове число n показує, як далеко від ядра може в середньому знаходитися електрон, а числа l і m_l визначають геометричну конфігурацію області його локалізації. При цьому всі s-орбіталі (l = 0) є сферично симетричними, p-орбіталі (l = 1) нагадують «гантель», а для більш високих станів мають ще складнішу форму. Залежність імовірності знаходження електрона на відстані r від ядра $P_r(r)$ для s- та p-станів перших двох рівнів атома водню показана на рис. 5.6а, де r_1 – радіус першої борівської орбіти електрона в атомі водню. З цього рисунка видно, що область можливого знаходження електрона, тож і розміри атома, не є чітко визначеними. За розміри атома $r_à$ можна прийняти найбільш імовірну відстань електрона від ядра, тобто відстань, на якій величина P_r є найбільшою.

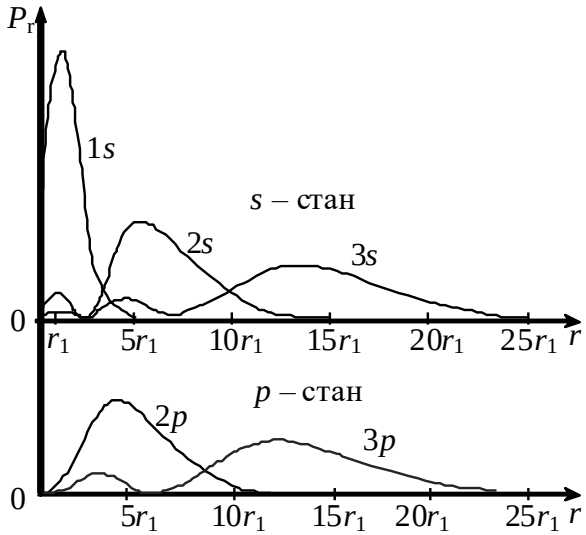


Рис. 5.6а

У такому контексті цікаво, що в стані 1*s* величина $r_à$ дорівнює радіусу першої, а в стані 2*p* – другої борівської орбіти, причому така відповідність зберігається й для інших станів з максимальним значенням орбітального числа $l = n - 1$.

Отже, рух електрона в атомі («орбітальний» рух) мало нагадує рух матеріальної точки по траєкторії. При цьому, позаяк частота обертання електрона в атомі дуже висока ($\sim 10^{16}\ 1/\text{c}$), ядро немов би оповите неперервно розподіленим негативним зарядом, або «електронною хмариною». Уявлення про її конфігурацію в деяких станах можна отримати з рис. 5.6б.

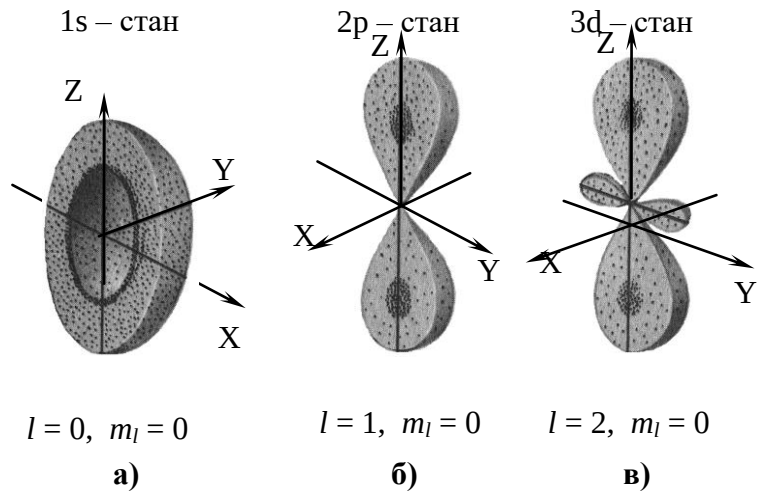


Рис. 5.6б

5.6. Орбітальний магнітний момент електрона

Орбітальний рух електрона в атомі створює циркуляцію заряду навколо ядра, себто деякий ефективний електричний струм і відповідне орбітальне магнітне поле. Із класичної електродинаміки відомо, що магнітні властивості малого витка зі струмом (магнітного диполя) визначаються магнітним моментом

$$\vec{p} = is\vec{n}, \qquad (5.11)$$

де i – величина струму, s – площа витка, $\vec{n}$ – орт (одиничний вектор) нормалі до площини витка.

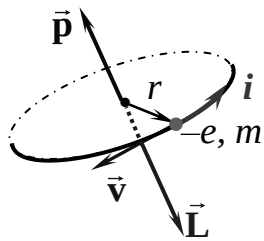


Рис. 5.7

Через невизначеність траєкторії класична формула (5.11) для визначення *орбітального магнітного моменту* електрона в атомі, строго говорячи, є не коректною. Але квантовомеханічний розрахунок дає такий самий результат. Тому будемо тимчасово розглядати електрон як матеріальну точку із масою m та зарядом $-e$, яка рухається із великою швидкістю v по коловій траєкторії радіуса r й уподібнюється мікроскопічному витку площею $s = \pi r^2$ з деяким струмом i, як показано на рис. 5.7. Оскільки сила струму дорівнює кількості заряду, що переноситься через дану поверхню за 1 с, то, уявивши на шляху електрона деяку площадку, знайдемо:

$$i = e\nu = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r},$$

де ν – частота, а $T = 2\pi r/v$ – період обертання електрона навколо ядра. Відтак із виразу (5.11) для модуля магнітного моменту отримаємо:

$$p = i \cdot \pi r^2 = \frac{evr}{2}.$$

При русі частинки по колу момент імпульсу $L = mvr$, тож $vr = L/m$, і вираз p можна записати, як $p = (e/2m)L$, або

$$p = gL, \tag{5.12}$$

де константа

$$g = \frac{e}{2m}, \tag{5.13}$$

називається *орбітальним гіромагнітним співвідношенням*.

Оскільки заряд електрона від'ємний, напрям струму i є протилежним до напрямку руху електрона, тож вектори $\vec{p}$ і $\vec{L}$ є антипаралельними. Тому

$$\vec{p} = -g\vec{L}, \tag{5.14}$$

$$p_z = -gL_z. \tag{5.14a}$$

Орбітальний момент імпульсу електрона квантується за правилами (5.6) і (5.7), отже згідно з (5.12) і (5.14*а*), аналогічно квантуються модуль і проекція орбітального магнітного моменту електрона:

$$p = \mu_B \sqrt{l(l+1)}, \tag{5.15}$$

$$p_z = -\mu_B m_l. \tag{5.15a}$$

Величина

$$\mu_B = g\hbar = \frac{e\hbar}{2m} = 9,27 \cdot 10^{-24}\ \text{А} \cdot \text{м}^2 \tag{5.16}$$

називається *магнетоном Бора* і є природньою одиницею магнітного моменту електрона. Подібна природня одиниця використовується і для визначення магнітних моментів ядерних частинок – нуклонів. Вона називається ядерним магнетоном $\mu_Я$ і визначається через масу протона:

$$\mu_Я = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5,05 \cdot 10^{-27}\ \text{А} \cdot \text{м}^2. \tag{5.16a}$$

Зауважимо, що через велику порівняно з електроном масу нуклонів $\mu_Я \ll \mu_Б$, тому магнітні властивості атома визначаються головним чином магнетизмом електронів.

5.7. Контрольні запитання

1. Чому рух електрона навколо ядра в атомі не можна розглядати по аналогії з рухом Землі навколо Сонця?
2. Чи може електрон при русі в полі ядра атома мати неперервний енергетичний спектр?
3. Чи може атом поглинати світло будь-якої частоти? Чому?
4. У якому випадку електрони, що налітають на атоми Гідрогену, стикаються з ними пружно, а в якому – непружно?

