

Энергия

11. Рассмотрим теперь единицы, используемые в микрофизике для измерения энергии. Одной из наиболее употребительных единиц является *электрон-вольт* (эВ). Она определяется как энергия, приобретаемая элементарным зарядом e при прохождении разности потенциалов один вольт. Воспользовавшись значением e из табл. 2А, можно выразить электрон-вольт в эргах:

$$1\text{эВ} = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг.} \quad (11a)$$

Кроме электрон-вольта, используют и производные единицы:

$$1 \text{ кэВ} = 1000 \text{ эВ}, \quad 1 \text{ МэВ} = 10^6 \text{ эВ},$$

$$1 \text{ ГэВ} = 10^3 \text{ МэВ} = 10^9 \text{ эВ};$$

кэВ — сокращенно *килоэлектрон-вольт*, МэВ — *мегаэлектрон-вольт*, ГэВ — *гигаэлектрон-вольт*. Электрон-вольт является единицей, особенно удобной в атомной физике, так как энергия связи внешних электронов у атомов имеет порядок 1 эВ. В ядерной физике, где энергии связи частиц в ядре порядка 1 МэВ, удобнее эта единица. И наконец, единица гигаэлектрон-вольт используется при рассмотрении взаимодействия элементарных частиц при очень высоких энергиях.

12. В гл. 1 мы говорили о важном значении констант c и \hbar . Особенно часто они встречаются в релятивистской квантовой физике, где по этой причине удобно работать с системой единиц, в которой константы c и \hbar безразмерны и равны единице: $c = \hbar = 1$.

Читатель чувствует, что эти определения нарушают наши представления о физической размерности. Следует, однако, понять, что определенные размерности, которые мы приписываем различным физическим величинам, основаны на произвольном соглашении. Строгое утверждение заключается в том, что *физические величины, которые можно непосредственно сравнивать*, имеют одинаковую «физическую размерность». Во всех остальных случаях приписывание размерности основано на некоторых соотношениях, в фундаментальный характер которых мы верим. Например, имея в виду фундаментальный характер такой постоянной, как скорость света, можно связать расстояние x и время t выражением $x = ct$, что дает нам возможность измерять расстояние и время в одних и тех же единицах. Так поступают астрономы, измеряя расстояние в световых годах.

Если положить $\hbar = c = 1$, то многие формулы приобретают более простой, ясный и привлекательный вид, и нам хотелось бы воспользоваться такой возможностью в этой книге. Но постоянное использование таких единиц создало бы ненужные трудности при чтении других книг по квантовой физике, большинство которых основано на системах единиц СИ или СГС. По этой причине мы будем пользоваться главным образом системой СГС.

13. Напишем теперь некоторые соотношения между различными физическими величинами, которые возникают благодаря существо-

Таблица 14А. Множители для переходов между различными единицами энергии

	Энергия E		Молярная энергия $N_0 E$		Температура	Масса	Частота	Волновое число	Длина волны
	эВ	эрг	эрг/моль	кал/моль	E/k , К	E/c^2 , а.е.м.	E/h , Гц	E/hc , см $^{-1}$	hc/E , Å
1 эВ	1	$1,6021 \cdot 10^{-12}$	$9,6487 \cdot 10^{11}$	23050	11605	$1,0736 \cdot 10^{-9}$	$2,4181 \cdot 10^{14}$	8065,8	12398
1 эрг	$6,2418 \cdot 10^{11}$	1	$6,0226 \cdot 10^{23}$	$1,439 \cdot 10^{16}$	$7,244 \cdot 10^{15}$	$6,7010 \cdot 10^2$	$1,5093 \cdot 10^{26}$	$5,0345 \cdot 10^{15}$	$1,9863 \cdot 10^{-8}$
1 эрг/моль	$1,0364 \cdot 10^{-12}$	$1,6604 \cdot 10^{-24}$	1	$2,389 \cdot 10^{-8}$	$1,203 \cdot 10^{-8}$	$1,1126 \cdot 10^{-21}$	250,61	$8,3594 \cdot 10^{-9}$	$1,1963 \cdot 10^{16}$
1 кал/моль	$4,338 \cdot 10^{-5}$	$6,951 \cdot 10^{-17}$	$4,186 \cdot 10^7$	1	0,503	$4,658 \cdot 10^{-14}$	$1,049 \cdot 10^{10}$	0,3499	$2,858 \cdot 10^8$
1 К	$8,617 \cdot 10^{-5}$	$1,381 \cdot 10^{-16}$	$8,314 \cdot 10^7$	1,986	1	$9,251 \cdot 10^{-14}$	$2,084 \cdot 10^{10}$	0,6950	$1,439 \cdot 10^8$
1 а.е.м.	$931,48 \cdot 10^6$	$1,4923 \cdot 10^{-3}$	$8,9876 \cdot 10^{20}$	$2,147 \cdot 10^{13}$	$1,081 \cdot 10^{13}$	1	$2,2524 \cdot 10^{23}$	$7,5131 \cdot 10^{12}$	$1,3310 \cdot 10^{-5}$
1 Гц	$4,1355 \cdot 10^{-15}$	$6,6255 \cdot 10^{-27}$	$3,9903 \cdot 10^{-3}$	$9,532 \cdot 10^{-11}$	$4,799 \cdot 10^{-11}$	$4,4398 \cdot 10^{-24}$	1	$3,3356 \cdot 10^{-11}$	$2,9979 \cdot 10^{18}$
1 см $^{-1}$	$1,2398 \cdot 10^{-4}$	$1,9863 \cdot 10^{-16}$	$1,1963 \cdot 10^8$	2,858	1,439	$1,3310 \cdot 10^{-13}$	$2,9979 \cdot 10^{10}$	1	10^8
1 Å	$1,2398 \cdot 10^4$	$1,9863 \cdot 10^{-8}$	$1,1963 \cdot 10^{16}$	$2,858 \cdot 10^8$	$1,439 \cdot 10^8$	$1,3310 \cdot 10^{-5}$	$2,9979 \cdot 10^{18}$	10^8	1
Масса электрона mc^2	511006	$8,1868 \cdot 10^{-7}$	$4,9306 \cdot 10^{17}$	$1,178 \cdot 10^{10}$	$5,930 \cdot 10^9$	$5,4859 \cdot 10^{-4}$	$1,2356 \cdot 10^{20}$	$4,1217 \cdot 10^9$	$2,4262 \cdot 10^{-2}$
Ридберг R_∞	13,605	$2,1797 \cdot 10^{-11}$	$1,3127 \cdot 10^{13}$	$3,136 \cdot 10^5$	$1,579 \cdot 10^5$	$1,4606 \cdot 10^{-8}$	$3,2898 \cdot 10^{15}$	109737	911,27

