



Квантовая механика атомов и молекул

Боровская модель атома позволила нам составить первое (хотя и довольно грубое) представление о строении атома. Она объяснила, почему атомы испускают и поглощают свет с дискретными длинами волн, и решила проблему стабильности атомов. Вычисленные в рамках боровской модели длины волн линейчатого спектра и энергии ионизации атома водорода и одноэлектронных ионов оказались в превосходном согласии с экспериментом. Но теория Бора имела и существенные ограничения. На ее основе нельзя было предсказать линейчатые спектры более сложных атомов – даже нейтрального атома гелия всего лишь с двумя электронами. Теория Бора не смогла объяснить, почему линии испускания при более детальном изучении оказались состоящими из двух или большего числа очень близких линий (так называемая *тонкая структура*). Теория Бора не смогла также объяснить, почему одни спектральные линии ярче других. Не получили объяснения и межатомные связи в молекулах, твердых телах и жидкостях.

Теория Бора не была вполне удовлетворительной и с чисто теоретической точки зрения, поскольку представляла собой странную смесь классических и квантовых представлений. Она не обеспечила решения и проблемы корпускулярно-волнового дуализма.

Мы упоминаем об этих недостатках теории Бора отнюдь не для того, чтобы умалить ее значение, ибо теория Бора была и остается знаменательной вехой в истории науки. Перечень недостатков теории Бора необходим лишь для того, чтобы пояснить, почему в начале 20-х годов многие физики стали все более отчетливо сознавать необходимость новой, более последовательной теории. И она не заставила себя ждать. Менее чем через два года после того, как де Бройль выдвинул гипотезу о волнах материи, Эрвин Шредингер (1887–1961) и Вернер Гейзенберг (1901–1976) независимо разработали новую, более общую теорию. Избранные ими подходы были совершенно различны, но, как выяснилось вскоре, оказались полностью совместимыми.

41.1. Квантовая механика – новая теория

Новая теория, получившая название **квантовой механики**, воссоздала из корпускулярно-волнового дуализма единую последовательную теорию. Как теория квантовой механики имела необычайный успех. Она блестяще, до мельчайших деталей решила проблему спектров сложных атомов; она объяснила относительную яркость спектральных линий и образование молекул из атомов; она представляет собой несравненно более общую теорию, которая охватила всю совокупность квантовых явлений от излучения черного тела до структуры атомов и молекул. Квантовая механика объяснила широкий круг явлений природы, ее предсказания позволили создать много новых устройств, нашедших практическое применение. Квантовая теория оказалась столь успешной, что почти все физики ныне считают ее фундаментальной теорией, лежащей в основе физических процессов.

Квантовая механика занимается в основном изучением микромира атомов и света; но и в окружающем нас макромире мы воспринимаем свет и считаем, что все окружающие нас предметы состоят из атомов. Поэтому из новой теории должны следовать и старые, хорошо проверенные результаты классической физики, т. е. квантовая механика при ее применении к макроскопическим явлениям должна приводить к старым классическим законам. Это означает, что квантовая механика должна полностью удовлетворять *принципу соответствия* (о котором мы упоминали в разд. 40.9). Это отнюдь не означает, будто мы отбрасываем классические теории, такие, например, как законы Ньютона. В повседневной жизни применять законы Ньютона несравненно проще, и они обеспечивают достаточно точные результаты. Но когда нам приходится иметь дело с большими скоростями, приближающимися к скорости света, мы вынуждены обратиться к специальной теории относительности, а когда нам приходится иметь дело с микромиром атома, мы используем квантовую механику.

Не вдаваясь в детали разработанного математического аппарата квантовой механики, мы обсудим ее основные идеи и рассмотрим, как они объясняют строение атома и находят другие приложения, используя волновые и корпускулярные свойства материи.

41.2. Волновая функция и ее интерпретация. Интерференция от двух щелей

Важнейшими характеристиками любой волны являются длина волны, частота и амплитуда. В случае электромагнитной волны от длины волны зависит, будет ли свет

видимым, и если да, то какого он цвета. Как мы уже знаем, длина волны (или частота) характеризует энергию соответствующего фотона ($E = hf$). Амплитуда электромагнитной волны определяет напряженность электрического (или индукцию магнитного) поля в данной точке и связана с интенсивностью волны (яркостью света).

Для материальных частиц, таких, как электроны, квантовая механика устанавливает связь между длиной волны и импульсом согласно формуле де Бройля $\lambda = h/mv$. А что можно сказать об амплитуде волн материи? В квантовой механике амплитуду, скажем, электронной волны называют **волновой функцией** и обозначают греческой буквой «пси»: Ψ . Таким образом, Ψ задает амплитуду нового типа поля, которое можно было бы назвать полем или волной материи¹⁾, как функцию времени и положения.

Одна из основных задач квантовой механики заключается в вычислении волновой функции Ψ для той или иной ситуации (например, для электрона в атоме). Выдающимся вкладом Шредингера в развитие квантовой механики явилось предложенное им уравнение, позволяющее вычислять волновую функцию. *Волновое уравнение Шредингера* (так оно теперь называется) по праву считается основным уравнением при описании нерелятивистских материальных частиц²⁾. Так как наше изложение квантовой механики будет по необходимости кратким (этому предмету посвящена не одна книга), мы не будем обсуждать общий вид уравнения Шредингера и способы его решения. Воспользуемся лишь уже «готовыми» решениями уравнения Шредингера и рассмотрим смысл волновой функции Ψ . В одной из интерпретаций функция Ψ – это просто заданная в любой точке пространства и в любой момент времени амплитуда «волны материи», подобно тому как \mathbf{E} (вектор напряженности электрического поля) – это амплитуда электромагнитной волны. Однако возможна и другая интерпретация, основанная на корпускулярно-волновом дуализме. Чтобы пояснить ее, воспользуемся аналогией со светом.

¹⁾ Приведенные рассуждения автора несколько архаичны; современная точка зрения относительно интерпретации волновой функции в квантовой механике была сформулирована немецким физиком Максом Борном еще в 1926 г., когда он выпустил работу, в которой дал статистическую интерпретацию Ψ ; см. ниже. – *Прим. ред.*

²⁾ Уравнение Шредингера лишь несколько отличается от обычного волнового уравнения (15.16) и в одномерном случае может быть записано в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t},$$

где $U(x)$ – потенциальная энергия «частицы» с массой m , описываемой волновой функцией $\Psi(x, t)$, которая зависит от пространственной координаты x и времени t , $\hbar = h/2\pi$ и $i = \sqrt{-1}$.

В гл. 15 было показано, что интенсивность I любой волны пропорциональна квадрату ее амплитуды. Как мы видели в гл. 33, это справедливо и для световых волн, т. е.

$$I \sim E^2,$$

где E – напряженность электрического поля. С точки зрения *корпускулярной* теории интенсивность светового пучка пропорциональна числу фотонов N , проходящих через единичную площадку в единицу времени. Таким образом, $I \sim E^2 \sim N$.

Обратив это соотношение, получим

$$N \sim E^2,$$

т. е. число фотонов (например, падающих на страницу этой книги) пропорционально квадрату напряженности электрического поля.

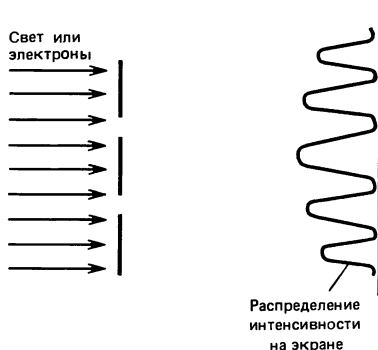
Если световой пучок очень слаб, то число фотонов в нем невелико. Используя очень слабый свет, можно воспроизвести фотографическое изображение, на котором будет видно действие каждого отдельного фотона. Если мы имеем дело с единственным фотоном, то соотношение $N \sim E^2$ можно интерпретировать несколько иначе. В любой точке квадрат напряженности электрического поля E^2 характеризует *вероятность* того, что фотон находится в данном месте. В точках, где значение E^2 велико, фотон находится с большой вероятностью. Там, где E^2 имеет малую величину, вероятность обнаружить фотон невелика.

Аналогичную интерпретацию можно использовать и в случае волн материи. Волновая функция Ψ может меняться по величине в пространстве и во времени. Если Ψ описывает ансамбль, состоящий из большого числа электронов, то величина Ψ^2 в любой точке пропорциональна числу электронов, которые будут обнаружены в этой точке. Но если число электронов мало, то очень точных предсказаний сделать нельзя и Ψ^2 приобретает вероятностный характер. Если зависящая от времени и точки пространства волновая функция Ψ описывает отдельный электрон (скажем, в атоме), то Ψ^2 интерпретируется следующим образом: Ψ^2 в заданной точке пространства и в данный момент времени определяет вероятность найти электрон в этой точке пространства и в выбранный момент времени.

Чтобы лучше это понять, обратимся к знакомому нам эксперименту с двумя щелями и рассмотрим его в случае света и электронов.

Предположим, что ширина каждой из щелей и расстояние между ними по порядку величины сравнимы с длиной падающей на них волны, будь то световая волна или электронная (рис. 41.1). Что произойдет, когда на щели падает световая волна, нам хорошо известно, так как перед нами схема эксперимента Юнга: на экране

Рис. 41.1. Параллельный пучок света или электронов падает на две щели, размеры которых сравнимы с длиной волны. Наблюдается интерференционная картина.



позади щелей образуется интерференционная картина. Если вместо света взять электроны с длиной волны, сравнимой с размерами щелей, то они также создадут интерференционную картину. (Напомним в этой связи эксперимент Дэвиссона–Джермера; рис. 40.7.) В случае света интерференционную картину можно наблюдать непосредственно глазом или зафиксировать на пленке. В случае электронов можно воспользоваться флюоресцирующим экраном (который светится в том месте, где на него попадает электрон).

Если теперь ослабить поток электронов (или фотонов) настолько, чтобы они проходили через щели не группами, а поодиночке, то при каждом соударении частицы с экраном мы увидим вспышку. Сначала вспышки будут казаться распределенными случайно. И действительно, нельзя предсказать, в какую точку экрана попадет отдельный электрон. Но если проводить эксперимент достаточно долго и отмечать точки, в которых электроны попадают на экран, то вскоре начнет вырисовываться картина – та самая интерференционная картина, которую предсказывает волновая теория. И хотя мы не можем предсказать, в какую точку экрана попадет данный электрон, ничто не мешает нам рассчитать вероятности. (Сказанное в полной мере относится и к фотонам.) Вероятность, о которой идет речь, как уже упоминалось, пропорциональна Ψ^2 . Там, где волновая функция Ψ обращается в нуль, находится минимум интерференционной картины. Там, где волновая функция Ψ максимальна, наблюдается максимум интерференционной картины.

Поскольку интерференционная картина наблюдается и в том случае, когда электроны (или фотоны) проходят через щель поодиночке, ясно, что интерференционная картина не является результатом взаимодействия электронов друг с другом. Все происходит так, как если бы электрон проходил через обе щели одновременно! Такое действительно возможно, если вспомнить, что электрон – не вполне обычная частица. Электрон в такой же мере волна, как и частица, а волна, разумеется, может пройти через две щели одновременно. А что произойдет, если мы

закроем одну щель и будем знать, что электрон заведомо прошел через другую щель, а затем, спустя некоторое время, закроем вторую щель и откроем первую так, что электрон сможет проходить только через нее? Оказывается, что в этих случаях интерференционная картина на экране не возникает. Мы увидим на экране просто два светлых пятна за каждой из щелей. Это подтверждает нашу догадку о том, что, когда обе щели открыты, каждый электрон проходит одновременно через обе щели, как если бы он был волной. И при этом каждый электрон образует на экране крохотное светящееся пятнышко, как если бы он был частицей.

Кратко суть всего сказанного сводится к следующему. Если мы трактуем электроны (и другие частицы вещества) как волны, то Ψ описывает амплитуду соответствующей материальной волны. Если мы трактуем электроны как частицы, то Ψ следует интерпретировать на основе *вероятности*. Квадрат волновой функции Ψ^2 характеризует вероятность обнаружить данный электрон в данной точке. Предсказать или хотя бы точно проследить за траекторией отдельного электрона в пространстве и времени мы не можем.

41.3. Принцип неопределенности Гейзенберга

Всякий раз, когда проводится измерение, его результаты всегда содержат некоторую неопределенность или погрешность. Например, мы не можем абсолютно точно измерить длину стола. Даже если линейка будет иметь миллиметровые деления, измерение будет содержать погрешность примерно $1/2$ мм. Более точные приборы позволяют производить более точные измерения, но независимо от того, насколько совершенен измерительный прибор, результат измерения непременно содержит некоторую неопределенность. Можно ожидать, что по мере совершенствования измерительных приборов погрешность измерений удастся сделать сколь угодно малой.

Однако, согласно квантовой механике, в действительности существует предел, ограничивающий точность определенных измерений. Этот предел не зависит от степени совершенства измерительного прибора, а присущ самой природе вещей. Он обусловлен двумя факторами: корпускулярно-волновым дуализмом и неизбежным взаимодействием наблюдаемого объекта с регистрирующим прибором. Рассмотрим этот вопрос более подробно.