5. Назвіть квантові числа електрона в атомі Гідрогену та охарактеризуйте їх фізичний зміст.
6. Які значення може набувати кожне з квантових чисел? Яку максимальну кількість значень може мати магнітне квантове число при заданому головному квантовому числі n?
7. Яку інформацію про енергетичний спектр електрона в атомі Гідрогену можна отримати, вимірявши його енергію іонізації?
8. Що таке спектральна серія? Головна лінія та короткохвильова межа серії? Запишіть вирази та розрахуйте довжини хвилі цих ліній для четвертої серії (серії Пфунда) Гідрогену.
9. Відомо, що в спектрі поглинання незбуджених атомів Гідрогену спостерігаються тільки лінії першої спектральної серії (серії Лаймана). Поясніть, чому?
10. Поясніть принцип класифікації квантових станів електрона в атомі Гідрогену за схемою цифра-літера. Чи може електрон бути в стані $2f$? $3d$?
11. Як записуються правила відбору для електронних переходів у атомі Гідрогену? Використовуючи прийняту класифікацію станів (цифра-літера), запишіть узагальнені позначення всіх електронних переходів у атомі Гідрогену, що утворюють серію Лаймана ($n_1 = 1$) та серію Пашена ($n_1 = 3$).
12. Які значення орбітального магнітного моменту може мати електрон у атомі водню? Запишіть (через магнетон Бора) цей момент для електрона, що перебуває в якомусь із s-станів, d-станів.

5.8. Задачі

Задача 5.1. Електрони в збудженому атомарному газі водню займають всі енергетичні рівні включно з n-м. Знайти кількість спектральних ліній, які випромінює газ.

Розв'язування. Для визначення кількості ліній у спектрі треба знайти кількість можливих електронних переходів між рівнями енергії. Підрахунок зручно вести по серіях. Очевидно, що таких серій всього є $(n-1)$, причому перша містить $(n-1)$ лінію, друга – $(n-2)$, третя – $(n-3)$, а остання

складається з однієї лінії. Ці числа утворюють арифметичну прогресію, тож за відомою формулою знаходимо:

$$N = \frac{a_1 + a_{n-1}}{2}(n-1) = \frac{n(n-1)}{2}.$$

Задача 5.2. Визначити найбільшу довжину хвилі світла, що спроможне іонізувати атом Гідрогену, котрий знаходиться в першому збудженому стані.

Розв'язування. Згідно з умовою, в іонізованому стані атома енергія електрона $E \geq 0$. Отже, якщо електрон знаходиться на *n*-му енергетичному рівні, то найменша необхідна для іонізації атома енергія E_i визначається умовою $E_n + E_i = 0$. У першому збудженому стані електрон знаходиться на енергетичному рівну n = 2, тож $E_i = -E_2$ і, згідно з (5.3*а*), $E_i = 3{,}4$ еВ. Ця величина визначає найменшу енергію фотонів світла, що спроможне іонізувати атомарний водень. Тому, згідно з формулою енергії фотона (1.1*б*), шукана максимальна довжина хвилі дорівнює

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{E_i} \approx 365 \text{ нм}.$$

Задача 5.3. Відомо, що у випромінюванні атомів Гідрогену тільки в серії Бальмера є лінії у видимій області спектра (від $\lambda_1 = 400$ нм до $\lambda_2 = 750$ нм). Розрахувати кількість цих ліній та їхню найбільшу і найменшу довжину хвилі.

Розв'язування. Серію Бальмера утворюють усі електронні переходи на рівень $n_1 = 2$, частоти яких відповідно до виразу (5.5) визначаються формулою:

$$\omega = R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 3, 4, \ldots. \qquad (1)$$

Для отримання розв'язків спочатку з'ясуємо, чи задовольняє умову задачі головна лінія серії, яка має найменшу частоту ω_0 і найбільшу в серії довжину хвилі λ_0. Підставивши в формулу (1) n = 3, отримуємо:

$$\omega_0 = \frac{5R}{36}, \quad \lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega_0} = \frac{72\pi c}{5R} = 656 \text{ нм},$$

що відповідає видимій області (червоний колір). Отже максимальна довжина хвилі видимого випромінювання атомів водню складає $\lambda_0 = 656$ нм.

Далі визначаємо максимальне можливе значення n у формулі (1), яке задовольняє умову $\lambda_{\min} \geq \lambda_1 = 400$ нм. Для цього розв'язуємо нерівність:

$$\frac{2\pi c}{\lambda_1} \geq R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right) \quad \Rightarrow \quad n \leq 6{,}7 \quad \Rightarrow \quad n = 6.$$

Підставивши це значення у формулу (1), знайдемо максимальну частоту та мінімальну довжину хвилі видимого випромінювання:

$$\omega_{\max} = \frac{2R}{9}, \quad \lambda_{\min} = \frac{2\pi c}{\omega_0} = \frac{9\pi c}{R} = 410 \text{ нм}.$$

Цей результат відповідає фіолетовій області спектра.

Із рівня $n_2 = 6$ на рівень $n_1 = 2$ можливі переходи $6 \to 5,\ 6 \to 4,\ 6 \to 3$ і $6 \to 2$, отже, у вказаній області спектра спостерігається чотири лінії випромінювання Гідрогену.

Задача 5.4. Визначити номер першої із спектральних серій атома Гідрогену, що лежать в інфрачервоній області $\lambda \geq \lambda_0 = 750$ нм.

Розв'язування. Оскільки $\omega = 2\pi c/\lambda$, то, згідно з умовою, для будь-якої серії максимальна частота (межа серії) повинна задовольняти умові $\omega_\infty \leq 2\pi c/\lambda_0$. Тому, поклавши в (5.8) $n_2 = \infty$, отримаємо:

$$\frac{R}{n^2} < \frac{2\pi c}{\lambda_0} \quad \Rightarrow \quad n > 2{,}87 \quad \Rightarrow \quad n = 3.$$

Задача 5.5. Визначити, в якого воднево-подібного іона різниця довжин хвилі головних ліній в перших двох серіях дорівнює 133,6 нм.

Розв'язування. Спочатку визначимо довжини хвиль указаних ліній. Для цього в узагальненій формулі Бальмера (5.8*а*) виразимо частоту через довжину хвилі і покладемо $n_1 = 1$ і $n_2 = 2$ для першої серії та $n_1 = 2$ і $n_2 = 3$ для другої:

$$\frac{2\pi c}{\lambda_1} = \frac{3Z^2R}{4};\ \frac{2\pi c}{\lambda_2} = \frac{5Z^2R}{36} \quad \Rightarrow \quad \lambda_1 = \frac{8}{3}\frac{\pi c}{Z^2R};\ \lambda_2 = \frac{72}{5}\frac{\pi c}{Z^2R}.$$

Виразивши звідси різницю довжин хвилі $\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1$, знайдемо порядковий номер елемента в періодичній системі:

$$\Delta\lambda = \frac{176\pi c}{15RZ^2} \quad \Rightarrow \quad Z = \sqrt{\frac{176\pi c}{15R\Delta\lambda}} = 2.$$

Отже, відповідь – іон гелію He^+.

Задача 5.6. Енергія іонізації атома гелію $E_i = 24{,}6$ еВ. Яку найменшу енергію E треба витратити, аби послідовно видалити з атома гелію обидва електрони?

Розв'язування. Для послідовного видалення з атома гелію обох електронів треба спочатку витратити задану енергію E_i для видалення одного з них, а потім ще деяку енергію E_i' для виривання другого, тобто – для іонізації утвореного іона He^+. Отже, шукана енергія $E = E_i + E_i'$. Найменша величина E_i' відповідає переведенню електрона в іоні He^+ із основного стану (n = 1) з енергією E_1 у стан з енергією $E = 0$: $E_i' = -E_1$. Тому, відповідно до формул (5.3б) і (5.4),

$$E_i' = \frac{k^2 m Z^2 e^4}{2\hbar^2} = Z^2 \hbar R,$$

де заряд ядра гелію Z = 2, і $R = 2{,}07 \cdot 10^{16}$ рад/с – стала Рідберга,
$\hbar = 1{,}05 \cdot 10^{-34}$ Дж $\cdot$ с – стала Планка. Отже, відповідь така:

$$E = E_i + 4\hbar R = 79 \text{ еВ}.$$

Задача 5.7. З якою найменшою відносною швидкістю мають рухатися два атоми Гідрогену, котрі перебувають в основному стані, щоби при непружному лобовому зіткненні один з них випустив фотон?

Розв'язування. Аби бути здатним випустити фотон, один з атомів при зіткненні має перейти у збуджений стан, поглинувши необхідну енергію збудження W. Саме ж зіткнення атомів відбуваються без дії зовнішніх сил, отже, із збереженням енергії та імпульсу. При цьому після непружного зіткнення частинки рухаються як одне ціле. Тому, прийнявши один з атомів до зіткнення за нерухомий, можемо записати :

$$\begin{cases} \vec{p} = \vec{p}' \\ K = K' + W \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} p = p' \\ \dfrac{p^2}{2m} = \dfrac{p'^2}{4m} + W \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad W = \frac{p^2}{4m} = \frac{mv^2}{4}, \qquad (1)$$

де $\vec{p}$ і K – імпульс та кінетична енергія рухомого атома до зіткнення, а $\vec{p}'$ і K' – імпульс та кінетична енергія атомів після зіткнення, коли вони рухаються , як одна частинка із масою $m' = 2m$.