ванию констант c и \hbar . Начнем с массы m , свяжем с ней ряд других физических констант, составленных из m , \hbar и c , и укажем обычную физическую размерность этих величин:

$$\begin{aligned} m &= (\text{масса}), & mc^2/\hbar &= (\text{время})^{-1}, \\ mc &= (\text{импульс}), & \hbar/mc^2 &= (\text{время}), \\ mc^2 &= (\text{энергия}), & \hbar/mc &= (\text{длина}). \end{aligned} \quad (13a)$$

Читатель должен проверить правильность указанных размерностей. Все эти величины «связаны вместе» постоянными h и c . Основываясь на приведенных соотношениях, можно ассоциировать *энергию* с массой, или с частотой, или с обратной длиной; энергия может быть выражена через значения связанных величин.

14. Таким образом, мы связываем с энергией E частоту E/h , волновое число E/hc и массу E/c^2 . Соответствующие переходные коэффициенты имеют следующие значения:

$$\frac{(\text{энергия})}{(\text{масса})} = (9,31478 \pm 0,00005) \cdot 10^8 \text{ эВ/а. е. м.}, \quad (14a)$$

$$\frac{(\text{частота})}{(\text{энергия})} = (2,41804 \pm 0,00002) \cdot 10^{14} \text{ Гц/эВ}, \quad (14b)$$

$$\frac{(\text{волновое число})}{(\text{энергия})} = (8,06573 \pm 0,00008) \cdot 10^3 \text{ см}^{-1} \cdot \text{эВ}^{-1}. \quad (14c)$$

Табл. 14А основана на этих переходных коэффициентах. В каждой горизонтальной строке таблицы приведен ряд величин, ассоциированных с величиной, стоящей в первом столбце. Второй и третий столбцы дают энергию E в электрон-вольтах и эргах. Седьмой столбец дает соответствующие значения E/c^2 в атомных единицах массы, восьмой столбец — соответствующую частоту E/h в герцах, девятый — волновое число E/hc в сантиметрах в минус первой степени, десятый — соответствующее значение длины волны hc/E в ангстремах. Это единственная величина в таблице, не пропорциональная энергии E .

15. В химии энергию обычно измеряют в калориях (сокращенно кал) и килокалориях (ккал). Иногда калорию называют «малой калорией», а килокалорию «большой калорией». Эти единицы определяют следующим образом:

$$1 \text{ кал} = 4,186 \text{ Дж} = 4,186 \cdot 10^7 \text{ эрг}, \quad 1 \text{ ккал} = 1000 \text{ кал}. \quad (15a)$$

Интересно связать энергию E одного атома или молекулы с соответствующей энергией моля таких частиц (молярной энергией).

Имеем

$$E_{\text{мол}}/E = N_0 = 23\,050 \text{ кал/эВ} = 9,6487 \cdot 10^{11} \text{ эрг/эВ}. \quad (15b)$$

В табл. 14А в четвертом и пятом столбцах приведены значения $E_{\text{мол}}$ в эргах на моль и калориях на моль.