Невозможно произвести измерение, не внося в измеряемый объект какое-нибудь возмущение, хотя бы слабое. Допустим, вы хотите отыскать в совершенно темной комнате шарик для игры в настольный теннис. Вы бродите по комнате, пытаясь наощупь определить, где находится шарик, и в тот момент, когда вы прикасаетесь к

нему, он отскакивает. Когда приходится измерять положение какого-нибудь объекта, будь то шарик для игры в настольный теннис или электрон, мы непременно должны чем-нибудь прикоснуться к нему, что даст нам информацию о его положении. Если вы хотите обнаружить в темной комнате закатившийся куда-то шарик для настольного тенниса, то вы можете попытаться нащупать его рукой или палкой. Вы можете также включить свет и обнаружить шарик по отраженному им свету. Пытаясь нащупать шарик рукой или палкой, вы обнаружите шарик в тот момент, когда дотронетесь до него. Но стоит вам дотронуться до шарика, как он неизбежно отпрыгнет, поскольку вы передадите ему импульс; поэтому положение шарика в *будущем* окажется неизвестным. Все сказанное остается в силе (хотя и в меньшей степени) и в том случае, когда вы пытаетесь обнаружить шарик для игры в настольный теннис, подсвечивая себе фонариком: чтобы шарик стал «виден», на нем должен рассеяться по крайней мере один фотон, и отраженный фотон должен попасть в ваш глаз или в другой детектор. Когда фотон сталкивается с обычным макроскопическим объектом, он не вносит значительных изменений ни в состояние движения, ни в положение этого объекта. Но при столкновении с микроскопически малым объектом, таким как электрон, фотон передает ему значительную часть своего импульса и тем самым сильно и непредсказуемо влияет на движение и положение объекта. Следовательно, сам акт измерения положения объекта в один момент времени вносит неопределенность в наше знание о его положении в будущем.

Посмотрим теперь, когда вступает в игру корпускулярно-волновой дуализм. Проведем мысленный эксперимент, в котором попытаемся измерить положение какого-нибудь объекта (например, электрона) с помощью фотонов, хотя аналогичные рассуждения справедливы и при использовании электронного микроскопа. Как было показано в гл. 37, точность наблюдения любого объекта не превышает длины волны используемого излучения. Если необходимо точно измерить положение тела, надо выбирать короткие волны. Но малая длина волны соответствует большой частоте и, следовательно, большой энергии (так как $E = hf$), а чем больше энергия фотонов, тем больший импульс они могут передать при соударении объекту. Если взять фотоны с большей длиной волны и соответственно с меньшей энергией, то при столкновении с ними движение объекта будет испытывать меньшее возмущение, но и положение объекта мы сможем измерить менее точно. Таким образом, самый акт наблюдения вносит существенную неопределенность либо в *положение*, либо в *импульс* электрона. В этом и заключается принцип неопределенности, впервые сформулированный Гейзенбергом в 1927 г.

Можно приближенно оценить величину этого эффекта. Освещая объект излучением с длиной волны λ , мы можем измерить его положение с точностью, не превышающей λ . Иначе говоря, неопределенность Δx в измерении координаты (положения) объекта приближенно равна

$$\Delta x \approx \lambda.$$

Предположим, что мы можем обнаружить объект с помощью отдельного фотона. Этот фотон обладает импульсом $p = h/\lambda$ и при соударении с объектом передает ему часть своего импульса или весь импульс. Следовательно, после соударения с фотоном неопределенность в импульсе объекта будет равна

$$\Delta p \approx h/\lambda,$$

так как мы не знаем заранее, какую часть импульса передаст фотон. Произведение этих неопределенностей координаты и импульса составляет

$$\Delta x \Delta p \approx h.$$

Разумеется, в зависимости от прибора и числа фотонов, необходимых для обнаружения объекта, неопределенности в положении и импульсе объекта могут оказаться и больше. Проведя более тщательный анализ¹⁾, Гейзенберг обнаружил, что в лучшем случае неопределенности Δx и Δp удовлетворяют неравенству

$$\Delta x \Delta p \gtrsim \frac{h}{2\pi}. \quad (41.1)$$

Это – математическая формулировка **принципа неопределенности Гейзенберга**. Он утверждает, что нельзя измерить одновременно с абсолютной точностью положение и импульс объекта. Чем точнее мы пытаемся определить положение объекта, т. е. чем меньше Δx , тем больше будет неопределенность в импульсе Δp . Если же мы попытаемся точно измерить импульс, то большой окажется неопределенность в положении объекта. Принцип неопределенности отнюдь не запрещает точно измерить что-нибудь одно: либо положение, либо импульс. Например, в принципе можно точно измерить положение объекта. Но при этом его импульс будет совершенно не известен. Следовательно, хотя положение объекта в какой-то момент времени нам точно известно, мы вообще ничего не знаем о том, где он будет находиться в следующий момент времени.

Один из вариантов принципа неопределенности связывает энергию и время. Мы рассмотрим его следующим образом. Неопределенность в положении регистрируемо-

¹⁾ На языке статистики и теории вероятностей неопределенности Δx и Δp соответствуют *среднеквадратичным отклонениям* (или *дисперсиям*) измерений координаты x и импульса p .

го объекта составляет $\Delta x \approx \lambda$. Фотон (или электрон), с помощью которого происходит регистрация, движется со скоростью v (для фотона $v = c$) и проходит отрезок, равный неопределенности в положении, за время $\Delta x/v \approx \lambda/v$. Следовательно, неопределенность в моменте времени, когда объект находится в заданном положении, составляет

$$\Delta t \approx \frac{\lambda}{v}.$$

Так как фотон может передать объекту либо часть своей энергии ($= hf = hv/\lambda$), либо всю энергию, неопределенность в энергии объекта в результате равна

$$\Delta E \approx \frac{hv}{\lambda}.$$

Произведение этих двух неопределенностей составляет $\Delta E \Delta t \approx h$.

Более тщательные вычисления Гейзенберга привели к неравенству

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{h}{2\pi}. \quad (41.2)$$

Эта форма принципа неопределенности эквивалентна утверждению, что энергия объекта может быть неопределенной или даже не сохраняться на величину ΔE в течение интервала времени $\Delta t \approx h/(2\pi\Delta E)$.

Мы говорили о положении и скорости электрона так, как если бы электрон был частицей. Но электрон — не просто частица: принцип неопределенности как раз обусловлен тем, что электрон (и вообще любая частица вещества) не является частицей в буквальном смысле слова. Принцип неопределенности в действительности утверждает, что если мы будем настаивать на том, что электрон представляет собой частицу, то это упрощенное представление обнаружит определенные ограничения, а именно положение и скорость не могут быть одновременно точно измерены, а неопределенность (несохранение) энергии составит ΔE на протяжении интервала времени $\Delta t \approx h/(2\pi\Delta E)$.

Так как постоянная Планка h очень мала, неопределенности, фигурирующие в принципе неопределенности Гейзенберга, в макроскопических масштабах оказываются пренебрежимо малыми. Но в мире атомов эти неопределенности существенны. Поскольку все окружающие нас предметы состоят из атомов, содержащих ядра и электроны, принцип неопределенности играет важную роль для понимания природы. Принцип неопределенности выражает, по-видимому, наиболее отчетливо вероятностную природу квантовой механики и поэтому часто оказывается предметом философских дискуссий.

41.4. Философский подход; вероятностное описание или детерминизм?

В классической ньютоновской физике мир строго детерминирован (разд. 5.7). Одна из основных идей этой физики заключается в том, что, зная скоро положение и скорость тела в некоторый момент времени известны, его положение в последующие моменты может быть предсказано абсолютно точно, если заданы все действующие на тело силы. Например, если бросать несколько раз камень с одной и той же скоростью и под одним и тем же углом, то он всякий раз будет описывать одну и ту же траекторию при условии, что действующие на камень силы не меняются. Если эти силы (сила тяжести и сопротивление воздуха, если оно существует) известны, то траекторию камня и ее положение в пространстве можно точно предсказать. Из таких механистических представлений следует, что будущее Вселенной, представляющей собой совокупность тел, полностью определено.

Квантовая механика радикально изменила подобное представление классического детерминизма о реальном мире. При анализе опыта по дифракции электронов на двух щелях (разд. 41.2) мы обнаружили, что не все электроны с одинаковыми начальными характеристиками попадут в одну и ту же точку экрана; согласно квантовой механике, электроны с определенной вероятностью попадают в различные точки. Это коренным образом отличается от классических представлений, согласно которым траекторию частицы можно точно предсказать по ее начальному положению, скорости и действующим на частицу силам. Квантовая же механика утверждает, что положение и скорость тела одновременно не могут быть даже точно известны. Это обстоятельство составляет содержание принципа неопределенности и является следствием того, что основные «кирпичи» мироздания (например, электроны) нельзя считать обычными частицами, поскольку они обладают также и волновыми свойствами. Квантовая механика позволяет нам вычислять только вероятности, например, того, что электрон (как частица) будет зарегистрирован в той или иной точке пространства. В этом смысле квантовая механика делает лишь приближенные предсказания. Она подразумевает, что природе присуща непредсказуемость.

Так как вещество состоит из атомов, то даже поведение обычных тел макроскопических размеров не строго детерминировано, а подчиняется законам случая и вероятности. Например, существует отличная от нуля (хотя и очень малая) вероятность того, что брошенный вами камень вместо того, чтобы описать выпуклую вверх параболу, как подобает свободно брошенному телу, неожиданно взвьется вверх. Квантовая механика предсказывает, что с очень большой вероятностью обычные

макроскопические тела будут вести себя в соответствии с законами классической механики; но эти предсказания носят вероятностный характер и не являются абсолютно достоверными. Макроскопические тела с подавляющей вероятностью ведут себя согласно законам классической механики потому, что состоят из большого числа атомов и молекул: если в статистике число частиц очень велико, то отклонение от среднего будет пренебрежимо малым. Именно средняя конфигурация огромного числа молекул с большой вероятностью следует законам классической физики и тем самым создает видимость «детерминизма». Отклонения от классических законов заметны, когда число молекул мало. Таким образом, можно сказать, что, хотя в квантовой механике отсутствует строгий детерминизм, она содержит статистические законы, основанные на вероятности осуществления того или иного события.

Следует подчеркнуть, что между вероятностью в квантовой механике и вероятностью, которой пользовались в XIX в. при формулировке термодинамики и молекулярно-кинетической теории газов (гл. 18 и 21), имеется различие. В термодинамике введение вероятности было обусловлено слишком большим числом молекул, что не позволяло проследить за поведением каждой молекулы. Тем не менее предполагалось, что движения и столкновения молекул происходят по законам Ньютона. В квантовой механике вероятность носит совсем иной характер: она *внутренне присуща* природе, а не вызвана затруднениями вычисления тех или иных характеристик.

Хотя некоторые ученые не отказались от детерминизма во взглядах на природу и не считали квантовую механику законченной теорией (одним из них был Эйнштейн), тем не менее подавляющее большинство физиков признали квантовую механику с ее вероятностным подходом к описанию природы. Этот подход, изложенный выше и ставший ныне общепризнанным, получил название *копенгагенской интерпретации* квантовой механики в честь города, где жил и работал Нильс Бор, так как вероятностная трактовка квантовой механики возникла в основном благодаря дискуссиям Бора с другими выдающимися физиками.

Так как электроны - не просто частицы, нельзя представлять себе, что они имеют определенные траектории в пространстве и времени. Это означает, что пространственно-временное описание частиц вещества не вполне корректно. Столь глубокий и далеко идущий вывод стал предметом оживленной дискуссии в среде философов. Самым значительным и влиятельным авторитетом квантовой механики был Нильс Бор. Он считал, что пространственно-временное описание реальных атомов и электронов невозможно; однако сами эксперименты с атомами или электронами должны описываться в терми-

нах пространства и времени, а также других понятий, заимствованных из обычной практики, таких, как волна и частица. Однако такое *описание* экспериментов не должно вводить нас в заблуждение, будто сами атомы и электроны действительно существуют в пространстве и времени в виде частиц. Крайне важно различие между нашей интерпретацией экспериментов и тем, что «в действительности» происходит в природе.

41.5. Квантовомеханическая картина строения атома

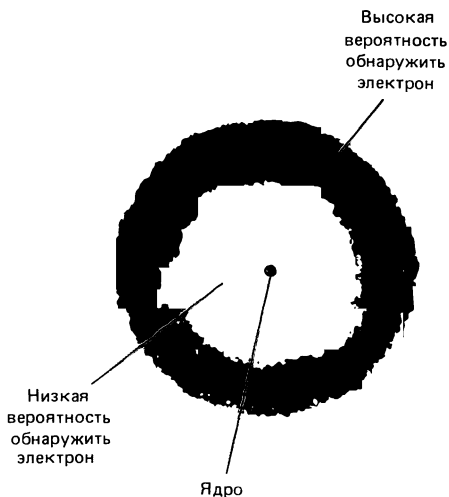
В начале этой главы мы обсуждали ограниченность боровской теории строения атома. Рассмотрим теперь квантовомеханическую теорию атомов, гораздо более полную, чем старая теория Бора. Она сохраняет некоторые аспекты старой теории. Например, электроны могут находиться в атоме только в дискретных состояниях с определенной энергией; при переходе электрона из одного состояния в другое испускается (или поглощается) фотон. Но квантовая механика – не просто обобщение теории Бора. Она представляет собой гораздо более глубокую теорию и рисует совершенно иную картину строения атома. Согласно квантовой механике, не существует вполне определенных круговых орбит электронов, как в теории Бора. В силу волновой природы электрон «размазан» в пространстве, подобно «облаку» отрицательного заряда. Размеры и форму электронного облака в заданном состоянии атома можно вычислить. Для основного состояния атома водорода решение уравнения Шредингера (разд. 41.2) дает

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} e^{-r/r_1},$$

где $\psi(r)$ – волновая функция¹⁾ как функция положения, зависящая только от расстояния r до центра и не зависящая от углов θ и ϕ . (Постоянная r_1 случайно совпадает с радиусом первой боровской орбиты.) Следовательно, электронное облако в основном состоянии водорода сферически-симметрично, как показано на рис. 41.2. Электронное облако грубо характеризует «размеры» атома, но, поскольку облако может не иметь четко выраженной границы, атомы также не имеют ни точной границы, ни строго определенного размера. Как мы увидим ниже, не все электронные облака сферически-симметричны. Обратите внимание на то, что, хотя функция $\psi(r)$ при больших

¹⁾ Строчной греческой буквой ψ мы обозначили волновую функцию как функцию только положения. Если имеется зависимость от времени, то, как и прежде, волновую функцию будем обозначать прописной греческой буквой $\Psi(r, t)$.