Найменша величина W дорівнює енергії, що необхідна для переведення електрона котрогось із атомів з енергетичного рівня n =1 на наступний рівень n = 2. Отже, згідно з формулами (5.3) і (5.4),

$$W = \frac{3\hbar R}{4}, \qquad (2)$$

де R – стала Рідберга.

Підставивши величину (2) у вираз (1), отримаємо відповідь:

$$v = \sqrt{\frac{3\hbar R}{m}} \approx 2,7 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

Задача 5.8. Нерухомий атом Гідрогену випустив фотон, який відповідає головній лінії серії Лаймана (перша спектральна серія). Визначити швидкість v, що її набув атом і частку $\eta = K/\Delta E$, яку складає отримана ним кінетична енергія від енергії електронного переходу.

Розв'язування. Фотон, який випускається атомом, відносить не тільки певну енергію $\varepsilon = \hbar\omega$, а й імпульс $p = \varepsilon/c = \hbar\omega/c$. Тому за законом збереження імпульсу атом отримує такий самий за модулем і протилежно напрямлений імпульс «віддачі» та відповідну швидкість:

$$mv = \frac{\hbar\omega}{c} \quad \Rightarrow \quad v = \frac{\hbar\omega}{mc}. \qquad (1)$$

Головна лінія серії Лаймана відповідає електронному переходу в атомі водню з енергетичного рівня $n_2 = 2$ на рівень $n_1 = 1$. Тому, згідно з узагальненою формулою Бальмера (5.5), у виразі (1)

$$\omega = \frac{3R}{4}.$$

Отже, швидкість віддачі атома

$$v = \frac{3\hbar R}{4mc}.$$

Підставивши числові значення $\hbar$, R та $m = 1{,}67 \cdot 10^{-27}$ кг, отримаємо

$$v \approx 3{,}5 \text{ м/с}.$$

При такій швидкості набута атомом кінетична енергія $K = mv^2/2$ дорівнює приблизно $5{,}5 \cdot 10^{-8}$ еВ. Це складає всього $\eta \approx 5 \cdot 10^{-6}$ % від енергії переходу $\Delta E = E_2 - E_1$, яка згідно з (5.3*a*), дорівнює 10,2 еВ.

Отриманий результат дозволяє зробити такий висновок. При випромінюванні фотона частина енергії електронного переходу передається атому. Тому енергія та частота фотона, що випромінюється, в принципі, є меншими, ніж це визначається формулою (5.3):

$$\varepsilon = \hbar\omega = (1 - \eta)\Delta E.$$

Проте ця відміна настільки незначна, що майже завжди є не істотною.

Лекція 6. СПІН ЕЛЕКТРОНА

6.1. Атом гідрогену у зовнішньому магнітному полі

Розщеплення енергетичних рівнів. Із електродинаміки відомо, що при внесенні витка із струмом (магнітного диполя) в зовнішнє магнітне поле він отримує енергію

$$W = -\vec{p}\vec{B} = -p_z B, \qquad (6.1)$$

де $\vec{B}$ – індукція магнітного поля, p_z – проекція магнітного моменту витка на напрям поля. При внесенні в магнітне поле атома Гідрогену його електрон так само взаємодіє із полем. При цьому енергія взаємодії, згідно з умовою квантування орбітального магнітного моменту (5.15*a*), визначається, як:

$$W = \mu_Б B \cdot m_l. \qquad (6.1a)$$

Відповідно змінюються й енергетичні рівні атома:

$$E_{\text{n}} = E_{\text{n}0} + \mu_Б B \cdot m_l, \qquad (6.2)$$

де $E_{\text{n}0}$ – енергія рівня за відсутності магнітного поля.

На перший погляд може здатися, що відбувається просто зсув рівнів. Але через їх виродження картина насправді є більш складною. Згідно з умовами (5.2), кожному рівню відповідає n різних значень орбітального числа l, а кожному значенню l – $2l+1$ різних значень m_l. Оскільки максимальна кількість значень орбітального числа $l_{\max} = n-1$, то повна кількість можливих значень m_l для заданого рівня складає $2l_{\max}+1 = 2n-1$. Тому кожен енергетичний рівень атома Гідрогену $E_{\text{n}0}$ у зовнішньому магнітному полі *розщеплюється* на $2n-1$ симетрично розміщених компонент з енергіями

$$E_{n0}, E_{n0} \pm \mu_Б B, E_{n0} \pm 2\mu_Б B, \ldots E_{n0} \pm (n-1)\mu_Б B. \qquad (6.2a)$$

Виняток становить лишень основний рівень $1s$ ($l = 0$), на якому магнітний момент електрона $p = 0$, і взаємодія з магнітним полем відсутня.

Відстань між сусідніми компонентами будь-якого розщепленого енергетичного рівня атома однакова й визначається тільки величиною поля:

$$\Delta E_1 = \mu_Б B. \qquad (6.3)$$

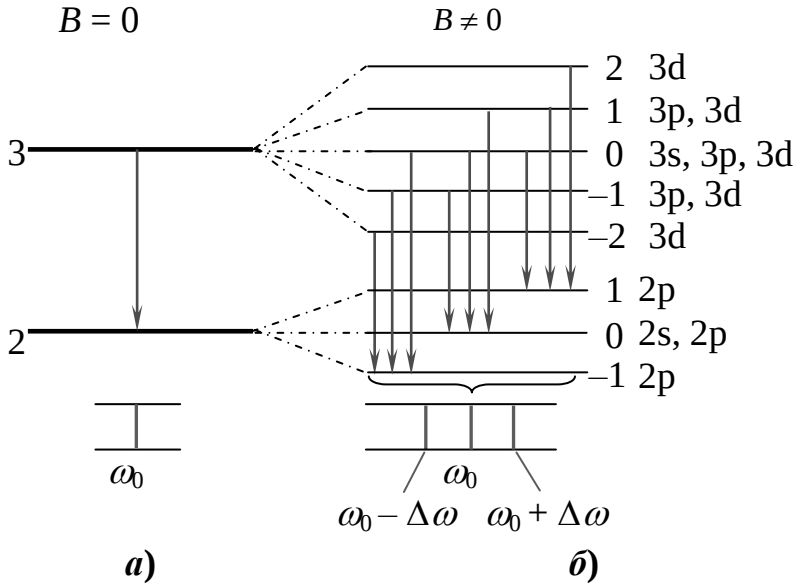


Рис. 6.1

На рис. 6.1 показана картина розщеплення рівня з $n = 2$, коли кількість компонент дорівнює 3, та рівня з $n = 3$, для якого кількість утворених компонент дорівнює 5. Принагідно відмітимо, що в системі утворених рівнів найвищий і найнижчий є невиродженими, а кратність виродження інших менша, ніж у вихідного рівня. Це видно з правої колонки на рисунку, в якій позначені всі стани, що відповідають кожній компоненті розщепленого рівня. Цей ефект, який називається *зняттям виродження*, спостерігається також у полях іншого походження і відіграє в квантових системах значну роль. Приміром, при об'єднанні атомів у кристал створюється так зване кристалічне поле, що призводить до зміни положення енергетичних рівнів вільних атомів і утворення енергетичних зон, поняття про які відіграє значну роль у фізиці твердого тіла та фізиці напівпровідників.

Простий ефект Зеємана. Розщеплення енергетичних рівнів автоматично призводить до відповідного розщеплення спектральних ліній атомів. Розщеплення спектральних ліній атомів у зовнішньому магнітному полі називається *ефектом Зеємана*[26].

