

ВВЕДЕНИЕ

ЧТО ТАКОЕ НАНОМИР?

Сейчас постоянно произносятся слова с приставкой «нано-»: нанотехнология, наноустройства и т.д. Что же они означают, и почему именно в XXI в. становится все более и более актуальной проблема изучения и использования свойств так называемых нанообъектов?

Термин «нано» относится к размерам 10^{-9} см. Характеризуемые такими величинами объекты имеют размеры не столь малые, чтобы можно было говорить просто о молекулах средней величины. Правда, так называемые биомолекулы и полимерные цепи имеют нередко и большую длину. Тем не менее, не случайно вводится новый термин, которым обозначаются объекты, лежащие в промежутке между миром молекул и миром макрообъектов.

Традиционно наука и промышленность имела дело с макрообъектами. К ним относятся все машины и механизмы, электроустройства и многое другое, что составляет уже привычный для нас окружающий мир. Эта область получила гигантское развитие в течение XIX—XX вв., после создания научного базиса, опирающегося на достижения классической физики: физическая механика, электромагнитные явления, свет и др. Микрообъекты, объединяемые термином «молекулы», составляли предмет, традиционно относимый к области химии. Эта наука тоже развивалась столетиями. Такие химические процессы, как брожение, окисление и многие другие были известны еще в Египте при фараонах. Конечно, начало систематизации химических знаний относится к значительно более позднему времени.

Принципиальное методическое отличие этих двух областей науки, иными словами, техники и химического производства, заключалось в том, что если техника базировалась на формулировке причинно-следственных связей в виде математических соотношений, что и позволяло использовать для проектирования желаемых объектов математические вычисления, то обобщение химических знаний базировалось на так называемых «черных ящиках».

Это последнее означает, что исходная ситуация приводит обязательно к определенному следствию. В математике эта причинно-следственная связь называется импликацией. Почему из посылки *A* следует *B* неизвестно, причинно-следственная связь не раскрывается, а только констатируется. Поэтому химия до сих пор базируется на громадном эмпирическом опыте, который позволяет, главным образом на

основе аналогий, прогнозировать ход той или иной химической реакции и, следовательно, синтез того или иного материала или реагента. Такая ситуация сложилась, потому что не было создано пригодных для описания свойств молекулярного мира физической теории и математического аппарата, которые играли бы в этой области науки ту же самую роль, что и классическая физика в макромире. Эти перспективы появились только в первом десятилетии XX в. в связи с появлением квантовой теории строения вещества, квантовой механики, квантовой электродинамики.

Конечно сразу же были сделаны попытки применить возможности новой громадной области науки к описанию свойств молекулярного мира. Это оказалось далеко не простым делом и потребовало усилий целого ряда выдающихся ученых, успехи которых были отмечены Нобелевскими премиями: теория резонанса Паулинга (Нобелевская премия 1954 г.), метод молекулярных орбиталей Малликен (Нобелевская премия 1966 г.), принцип орбитальной симметрии Хофмана и Фукуи (Нобелевская премия 1981 г.), вычислительные методы, применимые для получения количественных результатов при прогнозе строения и свойств сложных молекул Попла и Кона (Нобелевская премия 1998 г.).

Конечно, не только этим ученым мы обязаны современным уровнем квантовой теории строения вещества. Все теоретические достижения не стали бы практически пригодными, если бы одновременно вычислительная техника не получила широкое развитие систематического аппарата программостроения. Известно, что современные суперкомпьютеры способны производить десятки миллионов математических операций за секунду.

В то же время развивалась и техника общения человека и ЭВМ.

Если управление первыми компьютерами требовало владения аппаратом программирования, то сейчас расчет целого ряда свойств сложных молекул вполне доступен школьнику старших классов. Можно сказать, что фундаментальное знание превращается в инженерное умение. В результате удалось не только объяснить, почему именно существуют молекулярные объекты и идут химические реакции, но и сделать на количественном уровне прогноз желаемых свойств и тем самым проводить целенаправленный поиск соединений и материалов с желаемыми характеристиками.

Выяснилось, кроме того, что молекулярные объекты могут накапливать энергию, преобразовывать входной сигнал так, что действие и результат совершенно различаются по форме. Например, при фотосинтезе поглощается энергия в виде квантов света, а результатом является выделение кислорода. Молекула способна записывать информацию, пре-

образовывать ее вплоть до совершения такого сложного действия, которое называется распознаванием образа.

Все эти возможности не могут не вызывать большого интереса, так как обещают создание устройств, способных обеспечить решение проблем, которые в прошлом считались неразрешимыми.

