

## § 29. Электромагнитный механизм дифракции микрочастиц на монокристаллах.

На первый взгляд, в рамки обычных классических представлений не укладывались закономерности, которые проявлялись при отражении любых микрочастиц от граней совершенных монокристаллов. Частицы проявляли себя так же, как и рентгеновские лучи с длиной волны, равной длине волны де Бройля  $\frac{h}{mv}$ , для которых выполнялись условия Вульфа-Брэгга при отражении от кристаллических плоскостей. Особенно знаменательным было то, что существование гипотетических волн микрочастиц (волн материи) было предсказано де Бройлем за два года до экспериментов по дифракции микрочастиц на монокристаллах. Попробуем произвести анализ этого явления, ставшего поначалу сенсационным и необычным, а в дальнейшем просто роковым для судеб физики.

При рассмотрении каких бы то ни было моделей дифракции микрочастиц в результате их взаимодействия с внешними макрообъектами следует учитывать, прежде всего, те экспериментальные данные, которые можно отнести к разряду *твердо установленных фактов*. К настоящему времени с высокой степенью точности и воспроизводимости результатов констатируется следующее:

1. Явления дифракции характерны для микрочастиц любой природы – электронов, протонов, нейтронов, а также для атомов и молекул, за что их и нарекли своеобразными *волнами материи*. Наличие у частиц заряда или его отсутствие может сказаться на коэффициенте отражения, но не на характере дифракционной картины. Здесь, пожалуй, можно опустить из рассмотрения, например, эффекты рассеяния  $\pi$ -мезонов на протонах, которые также предполагается интерпретировать с точки зрения дифракционных механизмов.

2. Дифракция микрочастиц имеет в общем случае не поверхностный, а скорее объемный характер, обнаруживаясь при прохождении через монокристаллы, облете препятствий. В случае же отражения от поверхности монокристаллов картина дифракции в большей степени определяется физической природой монокристалла и в меньшей степени – состоянием его поверхности, в частности, процессами адсорбции или концентрацией дефектов на поверхности. Последние можно рассматривать как малые возмущения к основной картине дифракции на монокристалле, обусловленной его структурой.

3. Доминирующим фактором дифракции является величина относительной скорости между микрочастицей и макрообъектом. Если же говорить точнее, то для системы координат, связанной с монокристаллом, главным является импульс микрочастицы. Но эксперимент можно поставить так, что монокристалл будет двигаться с некоторой скоростью навстречу частицам. В том случае, когда будут двигаться навстречу друг другу и микрочастица, и монокристалл, не совсем ясно, что понимать под длиной

волны де Бройля в разных системах отсчета, не говоря уже о механизме возникновения такой волны.

4. В данных экспериментах отмечается поразительная корреляция положения дифракционных максимумов от кристаллографических характеристик макрообъектов-мишеней, от взаимной ориентации векторов импульса микрочастицы и кристаллической решетки.

Последнее обстоятельство традиционно является самым сильным доводом в пользу сложившейся концепции *корпускулярно-волнового дуализма*, а также обоснованием де-бройлевского формализма. Оставляя вне критики исходные пункты квантовой механики, основанные Борном, де Бройлем, Бором, Шредингером, Гейзенбергом и др. и приведшие, в конце концов, к возникновению целых направлений в фундаментальных исследованиях (от квантовой химии до прикладной математики), можно попытаться дать альтернативные интерпретации дифракционных механизмов и моделей.

Стало уже почти общим утверждение о *нематериальности* волн де Бройля, т.е. их существование оценивается почти исключительно с позиций эффективности математической модели. Можно согласиться, что это действительно фантастично и плодотворно, но, с точки зрения материальной физики, выглядит не вполне достаточной и непротиворечивой моделью. Отметим лишь некоторые принципиальные моменты:

1. Волнам де Бройля присущ широкий спектр необычных свойств – *вакуумная дисперсия*, пространственная локализация, необычные соотношения групповой и фазовой скоростей. Неясна даже гипотетически их природа, и, как следствие, "волны де Бройля не имеют ничего общего с волнами, рассматриваемыми в классической физике" [10]. Если волны де Бройля – это лишь статистическое (общепринятое) описание движения микрочастиц, то ведь должен, кроме количественного статистического описания, присутствовать реальный "природный" механизм рассеяния, который хотя бы приблизительно способен был объяснять наличие дифракции.