Рис. 41.2. Электронное облако, или распределение вероятности, для основного состояния атома водорода. Облако плотнее всего (что свидетельствует о наибольшей вероятности) на расстоянии $0,53 \cdot 10^{-10}$ м от ядра. Именно это значение модель Бора предсказывает для радиуса первой орбиты. Но в отличие от модели Бора квантовая механика утверждает, что электрон в любой момент времени может находиться и ближе к ядру, и дальше от ядра.



r , как следует из приведенного выше выражения, сильно убывает, она не обращается в нуль на конечных расстояниях. Поэтому квантовая механика утверждает, что основная часть атома не представляет собой пустое пространство. Так как $\psi \rightarrow 0$ только при $r \rightarrow \infty$, мы заключаем, что и во Вселенной не существует в подлинном смысле пустого пространства.

Электронное облако можно интерпретировать как с корпускулярной, так и с волновой точек зрения. Напомним, что под частицей мы понимаем нечто локализованное в пространстве: в любой момент времени частица занимает вполне определенное положение в пространстве. Волна же размыта в пространстве. Следовательно, размытое в пространстве электронное облако, как на рис. 41.2, является результатом волновой природы электронов. Электронное облако можно также интерпретировать как *распределение вероятностей* для данной частицы. Если измерить положение электрона (как частицы) 500 раз, то большинство результатов измерений соответствовало бы точкам, в которых вероятность велика (более темная область на рис. 41.2), хотя электрон случайно может оказаться и там, где вероятность мала. Мы не можем предсказать траектории, по которой будет двигаться электрон. Как было показано в разд. 41.3, после измерения его положения точно предсказать, где будет электрон находиться в последующие моменты времени, невозможно. Мы можем лишь вычислить вероятность обнаружить электрон в различных точках. Ясно, что подобная ситуация в корне отличается от классической ньютоновской физики. Как отмечал впоследствии Бор, при испускании атомом светового фотона, бессмысленно даже спрашивать как электрон переходит из одного состояния в другое.

41.6. Квантовая механика атома водорода.

Квантовые числа

Рассмотрим теперь более подробно, что дает квантовая механика в случае атома водорода. Многое из того, о чем пойдет речь в этом разделе, справедливо и в случае более сложных атомов, которым посвящен следующий раздел.

Для атома водорода квантовая механика предсказывает точно те же энергетические уровни (рис. 40.18), что и теория Бора, т. е.

$$E_n = -\frac{13,6 \text{ эВ}}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

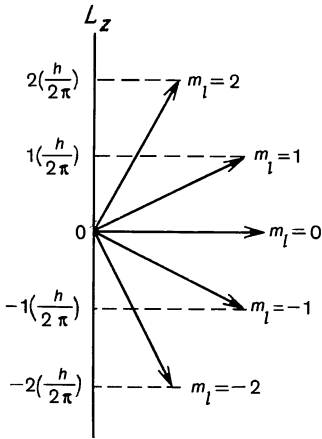


Рис. 41.3. Квантование направления углового момента при $l = 2$.

где n – целое число. В упрощенной теории Бора существовало только одно квантовое число n . В квантовой механике, чтобы задать каждое состояние атома, необходимы четыре различных квантовых числа.

Квантовое число n из теории Бора сохраняется и в квантовой механике под названием **главное квантовое число**. Оно может принимать любое целочисленное значение от 1 до ∞ . Как было показано выше, от n зависит полная энергия состояния атома водорода.

Орбитальное квантовое число l связано с моментом импульса электрона. Оно может принимать целочисленные значения от 0 до $n - 1$. В основном состоянии с $n = 1$ орбитальное квантовое число l может быть только равно нулю, но, например, при $n = 3$ оно может принимать значения 0, 1 и 2. Величина момента импульса L связана с квантовым числом l соотношением

$$L = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}.$$

В атоме водорода полная энергия не зависит от значения l ¹⁾, а зависит только от n . Но в атомах с двумя и большим числом электронов энергия, как будет показано в следующем разделе, зависит от l так же, как и от n .

Магнитное квантовое число m_l характеризует ориентацию момента импульса и может принимать целочисленные значения от $-l$ до $+l$. Например, если $l = 2$, то m_l может быть равно -2 , -1 , 0 , $+1$ или $+2$. Так как момент импульса – вектор, не удивительно, что он квантуется по величине и по направлению. При $l = 2$ возможны пять различных ориентаций, условно изображенных на рис. 41.3. В квантовой механике ориентацию момента импульса обычно задают, указывая его компоненту вдоль оси z . Эта компонента L_z связана с m_l соотношением

$$L_z = m_l \frac{h}{2\pi}.$$

¹⁾ Это не совсем так ввиду существования в атоме очень слабых взаимодействий; см. ниже обсуждение *тонкой структуры*.

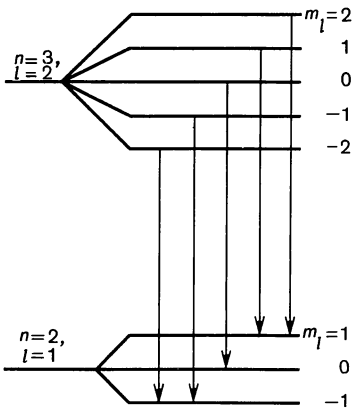


Рис. 41.4. Во внешнем магнитном поле уровень энергии $n = 3, l = 2$ расщепляется на пять отдельных уровней, соответствующих пяти значениям m_l (2, 1, 0, -1, -2). Уровень $n = 2, l = 1$ расщепляется на три уровня ($m_l = 1, 0, -1$). Между уровнями могут происходить переходы (не все из которых показаны) с испусканием фотонов, соответствующих нескольким частотам, незначительно различающимися между собой.

Название магнитного квантового числа m_l заимствовано не из теории (которая устанавливает его связь с L_z), а из эксперимента: было обнаружено, что при газовом разряде спектральные линии расщепляются в магнитном поле на несколько линий, расположенных близко друг к другу. (Это расщепление называют эффектом Зеемана). Отсюда следует, что энергетические уровни расщепляются (рис. 41.4), т. е. энергия состояния при наличии внешнего магнитного поля зависит не только от n , но и от m_l . Отсюда и название — «магнитное квантовое число». [Запись энергии от ориентации L можно понять, воспользовавшись полуклассическим представлением движущегося электрона как электрического тока, который взаимодействует с магнитным полем (гл. 28).]

Наконец, существует **спиновое квантовое число** m_s , которое принимает только два значения $m_s = +1/2$ и $m_s = -1/2$. Существование этого квантового числа в отличие от квантовых чисел n, l и m_l не следовало из первоначального варианта теории Шредингера. Позднее П. А. М. Дирак модифицировал теорию Шредингера, показав, что спиновое квантовое число является релятивистским эффектом. Указание о необходимости введения m_s впервые было получено из эксперимента. Тщательное исследование спектральных линий водорода показало, что каждая линия в действительности состоит из двух (или большего числа) близких линий. Это явление получило название **тонкой структуры**. Сначала было высказано предположение о том, что тонкое расщепление энергетических уровней может быть вызвано моментом импульса, связанным со спином электрона; электрон, обращаясь вокруг атомного ядра, одновременно вращается вокруг собственной оси подобно тому, как Земля, двигаясь вокруг Солнца, одновременно вращается вокруг своей оси. Взаимодействие слабого тока, создаваемого вращающимся электроном, с магнитным полем, обусловленным движением заряда по орбите вокруг ядра, и вызывает наблюдаемое тонкое расщепление энергетических уровней. (Таким образом, существует слабая зависимость энергии от m_l и m_s .) Представление об электроне, вращающемся вокруг своей оси, ныне полностью отброшено. Мы не можем представлять электрон как локализованный объект, тем более вращающийся вокруг своей оси. Важно лишь, что электрон может находиться в двух различных состояниях, отвечающих присущей ему характеристике, которую мы (возможно, не совсем удачно) называем «спином». Эти два возможных значения спинового квантового числа m_s ($+1/2$ и $-1/2$) часто характеризуют как «спин вверх» и «спин вниз», имея в виду два возможных направления спинового момента импульса.

Допустимые значения всех четырех квантовых чисел электрона в атоме водорода представлены в табл. 41.1.

Таблица 41.1. Квантовые числа электрона

Название	Обозначение	Разрешенные значения
Главное	n	1, 2, 3, ... , ∞
Орбитальное	l	При заданном n величина l может принимать значения 0, 1, 2, ..., $n-1$
Магнитное	m_l	При заданных n и l величина m_l может принимать значения $l, l-1, \dots, 0, \dots, -l$
Спиновое	m_s	Для любого набора n, l и m_l величина m_s может принимать значения $+1/2$ или $-1/2$

Пример 41.1. Сколько различных состояний может иметь электрон с главным квантовым числом $n = 3$?

Решение. При $n = 3$ орбитальное квантовое число l может принимать значения 2, 1, 0. При $l = 2$ магнитное квантовое число может принимать значения 2, 1, 0, -1, -2, что дает 5 различных состояний; в каждом из них спиновое квантовое число m_s может быть либо $+1/2$, либо $-1/2$, поэтому при $l = 2$ электрон может нахо-

диться в $2 \cdot 5 = 10$ различных состояниях. При $l = 1$ магнитное число m_l может принимать значения 1, 0, -1, а так как спин m_s может быть равен $+1/2$ или $-1/2$, мы получаем еще 6 разрешенных состояний. Наконец, при $l = 0$, магнитное квантовое число m_l может быть равно только 0, поэтому существуют только 2 разрешенных состояния, соответствующих $m_s = +1/2$ и $m_s = -1/2$. Таким образом, общее число состояний равно $10 + 6 + 2 = 18$.

Хотя энергетические уровни в атоме слабо зависят от l и m_l , эти квантовые числа влияют на функцию распределения (вероятностей) электрона в пространстве. При $n = 1$ (основное состояние) l и m_l могут принимать только нулевые значения. Функция распределения для этого случая изображена на рис. 41.2. При $n = 2$ квантовое число l может быть равно 0 или 1. Функция распределения для случая $n = 2, l = 0$ изображена на рис. 41.5, а. Видно, что она отличается от распределения в основном состоянии, хотя и сохраняет сферическую симметрию. При $n = 2,$

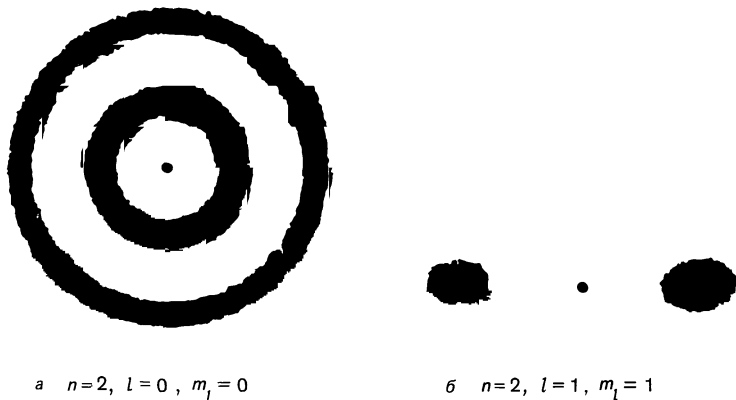


Рис. 41.5. Электронное облако (или распределение вероятности) для состояний $n = 2$ в атоме водорода.

а $n = 2, l = 0, m_l = 0$

б $n = 2, l = 1, m_l = 1$

$l = 1$ распределение перестает быть сферически-симметричным и по форме напоминает гантель (рис. 41.5, б). Это распределение соответствует какому-то одному значению m_l , например $m_l = 1$. При $m_l = 0$ и $m_l = -1$ распределения будут также иметь вид гантелей, но симметричных относительно других осей.

Хотя функцию распределения электрона в пространстве можно вычислить для различных состояний, измерить ее экспериментально довольно трудно. Большую часть экспериментальной информации о строении атома получают в результате тщательного изучения спектров испускания в различных условиях.

41.7. Сложные атомы. Принцип запрета Паули

Мы так подробно остановились на рассмотрении атома водорода потому, что он проще всего поддается анализу. В данном разделе мы кратко обсудим строение более сложных атомов с двумя и большим числом электронов. Энергетические уровни таких атомов можно определить экспериментально по спектрам испускания. Число электронов в нейтральном атоме называется *атомным номером* Z . Число Z равно также положительному заряду (числу протонов) ядра и определяет свойства атома.

Хотя для описания сложных атомов делались попытки модифицировать теорию Бора, развитие квантовой механики после 1925 г. оказалось значительно более успешным. Однако математический аппарат при этом существенно усложнился, так как в многоэлектронных атомах каждый электрон не только притягивается ядром, но и отталкивается другими электронами.

Простейший подход был основан на предположении, что каждый электрон в атоме находится в состоянии, которое характеризуется квантовыми числами n , l , m_l и m_s . Но для объяснения возможных конфигураций электронов в атоме оказался необходимым новый принцип. Такой принцип был введен Вольфгангом Паули (1900–1958) и получил название **принцип запрета Паули**. Этот принцип гласит:

Два электрона не могут находиться в атоме в одном и том же квантовом состоянии.

Иначе говоря, два электрона не могут иметь одинакового набора квантовых чисел n , l , m_l и m_s . Принцип запрета Паули¹⁾ составляет основу понимания не только структуры сложных атомов, но и природы молекул, химической связи и ряда других явлений.