Достаточно привести два примера. Во-первых, создание лекарств, которые без потерь доставлялись бы точно в тот центр, который управляет той или иной функцией сложного живого организма. Во-вторых, появление технологии «Стелс», которая сильно затрудняет обнаружение самолетов, кораблей с помощью радиолокаторов, делая их почти невидимыми.

Дальнейшее развитие, естественно, выдвигает на повестку дня новую чрезвычайно сложную проблему, связанную с переходом от одиночных объектов к множеству. Не случайно в физике бытует такая шутка: «Когда теоретика просят решить задачу об устойчивости стула на четырех ножках, то он довольно быстро приносит ответ об устойчивости на одной ножке и на бесконечном числе, а всю остальную жизнь тратит на поиски ответа на поставленный вопрос». Можно сказать, что классическая физика и базирующаяся на ней техника оперируют со множественными объектами. Даже кусок проволоки состоит из громадного числа атомов, и именно свойства взаимодействия этих атомов и их число обеспечивают прочностные свойства или электропроводность проволоки.

В молекулярном мире основные свойства главным образом определяются парными взаимодействиями объектов, которые свойственны микромиру. Можно сказать, что в одном случае мы можем охарактеризовать ситуацию термином «много», а в другом говорить о «единице» или «очень мало». А что в промежутке?

Например, известно, что, хотя в кристалле имеются поверхностные атомы, число их ничтожно, по сравнению с числом атомов всего кристалла. Поэтому свойства его будут определяться именно этим множеством. Однако, если размеры кристалла уменьшить, то число поверхностных атомов может стать сравнимым с числом внутренних. Такой малый кристалл будет обладать свойствами, отличными от достаточно большого. Именно проникновение в эту промежуточную область и освоение ее и составляют главную цель новой науки, на основе которой должно развиваться то, что сейчас принято называть нанотехнологиями.

Движение в этом направлении только началось, перспективы необъятны. Можно сказать, что XXI в. станет веком нанотехнологий.

Целью этого курса является знакомство студентов с особенностями поведения и средств описания микрообъектов и указание на те перспективы, реализация которых возможна с помощью знаний о микромире,

которые созданы в физике до настоящего времени. Прежде всего это требует знакомства с так называемой дискретностью, которая и описывается квантовой механикой. Элементы квантовой теории будут изложены в следующих главах.

1. БАЗОВЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ И ПОСТУЛАТЫ Н. БОРА

В начале XX в. обнаружилось, что хорошо развитая физическая теория с помощью классических представлений не может объяснить экспериментальные факты фундаментального характера, строение атомов и молекул. Это получило название «катастрофа в физике».

Курьезно, что незадолго до этого начинающий, а затем знаменитый ученый Макс Планк пришел к своему учителю и сказал, что хочет посвятить себя развитию теоретической физики, на что тот ответил: «Зачем Вы губите свою научную карьеру, в теоретической физике уже все сделано и ничего нового сделать нельзя». Это было сказано за несколько лет до «катастрофы» и создания квантовой механики, которая дала возможность понять, как устроен весь микромир.

М. Планк занимался изучением абсолютно черного тела. Разработал теорию его излучения, а в 1900 г. доказал, что лучеиспускание или поглощение происходит скачкообразно, порциями, которые были названы квантами, с энергией $E = h\omega$, где h — постоянная Планка, а ω — частота колебаний волны. Он ввел универсальную постоянную излучения, названную им *квантом действия*.

Атомная теория вещества существовала еще в XVIII в. Развитие физики и химии подтвердило прерывную дискретную структуру вещества. Было также показано, что атомы представляют собой сложную систему. Многие явления указали, что в состав атома входят электроны. Так как атом электрически нейтрален, то было очевидно, что в его состав входят и частицы, имеющие положительный заряд.

В начале XX в. Томсон предложил модель атома, согласно которой атом представляет собой сферу с радиусом около 10^{-8} см. Этот размер был найден в данных молекулярной физики. Равномерно по всему объему сферы распределен положительный заряд. Внутри сферы находятся электроны, положение которых определяется условиями равновесия между силами притяжения их к центру и отталкиванием их друг от друга. Упругими колебаниями электронов около положения равновесия можно было объяснить излучение света, но закономерности в спектрах атомов при помощи этой модели объяснить не удалось.

Как показывает опыт, каждому газу и пару соответствует характерный для него линейчатый спектр, т.е. спектр, состоящий из большого числа линий, которые могут быть разделены на группы — спектральные серии. В каждой серии линии сближаются в сторону более коротких волн и у границы серий расположены так тесно, что сливаются друг с другом.