Розглянемо це явище на прикладі електронного переходу між енергетичними рівнями $n = 3$ і $n = 2$ в атомі Гідрогену, який схематично показаний стрілкою на рис. 6.1*а*. У вільних атомах цей перехід дає одну спектральну лінію з частотою

[26] Подібний ефект спостерігається і в електричному полі і називається ефектом Штарка.

$$\omega_0 = \frac{E_{03} - E_{02}}{\hbar}.$$

Але при вміщенні в магнітне поле дані енергетичні рівні розщеплюються (рис. 6.1*б*). Тому в спектрі замість однієї лінії з частотою ω_0 з'являється декілька інших ліній зумовлених переходами між окремими компонентами розщеплених рівнів. На перший погляд нових ліній має бути стільки, скільки є комбінацій компонент розщеплених рівнів. Але насправді їх набагато менше бо не всі переходи є дозволеними. Згідно з правилами відбору (5.10), можливі тільки три групи по три переходи (рис. 6.1*б*). Оскільки всі компоненти розщеплених рівнів розміщені на однаковій відстані $\Delta E_1 = \mu_Б B$, ці переходи дають фотони всього з трьома різними енергіями: ΔE_0, $\Delta E_0 - \Delta E_1$, та $\Delta E_0 + \Delta E_1$. Отже, при вміщенні в магнітне поле атоми замість однієї спектральної лінії з частотою ω_0 мають випромінювати три лінії із частотами:

$$\omega_0 \text{ і } \omega = \omega_0 \pm \Delta\omega,$$

де

$$\Delta\omega = \frac{\Delta E_1}{\hbar} = gB. \qquad (6.4)$$

Таким чином, кожна одиночна спектральна лінія («синглет») з частотою ω_0 в магнітному полі має перетворитися на «триплет», який складається із центральної лінії з частотою ω_0 та двох симетричних сателітів, частоти котрих відрізняються від ω_0 на величину $\Delta\omega$, що залежить тільки від індукції магнітного поля. Таке розщеплення спектральних ліній за відповідних умов спостерігається експериментально й називається *простим* ефектом Зеємана. Правда, слід зазначити, що зеєманівське розщеплення є доволі малим (див. п. 6.7, Задача 6.1). Тому ефект Зеємана можна спостерігати тільки в сильних полях і за допомогою спектроскопа з великою роздільною здатністю.

Зазначимо також, що ефект Зеємана є експериментальним засвідченням просторового квантування моментів.

6.2. Неповнота рівняння Шрьодінгера

Квантова механіка, що ґрунтується на рівнянні Шрьодінгера (механіка Шрьодінгера) дає багату інформацію про будову та властивості атома не лише для Гідрогену, а й для більш складних атомів. Разом із тим існують ефекти, які ця теорія пояснити не може, що свідчить про її неповноту. Укажемо на деякі з них.

Складний ефект Зеємана. Розглянуте вище магнітне розщеплення спектральних ліній атома Гідрогену на три симетричні компоненти (простий ефект Зеємана) є наслідком просторового квантування орбітального магнітного моменту електрона та правил відбору для електронних переходів. При цьому ані кількість дозволених переходів, ані різниця їх енергій (відстань між спектральними лініями (6.4)) не залежать від величини магнітного моменту електрона. Тому простий ефект Зеємана мав би спостерігатися для всіх атомів. Але насправді він є швидше винятком, аніж правилом. Для більшості атомів типовим є *складний ефект Зеємана*, при якому різні спектральні лінії мають різну величину розщеплення та кількість компонент. Отже, ефект Зеємана, хоча й підтверджує одне із принципових передбачень механіки Шрьодінгера – просторове квантування, – у той же час свідчить, що магнетизм атома не можна пояснити лише орбітальним рухом електронів.

Тонка структура атомних спектрів. При спостереженнях за допомогою приладів із високою роздільною здатністю виявляється, що спектральні лінії атомів навіть за відсутності зовнішніх полів мають мультиплетну структуру, тобто складаються з декількох близько розташованих компонент. Спостерігаються дублети (подвійні лінії), триплети (потрійні лінії), квартети й таке інше. Зокрема трапляються і синглети – лінії, що не мають тонкої структури. У цьому контексті прикметно, що в спектрах Гідрогену та лужних металів усі лінії є дублетами, хоча мали би бути синглетними через орбітальне виродження енергетичних рівнів.

Досліди Штерна та Герлаха. Ці досліди, в яких вивчався вплив неоднорідного магнітного поля на атомарні пучки, дали прямі докази просторового квантування моментів. Схема досліду показана на рис. 6.2. Вузький пучок атомів досліджуваної речовини пропускався через сильне поперечне магнітне поле, індукція котрого $\vec{B}$ різко змінювалася вздовж осі OZ, і далі осаджувався на скляній пластинці-екрані.

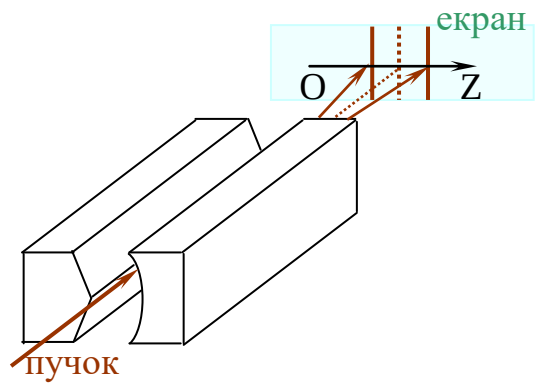


Рис. 6.2

Результат досліду можна передбачити. За відсутності поля атоми рухаються без відхилення і створюють вузьку смужку в центрі екрана. Але, через наявність магнітного моменту $\vec{p}$, при ввімкненні указаного магнітного поля $\vec{B}$ на атоми вздовж осі OZ діє сила

$$F_z = p\frac{\partial B}{\partial z}\cos\vartheta\sqrt{2} = p_z\frac{\partial B}{\partial z}, \qquad (6.5)$$

де $(\partial B/\partial z)$ – градієнт поля, ϑ – кут між напрямками векторів $\vec{p}$ і $\vec{B}$. Під дією цієї сили атоми в пучку відхиляються від напрямку вльоту в поле і потрапляють в різні точки екрана залежно від величини та напрямку магнітного моменту. При довільній орієнтації магнітних моментів атомів пучка значення p_z лежали б у неперервному інтервалі $[-p; p]$, і на них діяли б усі можливі сили (6.5) теж у неперервному інтервалі значень $\left[-p(\partial B/\partial z), p(\partial B/\partial z)\right]$. Це призвело би до утворення на екрані широкої суцільної смуги, але в дійсності утворюється декілька вузьких смужок симетричних до вихідної. Це прямо вказує на те, що можливі лише деякі значення p_z, тобто має місце просторове квантування магнітного моменту атома. Проте неочікуваним є те, що атоми деяких елементів дають парну кількість розщеплених смужок, тоді як за правилами квантування (5.15*a*) і (5.2) кількість можливих значень p_z, тож і розщеплених компонент пучка, завжди мала би складати $2l+1$. Зокрема, для срібла, Гідрогену та інших атомів з одним валентним електроном, який знаходиться в s-стані ($l=0,\ m_l=0$), спостерігається дві компоненти, як показано на рис. 6.2, хоча розщеплення взагалі на повинно бути.

Дослід Ейнштейна – де-Гааза. Цей дослід мав на меті визначення гіромагнітного співвідношення для феромагнетиків у рамках класичної теорії магнетизму речовини. Зупинимося лише на загальній схемі та ідеї досліду. Залізний циліндр, підвішений на тонкій пружній нитці, був розміщений всередині соленоїда, як схематично показано на рис. 6.3. По соленоїду пропускали змінний струм, унаслідок чого відбувалося перемагнічування циліндра, тобто напрямки магнітних моментів окремих атомів і циліндра в цілому періодично змінювалися на протилежні з частотою струму. Через зв'язок між магнітним та механічним моментом так само змінювалися й напрямки моментів імпульсу атомів та циліндра в цілому, і він починав здійснювати вимушені крутильні коливання. Для підсилення ефекту частоту струму підбирали рівною резонансній частоті циліндра, так що амплітуду коливань можна було надійно виміряти. Далі, не вдаючись у деталі, вкажемо, що, маючи амплітуду коливань циліндра, за допомогою законів механіки можна визначити величину моменту імпульсу всього циліндра та окремих атомів. Так само, за допомогою законів електродинаміки через величину струму та магнітну проникність матеріалу циліндра можна визначити відповідні магнітні моменти. Відтак можна знайти й відношення магнітного та механічного моментів атома, тобто гіромагнітне співвідношення.

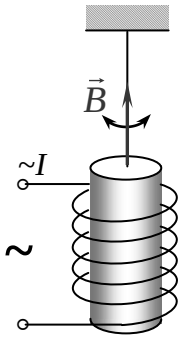


Рис. 6.3

Знайдена в описаному досліді величина гіромагнітного співвідношення виявилася з великою точністю рівною

$$g_s = \frac{e}{m}. \qquad (6.6)$$

Ця величина є вдвічі більшою за очікуване значення (5.13), тому її назвали *аномальним* гіромагнітним співвідношенням.