2. Мягко говоря, дискуссионным подходом к проблеме можно было бы назвать решительное *нерассмотрение* электромагнитной природы взаимодействия микрочастиц с макрообъектом. При условиях, сопутствующих явлениям дифракции, вряд ли могут быть отменены (и не отменяются) законы классической механики и электродинамики. Тем не менее, в рамках де-бройлевских моделей электростатическое взаимодействие с периодическими полями кристаллической решетки никак не отражается. Это не может не вызвать вопросов, потому что, например, при различных твердотельных эффектах, связанных с миграцией электронов по решетке, такие взаимодействия в основном только и рассматриваются. При этом вполне естественным выглядит требование того, чтобы распределение электронных облаков имело ту же самую пространственную периодичность,

которая характерна в целом для атомов кристалла.<sup>1</sup> Здесь достаточно вспомнить соответствующие теоремы Блоха и Ванье [11].

3. Среди экспериментальных данных, наглядно отражающих *кристаллографию* мишеней, обычно привлекают внимание эффекты каналирования электронов и протонов вдоль атомных плоскостей, а также эффекты теней от плоскостей кристалла. Получающиеся при этом картинки, сходные с дифракционными, находят, как известно, совершенно ясные объяснения вне де-бройлевского формализма. Наконец, стоит заметить, что микрочастице вовсе не обязательно мигрировать сквозь кристалл, чтобы провзаимодействовать с его периодическими полями, поскольку структура таких полей посредством электромагнитных полей может быть "прощупана" еще на подлете к поверхности монокристалла. Ни для кого же, в конце концов, не является секретом, что силовое электромагнитное взаимодействие между частицами происходит непрерывно и на любых расстояниях, хотя, возможно, и с разной интенсивностью в зависимости от конкретных условий.

4. Поскольку мерой механического движения, определяющей динамические свойства тел, является импульс – вполне закономерно связывать дифракцию, явно или неявно, с величиной  $p$ . Каким бы образом падающий пучок не коллимировался и не монохроматизировался, все равно приходится иметь дело со статистической физикой, т.к. различные частицы испытывают рассеяние в существенно отличающихся случайных условиях. Даже если принимать за основу некую локальную микроскопическую модель рассеяния, то пришлось бы учитывать, например, возможности рассеяния вблизи атомов и в междоузлиях или иные факторы влияния. Если же рассматривать процесс рассеяния на всем кристалле сразу (модель *большой молекулы*), тогда обмен импульсом с кристаллом может иметь разброс в широком диапазоне значений, определяемых спектральным распределением электронов кристалла по импульсам. Таким образом, приходится иметь дело с функциями распределения либо по координатам или углам, либо по импульсам.

Из корреляционной теории, получившей существенные результаты спустя 10-20 лет после работ де Бройля, Дэвиссона и Джермера, можно было

---

<sup>1</sup> По Интернету как-то приключился ехидный запрос: а нейтронография, а нейтроны? На встречный вопрос: а магнитный момент, а внутренняя зарядовая структура нейтронов? – больше вопросов не было. Действительно, если заряд мы еще только начинаем постигать, то что мы можем толковать о структуре элементарных частиц. Складывается такое впечатление, что де Бройль поначалу пытался представить себе электрон в виде бильярдного шара, который с треском отскакивает от кристалла. Не получилось. Ну, тогда – волна. Если есть желание выстраивать образные ассоциации, то электрон – это, скорее, шарик для пинг-понга, налетающий на небоскребы Манхеттена. Обмен импульсом имеет место, но только посредством полей или волн. Существенным фактом является то, что обмен осуществляется дискретным образом, и в этом “виноват” гармонический анализ Фурье, а точнее – периодическая структура кристалла, которую “видит” электрон. Мы часто употребляем словосочетание – акустическая модель физического вакуума (эфира). Так что электрон, скорее всего, “слышит” все эти строго регулярные “кварталы большого города”.