¹⁾ Принцип запрета Паули применим ко всем частицам с полуцелым спином ($1/2$, $3/2$ и т. д.), т. е. к электронам, протонам, нейтронам, но не имеет отношения к частицам с целочисленным спином (0, 1, 2 и т. д.), т. е. фотонам и π -мезонам.

Таблица 41. 2
Гелий, $Z = 2$

n	l	m_l	m_s
1	0	0	$1/2$
1	0	0	$-1/2$

Литий, $Z = 3$

n	l	m_l	m_s
1	0	0	$1/2$
1	0	0	$-1/2$
2	0	0	$1/2$

Натрий, $Z = 11$

n	l	m_l	m_s
1	0	0	$1/2$
1	0	0	$-1/2$
2	0	0	$1/2$
2	0	0	$-1/2$
2	1	1	$1/2$
2	1	1	$-1/2$
2	1	0	$1/2$
2	1	0	$-1/2$
2	1	-1	$1/2$
2	1	-1	$-1/2$
3	0	0	$1/2$

Рассмотрим теперь строение некоторых простых атомов в основном состоянии. Следующий за атомом водорода атом гелия имеет два электрона. Оба электрона могут иметь главное квантовое число $n = 1$, так как спин одного из них может быть направлен вверх ($m_s = +1/2$), а другого – вниз ($m_s = -1/2$), и принцип Паули не будет нарушен. Разумеется, так как $n = 1$, квантовые числа l и m_l должны быть равны нулю (табл. 41.1). Следовательно, в основном состоянии атома гелия электроны имеют квантовые числа, приведенные в табл. 41.2.

У лития три электрона, два из которых могут находиться в состоянии с $n = 1$. Но у третьего электрона главное квантовое число n не может быть равно 1, так как в этом случае нарушился бы принцип Паули. Следовательно, третий электрон должен иметь $n = 2$.

Так как уровень с $n = 2$, $l = 0$ имеет более низкую энергию, чем уровень $n = 2$, $l = 1$, квантовые числа электронов в основном состоянии будут такими, как показано в табл. 41.2. Разумеется, квантовые числа третьего электрона могли быть и другими, например 3, 1, -1 , $1/2$, но атом лития в этом случае оказался бы в возбужденном состоянии с более высокой энергией. Поэтому он спустя короткое время перешел бы в основное состояние с испусканием фотона. При комнатной температуре, если нет подвода энергии (как в случае разрядной трубки), большинство атомов находится в основном состоянии.

Аналогично можно продолжить перечисление квантовых чисел каждого электрона в основном состоянии все более сложных атомов. Результат для натрия с 11 электронами представлен в табл. 41.2.

Электронные конфигурации всех атомов в периодической системе элементов показаны в табл. 41.3. В каждой клетке указаны атомный номер Z , символ химического элемента и атомная масса (в а. е. м. – атомных единицах массы). Наконец, в левом нижнем углу приведена электронная конфигурация для основного состояния атома. Последняя требует некоторых пояснений. Об электронах с одинаковым значением n говорят, что они принадлежат одной оболочке. Электроны с $n = 1$ принадлежат первой оболочке (называемой K -оболочкой), электроны с $n = 2$ – второй оболочке (L -оболочке) и т. д. Об электронах с одинаковым значением l говорят, что они принадлежат одной подоболочке. Часто для обозначения l цифры заменяют буквами:

l	0	1	2	3	4	...
Буквенное обозначение	s	p	d	f	g	...

Таким образом, электроны с $l = 0$ образуют s -подоболочку, с $l = 1$ – p -подоболочку, с $l = 2$ – d -подоболочку; начиная с $l = 3$, обозначающие подоболочки буквы следуют в алфавитном порядке: f , g , h , i и т. д. [Первые буквы s , p , d

Таблица 41.3. Периодическая система химических элементов¹⁾

Группа I	Группа II	Переходные элементы										Группа III	Группа IV	Группа V	Группа VI	Группа VII	Группа VIII	
H 1 1,0079 1s ¹																		He 2 4,0026 1s ²
Li 3 6,94 2s ¹	Be 4 9,01218 2s ²																	
<div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;"> <p>Символ — Cl 17 — Атомный номер</p> <p>Атомная масса ²⁾ — 35,453</p> <p>— 3p⁵ — Электронная конфигурация</p> </div> </div>																		
Na 11 22,9898 3s ¹	Mg 12 24,305 3s ²																	
B 5 10,81 2p ¹	C 6 12,011 2p ²	N 7 14,0067 2p ³	O 8 15,9994 2p ⁴	F 9 18,9984 2p ⁵	Ne 10 20,17 2p ⁶													
Al 13 26,9815 3p ¹	Si 14 28,0855 3p ²	P 15 30,9738 3p ³	S 16 32,06 3p ⁴	Cl 17 35,453 3p ⁵	Ar 18 39,948 3p ⁶													
K 19 39,0983 4s ¹	Ca 20 40,08 4s ²	Sc 21 44,9559 3d ¹ 4s ²	Ti 22 47,90 3d ² 4s ²	V 23 50,9415 3d ³ 4s ²	Cr 24 51,996 3d ⁵ 4s ¹	Mn 25 54,9380 3d ⁵ 4s ²	Fe 26 55,847 3d ⁶ 4s ²	Co 27 58,9332 3d ⁷ 4s ²	Ni 28 58,71 3d ⁸ 4s ²	Cu 29 63,546 3d ¹⁰ 4s ¹	Zn 30 65,38 3d ¹⁰ 4s ²	Ga 31 69,735 4p ¹	Ge 32 72,59 4p ²	As 33 74,9216 4p ³	Se 34 78,96 4p ⁴	Br 35 79,904 4p ⁵	Kr 36 83,80 4p ⁶	
Rb 37 85,467 5s ¹	Sr 38 87,62 5s ²	Y 39 88,9059 4d ¹ 5s ²	Zr 40 91,22 4d ² 5s ²	Nb 41 92,9064 4d ⁴ 5s ¹	Mo 42 95,94 4d ⁵ 5s ¹	Tc 43 98,9062 4d ⁵ 5s ²	Ru 44 101,07 4d ⁷ 5s ¹	Rh 45 102,906 4d ⁸ 5s ¹	Pd 46 106,4 4d ¹⁰ 5s ⁰	Ag 47 107,868 4d ¹⁰ 5s ¹	Cd 48 112,41 4d ¹⁰ 5s ²	In 49 114,82 5p ¹	Sn 50 118,69 5p ²	Sb 51 121,75 5p ³	Te 52 127,60 5p ⁴	I 53 126,90 5p ⁵	Xe 54 131,30 5p ⁶	
Cs 55 132,905 6s ¹	Ba 56 137,33 6s ²	57–71 ¹⁾	Hf 72 178,49 5d ² 6s ²	Ta 73 180,947 5d ³ 6s ²	W 74 183,85 5d ⁴ 6s ²	Re 75 186,207 5d ⁵ 6s ²	Os 76 190,2 5d ⁶ 6s ²	Ir 77 192,22 5d ⁷ 6s ²	Pt 78 195,09 5d ⁹ 6s ¹	Au 79 196,966 5d ¹⁰ 6s ¹	Hg 80 200,59 5d ¹⁰ 6s ²	Tl 81 204,37 6p ¹	Pb 82 207,2 6p ²	Bi 83 208,980 6p ³	Po 84 (209) 6p ⁴	At 85 (210) 6p ⁵	Rn 86 (222) 6p ⁶	
Fr 87 (223) 7s ¹	Ra 88 226,025 7s ²	89–103 ¹⁾	Rf 104 (261) 6d ¹ 7s ²	Ha 105 (260) 6d ¹ 7s ²	106 ¹⁾ (263)	107 (262)	108 (265)	109 (266)										

Лантаноиды	La 57 139,906 5d ¹ 6s ²	Ce 58 140,12 5d ¹ 4f ¹ 6s ²	Pr 59 140,908 4f ³ 6s ²	Nd 60 144,24 4f ⁴ 6s ²	Pm 61 (145) 4f ⁵ 6s ²	Sm 62 150,4 4f ⁶ 6s ²	Eu 63 151,96 4f ⁷ 6s ²	Gd 64 157,25 5d ¹ 4f ⁷ 6s ²	Tb 65 158,925 5d ¹ 4f ⁸ 6s ²	Dy 66 162,50 4f ¹⁰ 6s ²	Ho 67 164,930 4f ¹¹ 6s ²	Er 68 167,26 4f ¹² 6s ²	Tm 69 168,934 4f ¹³ 6s ²	Yb 70 173,04 4f ¹⁴ 6s ²	Lu 71 174,967 5d ¹ 4f ¹⁴ 6s ²
------------	--	---	--	---	--	--	---	---	--	--	---	--	---	--	---

Актиноиды	Ac 89 (227) 6d ¹ 7s ²	Th 90 232,038 6d ² 7s ²	Pa 91 231,036 5f ² 6d ¹ 7s ²	U 92 238,029 5f ³ 6d ¹ 7s ²	Np 93 237,048 5f ⁴ 6d ⁰ 7s ²	Pu 94 (244) 5f ⁶ 6d ⁰ 7s ²	Am 95 (243) 5f ⁷ 6d ⁰ 7s ²	Cm 96 (247) 5f ⁷ 6d ¹ 7s ²	Bk 97 (247) 5f ⁹ 6d ¹ 7s ²	Cf 98 (251) 5f ¹⁰ 6d ⁰ 7s ²	Es 99 (254) 5f ¹¹ 6d ⁰ 7s ²	Fm 100 (257) 5f ¹² 6d ⁰ 7s ²	Md 101 (258) 5f ¹³ 6d ⁰ 7s ²	No 102 (259) 6d ⁰ 7s ²	Lr 103 (260) 6d ¹ 7s ²
-----------	--	--	--	---	--	--	--	--	--	---	---	--	--	---	---

1) Атомные массы усреднены по распространенности изотопов.

2) Для многих нестабильных элементов в скобках указано массовое число наиболее стабильного изотопа.

первоначально означали аббревиатуры английских слов «sharp» (резкая), «principle» (главная), «diffuse» (размытая), которые характеризовали особенности линий в экспериментально наблюдаемых спектрах.] Принцип запрета Паули ограничивает число электронов в каждой оболочке и подоболочке. Например, у атома натрия оболочки с $n = 1$ и $n = 2$ полностью заполнены (как и их подоболочки), и одиннадцатый электрон заполняет оболочку с $n = 3$.

Так как энергетические уровни почти полностью определяются значениями n и l , электронная конфигурация обычно задается указанием n и буквенным обозначением l , а число электронов в каждой подоболочке указывают в виде верхнего индекса. При такой записи электронная конфигурация основного состояния натрия выглядит следующим образом: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. В периодической системе элементов Д. И. Менделеева (табл. 41.3) использована упрощенная запись: приведены только конфигурации внешних электронов и других незаполненных оболочек. Атомы химических элементов в периодической системе расположены в порядке возрастания масс. Существующая периодичность химических свойств подробно рассматривается в учебниках химии.

*41.8. Рентгеновское излучение и атомный номер

Линейчатые спектры атомов в видимой области, ИК- и УФ-областях спектра электромагнитного излучения обязаны своим происхождением главным образом переходам между состояниями электронов во внешних оболочках. Значительная часть заряда ядра экранируется для этих электронов отрицательным зарядом электронов на внутренних оболочках. Но самые внутренние электроны на оболочке с $n = 1$ «ощущают» полный заряд ядра. Так как энергия данного уровня пропорциональна Z^2 [см. формулу (40.11)], можно ожидать, что длины волн, испускаемых атомом с $Z = 50$, примерно в $50^2 = 2500$ раз короче длин волн в лаймановской серии атома водорода (около 100 нм), т. е. составляют от 10^{-2} до 10^{-1} нм. Такие длины волн лежат в рентгеновской области спектра.

Как было показано в разд. 37.11, рентгеновское излучение возникает при соударении электронов, ускоренных высоким напряжением, с металлической мишенью внутри рентгеновской трубки. Спектр излучения рентгеновской трубки содержит две компоненты: сплошной спектр, обрывающийся при длине волны λ_0 , которая зависит только от приложенного к трубке напряжения, и максимумы, налагающихся на сплошной спектр. Типичный рентгеновский спектр показан на рис. 41.6. При повышении приложенного к трубке напряжения сплошной спектр и его граничная длина волны λ_0 смещаются влево. Максимумы (обозначенные на рис. 41.6 символами K_α и K_β)

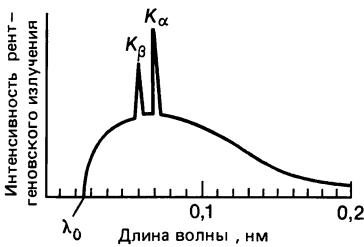


Рис. 41.6. Спектр рентгеновского излучения, испускаемого молибденовой мишенью (анодом) трубки, работающей при напряжении 50 кВ.

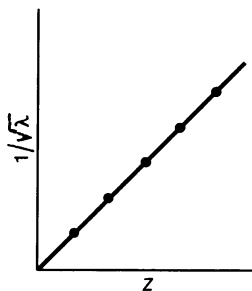


Рис. 41.7. Зависимость $1/\sqrt{\lambda}$ от Z для рентгеновских линий K_{α} .

при изменении напряжения остаются на месте, но их положение различно у мишеней из разных материалов. Это говорит о том, что соответствующие максимумам длины волны характеризуют используемый материал. Их можно объяснить тем, что приложенное к рентгеновской трубке высокое напряжение разгоняет электроны до высоких энергий, и при соударении с атомами мишени налетающие электроны могут выбить один из сильно связанных внутренних электронов. *Характеристическое рентгеновское излучение* (максимумы в спектре на рис. 41.6) представляет собой фотоны, которые испускаются при переходе электрона из более высокого состояния в вакантное более низкое состояние.