Природу аномального гіромагнітного співвідношення нездатна пояснити не тільки класична фізика, а й квантова механіка, що ґрунтується на рівнянні Шрьодінгера.

6.3. Спін

Спін електрона. Наведені вище та інші розбіжності між передбаченнями механіки Шрьодінгера та дослідними фактами, як з'ясувалося, пов'язані з існуванням у електрона спіну

Гіпотеза про спін була висунута в 1925 р. американськими фізиками Гаудсмітом і Уленбеком і твердить, що

> *електрон, незалежно від руху, має власний момент імпульсу – спін*[27] *– та відповідний власний* (*спіновий*) *магнітний момент.*

Згідно із загальними умовами квантування моменту імпульсу (5.6) і (5.7), модуль і проекція спіну визначаються формулами

$$L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)}; \qquad L_{sz} = \hbar m_s \tag{6.7}$$

через спінове квантове число s і спінове магнітне квантове число m_s, які коротко називають одним словом *спін*.

Значення цих квантових чисел можна встановити із наведених вище результатів дослідів Штерна та Герлаха. Відомо, що основні хімічні та фізичні властивості атомів визначаються практично тільки валентними електронами. Тому в атомах Гідрогену та срібла, що мають один валентний електрон у s-стані ($l = 0$), орбітальний магнітний момент $p = 0$, і ніякої взаємодії з магнітним полем не повинно бути. Отже, природньо припустити, що розщеплення пучків цих атомів у магнітному полі зумовлене власним магнітним моментом електрона – спіном. Зв'язок між квантовими числами m_s і s такий самий, як між m_l і l, тобто загальна кількість можливих проекцій спіну на напрям магнітного поля дорівнює $2s+1$. Оскільки для вказаних атомів у досліді спостерігається розщеплення пучка на дві компоненти, то

$$2s+1 = 2 \quad \Rightarrow \quad s = \frac{1}{2}. \tag{6.8}$$

[27] Термін спін, який перекладається як веретено або дзиґа, пов'язаний із первісним і, як з'ясувалося, хибним уявленням про обертання електрона навколо своєї осі.

Цей результат привертає увагу тим, що квантове число s є не цілим і має єдине можливе значення. Відповідно, значення m_s, які лежать в інтервалі $[-s;s]$, складають $\mp(1/2)$. Це, згідно з (6.7), означає, що власний момент імпульсу електрона та його можливі проекції на вісь дорівнюють:

$$L_s = \hbar\frac{\sqrt{3}}{2}; \qquad L_{sz} = \pm\frac{\hbar}{2}. \tag{6.9}$$

Існування спіну в електрона та його характеристики узгоджуються і з іншими дослідними фактами. Зокрема, аномальна величина гіромагнітного співвідношення g_s у феромагнетиках пояснюється тим, що їхні магнітні властивості зумовлені саме спіновими магнітними моментами атомів. Отже знайдена в дослідах Ейнштейна – де-Гааза величина $g_s = (e/m)$ є *спіновим гіромагнітним співвідношенням* для електрона. Відповідно, *власний магнітний момент електрона* визначається виразом:

$$\vec{p}_s = -g_s\vec{L}_s \tag{6.10}$$

і, згідно з (6.6) і (6.9), має модуль і проекції

$$p_s = \mu_Б\sqrt{3}; \qquad p_{sz} = \pm\mu_Б, \tag{6.11}$$

де $\mu_Б$ – магнетон Бора (5.16).

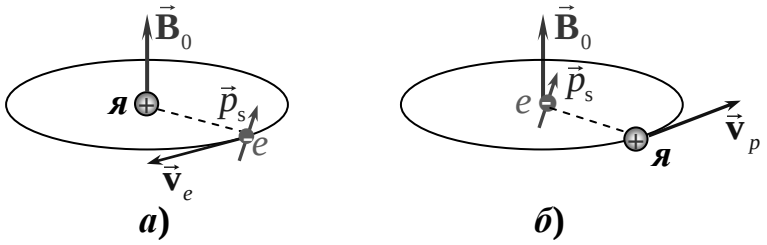
Отже, магнетон Бора є природньою мірою не тільки орбітального, а й власного магнітного моменту електрона.

Природа спіну. Спочатку спін пов'язували з обертанням електрона навколо власної осі, подібно до добового обертання Землі. Але така концепція виявилася хибною. По-перше, величина L_s, згідно з (6.9), має єдине значення, отже, не може змінюватися ні за яких умов. Це свідчить про те, що спін відображає не стан руху електрона, а його внутрішні властивості, так само, як заряд або маса. По-друге, аби при обертанні навколо своєї осі момент імпульсу кульки з розмірами і масою електрона мав величину (6.9), лінійна швидкість точок її поверхні мала би бути більшою за граничну швидкість $c = 3\cdot10^8$ м/с. Тож природньо, що нерелятивістська механіка Шрьодінгера не дає ніяких указівок на існування спіну. А ось з релятивістського хвильового рівняння, яке отримав Дірак, існування спіну випливає автоматично. А саме, з рівняння Дірака випливає, що хвильові функції електрона в атомі, крім відомих чисел n, l, m_l, визначаються ще

одним квантовим числом із двома можливими значеннями $\pm 1/2$, тобто, – спіном. Таким чином, можна сказати, що спін є одночасно і квантовою, і релятивістською властивістю частинки.

Спін є властивістю не лише електрона, а й переважної більшості інших елементарних частинок. При цьому існують частинки як із напівцілим, так і з цілим значенням спіну. Зокрема, із добре знайомих частинок електрон, протон і нейтрон мають спін 1/2, а спін фотона дорівнює 1.

Спін-орбітальна взаємодія. Наявність спіну призводить до того, що в атомі Гідрогену кожному набору квантових чисел (n, l, m_l) відповідає не один, а два квантових стани з $m_s = 1/2$ і $m_s = -1/2$, які відрізняються орієнтацією спіну. Ці орієнтації часто умовно називають «спін угору» та «спін униз» і позначають стрілками $\uparrow$ і $\downarrow$. Оскільки ці два квантові стани належать одному значенню головного квантового числа n, іноді говорять, що наявність спіну приводить до подвоєння кратності виродження енергетичних рівнів. Але, строго говорячи, таке твердження є неточним, бо вказані спінові стани мають не однакову енергію. Причина в тому, що спіновий магнітний момент електрона $\vec{p}_s$ перебуває в магнітному полі $\vec{B}_0$, створюваному орбітальним рухом електрона, і взаємодіє з ним, рис. 6.4*а*. Можливо це буде більш зрозуміло, якщо перейти в систему відліку, пов'язану з електроном (рис. 6.4*б*), в якій протон (ядро атома) рухається навколо електрона так само, як і електрон навколо ядра, тільки в протилежний бік. Проте й знак заряду протона протилежний до знаку заряду електрона. Тому поле, створюване ядром атома в системі відліку електрона за величиною та напрямком співпадає з полем $\vec{B}_0$, яке створюється орбітальним рухом електрона в системі відліку ядра.



***а*)** ***б*)**

Рис. 6.4

Взаємодія спінового моменту електрона $\vec{p}_s$ з орбітальним полем $\vec{B}_0$ називається *спін-орбітальною взаємодією*. За рахунок неї електрон, згідно з (6.1) і (6.11), залежно від орієнтації спіну отримує додаткову енергію

$$W_{so} = -\vec{p}_s \vec{B}_0 = \pm \mu_Б B_0. \qquad (6.12)$$

Тому при заданому головному квантовому числі n енергія електрона складає

$$E_n = E_{n0} \pm \mu_Б B_0,$$

де E_{n0} – енергія n-го рівня без урахування спіну, котра визначається формулою (5.3). Отже, спін-орбітальна взаємодія в атомі гідрогену призводить до того, що кожен енергетичний рівень (окрім основного) виявляється розщепленим на два підрівні (рис. 6.5), відстань між якими

$$\Delta E_{so} = 2\mu_Б B_0. \qquad (6.13)$$

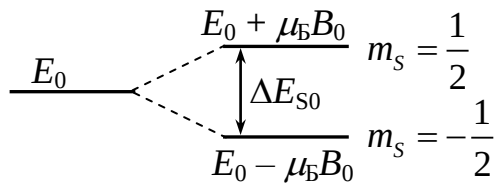


Рис. 6.5

Відповідно, двократно розщепленими (дублетними) виявляються й усі спектральні лінії атома гідрогену. Величина розщеплення $\Delta\omega_{so} = \Delta E_{so}/\hbar$, згідно з (5.16), дорівнює:

$$\Delta\omega_{so} = g_s B_0, \qquad (6.13a)$$

де g_s – спінове гіромагнітне співвідношення (6.6).