16. В п. 31—34 гл. I мы кратко рассмотрели понятия теплоты и температуры и отметили, что постоянная Больцмана является переходным множителем от температуры к энергии. Обычно темпера-

туру выражают через соответствующую энергию, и наоборот, с помощью условного соотношения

$$(\text{эквивалентная энергия}) = k \times (\text{температура}). \quad (16a)$$

Для такого перехода удобно иметь значение постоянной Больцмана, выраженное в электрон-вольтах на кельвин:

$$k = 8,617 \cdot 10^{-5} \text{ эВ/К}, \quad 1/k = 11\,605 \text{ К/эВ}. \quad (16b)$$

Соответственно «комнатная температура» ($20^\circ\text{C} = 293 \text{ К}$) эквивалентна энергии

$$k \cdot 293 \text{ К} \approx (1/40) \text{ эВ}. \quad (16c)$$

В шестом столбце табл. 14А даны значения эквивалентной энергии в кельвинах.

17. Итак, энергия и температура могут быть выражены в одинаковых единицах. Однако не следует считать эти величины «одним и тем же». Было бы ошибкой полагать, что тепловая энергия любого макроскопического тела при температуре T равна величине kT , умноженной на число атомов тела. Внутренняя энергия макроскопического тела зависит не только от температуры, но и от других (макроскопических) параметров, и, кроме того, соотношение между энергией и температурой зависит от природы тела. Это очень важное замечание, и формула (16a) не должна вводить нас в заблуждение.

Весьма полезно помнить, однако, что если макроскопическое тело имеет температуру T , то часто (хотя и не всегда) средняя энергия «беспорядочного» движения, приходящаяся на один атом (или молекулу), имеет порядок kT .

Это утверждение дает нам возможность оценить среднюю энергию беспорядочного теплового движения атома или молекулы, если мы знаем температуру. Для некоторых специальных систем можно высказать более точное утверждение. Важным примером может служить газ, состоящий из молекул, нагретый до температуры T . Средняя кинетическая энергия E_{tr} , связанная с поступательным движением молекулы, равна в этом случае

$$E_{\text{tr}} = (3/2) kT \quad (17a)$$

независимо от того, имеем ли мы дело со сложной молекулой или с атомом. Вывод этой формулы — дело статистической механики, и мы отложим его до тома V этого курса *), но будем часто прибегать к формуле (17a).

18. Мы говорили уже, что понятия теплоты или температуры неприменимы к изолированным ядрам, атомам или молекулам. Эти понятия относятся к веществу в целом. Мы почти никогда не можем производить измерения над изолированными частицами. Они всегда погружены в некую среду, представляющую собой макроскопическое тело. Поэтому беспорядочное тепловое движение почти всегда является фактором, который следует учитывать, если мы хотим

*) Рейф Ф. Статистическая физика. — 3-е изд. — М.: Наука, 1986.

понять поведение квантовомеханических систем, особенно когда мы рассматриваем макроскопические следствия квантовых явлений.

Важной особенностью теплового движения в системе является его *беспорядочность*. Это вводит в поведение системы элемент случайности. Можно сказать, что беспорядочное тепловое движение является «шумом в чистой симфонии квантовой механики». И следует добавить, что часто шум настолько велик, что заглушает музыку. В принципе тепловое движение можно подавить, если поддерживать исследуемую систему и ее окружение при температуре, очень близкой к 0 К. Действительно, при абсолютном нуле тепловое движение исчезает. На практике полного подавления достичь нельзя. Тепловое движение является характерной особенностью мира, в котором мы живем.

Порядки величин в атомной и молекулярной физике

19. Представим себе атом в виде некоторой динамической системы, состоящей из очень малого ядра, окруженного облаком электронов. Электроны притягиваются к ядру и взаимодействуют друг с другом с помощью электромагнитных сил. Наша вера в то, что электромагнитные силы являются единственными силами, которые надо учитывать для понимания свойств атомов и молекул, основана на постоянном сравнении предсказаний теории с опытом.

Квантовая теория, описывающая взаимодействие заряженных частиц с электромагнитным полем, называется *квантовой электродинамикой*. Она включает в себя законы специальной теории относительности. В настоящее время это наиболее успешная теория фундаментальных процессов, происходящих с элементарными частицами. Она позволила описать строение атомов и молекул, а также испускание и поглощение этими объектами электромагнитного излучения.

20. Как показывает эксперимент, размер ядра порядка 10^{-13} см, а атома 10^{-8} см. Таким образом, объем ядра ничтожно мал по сравнению с объемом всего атома.

Масса ядра велика по сравнению с массой электрона, равной 0,0005486 а. е. м. Действительно, отношение масс электрона и протона равно

$$m/M_p = 1/1836. \quad (20a)$$

Разумно ожидать, что по крайней мере в первом приближении движение ядра не играет существенной роли и ядро можно считать «бесконечно тяжелым» и фиксированным в пространстве. Так как ядро очень мало, то сделаем еще одно упрощение и будем считать его «точкой». В такой атомной модели роль ядра сводится к созданию электростатического поля, описываемого потенциалом

$$V(r) = eZ/r, \quad (20b)$$

где e — элементарный заряд; Z — атомный номер.