бы позаимствовать ряд полезных идей. Математический аппарат стохастических процессов, основанный на Фурье-преобразованиях, это - канонические разложения случайных функций в ряды Фурье, формулы Хинчина-Винера, спектральные разложения корреляционных функций с дискретным или непрерывным спектрами [12].

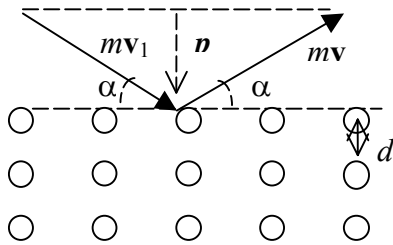


Рис. 29.1. Схема резонансного отражения (дифракции) частицы от поверхности монокристалла.

Итак, попытаемся все-таки проанализировать сложный механизм, управляющий дифракцией микрочастиц на монокристаллах. Как известно, явление дифракции микрочастиц заключается в появлении резких дифракционных максимумов при отражении пучка частиц от монокристаллов в случае выполнения условий Вульфа-Брэгга (рис. 29.1):

$$2d \sin \alpha = n\lambda_D, \quad (29.1)$$

где  $d$  - постоянная кристаллической решетки,  $\alpha$  - угол скользющего падения,  $n$  - порядок дифракционного максимума,  $\lambda_D = \frac{h}{mv}$  - длина волны де Бройля налетающих частиц.

Ситуация может несколько проясниться, если приведенные условия Вульфа-Брэгга переписать в несколько иной форме, а именно:

$$2p \sin \alpha = 2p_n = \frac{nh}{d} = n\hbar k, \quad (29.2)$$

где  $2p_n$  - величина, на которую изменяется нормальная по отношению к поверхности компонента импульса микрочастицы при зеркальном отражении от поверхности монокристалла,  $n\hbar k$  - дискретный спектр нормальной компоненты импульса электронов кристаллической решетки,  $k = \frac{2\pi}{d}$  - модуль волнового вектора обратной решетки. В таком виде записи формулы Вульфа-Брэгга просматривается определенный резонанс при обмене нормальной компонентой импульса между налетающей частицей и электронной плазмой кристаллической решетки, т.е. действует закон сохранения проекции суммарного импульса на нормаль к поверхности монокристалла. При этом проекция импульса налетающей частицы на

плоскость, совпадающую с гранью монокристалла, может сохраниться автоматически при равенстве углов падения и отражения.

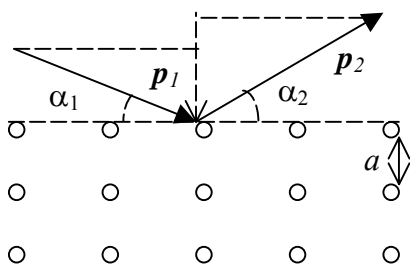


Рис. 29.2. Схема отражения частицы от монокристалла при различных углах падения и отражения.

Однако угол падения может быть и не равен углу дифракции (рис. 29.2). При этом условия дифракции (29.1) несколько видоизменяются:

$$2a(p_2 \cos \alpha_2 - p_1 \cos \alpha_1) = n\lambda_D, \quad (29.3)$$

где  $a$  – постоянная кристаллической решетки в направлении, перпендикулярном поверхности кристалла. При переходе к импульсам это же соотношение запишется в виде

$$p_2 \cos \alpha_2 - p_1 \cos \alpha_1 = n\hbar k. \quad (29.4)$$

Как мы видим, это соотношение уже не похоже на закон Вульфа-Брэгга, а именно: здесь отсутствует коэффициент 2, и угол падения не равен углу отражения.