Спін-орбітальна взаємодія пояснює і дублетність спектральних ліній атомів лужних металів, які мають в основному стані один s-електрон і тим схожі на атом гідрогену. Аналогічно пояснюється тонка структура спектрів й у складніших атомах. Але через наявність декількох валентних електронів картина спін-орбітального розщеплення рівнів у таких атомах є набагато складнішою.

Через велику швидкість орбітального руху та дуже малі розміри електронних «орбіт» орбітальні магнітні поля в атомах є дуже сильними і складають десятки Тл. Тому спін-орбітальне розщеплення спектральних ліній може бути навіть сильнішим, аніж у зовнішніх полях (ефект Зеємана), де воно має порядок 10^{-11} м. Приміром, для найяскравішої лінії в спектрі атомів натрію (жовтий дублет) спін-орбітальне розщеплення дорівнює $6 \cdot 10^{-10}$ м.

6.4. Принцип Паулі. Оболонкова структура атомів

Принцип Паулі. Одним із проявів спіну є не однакова колективна поведінка частинок у залежності від величини спіну. Це відображає сформульоване Паулі на основі аналізу дослідних фактів і пізніше доведене теоретично положення, що називається *принципом* або *забороною* Паулі:

> *у системі частинок із напівцілим спіном, у кожному квантовому стані не може перебувати більше однієї частинки.*

Стосовно електрона в атомі це означає, що в кожному стані із заданим набором квантових чисел n, l, m_l, може перебувати не більше двох електронів із протилежно орієнтованими спінами. Для частинок із цілочисловим спіном таких обмежень немає.

Указані розбіжності зумовлюють не однаковий розподіл частинок по енергіях у макроскопічних системах. Частинки з напівцілим спіном підпорядковані закону розподілу Фермі-Дірака і називаються «ферміонами». У системі частинок із цілочисловим спіном діє зовсім інший закон розподілу Бозе-Ейнштейна, і вони називаються «бозонами».

Оболонкова структура атома. Електрони мають спін $1/2$ і є ферміонами. Це суттєво відображається на властивостях електронних систем таких як, скажімо, метали чи атоми. Приміром, на кожному енергетичному рівні в металі може бути тільки по два електрони. Тому навіть при температурі абсолютного нуля вільні електрони займають кількість рівнів порядку кількості атомів зразку металу і мають дуже велику середню кінетичну енергію. Це суттєво понижує для них ефективну висоту потенціального бар’єра на межі з вакуумом і уможливлює тунельні явища, про які говорилося раніше (Лекція 4, п. 4.5).

В атомі електрони теж не можуть усі перебувати на найнижчому енергетичному рівні навіть у основному стані, коли атом має найменшу можливу енергію. Вони розподіляються по декількох найнижчих рівнях так, щоб у кожному квантовому стані був лише один електрон. Тому максимальна кількість електронів $N_{\max}$ у станах із заданим головним квантовим числом n дорівнює

$$N_{\max} = 2n^2. \qquad (6.14)$$

Тож, на першому рівні може бути 2 електрони, на другому – 8, третьому – 18, тощо.

Квантове число n є головним чинником, який визначає не лише енергію електрона, а й середню відстань електрона від ядра. Тому всі електрони, що перебувають на заданому рівні n, є певною мірою просторово відокремленими від інших і утворюють відповідну *електронну оболонку* атома. Оболонки прийнято позначати великими латинськими літерами, починаючи від *K*: *K, L, M, N, O, ...* . При цьому *K*-оболонка містить рівень $1s$, *L* – рівні $2s, 2p$, *M* – рівні $3s, 3p$ і $3d$, тощо.

У межах оболонки також спостерігається розшарування електронів залежно від геометричної конфігурації орбіталей, яка визначається квантовим числом l. Через це всі електрони, що мають задане значення l, утворюють відповідну *підоболонку* даної оболонки[28]. Максимальна кількість електронів у підоболонці дорівнює кількості квантових станів електрона із заданим значенням l і, з урахуванням спіну, складає

$$N'_{\max} = 2(2l+1). \qquad (6.14a)$$

Залежно від фактичної кількості електронів N в оболонці, вона називається *замкненою* (якщо $N = N_{\max}$), або *незамкненою* (якщо $N < N_{\max}$), так само й для підоболонок. Відмітимо, що, згідно з (6.14) і (6.14*a*), кількість електронів у замкненій оболонці чи підоболонці є завжди парною.

Властивості оболонок і періодична система елементів. Теорія і дослід свідчать про те, що властивості оболонок і підоболонок суттєво залежать від ступеня їх заповненості («заселеності») електронами. Зокрема, замкнені оболонки та підоболонки не мають електричного та магнітного моментів і не взаємодіють із зовнішніми полями. Про це опосередковано свідчить той факт, що, сума всіх значень m_l і m_s у замкненій оболонці чи підоболонці дорівнює нулю. Електрони в замкненій оболонці чи підоболонці сильно зв'язані з ядром та між собою. Тому для їх вивільнення (внутрішньої іонізації атома) потрібна велика енергія ($>10^3$ еВ), у той час як для виривання електрона з незамкненої оболонки треба всього порядку 10 еВ. Також електрон не може змінити свій стан і всередині замкненої оболонки, оскільки всі дозволені стани зайняті іншими електронами цієї оболонки. Через указані особливості замкнені оболонки практично не беруть участі у взаємодії атомів з іншими частинками та зовнішніми полями, і всі основні

[28] Інколи оболонки називають електронними шарами, а підоболонки – оболонками.

фізико-хімічні властивості атомів визначаються тільки електронами незамкнених (валентних) оболонок.

Властивості незамкнених оболонок теж залежать від кількості електронів у них. Зокрема, атоми із майже заповненими валентними оболонками легко забирають недостатні електрони в інших атомів і утворюють міцні негативні іони із замкненою електронною структурою. Яскравим представником таких хімічних елементів є галогени: F, Cl, Br, ... З іншого боку, коли валентна оболонка атома далека від заповнення, він легко позбавляється «зайвих» електронів, утворюючи міцний позитивний іон із замкненою електронною структурою. Найкраще така властивість виражена в лужних металів: Li, Na, K, ... Ці речовини є дуже хімічно активними, зокрема, з'єднуючись із галогенами, вони утворюють міцні молекули лужно-галоїдних сполук – солей, до яких належить і харчова сіль $NaCl$. Показовим прикладом є також інертні гази He, Ne, Ar, ... Валентні електрони в атомах цих елементів утворюють замкнені оболонки або підоболонки. Тому інертні гази за звичайних умов існують тільки в атомарному стані й не утворюють хімічних сполук з іншими елементами.

Електронна структура будь-якого атома, тобто кількість і тип його електронних оболонок і підоболонок, визначається загальною кількістю електронів та умовою мінімуму енергії атома в основному стані. Позаяк кількість електронів у оболонках є обмеженою, структура валентних оболонок атомів при збільшенні загальної кількості електронів періодично повторюється. Відповідно повторюються і їхні характерні фізико-хімічні властивості. Цим пояснюється закономірний розподіл хімічних елементів по групах і періодах у системі хімічних елементів. Цей закон був відкритій Менделеєвим на основі емпіричних даних, але вичерпне теоретичне обґрунтування отримав лише після створення квантової механіки.

6.5. Характеристичні рентгенівські спектри

Енергетичний спектр багатоелектронних атомів. Багатоелектронні атоми відрізняються від Гідрогену більшим зарядом ядра $q = Ze$, де Z – порядковий номер елемента в таблиці Менделеєва. Тому, здавалося б, енергетичні рівні мали визначатися виразом (6.6*а*) і розміщуватися глибше, ніж у Гідрогені, причому тим глибше, чим далі розміщений елемент у періодичній системі. Але насправді енергетичні і оптичні спектри багатоелектронних атомів набагато складніші, позаяк в них квантові стани визначаються взаємодією електронів не лише з ядром, а й між собою.