Измерение спектров характеристического рентгеновского излучения позволило определить положение энергетических уровней, соответствующих внутренним оболочкам атома. Эти спектры обеспечили также определение атомного номера Z многих атомов, поскольку (как мы видели) длина волны наиболее жесткого (коротковолнового) рентгеновского излучения пропорциональна Z^2 . При переходе электрона, например, с уровня с $n = 2$ на уровень с $n = 1$ длина волны обратно пропорциональна $(Z - 1)^2$, так как ядро экранируется оставшимся электроном на уровне $1s$. В 1914 г. Г. Мозли обнаружил, что график зависимости $\sqrt{1/\lambda}$ от Z представляет собой прямую (рис. 41.7). Атомные номера Z некоторых элементов были определены с помощью «графика Мозли». Работа Мозли обеспечила понятие атомного номера Z прочную экспериментальную основу.

Пример 41.2. Оцените длину волны, отвечающую переходу атома молибдена ($Z = 42$) из состояния с $n = 2$ в состояние с $n = 1$.

Решение. Воспользуемся формулой Бора (40.12), заменив в ней Z^2 на $(Z - 1)^2$. [Еще проще воспользоваться результа-

том примера 40.7 для перехода атома водорода ($Z = 1$) из состояния $n = 2$ в состояние $n = 1$. Так как $\lambda \sim 1/(Z - 1)^2$, получаем

$$\lambda = (1,22 \cdot 10^{-7} \text{ м})/41^2 = 0,073 \text{ нм.}$$

Вычисленная нами величина мало отличается от экспериментального значения 0,071 нм (рис. 41.6).

Бегло проанализируем теперь на основе фотонной теории света сплошную часть спектра рентгеновского излучения (рис. 41.6). Попадая на мишень, электроны сталкиваются с атомами вещества мишени и теряют большую часть своей энергии в виде тепла (около 99%; поэтому рентгеновские трубки приходится охлаждать, обычно водой). Однако электроны могут терять энергию, излучая фотон. Как видно из рис. 41.8, электрон может затормозиться положительным ядром атома; но движущийся с ускорением заряд излучает (гл. 33). Испускаемое в этом случае излучение называют *тормозным*. Так как энергия сохраняется, энергия испускаемого фотона hf должна быть равна потере кинетической энергии элект-

рона $\Delta KЭ = KЭ - KЭ'$, т. е.

$$hf = \Delta KЭ.$$

При столкновении электрон может потерять либо часть своей кинетической энергии, либо всю кинетическую энергию. Сплошной (непрерывный) спектр рентгеновского излучения (рис. 41.6) объясняется тормозным излучением, при котором электроны теряют различное количество энергии. Наиболее жесткое рентгеновское излучение (с наименьшей длиной волны и соответственно наибольшей частотой) отвечает случаю, когда электрон передает всю кинетическую энергию одному фотону в одном соударении. Так как начальная кинетическая энергия электрона равна энергии, сообщенной ему ускоряющим напряжением V , то $KЭ = eV$; в том случае, когда электрон полностью тормозится в результате единственного соударения, мы имеем

$$hf_0 = eV,$$

или

$$\lambda_0 = \frac{hc}{eV}, \quad (41.3)$$

где $\lambda_0 = c/f_0$ — граничная длина волны (рис. 41.6). Формула (41.3) для λ_0 точно воспроизводит экспериментальные данные. Это еще одно подтверждение того, что рентгеновское излучение представляет собой разновидность света¹⁾, и подтверждение справедливости фотонной теории света.

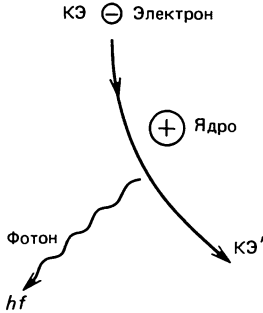


Рис. 41.8. Фотон тормозного излучения, испускаемый электроном, движение которого замедляется (тормозится) положительно заряженным ядром.

Пример 41.3. Чему равна граничная длина волны рентгеновского фотона, испускаемого рентгеновской трубкой с ускоряющим напряжением 50 кВ?

Решение. По формуле (41.3)

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= \frac{(6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с})(3,0 \cdot 10^8 \text{ м/с})}{(1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл})(5,0 \cdot 10^4 \text{ В})} = \\ &= 2,5 \cdot 10^{-11} \text{ м}, \end{aligned}$$

или 0,025 нм. Как видно из рис. 41.6, эта длина волны хорошо согласуется с экспериментом.

*41.9. Лазеры и голография

Лазером называется прибор, генерирующий очень узкий пучок монохроматического когерентного света высокой интенсивности. Излучение лазера представляет собой почти идеальную плоскую волну. Обычный источник излучает свет во всех направлениях, так что интенсив-

¹⁾ Если бы рентгеновское излучение представляло собой не фотоны, а нейтральные частицы с массой покоя m_0 , формула (41.3) была бы неверна.

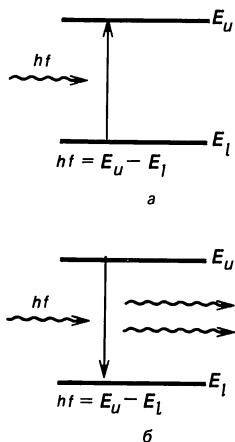


Рис. 41.9. *а* – поглощение фотона; *б* – вынужденное излучение.

ность его излучения быстро убывает с расстоянием, и свет некогерентен. Некогерентность света (случайное различие по фазе различных частей пучка) обусловлена тем, что возбужденные атомы испускают свет независимо друг от друга, и каждый фотон можно рассматривать как короткий пучок волн – обычно длиной около 30 см и длительностью порядка 10^{-8} с. Между этими пучками нет определенных фазовых соотношений (разд. 36.4).

Принцип действия лазера основан на квантовом эффекте. Как мы знаем, фотон может поглощаться атомом, когда (и только когда) его энергия hf совпадает с разностью энергий между заполненным энергетическим уровнем атома и свободным возбужденным уровнем (рис. 41.9, *а*). Иначе говоря, необходимо выполнение условия своего рода резонанса. Если атом уже находится в возбужденном состоянии, то он может самопроизвольно перейти в более низкое состояние с испусканием фотона. Фотон, обладающий нужной энергией, при столкновении с возбужденным атомом стимулирует переход атома в более низкое состояние (рис. 41.9, *б*). Излучение, сопровождающее такой переход, называется **вынужденным**. Нетрудно видеть, что при вынужденном излучении не только сохраняется падающий фотон, но и в результате перехода атома в более низкое энергетическое состояние возникает второй фотон с такой же частотой. Оба фотона оказываются *в фазе* относительно друг друга. Именно так возникает в лазере когерентное излучение. Само название «лазер» произошло из аббревиатуры английского названия прибора Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation – усиление света вынужденным излучением.

Обычно большая часть атомов находится в низшем состоянии, и поэтому падающие фотоны в основном поглощаются. Чтобы получить когерентное излучение в результате вынужденного испускания, необходимо удовлетворить двум условиям. Во-первых, атомы должны находиться в более высоком, возбужденном состоянии, т.е. необходима *инверсная населенность*, при которой число атомов в более высоком состоянии превышает число атомов в более низком состоянии, так что *испускание* фотонов преобладает над поглощением. Во-вторых, более высокое состояние должно быть *метастабильным*, т.е. электроны в нем должны находиться дольше, чем обычно, и переход в более низкое состояние происходит благодаря вынужденному, а не спонтанному излучению. Коротко обсудим, каким образом выполняются эти два

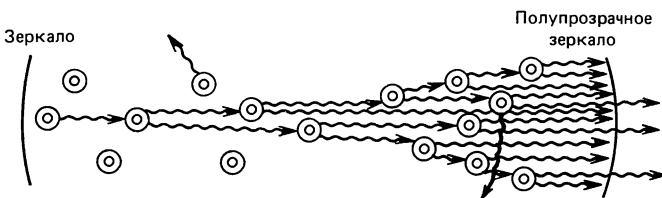


Рис. 41.10. Схема лазера: возбужденные атомы испускают вынужденное излучение.

условия в различных лазерах. Пока предположим, что атомы находятся в более высоком состоянии. Схема лазера изображена на рис. 41.10: активная среда лазера заключена в длинной узкой трубке, на концах которой расположены два зеркала. Одно из зеркал полупрозрачное (пропускает около 1–2% падающего излучения). Некоторые из возбужденных атомов довольно скоро переходят в более низкое состояние. Один из таких атомов изображен на рис. 41.10 слева. Если излученный им фотон испытывает столкновение с другим возбужденным атомом, то он стимулирует этот атом испустить еще один фотон той же частоты и в фазе с падающим фотоном. Оба фотона в дальнейшем сталкиваются с другими возбужденными атомами, стимулируя дальнейшее вынужденное излучение. Процесс продолжается, и число фотонов лавинно нарастает. При попадании фотонов на зеркала на концах трубки большинство их отражается, и, двигаясь в обратном направлении, они продолжают стимулировать испускание атомами новых фотонов. Небольшая доля фотонов, летящих то в одну, то в другую сторону между зеркалами, выходит через полупрозрачное зеркало на одном из концов трубки. Именно эти фотоны и образуют узкий когерентный пучок излучения лазера.

Часть фотонов испускается внутри трубки не параллельно ее оси. Такие фотоны покидают прибор через боковую поверхность трубки и не дают вклада в основной пучок. Таким образом, лазерный пучок может быть очень узким. В хорошо сконструированном лазере угловой разброс пучка ограничен только дифракцией и поэтому составляет порядка λ/D [см. формулу (37.1)], где D – диаметр торцевого зеркала; дифракционный разброс может быть исключительно мал. Световая энергия не рассеивается в пространстве, как в случае обычных источников света, а сосредоточена в узком пучке.

Существует несколько способов возбуждения атомов для создания в лазере необходимой инверсной населенности. В рубиновом лазере используется рубиновый стержень, представляющий собой Al_2O_3 , в котором небольшая часть атомов алюминия (Al) замещена атомами хрома (Cr). Атомы хрома и участвуют в генерации лазерного излучения. Эти атомы возбуждаются сильными вспышками света с длиной волны 550 нм, соответствующими

Рис. 41.11. Уровни энергии атомов хрома в кристалле рубидия. Фотоны с энергией 2,2 эВ создают «накачку», вынуждая атомы переходить с уровня E_0 на уровень E_2 , откуда возбужденные атомы переходят на метастабильный уровень E_1 . Усиление света обусловлено вынужденным испусканием фотонов при переходе с уровня E_1 на основной уровень E_0 .

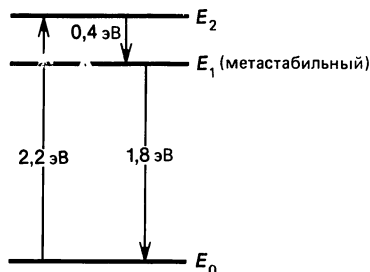
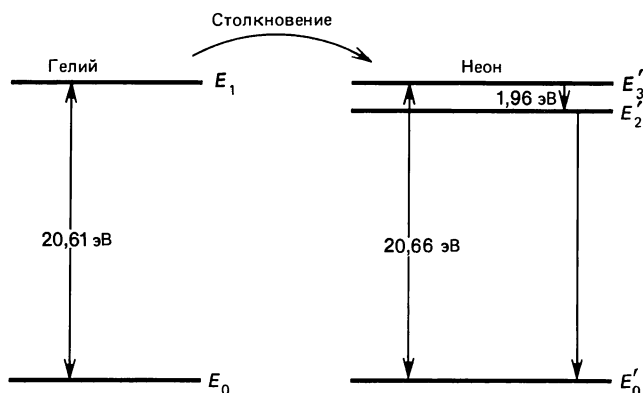


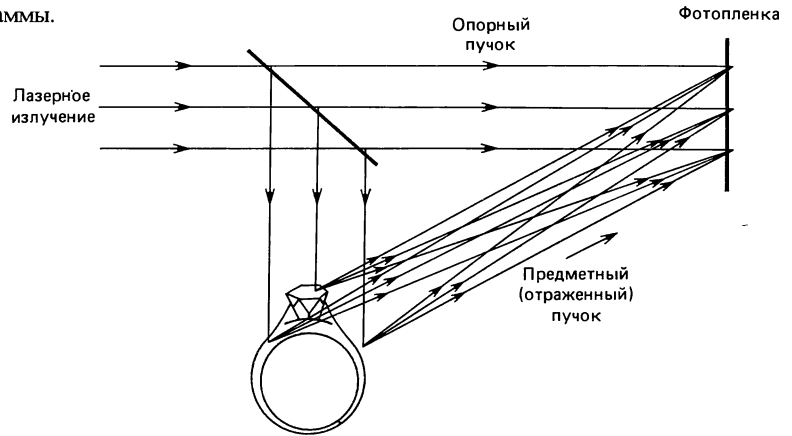
Рис. 41.12. Уровни энергии атомов He и Ne. Атом He возбуждается в электрическом разряде, переходит в состояние E_1 . При столкновении эта энергия передается уровню E'_3 атома Ne. Уровень E'_3 метастабильный, и, испуская вынужденное излучение, атом переходит из него на уровень E'_2 .