В завершение сказанного следует отметить, что спектр компонент импульсов электронов кристаллической решетки может быть найден методом простого Фурье-анализа функций распределения электронов решетки по координатам и по импульсам. Ранее Альфредом Ланде [13] также обращалось внимание на то, что дифракция микрочастиц может быть объяснена без искусственной и неэкономной гипотезы о волновой природе частиц, а определенными механическими свойствами всей кристаллической решетки в целом, дискретной передачей импульсов телом, имеющим периодическую структуру. Однако многие работы А. Ланде остались без должного внимания.

### § 30. Функции распределения электронной плотности

С целью успешного применения статистических методов описания электронных процессов, происходящих в атомах, вспомним некоторые моменты из статистической физики.

При статистическом описании состояние системы изображается точкой в соответствующем фазовом пространстве (фазовая точка с координатами  $p$  и  $q$ ). Изменение состояния системы изображается траекторией фазовой точки в фазовом пространстве – фазовой траекторией.

Благодаря использованию фазового пространства законы изменения состояния системы могут быть сформулированы на геометрическом языке.

Основным положением статистической физики является утверждение о возможности определить функцию распределения (или плотность вероятности состояний)  $w(p,q)$  из общих соображений, в том числе и из геометрических для систем, находящихся в состоянии термодинамического равновесия, т.е. не решая уравнений движения для отдельных частиц.

Согласно теореме Лиувилля [14] функция распределения является интегралом движения системы, т.е. остается постоянной, если импульсы  $p$  и координаты  $q$  изменяются в соответствии с уравнениями движения механики Гамильтона, т.е. каноническими уравнениями. При этом фазовый объем системы (объем в переменных  $p$  и  $q$ ) в результате ее естественного движения остается постоянным. Это свойство можно выразить при помощи интеграла

$$\int d\Gamma = \int dp dq = const, \quad (30.1)$$

где  $d\Gamma$  обозначает элемент объема фазового пространства.

Рассмотрим наиболее общие свойства функции распределения  $w$ . В статистической механике для полного описания состояния движения частицы достаточно указать вероятность, с которой координата частицы лежит в области от  $q$  до  $q + dq$ , и одновременно ее импульс – в интервале от  $p$  до  $p + dp$ , т.е. в некотором элементе объема фазового пространства  $dq dp$ , или в декартовых координатах –  $dx dy dz dp_x dp_y dp_z$ .

В случае стационарных процессов, когда система частиц находится в термодинамическом равновесии и в стационарном состоянии, возможно использование стационарной функции распределения только по координатам  $w(x,y,z)$ . Принимая во внимание тот факт, что функция распределения по своей величине является принципиально неотрицательной, т.е.  $w(x,y,z) \geq 0$ , ее можно выразить в комплексном пространстве через вспомогательную комплексную функцию (комплексную амплитуду)  $\Phi(x,y,z)$  посредством выражения

$$w(x, y, z) = |\Phi(x, y, z)|^2 = \Phi^* \Phi. \quad (30.2)$$

С использованием функции распределения  $w(x,y,z)$  средняя потенциальная энергия электрона по области его движения определяется через объемный интеграл

$$\langle U \rangle = \int U(x, y, z) w(x, y, z) dV \quad (30.3)$$

или, с учетом выражения (30.2),

$$\langle U \rangle = \int \Phi^* U \Phi dV. \quad (30.4)$$

Функция распределения, как правило, нормируется посредством интеграла

$$\int w(x, y, z) dV = \int \Phi^* \Phi dV = 1. \quad (30.5)$$

Таким образом, задача на нахождение функции распределения электронной плотности  $w(x, y, z)$  в атомах сводится к отысканию некоторой комплексной характеристической функции  $\Phi(x, y, z)$ , через которую могут быть определены не только плотность вероятности местопребывания электронов в атомах, но также и, как будет показано в дальнейшем, целый ряд интегралов движения. С целью вычисления функции  $\Phi(x, y, z)$  необходимо составить для нее дифференциальное уравнение, максимально используя при этом всю известную нам заранее информацию об атомах. Для этого можно воспользоваться известными из классической механики законами сохранения определенных динамических величин (например, полной энергии  $E$ , модуля полного механического момента  $L$ , а также проекции механического момента на ось симметрии атома  $L_z$ ).