В 1885 г. Швейцарский физик и математик Бальмер, пользуясь таблицей длин волн, соответствующей четырем линиям видимой части спектра водорода, нашел формулу, которая связывала эти линии водорода:

$$\lambda = B \frac{n^2}{n^2 - 4},$$

где B — некоторая постоянная, n — целое число, принимающее значения 3, 4, 5, 6 и λ — длина электромагнитной волны.

При переходе от длины волны к частоте получается формула

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

где R — константа, называемая постоянной Ридберга (Шведский физик).

Формула называется формулой Бальмера, а соответствующая серия спектральных линий водородного атома — серией Бальмера. По этой формуле можно было очень точно вычислить длины волн, соответствующих видимым линиям водородного спектра.

Дальнейшие исследования показали, что в спектре водорода имеется несколько серий. В ультрафиолетовой части спектра находится серия Лаймана. Остальные серии лежат в инфракрасной области. Линии этих серий могут быть представлены в виде формул:

$$\text{Серия Лаймана: } \nu = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (n = 2, 3 \dots).$$

$$\text{Серия Пашена: } \nu = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (n = 4, 5 \dots).$$

$$\text{Серия Брэкета: } \nu = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (n = 5, 6, 7 \dots).$$

$$\text{Серия Пфунда: } \nu = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (n = 6, 7, 8 \dots).$$

Частоту всех линий спектра атома водорода можно представить:

$$\nu = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \text{где } m - n = m + 1.$$

Это обобщенная формула Бальмера. При возрастании n частота линий в каждой серии стремится к предельному значению R/m^2 , которое называется границей серии.

Каждый элемент имеет свой дискретный набор линий. Получается индивидуальный портрет этого вещества. Эти свойства лежат в основе спектрального анализа, т.е. имеется возможность по своеобразному отпечатку пальцев определить, с каким веществом мы имеем дело. Это верно и для молекул. Каждый атом поглощает и испускает энергию дискретным образом.

Однако обосновать физически эту формулу не удавалось.

В 1912 г. Резерфорд предпринял исследования строения атома. В качестве зонда для прощупывания атома Резерфорд выбрал α -частицы, т.е. быстро летящие ионы гелия с атомным весом 4 и двойным элементарным зарядом. Такие частицы выделяются при радиоактивном распаде сложных атомов. Выделяемые объекты представляют собой сравнительно тяжелые частицы (атомный вес 4, т.е. масса $6,7 \cdot 10^{-24}$ г), летящие с большой скоростью (до $1/3$ с). Кинетическая энергия α -частицы весьма значительна.

Существует несколько методов наблюдений α -частиц.

Простейший метод — *метод сцинтилляций*, основанный на способности α -частиц при ударе о фосфорисцирующий экран вызывать вспышку, достаточно яркую для наблюдений с помощью лупы или микроскопа. Резерфорд исследовал, каким образом меняется направление полета α -частиц при прохождении их сквозь слой какого-либо вещества (рассеяние α -частиц), схема его опыта приведена на рис. 1.

Имеется радиоактивный препарат, который испускает α -частицы и помещен в сосуд с высоким вакуумом, чтобы α -частица могла без столкновений долететь до фосфорисцирующего экрана E . При помощи диафрагмы D выделяется узкий пучок α -частиц. В микроскоп можно на экране E

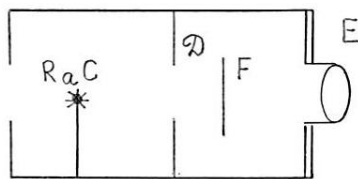


Рис. 1. Схема опыта Резерфорда

наблюдать сцинтилляции. На пути α -частиц ставились тонкие листочки металлической фольги 10^{-6} — 10^{-7} м, при прохождении которых α -частицы рассеивались. Наблюдение состоит в определении числа сцинтилляций (за определенное время), возникающих в разных местах экрана. Отклонения α -частиц происходит в результате взаимодействия их с

зарядами, входящими в состав атома. Электроны, входящие в состав атома, не могут дать сильное отклонение α -частиц (так как масса α -частицы в 8000 раз больше массы электрона). Столкновение с положительной заряженной частью атома может вызвать отклонение α -частиц. На рис. 2 показано полученное распределение.