шей энергии фотона $2,2 \text{ эВ}$. Как видно из рис. 41.11, при возбуждении атомы переходят из состояния E_0 в состояние E_2 . Этот процесс называется *оптической накачкой*. Из состояния E_2 атомы либо быстро возвращаются в состояние E_0 , либо переходят в промежуточное метастабильное состояние E_1 с временем жизни около $3 \cdot 10^{-3} \text{ с}$ (по сравнению с 10^{-8} с для обычных уровней). При мощной накачке в состоянии E_1 может оказаться больше атомов, чем в состоянии E_0 . Тем самым создается инверсная населенность уровней, необходимая для генерации лазерного излучения. Как только несколько атомов перейдут из состояния E_1 в состояние E_0 , они стимулируют вынужденное излучение других атомов, и начинается лазерная генерация. Рубиновый лазер генерирует пучок фотонов с энергией $1,8 \text{ эВ}$ и длиной волны $694,3 \text{ нм}$ («рубиново-красный» свет).

В гелий-неоновом (He–Ne) лазере используется газовая смесь из 15% гелия и 85% неона. Такая смесь представляет собой активную среду благодаря удачному сочетанию свойств обоих газов. В He–Ne-лазере атомы возбуждаются приложенным к трубке высоким напряжением, которое вызывает электрический разряд в газе. В процессе разряда часть атомов гелия возбуждается и переходит в метастабильное состояние E_1 (рис. 41.12) с энергией $20,61 \text{ эВ}$. У атомов неона имеется возбужденное состояние с почти такой же энергией над основным состоянием $20,66 \text{ эВ}$. Атомы гелия вместо быстрого перехода в основное состояние за счет спонтанного излучения часто передают при столкновениях избыток своей энергии атомам неона. В результате такого столкновения атом гелия переходит в основное состояние, а атом неона возбуждается и переходит в состояние E'_3 (штрих относится к состояниям неона). Небольшое различие энергий ($0,05 \text{ эВ}$) восполняется кинетической энергией движущихся атомов. В результате метастабильное состояние E'_3 атома неона оказывается более населенным, чем состояние E'_2 , и возникает инверсная населенность, необходимая для лазерной генерации.

Рис. 41.13. Запись голограммы.



Существуют лазеры на p - n -переходах, в которых реализуются переходы между дном зоны проводимости и потолком валентной зоны (разд. 41.11).

Одно из многочисленных интересных приложений лазерного излучения – создание трехмерных изображений, известных под названием *голограмм*. В обычной фотографии светочувствительная пленка просто регистрирует интенсивность света, приходящего в каждую точку. Если рассматривать фотографию или слайд, свет, отражаясь или проходя сквозь пленку, создает двумерное изображение. В голографии изображение формируется без использования линз благодаря интерференции света. При записи лазерной голограммы на пленке лазерный пучок с помощью полупосеребренного зеркала делится на две части (рис. 41.13). Одна часть пучка направляется непосредственно на пленку, а другая – на фотографируемый объект и, отражаясь от него, попадает на пленку. Свет, отраженный каждой точкой объекта, попадает на всю пленку, и интерференция двух пучков позволяет зарегистрировать в каждой точке пленки как интенсивность, так и относи-

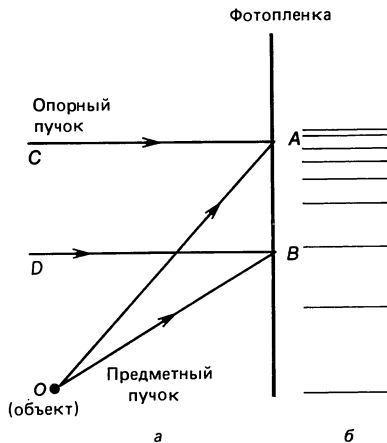
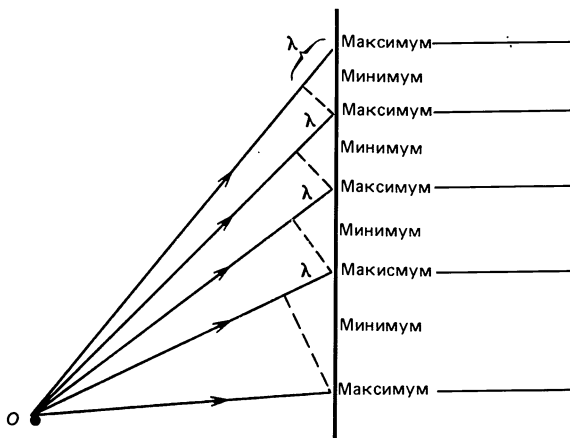


Рис. 41.14. Свет из точки объекта O интерферирует со светом опорного пучка (лучи CA и DB).

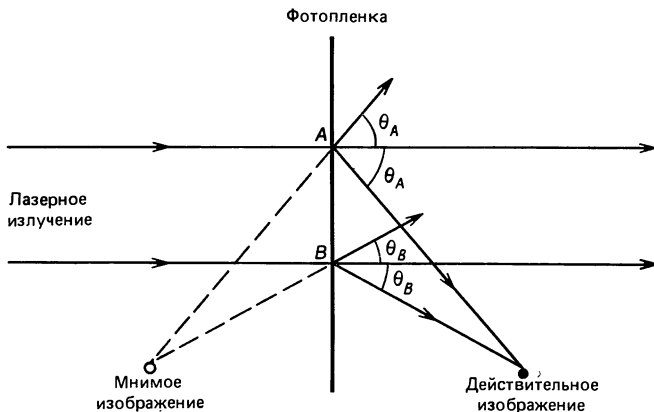
Рис. 41.15. Каждый из лучей, выходящих из точки O , на одну длину волны короче предыдущего (ближайшего сверху). Если верхний луч совпадает по фазе с опорным пучком (не показанным на схеме), имеющим одну и ту же фазу во всех точках на экране, то все лучи, изображенные на схеме, порождают усиливающую интерференцию. Из рисунка видно, что расстояния между светлыми полосами увеличиваются сверху вниз.



тельную фазу света. Если проявленную пленку вновь поместить в лазерный пучок, то возникнет трехмерное изображение объекта. Такое изображение можно разглядывать с разных сторон, как если бы это был сам объект. Но если попытаться прикоснуться к изображению рукой, вы обнаружите лишь пустоту.

Детали формирования голографического изображения достаточно сложны. Но основное представление можно получить, рассмотрев отдельную точку объекта. На рис. 41.14,а лучи OA и OB отражаются одной точкой объекта. Лучи CA и DB идут непосредственно от источника света и интерferируют с лучами OA и OB в точках A и B пленки. В результате на пленке возникают интерференционные полосы, как показано на рис. 41.14,б. Расстояния между полосами уменьшается снизу вверх. Почему так происходит, видно из рис. 41.15. Таким образом, голограмма точечного объекта имеет вид, изображенный на рис. 41.14,б. Пленка в этом случае напоминает дифракционную решетку с переменным шагом. Следовательно, если через проявленную пленку проходит когерентное лазерное излучение, то из-за переменного шага

Рис. 41.16. Лазерное излучение падает на фотопленку, которая действует как дифракционная решетка с переменным периодом. Изображены только выходящие лучи, соответствующие первым дифракционным максимумам. Так как период решетки в точке B больше, чем в точке A , угол θ_A больше угла θ_B ($\sin \theta = \lambda/D$), и поэтому формируются действительное и мнимое изображения точки.



решетки максимумы первого порядка дифракционной картины будут наблюдаться под несколько разными углами [см. соотношение (37.1): $\sin \theta = \lambda/D$; там, где расстояние между щелями D больше, угол θ оказывается меньше]. Следовательно, в первом порядке будет казаться, что дифрагирующие вверх лучи расходятся из одной точки (рис. 41.16). Это – мнимое изображение исходного объекта, которое можно наблюдать невооруженным глазом. Лучи, дифрагирующие в первом порядке *вниз*, сходятся, образуя действительное изображение, которое можно наблюдать и фотографировать. (Обратите внимание на то, что прямые, недифрагирующие лучи не представляют интереса.) Разумеется, реальные предметы состоят из множества точек, поэтому их голограмма представляет собой сложную интерференционную картину, которая при освещении ее лазерным излучением воспроизводит изображение предмета. Каждая точка изображения занимает в трехмерном пространстве правильное положение относительно других точек, и изображение точно воспроизводит оригинал, причем его можно, как и оригинал, рассматривать под разными углами. Можно изготовить голограммы, позволяющие наблюдателю обойти вокруг изображения и рассмотреть его со всех сторон.

*41.10. Молекулярные спектры

В этом и следующем разделах мы обсудим некоторые крупные достижения квантовой теории в объяснении явлений, связанных с образованием систем с большим числом атомов. Мы вынуждены ограничиться лишь кратким обзором.

При образовании молекулы энергетические уровни внешних электронов атомов изменяются, так как в молекуле они взаимодействуют друг с другом. Кроме того, иногда возникают дополнительные уровни, так как атомы могут колебаться относительно друг друга, а молекула – вращаться как целое. Энергетические уровни колебательного и вращательного движений квантованы. Однако расстояние между ними очень мало, особенно в случае

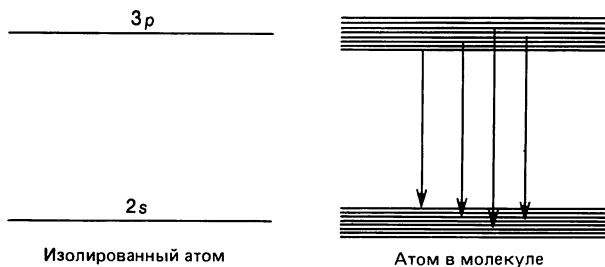


Рис. 41.17. Отдельные уровни энергии изолированного атома в молекулах, твердых телах и жидкостях расщепляются и превращаются в полосы близких уровней.

вращательных уровней (характерное расстояние между уровнями составляет 10^{-3} эВ). Таким образом, каждый атомный уровень превращается в ряд близких уровней, соответствующих колебательным и вращательным движениям (рис. 41.17). В результате переходов между этими близкими уровнями возникает множество очень близких спектральных линий. В действительности линии не всегда удастся отличить друг от друга, и такие спектры называются *полосатыми*. Каждый тип молекул обладает характерным спектром, который можно использовать для идентификации молекул и определения их структуры.

Если вещество находится в твердом (или жидком) состоянии, внешние электроны его атомов или молекул перекрываются. Их энергетические уровни изменяются и вследствие взаимодействия размываются, образуя *энергетические зоны*, как на рис. 41.17. Так как число атомов в твердом теле и жидкости очень велико, энергетические уровни в таких зонах расположены чрезвычайно плотно. Они заполняют зону фактически непрерывно, вследствие чего спектр сильно нагретых твердых тел, например раскаленного докрасна железа или нити лампы накаливания, кажется непрерывным. Энергетические зоны в полупроводниках играют важную роль с точки зрения работы транзисторов и диодов, о чем пойдет речь в следующем разделе.

*41.11. Полупроводники

Квантовая механика оказалась действенным инструментом изучения структуры твердых тел. Ныне эту бурно развивающуюся область физики принято называть *физикой твердого тела* (или *физикой конденсированного состояния*, которое включает не только твердое тело, но и жидкость). Мы бегло рассмотрим лишь один из разделов физики твердого тела – физику полупроводников – и некоторые ее приложения в современной электронике. Познакомимся прежде всего со свойствами широко используемых полупроводников – германия и кремния.

Рис. 41.18. Кристалл германия. *а* – четыре (внешних) электрона окружают каждый атом германия. *б* – кристалл германия с примесью атомов мышьяка: лишний электрон «не влезает» в кристаллическую решетку и свободно перемещается. Это – полупроводник *n*-типа.

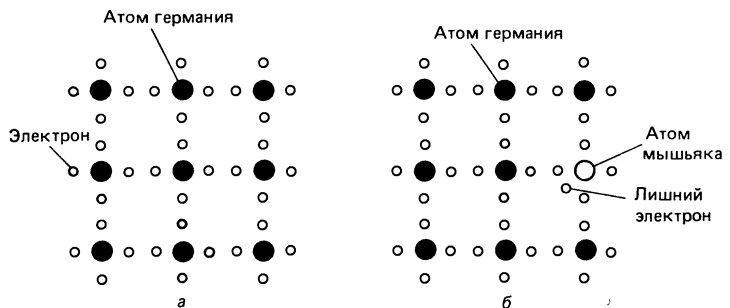
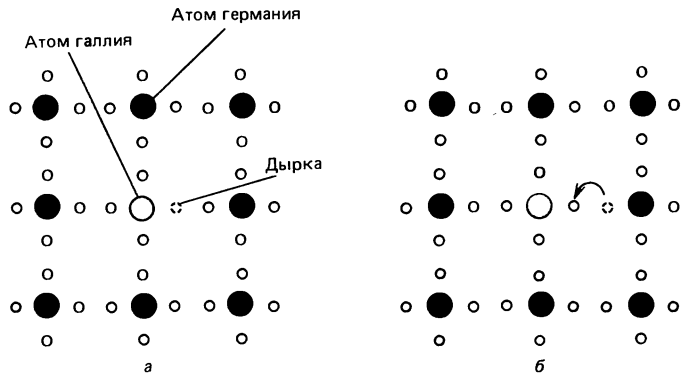


Рис. 41.19. Проводник p -типа – германий с примесью галлия. У галлия имеются только три внешних электрона, поэтому в структуре существует свободное место, или дырка (а). Электроны из атомов германия могут перескакивать в дырку и занимать ее. В результате дырка перемещается (на рисунке – вправо) (б).