### § 31. Геометрический способ доказательства теоремы Лиувилля

Рассмотрим теорему Лиувилля с геометрической точки зрения с использованием пучков частиц, например, электронов.

Допустим, что один и тот же пучок частиц предстоит сфокусировать в фокальной плоскости в малое пятно при помощи электронных линз  $L_1$  и  $L_2$  с разными фокусными расстояниями  $F_1$  и  $F_2$  (рис. 31.1). При этом  $F_2$  больше  $F_1$ .

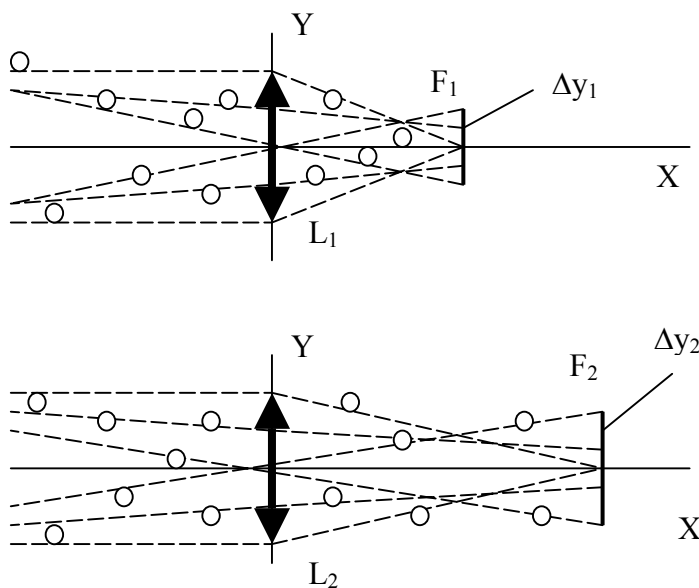


Рис. 31.1. Фокусировка частиц с помощью электронных линз  $L_1$  и  $L_2$ .

Вполне понятно, что размер пятна  $\Delta y$  в фокальной плоскости электронной линзы будет пропорционален углу расходимости пучка  $\theta$ , так называемому *эмиттансу* пучка [15], и фокусному расстоянию линзы.

Существенно заметить, что в фокальную плоскость электроны будут влетать под большими углами, чем это было на входе электронной линзы. Другими словами, разброс в величине проекций импульсов  $\Delta p_y$  в фокальной плоскости будет больше, чем  $\Delta p_y$  на входе линзы. Из геометрических соображений понятно, что если фокусное расстояние  $F_2$  линзы в два раза больше, чем  $F_1$ , то размер пятна  $\Delta y$  будет в два раза больше. Однако разброс частиц по проекциям импульсов  $\Delta p_y$  будет в два раза меньше, поскольку электроны будут влетать в фокальную плоскость в случае длиннофокусной линзы под углами в два раза меньшими (рис.31.1). Стараясь сконцентрировать частицы в меньшей области  $\Delta y$ , мы при помощи электромагнитных полей сообщаем им дополнительные проекции импульсов  $\Delta p_y$ .

Таким образом, для данного пучка частиц будет всегда выполняться соотношение

$$\Delta p_y \Delta y = const \quad (31.1)$$

независимо от фокусного расстояния электронной линзы. Это означает, что фазовый объем пучка частиц при движении его в силовых полях остается постоянным, что и составляет сущность теоремы Лиувилля.

Используемые соотношения справедливы как для пучков частиц, так и для лучей света. Расходимость пучка частиц или луча света связана с принципиальной невозможностью сведения их в точку в фокальной плоскости объектива или электронной линзы. При этом полная ширина расходимости  $\theta$  пучка или луча определяется по уровню  $\frac{1}{e}$  с помощью формулы

$$\theta = \frac{d}{F}, \quad (31.2)$$

где  $d$  – диаметр пятна по уровню  $\frac{1}{e}$  в фокальной плоскости фокусирующей системы.