Одним із наслідків електрон-електронної взаємодії є утворення електронних оболонок, через що різні групи електронів у багатоелектронному атомі певною мірою відокремлені від інших і знаходяться на суттєво різній середній відстані від ядра. Тому в першому наближенні можна вважати, що для електронів даної оболонки електричне поле ядра частково послаблене (екрановане) електронами, що знаходяться ближче до ядра. Через це найвіддаленіші від ядра електрони зовнішніх (валентних) оболонок усіх атомів, окрім гелію, зв'язані з ядром навіть слабше, ніж у Гідрогені. На це вказують, зокрема, відносно невеликі енергій іонізації атомів та частоти в спектрах випромінювання багатоелектронних атомів. Але електрони внутрішніх оболонок зв'язані з ядром дуже сильно, тому їхні енергетичні рівні залягають дуже глибоко. Відстань між рівнями різних оболонок теж є дуже великою і для масивних атомів складає $\sim 10^4$ еВ.

Ще одна особливість спектрів багатоелектронних атомів полягає в тому, що в них енергія квантових станів залежить не лише від головного n, а і від орбітального квантового числа l. Це пояснюється тим, що навіть у межах однієї оболонки хвильові функції (орбіталі) електронів із різних підоболонок мають різні розміри та просторову конфігурацію, і тому для них ступінь екранування ядра іншими електронами є не однаковим. З цієї причини енергетичні та оптичні спектри багатоелектронних атомів є набагато складнішими, ніж у гідрогену.

Характеристичні рентгенівські спектри. Закон Мозлі. За звичайних умов переходи електронів між рівнями замкнених внутрішніх оболонок атома є неможливими через відсутність на них «вільних місць». Але такі переходи стають можливими при внутрішній іонізації атома – вириванні електрона із внутрішньої оболонки атома внаслідок опромінення жорсткими рентгенівськими променями або бомбардування швидкими електронами чи іншими частинками. В такому разі на відповідному рівні з'являється «дірка» – не зайнятий квантовий стан, у який може перейти електрон із більш високої оболонки. Відтак уже в ній з'явиться дірка, в яку перейде електрон із наступної вищої оболонки, і т. ін. У результаті таких каскадних переходів випромінюються фотони з упорядкованими частотами, що утворюють спектральні серії в рентгенівському діапазоні, як це схематично показано на рис. 6.6.

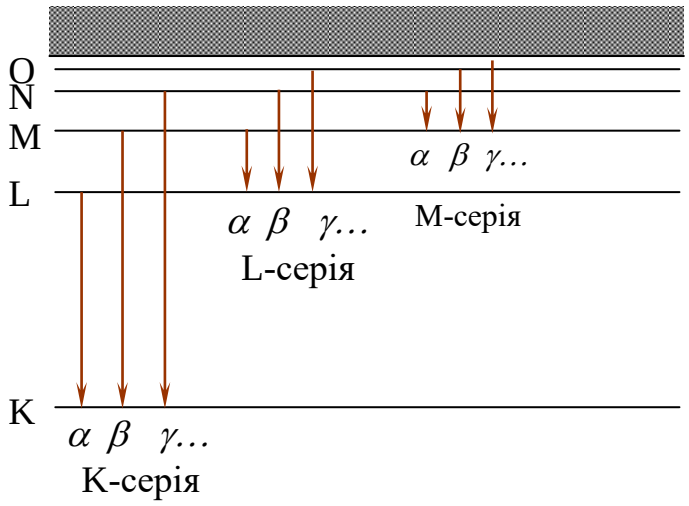


Рис. 6.6

Рентгенівські серії позначають літерою оболонки, на яку здійснюються переходи, а лінії в серії – нижнім індексом $\alpha, \beta, \gamma, \ldots$. Енергії переходів і частоти переходів є індивідуальними для кожного хімічного елемента, тому вказане випромінювання атомів називається *характеристичним* рентгенівським випромінюванням.

Закон Мозлі. Характеристичні рентгенівські спектри нагадують спектр атомів Гідрогену, але є більш простими. Це пояснюється тим, що навіть наймасивніші атоми мають тільки п’ять електронних оболонок. Тому кількість ліній в серії (кількість можливих переходів на дану оболонку) не перевищує чотирьох. Правда, через залежність енергії електронів у заданій оболонці не тільки від головного, а й від орбітального квантового числа, кожен рівень і кожна лінія рентгенівського спектра складається з відповідної кількості близько розташованих компонент. Але через дуже великі енергії і частоти переходів між оболонками така тонка структура рентгенівських спектрів не є суттєвою. Тому характеристичні рентгенівські спектри різних елементів вирізняються одноманітністю й невеликою кількістю ліній.

Ще одна особливість рентгенівських спектрів полягає в тому, що утворення хімічних сполук не впливає на характеристичні спектри атомів у складі молекули. Це прямо свідчить про те, що внутрішні оболонки атомів у молекулі не взаємодіють між собою, тобто що за хімічний зв’язок відповідають тільки валентні електрони. Енергії внутрішніх оболонок головним чином визначаються взаємодією електронів з ядром і залежать від його заряду. Тому існує закономірний зв’язок між частотами ліній характеристичного випромінювання даного хімічного елемента та його

порядковим номером Z у періодичній системі, який задає заряд ядра $q = Ze$. Цей зв'язок виражається *законом Мозлі*, що визначає частоту ω даної лінії в даній серії характеристичного спектра кожного елемента:

$$\sqrt{\omega} = C(Z - \sigma), \tag{6.15}$$

де Z – порядковий номер елемента в періодичній системі, а σ і C – константи, що залежать від серії та лінії в серії.

Слід одразу зауважити, що закон Мозлі не є точним. Він добре виконується для легких елементів, але для важких спостерігається деяке відхилення від лінійної залежності в (6.15), а також значні відміни констант σ і C для однієї й тієї ж лінії в одній і тій самій серії різних елементів.

Для розуміння закону Мозлі суттєво, що у випадку легких елементів для K_α - ліній $\sigma = 1$, а константу C можна подати як

$$C = \sqrt{R\left((1/1^2) - (1/2^2)\right)},$$

де R – стала Рідберга (6.7). Відтак частота лінії K_α

$$\omega = R(Z-1)^2\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right). \tag{6.16}$$

Прикметно, що, згідно з (5.5*a*), цей вираз відповідає першій лінії першої серії в оптичному спектрі водневоподібного іона із зарядом ядра $q = (Z-1)e$. Це можна пояснити тим, що K_α - лінія зумовлена переходом електрона L-оболонки на K – оболонку, в якій лишився тільки один електрон. Відтак у процесі переходу L-електрон рухається в полі ядра, що послаблене (екрановане) одним K-електроном так, якби заряд ядра дорівнював $q_{\text{еф}} = (Z-1)e$. Отже, величина σ має зміст константи екранування. Те саме можна сказати й про L_α -лінії, для яких

$$C = \sqrt{R\left((1/2^2) - (1/3^2)\right)}$$

і

$$\omega = R(Z-\sigma)^2\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2}\right). \tag{6.17}$$

Але в цьому випадку дослід дає $\sigma \approx 5{,}5$, хоча за «арифметичною» логікою мало би бути $\sigma = 9$, оскільки для *M*-електрона при його переході на звільнене місце в *L*-оболонці ядро екранують 2 електрони *K*-оболонки та 7 електронів *L*-оболонки. Цю розбіжність можна пояснити тим, що, на відміну від компактної і близької від ядра *K*-оболонки, вищі оболонки частково перекриваються між собою. Тому для *M*-електрона, що здійснює перехід, поле ядра екранується не всім зарядом електронів *L*-оболонки. Подібне пояснення, ймовірно, мають і відмічені вище відхилення від простого закону (6.15) у випадку важких елементів, які мають більшу кількість внутрішніх оболонок і більший ступінь їх перекриття.

На завершення зазначимо, що закон Мозлі відіграв велику роль в обґрунтуванні та становленні періодичної системи хімічних елементів Менделеєва. Цей закон показав, що місце елемента в періодичній системі визначається не масою атома, як вважалося, а зарядом ядра. Це дозволило остаточно впорядкувати таблицю хімічних елементів. Зокрема, Мозлі показав, що між Гідрогеном та ураном має існувати рівно 92 елементи та визначив кількість і місце в таблиці невідомих на той час і відкритих пізніше елементів.

6.6. Контрольні запитання

1. Чи залежить, згідно з механікою Шрьодінгера, кількість компонент, на які розщеплюється енергетичний рівень атома гідрогену в зовнішньому магнітному полі від індукції поля? Від номера рівня?