У атомов кремния или германия имеется по четыре электрона во внешней оболочке, взаимодействие между которыми удерживает атомы в узлах правильной кристаллической решетки (рис. 41.18, а). Германий и кремний приобретают свойства, позволяющие использовать их в электронике, только при введении в кристаллическую структуру небольшой примеси (примерно одной миллионной, т. е. 10^{-6}). Введение примеси называется легированием полупроводника. В зависимости от характера примеси полупроводники могут быть двух типов. Если атомы вещества примеси имеют пять внешних электронов (как, например, мышьяк), то возникает ситуация, изображенная на рис. 41.18, б. Только четыре внешних электрона мышьяка «вписываются» в кристаллическую структуру. Пятый электрон оказывается «лишним» и может перемещаться сравнительно свободно, почти как электроны в проводнике. Из-за того что число этих избыточных электронов невелико, легированный полупроводник становится слабо проводящим. Кристалл германия, легированный мышьяком, называется *полупроводником n -типа*, так как носителями электрического тока служат отрицательно заряженные электроны (n – начальная буква слова negative, т. е. отрицательный).

В *полупроводнике p -типа* присутствует небольшая примесь вещества с тремя внешними электронами (например, галлия). Как показано на рис. 41.19, а, в кристаллической решетке около атома галлия (поскольку у него только три внешних электрона) возникает «дырка». Электроны близлежащих атомов германия могут перейти в дырку и заполнить ее. Но при этом «дырка» образуется на том месте, где они до этого находились (рис. 41.19, б). Так как атомов германия во много раз больше, чем атомов галлия, дырка почти всегда находится около атома германия. Поскольку для того, чтобы атом германия был нейтральным, у него должны быть четыре электрона во внешней оболочке; присутствие дырки означает результирующий положительный заряд. Когда электрон в процессе движения заполняет дырку, положительный заряд

перемещается туда, где до этого находился электрон. Новую дырку может заполнить другой электрон, и дырка таким образом переместится и займет новое положение и т. д. Такой полупроводник называется *полупроводником p-типа*, так как носителями электрического тока служат положительно заряженные дырки (*p* – начальная буква слова *positive*, т. е. положительный).

Поведение полупроводников находит свое объяснение в рамках так называемой *зонной теории* твердого тела, основанной на квантовой механике. Как мы уже знаем, электроны в отдельном атоме могут занимать только вполне определенные энергетические уровни. Наинизший энергетический уровень соответствует основному состоянию, а более высокие уровни – возбужденным состояниям. В твердом теле разрешенные энергетические уровни вследствие взаимодействия атомов размываются, превращаясь в широкие полосы, или зоны, как уже говорилось в предыдущем разделе. Внешние электроны могут оказаться в одной из двух зон¹⁾: либо в нижней, *валентной зоне*, соответствующей основному состоянию, либо в верхней *зоне проводимости*. Электроны не могут иметь энергии в «запрещенной» щели между этими двумя зонами. Обычно электроны находятся в валентной зоне, где они довольно сильно связаны с отдельными атомами. У хорошего диэлектрика валентная зона заполнена, зона проводимости, по существу, пуста, а щель между зонами достигает значительной ширины. Свободных состояний, которые могли бы занять электроны, нет, если только электроны не обладают достаточно большой энергией (полученной, например, в результате столкновения с другим электроном), чтобы перейти в более высокую зону проводимости. Оказавшись в зоне проводимости, электрон перестает быть связанным с определенным атомом и может свободно перемещаться по решетке. Если щель между валентной зоной и зоной проводимости велика, то вещество будет представлять собой хороший диэлектрик, так как лишь у немногих электронов достаточно энергии для перехода в зону проводимости (рис. 41.20, а). С дру-

Рис. 41.20. Энергетические зоны в твердых телах. Показаны (в идеализированном виде) только зоны для внешних электронов. Зоны для других электронов соответствуют меньшей энергии.



¹⁾ Обычно все состояния в зонах с меньшей энергией заняты.



Рис. 41.21. Примесные уровни в легированных полупроводниках.

гой стороны, в хорошем проводнике щели между валентной зоной и зоной проводимости не существует (рис. 41.20,б): обе зоны могут перекрываться или зона может просто оказаться незаполненной и электроны будут свободно переходить в другие состояния; таким образом, они могут свободно перемещаться и представляют собой носители электрического тока. В чистых полупроводниках (или проводниках с *собственной, беспримесной проводимостью*), например в углероде, германии или кремнии, энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости невелика (рис. 41.20,в). Небольшая доля электронов может обладать достаточной энергией, чтобы преодолеть щель, так что чистые полупроводники обнаруживают очень слабую проводимость. (При комнатной температуре средняя кинетическая энергия электронов равна $kT \approx 1/40$ эВ.) С повышением температуры число электронов с энергией, достаточной для преодоления щели между зонами, возрастает. Этот эффект нередко преобладает над уменьшением средней длины свободного пробега из-за увеличения хаоса с повышением температуры, так что сопротивление полупроводников может падать с температурой (табл. 26.1).

В легированных полупроводниках примеси создают дополнительные энергетические состояния между зонами, как показано на рис. 41.21. В полупроводнике *n*-типа примесный энергетический уровень лежит чуть ниже дна зоны проводимости. Электроны на этом уровне могут легко приобрести дополнительную энергию для перехода в зону проводимости. Так как этот уровень поставляет электроны в зону проводимости, он называется *донорным*. В полупроводниках *p*-типа примесный энергетический уровень расположен чуть выше потолка валентной зоны. Он называется *акцепторным*, так как электроны из валентной зоны легко могут переходить на него. В результате образуется положительно заряженная дырка. При заполнении дырки другими электронами она перемещается.

Полупроводниковые диоды и транзисторы служат важными компонентами современных электронных устройств. Достигнутый ныне уровень миниатюризации позволяет разместить на одном *чипе* размером около 1 см тысячи диодов, транзисторов, резисторов и т. д. Рассмотрим вкратце, как действуют диоды и транзисторы.

Если полупроводник *n*-типа соединить с полупроводником *p*-типа, то получится *диод* с *p-n-переходом*. Каждый из полупроводников в отдельности электрически нейтрален. Но в результате соединения небольшое количество электронов вблизи контакта перейдет за счет диффузии из полупроводника *n*-типа в полупроводник *p*-типа и заполнит там некоторое число дырок. В результате полупроводник *n*-типа приобретет положительный заряд, а полупроводник *p*-типа – отрицательный. Возникнет раз-

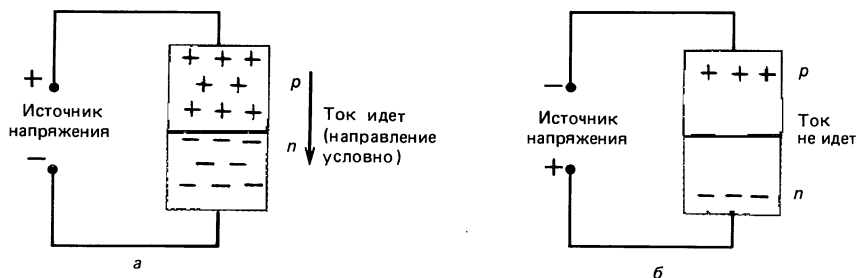


Рис. 41.22. Схема, показывающая принцип действия полупроводникового диода. Ток течет, когда приложено прямое смещающее напряжение (а). Если приложено обратное смещающее напряжение, то ток не течет (б).

ность потенциалов, положительная со стороны полупроводника n -типа по отношению к полупроводнику p -типа, которая воспрепятствует дальнейшей диффузии электронов.

Если диод подключить положительным полюсом батареи к полупроводнику p -типа, а отрицательным — к полупроводнику n -типа, как на рис. 41.22, а, то напряжение будет противоположно внутренней разности потенциалов. В этом случае диод будет иметь *прямое смещение*. Если напряжение достаточно велико (около 0,3 В для германия и 0,6 В для кремния при комнатной температуре), то возникает ток. Положительные дырки в полупроводнике p -типа отталкиваются положительным полюсом батареи, а электроны в полупроводнике n -типа отталкиваются отрицательным полюсом батареи. Дырки и электроны встречаются в месте контакта полупроводников, электроны пересекают границу, разделяющую полупроводники, и заполняют дырки. Между тем положительный полюс батареи постоянно «отсасывает» электроны от полупроводника p -типа, образуя новые дырки, а отрицательный полюс подпитывает электронами полупроводник n -типа. В результате через диод течет сильный ток.

В диоде с *обратным смещением* (рис. 41.22, б) дырки в полупроводнике p -типа притягиваются отрицательным полюсом батареи, а электроны в полупроводнике n -типа — положительным полюсом батареи. Носители тока не встречаются в месте контакта, и в идеальном случае ток отсутствует.

Так как диод с p – n -переходом пропускает ток только в одном направлении, он может служить *выпрямителем*, преобразующим переменный ток в постоянный. Простая схема выпрямителя показана на рис. 41.23, а. Стрелка в условном обозначении диода указывает направление, в котором диод проводит ток (положительным выбрано обычное направление тока). Источник переменного тока подает на диод то положительное, то отрицательное напряжение. Ток через диод протекает только в течение половины периода, и поэтому через сопротивление R ток течет тоже только полпериода. Следовательно, напряжение V_{ab} на сопротивлении R в зависимости от времени имеет форму, изображенную на рис. 41.23, б. Подобный *однополупериодный выпрямитель* дает не вполне постоян-

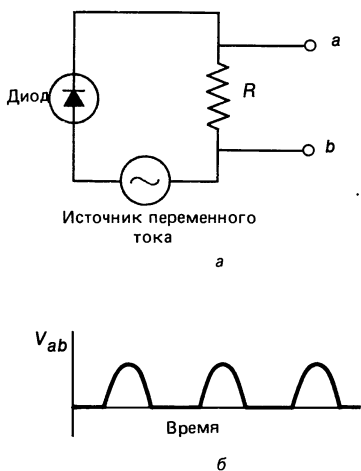
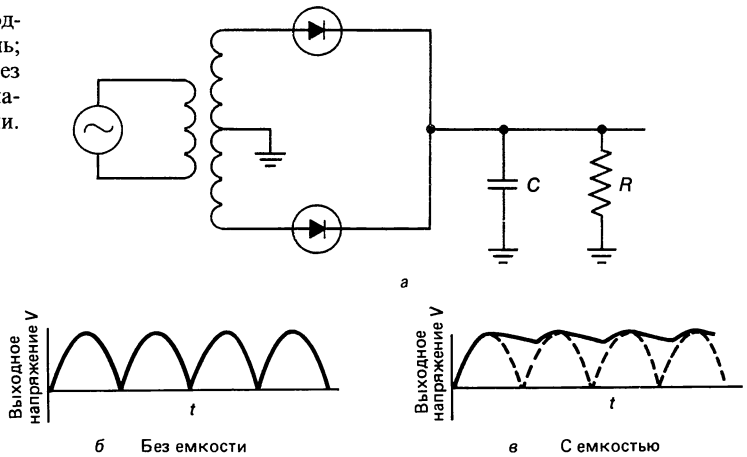


Рис. 41.23. а — простая выпрямительная цепь, использующая полупроводниковый диод; б — выходное напряжение на сопротивлении R как функция времени.

Рис. 41.24. *а* – двухполупериодная выпрямительная цепь; *б* – выходное напряжение без емкости C ; *в* – выходное напряжение с емкостью в цепи.



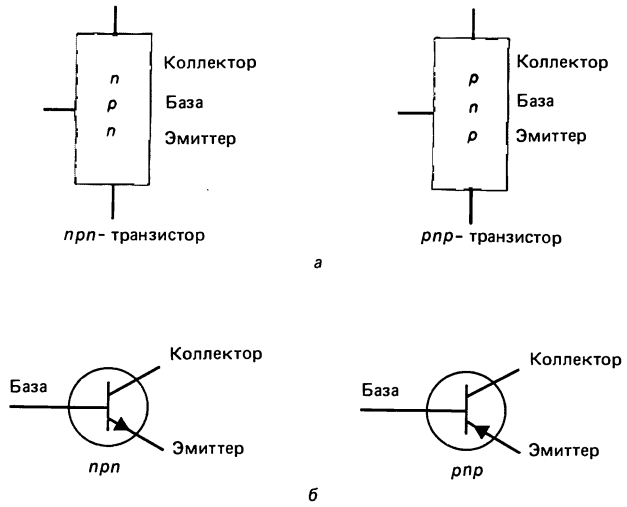
ный ток, а лишь ток постоянного направления. Более широкое применение имеет *двухполупериодный выпрямитель* на двух (иногда на четырех) диодах (рис. 41.24, *а*). В каждый момент либо один, либо другой диод проводит ток, текущий направо; поэтому зависимость от времени выходного напряжения на сопротивлении нагрузки R имеет вид, изображенный на рис. 41.24, *б*. В действительности такой вид напряжения V имеет, когда в цепи нет емкости C . Как известно, емкость накапливает заряд и тем самым помогает сглаживать колебания напряжения (рис. 41.24, *в*).

Выпрямительные схемы играют важную роль, потому что большинство линий электропередач работает на переменном токе, а большинство электронных устройств требует постоянного напряжения. Поэтому диоды используются почти во всех электронных приборах, в том числе в радиоприемниках и телевизорах.

Простой *транзистор* представляет собой своеобразный сэндвич из полупроводникового кристалла одного типа, расположенного между двумя кристаллами противоположного типа. Существуют как *pnp*-, так и *npn*-транзисторы, схематически изображенные на рис. 41.25, *а*. Полупроводники, входящие в состав транзистора, называются коллектором, базой и эмиттером. Условные обозначения *npn*- и *pnp*-транзисторов приведены на рис. 41.25, *б*. Стрелка всегда обозначает эмиттер, а ее направление совпадает с направлением тока, условно принимаемым за положительное, в нормальном режиме работы.

Работа транзистора происходит следующим образом. Рассмотрим *npn*-транзистор, включенный в цепь, как показано на рис. 41.26. Напряжение V_{CE} между коллектором и эмиттером поддерживается батареей \mathcal{E}_C . Напряжение, приложенное к базе, называется *напряжением смещения базы* V_{BE} . Если оно положительно, то электроны эмиттера

Рис. 41.25. *a* – схема *npn*- и *pnp*-транзисторов; *б* – условные обозначения *npn*- и *pnp*-транзисторов.