В качестве основных следствий теоремы Лиувилля можно привести следующие:

1. В силу статистического разброса проекций импульсов на плоскость, перпендикулярную пучку, частицы невозможно сфокусировать в точку никакими электронными линзами.

2. Невозможным является также создание абсолютно параллельных, т.е. без расходимости, пучков частиц и лучей света.

3. Яркость источника невозможно увеличить при помощи каких-либо оптических устройств.



4. Благодаря статистическому разбросу проекций импульсов на любую заданную ось, вероятность падения электронов на ядра атомов является ничтожно малой.

К этому можно также добавить, что среднеквадратичный момент импульса электронов в атомах не может равняться нулю, а может принять лишь некоторое минимально возможное значение согласно исходному фазовому объему свободных электронов

$$\Delta\Omega = \Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z. \quad (31.3)$$

В эксперименте это проявляется в появлении у электронов в атомах минимального механического момента порядка постоянной Планка  $\hbar$  (спин электрона).

На практике, для того чтобы послать луч света на большое расстояние с малой угловой расходимостью или сконцентрировать его на большом расстоянии в малое пятно, необходимо предварительно этот луч с помощью оптики увеличить в диаметре. В противном случае при очень малой апертуре оптического устройства луч света на расстоянии попросту разойдется во все стороны. Это также является одним из следствий теоремы Лиувилля.

## § 32. Загадка постоянной Планка

На протяжении XX века физики ломали голову над тем: чем обусловлена величина постоянной Планка  $\hbar$  или постоянной тонкой структуры  $\alpha$ . Какова природа  $\hbar$ ? Или это квант действия  $\Delta S$ , введенный Планком в атомную физику, или механический момент  $L$  в атомах, который следует из уравнения Шредингера, или величина, определяющая длину волны де Бройля  $\hbar/mv$ , или величина, определяющая импульс электрона  $\hbar k$  в кристаллах, или спин элементарных частиц  $s$ , кратный  $\hbar/2$ , или минимальный фазовый объем  $\Delta\Omega$  в статистической физике микромира и т.д.? Вопросов накопилось, как мы видим, немало. Попробуем в этом разобраться.

В соответствии с теоремой Лиувилля постоянная Планка  $\hbar$  может действительно претендовать на минимально возможный фазовый объем для функции распределения электронов по координатам и импульсам в самых разнообразных прикладных задачах. В декартовых координатах элементарный фазовый объем  $\Delta\Omega$  выглядит так:

$$\Delta\Omega = \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (32.1)$$

при этом проекции импульсов  $p_x, p_y, p_z$  и координаты частицы  $x, y, z$  рассматриваются как независимые динамические переменные.

Каким же образом формируется в природе такой минимальный фазовый объем, который мы не можем ни при каких обстоятельствах обратить в нуль?

Чтобы это понять, необходимо учесть стохастический характер движения электронов в эфире, атомах, молекулах и т.д. Свободные электроны не просто летят по прямым траекториям, а постоянно подвержены воздействию электромагнитных флуктуаций физического вакуума, т.е. так называемых “нулевых колебаний” вакуума. На более простом классическом языке это можно выразить так: электроны подвержены воздействию случайных волн эфира, которые заставляют электроны “дрожать”, т.е. совершать своеобразное броуновское движение в вакууме.

В результате таких воздействий импульсы и координаты электронов уже изначально разбросаны случайным образом вблизи некоторых средних значений, измеряемых в экспериментах. По этой причине, например, невозможно все электроны при помощи кулоновского поля направить точно в центры атомных ядер. Фигурально выражаясь, можно сказать, что электрон всегда выступает в роли “плохого стрелка”. Подавляющее большинство электронов, наверняка “промахнувшись”, пройдут где-то вблизи ядер, однако будут захвачены кулоновским полем ядер и продолжат случайное движение в окрестности этих ядер. Примерная картина такого движения для атома водорода представлена на рис.32.1.