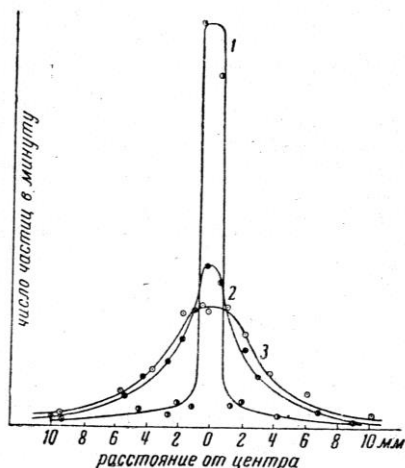


Рис. 2. Распределение α -частиц по экрану

Этот рисунок показывает, что если нет рассеивающей фольги, то весь поток α -частиц группируется в центре (кривая 1), при прохождении через 1 слой фольги — кривая 2, через два слоя фольги — кривая 3.

Из кривых можно определить, сколько α -частиц испытывают в результате прохождения через фольгу отклонение на большой угол. Оказалось, что число таких частиц весьма заметно.

Было естественно предположить, что эти отклонения вызваны оттапливанием α -частиц со стороны положительных зарядов атома.

Проанализировав результаты опыта, Резерфорд пришел к выводу,

что столь сильное отклонение α -частиц возможно только в том случае, если внутри атома имеется чрезвычайно сильное электрическое поле, которое создается зарядом, связанным с большой массой и сконцентрированным в очень малом объеме.

Основываясь на этом выводе, Резерфорд предложил в 1911 г. ядерную (или планетарную) модель атома. Согласно этой модели, размер положительного ядра очень невелик, порядка 10^{-12} см, что в десятки тысяч раз меньше поперечника атома (10^{-8} см).

Дальнейшие исследования дали возможность измерить величину заряда ядра, который оказался равным номеру элемента в периодической таблице Менделеева, если за единицу принять заряд электрона и установить на опыте, что почти вся масса атома связана с положительным зарядом.

Итак, атом состоит из положительно заряженного ядра, имеющего заряд Ze , и электронной оболочки с отрицательным зарядом, равным заряду ядра. Если заряды неподвижны, то такая система не может находиться

в устойчивом равновесии (общее положение электростатики). Поэтому следует предположить, что электроны движутся вокруг центра ядра наподобие планет Солнечной системы, описывая около него замкнутые траектории. Однако эта модель не могла объяснить спектральных закономерностей: движение электронов по круговым и вообще криволинейным орбитам есть движение ускоренное и, согласно законам электродинамики, должно сопровождаться излучением света соответствующей частоты. При таком движении в результате излучения будет уменьшаться энергия атомной системы и вместе с ней — расстояние от электрона до ядра, и, следовательно, уменьшается и период обращения. Частота обращения и частота излучения непрерывно повышаются, атом будет испускать непрерывный спектр, электрон непрерывно приближается к ядру и через короткую долю секунды должен упасть на ядро, и атом прекратит свое присутствие.

Эти выводы находятся в противоречии с опытом. Отсюда был сделан вывод, что законы классической механики и электродинамики не могут применяться к атомной системе. Выход из этого тупика был найден в 1913 г. Н. Бором.

Бор первый понял, что за этим скрывается новая физика и что надо искать другие средства описания поведения частиц в атоме и вообще в атомных объектах. Он сформулировал два утверждения, получивших название *постулатов Бора* и лежащих в основе всей современной атомно-молекулярной физики.

1. Атомная система устойчива только для определенной совокупности состояний (стационарных состояний), которая в общем случае соответствует дискретной последовательности значений энергии атома. Каждое изменение этой энергии связано с переходом атома (или молекулы) из одного стационарного состояния в другое.

2. Способность атома (молекулы) поглощать и испускать излучение подчиняется закону, по которому излучение, связанное с переходом, должно быть монохроматическим и иметь частоту ω :

$$\hbar\omega = E_1 - E_2,$$

где \hbar — постоянная Планка; E_1 и E_2 — энергии стационарных состояний. Это соотношение называется *правилом частот Бора*. Оно показывает, что в процессах излучения и поглощения энергии атомами выполняется закон сохранения энергии.

В дальнейшем Э. Шредингеру, В. Гейзенбергу, П. Дираку и другим физикам удалось развить новую механику и электродинамику, названные *квантовой механикой* и *электродинамикой*. На их основе не только можно объяснить строение и поведение атомно-молекулярных объектов, но и рас-

считать спектральные, пространственные и другие характеристики атомов, молекул, вплоть до белков, полимеров, кристаллов и т.д.

В отдельных случаях можно детально описать пространственно-временные изменения молекул при их взаимодействиях. Предсказано и подтверждено экспериментально существование новых соединений, например, молекул H_3 и NH_4 (есть основание ожидать, что существуют молекулы H_4, H_5). Физика вторглась в область химии, и соответствующие ее разделы (квантовая химия) стали теоретической основой этой области науки. Появилась квантовая биохимия, квантовая фармакология и др.

2. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

Прежде чем ввести важнейшее понятие волновой функции, обратимся к классическому эксперименту. Всем хорошо известна электронно-лучевая трубка, применяемая в осциллографах, в дисплеях и телевизорах. В этих трубках генерируемые катодом и формируемые электрическими и магнитными полями электронные пучки (все устройство называют *электронной пушкой*) направляются на светящиеся под ударами электронов экраны. На пути от источника до экрана электроны ведут себя как классические частицы и их движение можно описать и рассчитать средствами классической механики и электродинамики.

Однако если на пути летящих в трубке электронов поставить одну или две щели, то после прохождения их через эти щели на светящемся экране наблюдается чередование темных и светлых полос. Получающаяся картина аналогична дифракционной, образующейся после прохождения через щели плоской световой волны. Значит, электроны, встречая на своем пути экраны с щелями, способны дифрагировать, т.е. ведут себя подобно волнам. Но волны эти необычны. Если выпускать из пушки по одному электрону, а на месте экрана поставить приборы, способные регистрировать удар лишь одного электрона (электронные умножители), то в каком бы месте за экраном ни был поставлен соответствующий приемник, всегда отмечается действие не части, а всего электрона. Электрон продолжает оставаться частицей, но его попадание в то или иное место экрана (или, более точно, вероятность попадания) определяется свойствами некоторой волны. При этом вероятность попадания, подобно энергии волны, определяется квадратом амплитуды такой гипотетической волны.

Мы не можем точно сказать, какой электрон куда попадет, мы можем указать его положение с определенной вероятностью. Чтобы это было понятно, рассмотрим классический наглядный пример.

Вы производите из закрепленного ружья большое число выстрелов. Если расстояние достаточно велико, то никогда все пули в одно место не попадут, всегда будет разброс: большая часть — в середину, но некоторые пули отлетят вправо и влево.

Представим себе, что мы следим за каждой пулей в отдельности. Чем больше произведено выстрелов, тем большее число пуль попадет в середину, но обязательно какая-то часть попадет и не в середину. Предсказание распределения пуль можно сделать, когда введено понятие вероятности.

Если первоначально плоская световая волна несла энергию только в направлении ее распространения, то за щелью этот энергетический поток разделится по направлениям, отвечающим углам, определяющим максимумы дифракционной картины. Если поток подлетающих к экрану электронов несет энергию, то после дифракции на щели он распадется, и поток энергии распределяется в пространстве подобно свету. Каждый отдельный электрон ведет себя как целая частица, и лишь вероятность направления его полета подчиняется правилам, аналогичным правилам дифракции плоской волны на щели.

Такое своеобразное поведение электронов можно учесть, если формально сопоставить с электроном некоторую волну (назовем ее *волной вероятности*).

Соответствующая гипотеза была выдвинута французским физиком Л. де Бройлем, предположившим, что каждая частица может быть сопоставлена с волной, длина которой определяется соотношением $\lambda = \hbar / p$, где p — классический импульс частицы. Развивая идеи Л. Де Бройля, Э. Шредингер ввел понятие *волновой функции*. Считая, что число электронов в некоторой области пространства пропорционально квадрату ее амплитуды (вспомним, что в обычной волне плотность энергии также пропорциональна квадрату амплитуды), можно не только объяснить дифракционные эксперименты с электронами, но и количественно описать их.

Волна имеет число математический смысл, и представление о ней нужно только для того, чтобы предсказать реально наблюдаемое распределение электронов в пространстве после прохождения их через щель или отверстие в экране.

Здесь мы имеем совершенно новую ситуацию. До сих пор предполагалось, что характеристики, вводимые для описания состояния тел (их координаты, скорости, ускорения), могут быть непосредственно измерены приборами и в этом смысле также являются наблюдаемыми. Волна де Бройля (подобно волновой функции) сама по себе принципиально не наблюдаема и служит лишь удобным средством описания.

Это не значит, конечно, что введение представления о волновых свойствах электронов есть чисто математический прием. Наоборот, как раз проявление в соответствующих экспериментах нового физического качества, которое не может быть понято в рамках классических представлений, приводит к необходимости ввести и новые средства математического описания этих представлений.

Если воспользоваться понятием волны вероятности (волновой функции) и считать, что такая волна обладает рядом свойств обычных, например, механических волн, то многие факты сразу же получают простое объяснение.

Например, если электрон находится в атоме, т.е. в ограниченной области пространства, то должны существовать своеобразные стоячие волны вероятности (рис. 3).