притягиваются к базе. Так как толщина базы очень мала (около 1 мкм), большинство электронов свободно проходит на коллектор, который находится под положительным напряжением. Между коллектором и эмиттером протекает большой ток I_C , тогда как ток базы I_B оказывается гораздо более слабым. Небольшие изменения напряжения на базе, обусловленные входным сигналом, вызывают сильные изменения тока в цепи коллектора I_C и, следовательно, большие изменения в падении напряжения на выходном сопротивлении R_C . Таким образом, транзистор позволяет усиливать слабые сигналы. Транзисторы служат основными элементами современных электронных усилителей всех типов.

Аналогичным образом работает и *pnp*-транзистор, где вместо электронов происходит перемещение дырок. В нормальном режиме напряжение на коллекторе, как и напряжение на базе, отрицательно.

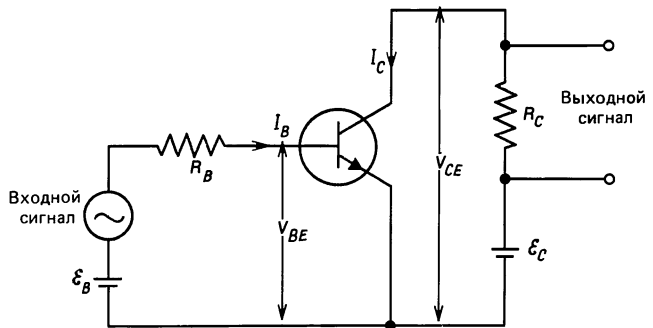


Рис. 41.26. *npn*-транзистор, используемый в качестве усилителя.

Заклучение

В 1925 г. Шредингер и Гейзенберг независимо разработали новую теорию, получившую название *квантовой механики*, которая ныне считается основной теорией явлений микромира. По своей природе это статистическая теория в противоположность детерминизму классической физики. Согласно квантовомеханическим представлениям, электроны в атоме не имеют вполне определенных орбит, а образуют своего рода «облако». Это электронное облако можно интерпретировать как электронную волну, размытую в пространстве, или как распределение вероятности для электрона как частицы.

К числу наиболее важных особенностей квантовой механики принадлежит *принцип неопределенности* Гейзенберга. Он является следствием корпускулярно-волнового дуализма и неизбежного взаимодействия наблюдателя с наблюдаемым предметом. В одной из формулировок принцип неопределенности утверждает, что положение x и импульс p частицы не могут быть точно измерены одновременно: произведение неопределенностей $\Delta x \Delta p$ не может быть меньше $h/(2\pi)$:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{2\pi}.$$

Другая формулировка этого принципа утверждает, что неопределенность в энергии ΔE (или несохранение энергии) в течение интервала времени Δt удовлетворяет неравенству

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{h}{2\pi}.$$

Согласно квантовой механике, состояние электрона в атоме характеризуется четырьмя квантовыми числами: n , l , m_l и m_s . Главное квантовое число n может принимать любые целочисленные значения (1, 2, 3, ...) и соответствует квантовому числу в старой теории Бора. Орбитальное квантовое число l может принимать целочисленные значения от 0 до $n - 1$. Магнитное квантовое число m_l может принимать целочисленные значения от $-l$ до $+l$, и спиновое квантовое число m_s может быть либо $+1/2$, либо $-1/2$. Энергетические уровни атома водорода зависят от n , а у атомов других элементов могут зависеть от n и l . Во внешнем магнитном поле спектральные линии расщепляются (эффект Зеемана), что свидетельствует о зависимости энергии от магнитного квантового числа m_l . Точные измерения спектральных линий обнаруживают расщепление каждой спектральной линии на несколько близких линий, даже в отсутствие внешнего магнитного поля. Эта тонкая структура спектральных линий обусловлена очень слабой зависимостью энергии от m_l и m_s .

Распределение электронов по уровням в многоэлектронных атомах подчиняется *принципу запрета Паули*, согласно которому в одном и том же квантовом состоя-

нии не могут находиться два электрона, т. е. два электрона не могут иметь одинаковые наборы квантовых чисел n , l , m_l и m_s . Электроны группируются в оболочки (с одинаковым n) и подоболочки (с одинаковым l). Оболочечная структура атомов приводит к периодичности свойств химических элементов.

Вопросы

- Сравните волну материи ψ а) с волной на струне; б) с электромагнитной волной. Отметьте сходство и различие.
- Объясните, в чем теория атома Бора несовместима с квантовой механикой. В частности, обратите внимание на принцип неопределенности.
- Объясните, почему, чем массивнее тело, тем легче предсказать его положение.
- Используя принцип неопределенности, объясните, почему бейсбольный мяч имеет точно определенные положение и скорость, а положение и скорость электрона нельзя одновременно точно измерить.
- Не возникает ли некой аналогии с принципом неопределенности при опросе общественного мнения: не воздействуем ли мы на общественное мнение, производя опрос?
- Холодный термометр помещен в чашку с горячим бульоном. Будут ли показания термометра совпадать с температурой бульона до измерения?
- Предположим, что постоянная Планка значительно больше своего истинного значения. Как отразилось бы это на нашей повседневной жизни?
- В чем ньютоновская механика противоречит квантовой механике?
- Чем отличается строение атома по Бору от строения атома согласно квантовой механике?
- Желтая линия ($\lambda = 589$ нм) в спектре натрия в действительности представляет собой две очень близкие линии. Такое расщепление обычно объясняют «внутренним» эффектом Зеемана. В чем он состоит? (Подсказка: перейдите в систему отсчета электрона.)
- Какая из следующих электронных конфигураций запрещена: а) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^3$; б) $1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 4p^2$; в) $1s^2 2s^2 2p^8 3s^1$?
- Выпишите полностью электронную конфигурацию атома урана.
- Сравните спонтанное и вынужденное излучение.
- Чем лазерное излучение отличается от обычного света? Что между ними общего?
- Объясните, почему луч лазера мощностью

0,0005 Вт, сфотографированный на некотором расстоянии, кажется гораздо ярче света уличной лампы мощностью 1000 Вт?

- *16. Кремниевый полупроводник легирован фосфором. Будут ли примесные атомы донорами или акцепторами? Какого типа получится полупроводник?
- *17. Объясните, каким образом транзистор можно использовать в качестве электронного ключа.
- *18. Опишите, каким образом pnp -транзистор можно использовать в качестве усилителя.

Задачи

Раздел 41.3

- (I) Скорость протона составляет $(8,880 \pm \pm 0,012) \cdot 10^5$ м/с. С какой максимальной точностью можно измерить его положение?
- (I) Электрон находится на возбужденном уровне атома в течение 10^{-8} с. Чему равна минимальная неопределенность (в электронвольтах) в энергии уровня? Чему равна эта неопределенность (в процентах) для первого возбужденного уровня атома водорода?
- (I) Положение электрона можно измерить с точностью $1,6 \cdot 10^{-8}$. С какой точностью можно определить его скорость?
- (II) Оцените минимальную энергию нейтрона в типичном ядре радиусом 10^{-15} м.
- (II) Пуля массой 12 г вылетает из ружейного ствола со скоростью 450 м/с. а) Какова длина волны соответствует пуле? б) Положение пули известно с точностью до 0,55 см (радиус ствола). Чему равна минимальная определенность ее скорости? в) Как далеко могла бы уклониться от центра мишени пуля при стрельбе с дистанции 300 м, если бы точность попадания определялась принципом неопределенности? (Неразумность такого предположения вряд ли нуждается в комментариях.)
- (II) Электрон и бейсбольный мяч массой 150 г движутся со скоростью 220 м/с, измеренной с точностью 0,065%. Вычислите неопределенность в положении мяча и электрона и сравните полученные результаты.

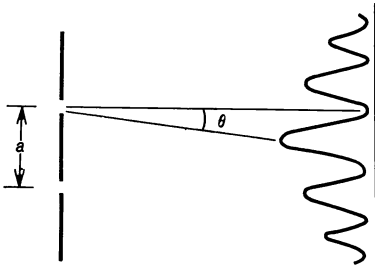


Рис. 41.27.К задаче 41.10.

7. (II) Пользуясь принципом неопределенности, покажите, что если бы электрон находился в ядре ($r \approx 10^{-15}$ м), то неопределенность в его энергии достигала бы сотен мегаэлектрон-вольт. (Так как электроны с такими энергиями не наблюдались, мы заключаем, что электронов в ядре нет.)

8. (II) Принцип неопределенности можно записать для угловых величин следующим образом:

$$\Delta L \Delta \phi \geq \frac{h}{2\pi},$$

где L – момент импульса вдоль данной оси, а ϕ – угловое положение в плоскости, перпендикулярной этой оси. а) Приведите соображения в обоснование этого соотношения. б) Электроны в атомах имеют точно определенные квантованные значения момента импульса без всякой неопределенности. Что можно в этой связи сказать о неопределенности углового положения и о концепции электронной орбиты?

9. (II) Пользуясь принципом неопределенности, оцените неопределенность положения электрона в основном состоянии атома водорода. [Подсказка: импульс электрона вычислите на основе боровской модели (разд. 40.9).] Полученный результат сравните с боровским радиусом.

10. (II) Предположим, что в эксперименте с двумя щелями, проводимом с электронами (или фотонами), мы используем индикаторы, для того чтобы определить, через какую щель проходит каждый электрон (разд. 41.2). Эти индикаторы определяют координату у электрона с точностью $a/2$, где a – расстояние между щелями. Пользуясь соотношением неопределенности, покажите, что интерференционная картина исчезнет. [Подсказка: покажите прежде всего, что угол θ между максимумами и минимумами интерференционной картины характеризуется $\lambda/2a$ (рис. 41.27).]

11. (II) С какой точностью можно измерить положение электрона с энергией 1,50 кэВ, если энергия известна с точностью 1%?

12. (III) Карандаш длиной 20 см поставлен на острие. В классической физике это положение (неустойчивого) равновесия, и карандаш, если он установлен строго вертикально, может простоять на острие неограниченно долго. Квантовомеханический анализ показывает, что карандаш должен упасть. а) На чем основано квантовомеханическое предсказание? б) Оцените (с точностью до множителя 2), спустя какое время карандаш упадет на стол, если он был сначала установлен по возможности точно.

Разделы 41.6 и 41.7

13. (I) Сколько разных состояний у электрона с главным квантовым числом $n = 5$?

14. (I) Перечислите квантовые числа каждого электрона в основном состоянии атома магния ($Z = 12$).

15. (I) Сколько электронов может находиться в подоболочке с $n = 6$, $l = 3$?

16. (I) Какие значения могут принимать m_l и m_s при $n = 4$, $l = 3$?

17. (I) Перечислите все квантовые числа каждого электрона в основном состоянии атома углерода ($Z = 6$).

18. (I) Вычислите величину момента импульса электрона в состоянии атома водорода с $n = 3$, $l = 2$.

19. (II) С помощью формулы Бора для радиуса электронной орбиты оцените среднее расстояние до ядра электрона, находящегося на ближайшей к ядру ($n = 1$) орбите атома урана ($Z = 92$). Какая энергия необходима для удаления из атома этого электрона с самой внутренней орбиты?

20. (II) С помощью теории Бора оцените энергию связи третьего электрона атома лития ($Z = 3$). Экспериментально измеренное значение равно 5,36 эВ.

21. (II) Энергия ионизации (связи) внешнего электрона атома бора равна 8,26 эВ. а) Определите «эффективный заряд ядра» $Z_{\text{эфф}}$ для этого электрона. (Подсказка: воспользуйтесь боровской моделью.) б) Оцените средний радиус его орбиты.

22. (II) Покажите, что максимальное число электронов на подоболочке с орбитальным квантовым числом l равно $2(2l + 1)$.

Раздел 41.8

*23. (I) Какова минимальная длина волны рентгеновского излучения, испускаемого электронами, бомбардирующими экран телевизионного кинескопа с рабочим напряжением 30 кВ? Чему равна максимальная длина волны?

*24. (II) Используя данные из примера 41.2,

оцените длину волны рентгеновского излучения, возникающего при переходе атома титана ($Z = 22$) из состояний с $n = 2$ в состояние с $n = 1$.

*25. (II) Оцените длину волны излучения, возникающего при переходе атома железа ($Z = 26$) из состояния с $n = 2$ в состояние с $n = 1$.

*26. (II) С помощью теории Бора оцените длину волны, отвечающую переходу атома молибдена из состояния с $n = 3$ в состояние с $n = 1$. Экспериментально измеренная длина волны $\lambda = 0,063$ нм. Почему нельзя ожидать идеального согласия?

*27. (II) Рентгеновская трубка работает при напряжении 100 кВ (сила тока 20 мА). Почти вся энергия электронов превращается в тепловую. Удельная теплоемкость металлической мишени массой 78 г равна 0,11 ккал/(кг·К).

Как будет подниматься ежеминутно температура мишени, если водяное охлаждение отсутствует?

Раздел 41.9

*28. (II) Для сварки отслоившейся сетчатки используется лазер, генерирующий световые импульсы с длиной волны 640 нм, продолжительностью 25 мс, средней энергией 0,50 Вт в импульсе. Сколько энергии может выделяться в импульсе и сколько фотонов в нем?

*29. (II) Оцените угловое расхождение лазерного пучка из-за дифракции, если он выходит через зеркало диаметром 5,0 мм. Длина волны излучения $\lambda = 694$ нм. Чему равен диаметр пучка на искусственном спутнике Земли, находящемся на высоте 1000 км над Землей?