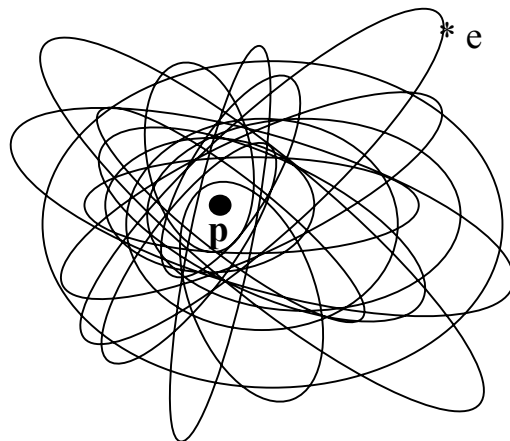


Рис.32.1. Случайный характер движения электрона в атоме водорода, находящегося в основном, т.е. низшем энергетическом состоянии, за большой промежуток времени.

Поскольку минимальный фазовый объем  $\Delta\Omega$  для атомных масштабов достаточно велик, а размеры ядер очень малы, то лишь очень редким электронам удастся угодить в ядро, да и то, заведомо, не в “десятку”, поскольку вероятность такого события практически равна нулю.

Из схемы движения электрона хорошо видно, что для центральных полей фазовый объем и орбитальный механический момент для  $e$  отдельной траектории тесно связаны между собой.

В силу полной сферической симметрии среднее значение орбитального механического момента электрона в основном состоянии атома равно нулю, чего нельзя сказать про среднеквадратичное значение этого же момента.

Согласно теореме вириала для центрального кулоновского поля средние значения кинетической энергии  $K$  и потенциальной энергии  $U$  электрона связаны между собой следующим образом:

$$\langle K \rangle = -\frac{\langle U \rangle}{2}. \quad (32.2)$$

В декартовых координатах это выглядит так:

$$\frac{\langle p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \rangle}{2m} = \left\langle \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right\rangle. \quad (32.3)$$

Для среднеквадратичных отклонений  $\Delta x_{ck}$  с учетом того, что в силу сферической симметрии  $\langle \Delta p_x^2 \rangle = \langle \Delta p_y^2 \rangle = \langle \Delta p_z^2 \rangle$  и  $\langle \Delta x^2 \rangle = \langle \Delta y^2 \rangle = \langle \Delta z^2 \rangle$  из соотношения (32.3) получаем

$$\langle \Delta p_x^2 \rangle \Delta x_{ck} = A, \quad (32.4)$$

где константой  $A$  обозначены все коэффициенты в (32.3).

С другой стороны, согласно теореме Лиувилля минимально допустимый фазовый объем  $\Delta\Omega = h$  накладывает свои ограничения на величины  $\Delta x$  и  $\Delta p_x$

$$\langle \Delta p_x^2 \rangle \langle \Delta x^2 \rangle \geq h^2. \quad (32.5)$$

Подставляя значение  $\langle \Delta p_x^2 \rangle$  из (32.5) в (32.4), получаем

$$\Delta x_{ck} \geq A^{-1} h^2. \quad (32.6)$$

Из неравенства (32.6) следует, что размеры атомов в среднем не могут быть меньше некоторой величины, определяемой минимально возможным фазовым объемом  $\Delta\Omega = h$ . Поскольку произведение  $\Delta p_{ck} \Delta r_{ck}$  определяет и механический момент электрона относительно ядра, то среднеквадратичное значение этого момента не может быть сколь угодно малой величиной, а должно быть порядка постоянной Планка  $h$ .

Поскольку в основном состоянии атома водорода электрон совершает только случайное броуновское движение вокруг ядра, средние значения момента количества движения и его проекций на некоторые выделенные оси обращаются в нуль. Такое состояние движения электрона в атоме называют  $s$ -состоянием. Однако если такой атом поместить в магнитное поле, то у электрона может появиться ненулевая проекция механического момента на выделенную ось, которая может быть определена статистическими методами. Это будет рассмотрено в разделе о спине электрона в § 37.