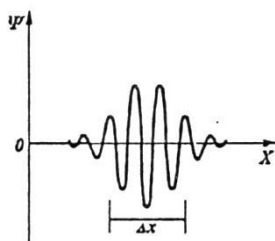


Рис. 3. Схематическое изображение волнового пакета

Как известно, в обычных стоячих волнах их энергия сосредоточена в местах пучностей. Значит, должны быть и определенные области, где вероятность пребывания электрона также наибольшая (т.е. существуют стационарные области локализации электронов). Далее, длины стоячих волн и их энергии обладают свойством дискретности. Это сразу приводит к выводу о возможности существования дискретных энергетических состояний электронов в атомах.

Для волн выполняется принцип суперпозиции. Оказывается, что это имеет место и для волн вероятности и объясняет, в частности, появление повышенной электронной плотности между атомами в молекуле водорода, что и приводит к устойчивости молекулы.

При рассмотрении дифракции световых волн отмечалось, что в тех случаях, когда длина волны становится много меньше размеров отверстий в экранах, волновыми свойствами можно вообще пренебрегать и пользоваться представлениями геометрической или корпускулярной оптики.

Длины волн де Бройля становятся очень малыми при больших импульсах частиц, т.е. для тяжелых частиц. Волновые свойства таких частиц заметить практически невозможно. Поэтому можно пользоваться классической механикой.

Если предсказать точное местоположение частицы можно только с определенной вероятностью, описываемой квадратом модуля волновой функции $|\psi|^2$ (обозначение волновой функции ψ), то безразлично, будет ли математически волна ψ описываться действительными или мнимыми (комплексными) величинами. Однако квадрат ее модуля $|\psi|^2$ должен быть всегда действительным, так как эта величина определяет наблюдаемый результат.

На этом этапе развития физики был введен важнейший принцип — *принцип соответствия*.

При формулировке физической теории могут быть введены любые понятия, в том числе и не наблюдаемые экспериментально, но необходимо, чтобы эти наблюдаемые величины или понятия выражали непосредственно наблюдаемые классические величины. Мы вводим волновую функцию ψ , но наблюдать ее непосредственно не в состоянии: она обслуживает математический аппарат, с ее помощью производятся какие-то расчеты. Затем, зная эту величину ψ , можно вычислить квадрат этой функции. Он указывает вероятность обнаружить, что электрон, летящий в направлении щели, попадает в какую-то точку экрана. Можно поставить фотопластинку и на ней будет след — черная точка. Этот след мы можем наблюдать.

Результат любого эксперимента всегда классический. Принцип соответствия говорит: любая теория должна вернуть Вас к классике.

Поэтому в общем случае $|\psi|^2 = \psi \psi^*$, где ψ^* — комплексно сопряженная функция. Многие волновые функции являются комплексными. Если квадрат модуля волновой функции $|\psi|^2 = \psi \psi^*$ описывает вероятность пребывания частицы в некоторой области пространства, то в этой области $|\psi|^2$ резко возрастает (рис. 3). Такое образование называется *волновым пакетом*. Если на пути волнового пакета встретится щель, то пакет должен дифрагировать. Известно, что волновой пакет можно представить как сумму гармонических синусоидальных волн. Приписать определенную частоту и импульс можно лишь одиночной гармонической волне. Значит, для волнового пакета импульс «размыт» в некотором интервале. Нельзя говорить и об определенной области локализации частицы, так как волновой пакет не имеет резких границ.

Чем более узким является волновой пакет, тем больше число гармонических волн надо просуммировать, чтобы описать его. Если уменьшать возможный интервал значений координаты Δx , что соответствует созданию таких условий, когда волновой пакет сужается, то одновременно будет увеличиваться разброс Δp возможных значений импульса, т.е. снижается точность его измерения, и наоборот.

Это правило было сформулировано В. Гейзенбергом в виде *соотношения неопределенностей*:

$$\Delta p \Delta x \approx \hbar.$$

Это соотношение необходимо для понимания многих особенностей физики микромира. В частности, оно приводит к важнейшему следствию: *микрочастицы не могут покоиться*. В самом деле, если $\Delta x \rightarrow 0$, то $\Delta p \rightarrow \infty$, т.е. возрастает разброс кинетической энергии и, в частности, возрастает ее максимальное значение. Поэтому, во-первых, в атомах и молекулах и при температуре 0°K сохраняются движения электронов около ядра, ядер друг относительно друга в молекулах (нулевые колебания). Во-вторых, чем меньше область пространства, в которой находятся частицы, тем большая энергия требуется для их удержания. Поэтому, например, появляющиеся внутри ядра при некоторых внутриядерных процессах электроны не могут удержаться в области ядер и вылетают наружу (β -распад).