2. Чи залежить, згідно з механікою Шрьодінгера, відстань ΔE між компонентами розщепленого в зовнішньому магнітному полі енергетичного рівня атома гідрогену від індукції поля? Від номера рівня?

3. Чи залежить кількість компонент, на які розщеплюється спектральна лінія атома Гідрогену в нормальному ефекті Зеємана від індукції поля? Від номерів рівнів, між якими відбувається електронний перехід?

4. Чи залежить величина розщеплення $\Delta\omega$ спектральної лінії атома в нормальному ефекті Зеємана від індукції поля? Від номерів рівнів, між якими відбувається електронний перехід?

5. Відомо, що нормальний ефект Зеємана спостерігається тільки для атомів із парною кількістю електронів. Чому?

6. Як пояснити, що в дослідах Штерна і Герлаха спостерігалося розщеплення пучків атомів, котрі не мають орбітального магнітного моменту?

7. Як пояснити, що спінове квантове число електрона s, на відміну від l, має єдине можливе значення?

8. Які електрони в атомі утворюють оболонку? підоболонку? Чому дорівнює максимальна можлива кількість електронів у оболонці? підоболонці?

9. Що таке валентна оболонка атома? Чому взаємодія між атомами за звичайних умов визначається тільки валентними електронами?

10. Як виникає характеристичне рентгенівське випромінювання?

11. Чому серії в характеристичному рентгенівському спектрі складаються з невеликої кількості ліній?

12. Спочатку елемент кобальт Co в періодичній таблиці розміщували за нікелем Ni в порядку зростання атомної маси (відповідно, 58,7 і 58,9). Але за допомогою закону Мозлі з'ясували, що вказану послідовність треба змінити. Поясніть, як це взнали.

6.7. Задачі

Задача 6.1. Визначити абсолютну $\Delta\lambda$ та відносну $\eta = \Delta\lambda/\lambda$ величину нормального зеєманівського розщеплення лінії $\lambda_\alpha = 656$ нм у спектрі Гідрогену в магнітному полі B = 0,5 Тл.

Розв'язування. Величина розщеплення спектральної лінії в теорії визначається через частоту формулою (6.4). Тому спочатку виразимо $\Delta\lambda$ та η через частоту, врахувавши співвідношення $\lambda = 2\pi c/\omega$. Оскільки в ефекті Зеємана $\Delta\lambda << \lambda$, можна вважати, що

$$\frac{\Delta\lambda}{\Delta\omega} = \left|\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}\omega}\right| = \frac{2\pi c}{\omega^2} = \frac{\lambda^2}{2\pi c} \quad \Rightarrow \quad \Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2\pi c}\Delta\omega. \qquad (1)$$

Відтак з урахуванням (6.4) і (5.14) маємо:

$$\Delta\lambda_\alpha = \frac{eB\lambda_\alpha^2}{4\pi mc} = 10^{-11}\ \text{м}, \quad \eta \approx 1{,}5\cdot 10^{-5} = 1{,}5\cdot 10^{-3}\ \%.$$

Цей розрахунок показує, що зеєманівське розщеплення спектральних ліній атомів є тонким ефектом, який можна спостерігати тільки за допомогою спектроскопа високої роздільної здатності..

Задача 6.2. Оцінити індукцію орбітального магнітного поля валентного електрона атома натрію в стані 3*p*, якщо при його переході в основний 3*s*-стан випромінюються дві близькі лінії (дублет) із довжиною хвилі $\lambda' = 589{,}0$ нм і λ''=589,6 нм.

Розв'язування. Утворення дублета при вказаному електронному переході є наслідком спін-орбітального розщеплення, величина якого по частоті визначається виразами (6.13*a*) і (6.6), як

$$\Delta\omega_{\text{so}} = g_{\text{s}} B_0 = \frac{eB_0}{m}.$$

Підставивши цю величину у вираз (1) із попередньої задачі, отримаємо:

$$\Delta\lambda = \left(\lambda'' - \lambda'\right) = \frac{e\lambda^2 B_0}{2\pi mc} \quad \Rightarrow \quad B_0 = \frac{2\pi mc\left(\lambda'' - \lambda'\right)}{e\lambda^2}.$$

Підставивши сюди $\lambda \approx 5{,}9 \cdot 10^{-7}$ м, після обчислень отримаємо відповідь $B_0 \approx 18$ Тл. Як бачимо, попри мікроскопічний заряд електрона, його орбітальне магнітне поле є дуже сильним. Це пояснюється великою швидкістю руху та гранично малою відстанню електрона від ядра.

Задача 6.3. При якій найменшій напрузі $U_{\min}$ на рентгенівській трубці з антикатодом, укритим ванадієм (*Z* = 23), у її випромінюванні будуть спостерігатися характеристичні лінії *K*-серії? Короткохвильова межа К-серії складає $\lambda_0 = 2{,}26 \cdot 10^{-10}$ м.

Розв'язування. К-серія в рентгенівському спектрі з'являється при вириванні одного з електронів *K*-оболонки атома. Мінімальна необхідна для цього енергія дорівнює енергії іонізації E_1, тобто енергії переходу електрона *K*-оболонки із основного стану в стан з енергією $E = 0$. При поверненні такого електрона безпосередньо в *K*-оболонку ця енергія випромінюється у вигляді фотона із граничною для *K*-серії частотою ω_0 та довжиною хвилі λ_0 такими, що

$$E_1 = \hbar\omega_0 = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_0}. \qquad (1)$$

У рентгенівській трубці внутрішня іонізація атомів анода відбувається за рахунок кінетичної енергії електронів $W = eU$, (U – напруга на трубці), якими бомбардується анод. Тому мінімальна величина $W_{\min} = eU_{\min}$, необхідна для збудження К-серії, має дорівнювати енергії іонізації К-оболонки: $eU_{\min} = E_1$. Підставивши цей вираз у формулу (1), знайдемо найменшу напругу на трубці $U_{\min}$, при якій у спектрі з'являться лінії *К*-серії:

$$eU_{\min} = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_0} \quad \Rightarrow \quad U_{\min} = \frac{2\pi\hbar c}{e\lambda_0} = 5{,}5\,\text{кВ}.$$

Задача 6.4. У деякій послідовності елементів довжини хвилі K_α-лінії характеристичного рентгенівського спектра змінюються від 250 пм до 179 пм. Скільки елементів міститься в цій послідовності?

Розв'язування. Згідно із законом Мозлі (6.16), маємо:

$$Z = \sqrt{\frac{4\omega}{3R}} + 1 = \sqrt{\frac{8\pi c}{3R\lambda}} + 1, \qquad (1)$$

де ω і λ – частота та довжина хвилі K_α-лінії характеристичного спектра, R – стала Рідберга.

Якщо порядкові номери першого та останнього елемента в послідовності позначити як Z_1 і Z_2, а шукану кількість елементів – як N, то

$$Z_2 - Z_1 = N - 1.$$

Підставивши сюди вирази Z_1 і Z_2 з (1), отримаємо відповідь:

$$N = \sqrt{\frac{8\pi c}{3R}}\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_2}} - \frac{1}{\sqrt{\lambda_1}}\right) + 1 = 5.$$

Задача 6.5. Яким металом укритий анод рентгенівської трубки, якщо при напрузі U = 10,0 кВ мінімальна довжина хвилі λ_0 гальмівного рентгенівського випромінювання на $\Delta\lambda = 42{,}3$ пм менша за максимальну довжину хвилі λ_α *К*- серії характеристичного спектра?

Розв'язування. Величина λ_0 фактично є відомою, позаяк повністю визначається напругою на трубці формулою (1.13а):

$$\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar c}{eU} = \frac{hc}{eU} = 124,2 \text{ пм}.$$

Відтак можна знайти й довжину хвилі K_α-лінії характеристичного спектра λ_α, котра за умовою задачі дорівнює:

$$\lambda_\alpha = \lambda_0 + \Delta\lambda = 166,5 \text{ пм}.$$

Після цього із закону Мозлі за допомогою формули (6.16) отримуємо відповідь, виразивши частоту через довжину хвилі:

$$\frac{2\pi c}{\lambda} = \frac{3}{4}R\left(Z-1\right)^2 \quad \Rightarrow \quad Z = \sqrt{\frac{8\pi c}{3R\lambda}} + 1 = 28 \quad \left(\textit{Нікель}\right).$$

Зміст