Соотношение неопределенностей фундаментальное. Оно, в частности, дает понять, почему вообще существует молекула. Рассмотрим простейшую молекулу водорода (рис. 4). Она состоит из двух атомов водорода и электронов. Ядра отталкиваются друг от друга. Чтобы они не разлетались, необходимо, чтобы они притягивались к отрицательному заряду. Должна быть повышенная электронная плотность в середине. Тогда будет притяжение к этому отрицательному облаку, и молекула будет существовать. Это расстояние определяет место локализации электрона. Если начинается сближение ядер, то уменьшается разброс координаты Δx , т.е. мы загоняем электрон в более узкую часть пространства. Но тогда растет импульс, частица начинает двигаться с большей скоростью. Ее становится трудно удержать в этом пространстве, она будет стремиться вылететь из него. Надо уменьшить скорость, но тогда придется увеличить Δx . В результате и молекула начинает существовать как геометрическое тело, когда между атомами устанавливается вполне определенное расстояние.

Прямым отражением принципа неопределенностей Гейзенберга является факт существования в молекулах вполне определенных длин связей.

Отмеченная выше связь между точностью измерения координат и импульсов микрочастиц не встречается в классической физике, в частности в классической механике. В ней полагается, что каждая из характеристик — координата, скорость, импульс — не зависима одна от другой и что соответствующие величины можно измерить с любой наперед заданной точностью, все дело только в том, насколько совершенны приборы.

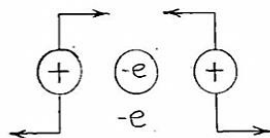


Рис. 4. Молекула водорода

Обсуждаемую связь между измерением координат и импульсов можно пояснить следующей наглядной аналогией. Представим себе, что некоторое тело движется вдоль линейки с делениями. Сфотографируем это тело в некоторый момент времени с выдержкой, отвечающей интервалу времени Δt . На фотографии получится резкое изображение неподвижного фона (линейки) и несколько размытое изображение предмета. Эта размытость будет тем большей, чем больше была выдержка, т.е. интервал Δt , и скорость движения предмета. При сильном размытии изображения предмета теряется возможность точно ответить на вопрос, где находился предмет в выбранный момент времени. Увеличивается, однако, точность измерения скорости, которая может быть определена по величине размытия, отнесенного к интервалу времени Δt .

Чтобы точно определить местоположение предмета, надо уменьшить выдержку. Если сделать эту выдержку очень малой, то при не слишком больших скоростях получим резкое изображение предмета на фоне линейки. Однако при этом полностью теряется возможность отличить движущийся предмет от неподвижного.

Взаимосвязь между возможностью одновременного измерения координат и импульсов и переход к вероятностному описанию поведения микрочастиц приводят еще к ряду важных следствий. В классической физике вводилось понятие траектории, которая для материальной точки представлялась бесконечно тонкой линией. Для микрочастиц понятие траектории в классическом смысле не применимо. Можно говорить лишь о том, с какой вероятностью будет находиться частица в определенном месте пространства через определенный промежуток времени.

Эта вероятность всегда меньше 100 %. Вместо траектории (тонкой линии) получается некоторая область, в каждой точке которой с определенной вероятностью может находиться частица. Вероятность — это не точность. Например, когда мы бросаем монету, вероятность того, что выпадет орел или решка $\sim 50\%$. Но даже в этом случае мы не можем предсказать результат одного бросания. Принять такую точку зрения психологически было трудно. Известен спор, который проходил между Н. Бором и А. Эйнштейном, почти до конца их жизни. Н. Бор стоял на позициях вероятностного описания и говорил, что это есть новая физика и это надо с самого начала учитывать. А. Эйнштейн же считал, что это не новая физика, а недостаток наших знаний. Сохранилась его знаменитая фраза: «Я не могу поверить, чтобы Бог играл в кости».

Поэтому при описании поведения микрочастиц не пользуются понятиями скорости и ускорения, поскольку они теснейшим образом связаны с понятием траектории. Нет смысла сохранять и понятие силы, действующей на частицу, так как нет определенной точки приложения этой силы. Однако сохраняется понятие потенциала, потенциальной энергии и функции. Понятие кинетической энергии также сохраняется, хотя изменяется соответствующее ей математическое выражение.

Все это привело к необходимости ввести новое уравнение движения. Вид этого уравнения был найден Э. Шредингером. Базирующаяся на уравнении Шредингера механика называется *волновой* или *квантовой механикой*. В этой механике уравнение Шредингера играет ту же фундаментальную роль, что и уравнение Ньютона в классической.

3. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

В квантовой механике состояние системы характеризуется волновой функцией ψ , зависящей от координат и времени. Квадрат модуля волновой функции $|\psi|^2$, взятый при данных значениях координат и времени, равен плотности вероятности того, что эти координаты окажутся в результате их измерения равными вычисленным значениям.

Волновая функция удовлетворяет дифференциальному уравнению движения Шредингера. Для совокупности взаимодействующих частиц с потенциальной функцией U оно имеет вид, где суммирование проводится по всем частицам. Символом i обозначена мнимая единица. Классическая потенциальная функция взаимодействующих частиц при переходе к квантовой механике сохраняется без изменений.

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{k=1}^N \frac{1}{m_k} \left(\frac{\partial^2 y}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2 y}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2 y}{\partial z_k^2} \right) + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

Если потенциальная функция системы от времени не зависит, то уравнению Шредингера удовлетворяет произведение

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \exp(-iEt / \hbar),$$

причем функция $\psi(x, y, z)$ зависит только от координат системы. Параметр E есть *собственное значение* стационарного уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{k=1}^N \frac{1}{m_k} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_k^2} \right) + U\psi = E\psi.$$

В результате решения этого уравнения находят собственные (возможные) значения параметра E и соответствующие ему решения, называемые *собственными функциями*. Физический смысл параметра E заключается в том, что он передает допустимые для данной системы значения полной энергии, получаемые в результате экспериментов, связанных, в частности, с обменом энергией системы с внешней средой.

Для любого уравнения Шредингера, соответствующего конкретной системе, существует бесконечное множество значений параметра E . Эти значения могут быть как непрерывными (для свободно движущихся частиц), так и дискретными, если частицы локализованы в малой области пространства.

Дискретные значения E называются *уровнями энергии*. Для каждого собственного значения E_n существует своя собственная функция ψ_n . Если собственные значения E_n всегда действительные, то собственные функции могут быть как действительными, так и комплексными. Такое различие E_n и ψ_n объясняется тем, что все наблюдаемые характеристики определяются не собственной функцией, а квадратом ее модуля или другими математическими выражениями, в которые обязательно входят либо произведения функции на комплексно-сопряженную ей функцию, либо аналогичные произведения функций на их производные. Соответствующие комбинации всегда оказываются действительными.

Удовлетворяющие уравнению Шредингера волновые функции для разных собственных значений $n \neq m$ ортогональны.

Это значит, что

$$\int \psi_n^* \psi_m dV = 0.$$

Интегрирование ведется по всей области задания функций.

Физический смысл ортогональности заключается в том, что система может находиться в состоянии либо с энергией E_n , либо E_m , но не в двух состояниях одновременно. Собственные функции непрерывны, причем ни одна из ψ_n не может обращаться в бесконечность. Собственные функции подчиняются *условию нормировки*, выражаемому равенством

$$\int |\psi_n|^2 dV = 1.$$

Смысл этого равенства заключается в том, что полная вероятность обнаружить частицу или систему частиц во всей области, где они заведомо существуют (так как $\psi_n \neq 0$), равна единице.

Важнейшую роль в квантовой механике играет понятие оператора физической величины. *Оператором* называется символическое изображение совокупности любых математических действий, производимых над функцией. Например, если функция $f_1(x)$ умножается на число или другую функцию $f_2(x)$, то это число или функция является оператором. Если производится дифференцирование, то оператором является символ d/dx или $\partial/\partial x$. Дифференциальные операторы выступают не сами по себе, а лишь в сочетании с соответствующими функциями, на которые они действуют.

Результат действия таких операторов меняется в зависимости от последовательности расположения оператора и функции. Например,

$$\frac{d}{dx}(f_1 f_2) \neq f_1 \frac{d}{dx} f_2.$$

В квантовой механике каждой наблюдаемой физической величине сопоставляется свой оператор. Так, оператором x -компоненты импульса является символ $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, оператором энергии — оператор \hat{H} и т.д.

В квантовой механике выполняется принцип суперпозиции, который проявляется в том, что для всех операторов имеется равенство

$$\hat{o}(f_1 + f_2) = \hat{o}f_1 + \hat{o}f_2,$$

где символом \hat{o} обозначен произвольный оператор. В математике такие операторы называются *линейными*.

Степени операторов определяются как операторы, действие которых равно последовательному действию оператора-основания на функцию столько раз, каков показатель степени оператора.

Конец ознакомительного фрагмента.
Приобрести книгу можно
в интернет-магазине
«Электронный универс»
e-Univers.ru