

Министерство образования Республики Беларусь

Учреждение образования
«Полоцкий государственный университет»

С. А. Вабищевич, Н. В. Вабищевич, Н. А. Опарина

ФИЗИКА

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ
ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ
ЭЛЕМЕНТЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Учебно-методический комплекс
для студентов технических специальностей

Новополоцк
ПГУ
2008

УДК 53(075.8)
ББК 22.3я73
В12

Рекомендовано к изданию методической комиссией радиотехнического факультета в качестве учебно-методического комплекса (протокол № 2 от 25.10.2007)

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

заслуженный деятель науки Республики Беларусь, проф., д-р техн. наук,
зав. лаб. Белорус. Межвуз. центра структур. исслед. при БГУ В. П. ГОЛЬЦЕВ;
проф. каф. физики УО «Полоцкий государственный университет» Г. М. МАКАРЕНКО;
ст. преп. каф. физики УО «Полоцкий государственный университет» Г. А. ДУБЧЕНОК

Вабищевич, С. А.

В12 Физика : Основы квантовой физики. Элементы квантовой статистики. Элементы физики твердого тела : учеб.-метод. комплекс / С. А. Вабищевич, Н. В. Вабищевич, Н. А. Опарина. – Новополоцк : ПГУ, 2008. – 180 с.
ISBN 978-985-418-644-3.

Представляет собой заключительную часть общей физики и содержит два модуля: «Квантовая природа излучения. Элементы квантовой физики» и «Элементы квантовой статистики. Физика твердого тела». Составлен на основании учебной программы по курсу «Общая физика» и включает в себя краткие теоретические сведения, примеры решения задач и задачи для самостоятельного решения.

Предназначен для студентов технических специальностей.

УДК 53(075.8)
ББК 22.3я73

ISBN 978-985-418-644-3

© Вабищевич С. А., Вабищевич Н. В.,
Опарина Н. А., 2008

© УО «Полоцкий государственный университет», 2008

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
УЧЕБНЫЙ МОДУЛЬ 7. КВАНТОВАЯ ПРИРОДА ИЗЛУЧЕНИЯ.	
ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ	6
Учебно-методическая структура модуля	7
Методическая программа модуля	7
УБ-1. КВАНТОВЫЕ СВОЙСТВА ИЗЛУЧЕНИЯ	8
1.1. Краткое содержание теоретического материала	10
1.2. Методические указания к лекционным занятиям	20
1.3. Методические указания к практическим занятиям	21
1.4. Примеры решения задач	22
1.5. Задачи для самостоятельного решения	25
УБ-2. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ	29
2.1. Краткое содержание теоретического материала	31
2.2. Методические указания к лекционным занятиям	43
2.3. Методические указания к практическим занятиям	44
2.4. Примеры решения задач	45
2.5. Задачи для самостоятельного решения	47
УБ-3. ЭЛЕМЕНТЫ АТОМНОЙ ФИЗИКИ	53
3.1. Краткое содержание теоретического материала	54
3.2. Методические указания к лекционным занятиям	86
3.3. Методические указания к практическим занятиям	87
3.4. Примеры решения задач	88
3.5. Задачи для самостоятельного решения	91
УЧЕБНЫЙ МОДУЛЬ 8. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ.	
ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА	98
Учебно-методическая структура модуля	98
Методическая программа модуля	99
УБ-1. КВАНТОВЫЕ СТАТИСТИКИ ФЕРМИ – ДИРАКА И БОЗЕ – ЭЙНШТЕЙНА	99

1.1. Краткое содержание теоретического материала	101	
1.2. Методические указания к лекционным занятиям	120	
1.3. Методические указания к практическим занятиям	121	
1.4. Примеры решения задач	122	
1.5. Задачи для самостоятельного решения	125	
УБ-2. ЗОННАЯ ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА.		
КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ		127
2.1. Краткое содержание теоретического материала	129	
2.2. Методические указания к лекционным занятиям	168	
2.3. Методические указания к практическим занятиям	170	
2.4. Примеры решения задач	171	
2.5. Задачи для самостоятельного решения	173	
ЛИТЕРАТУРА	179	

ВВЕДЕНИЕ

Предлагаемый комплекс содержит систему взаимосвязанных средств обучения на основе действующей программы по физике.

Данное пособие содержит два модуля. Каждый модуль содержит учебную и методическую программы, краткое содержание теоретического материала, примеры решения задач, задачи для самостоятельного решения, а также список основной и дополнительной литературы.

Успехи и перспективы большинства наукоемких отраслей промышленности основаны на достижениях квантовой физики, что определяет ее огромное значение в формировании естественно-научного мировоззрения современного, прогрессивно мыслящего инженера. Настоящее пособие не претендует на освещение всех проблем современной физики твердого тела и квантовой механики, а преследует цель ознакомления студентов инженерно-технических специальностей с основами квантово-механических методов описания свойств различных сред и процессов, протекающих в них. Основное внимание уделяется базовым вопросам, входящим в программу курса общей физики и определенным образовательными стандартами соответствующих специальностей. Для студентов, заинтересовавшихся данной темой и желающих получить более широкое представление по рассматриваемым проблемам, предложен список дополнительной литературы.

УМК разработан доцентом кафедры физики УО «ПГУ» Вабищевичем С. А. и старшими преподавателями Опариной Н. А. и Вабищевич Н. В.

УЧЕБНЫЙ МОДУЛЬ 7. КВАНТОВАЯ ПРИРОДА ИЗЛУЧЕНИЯ. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ

Физической основой квантовой физики является корпускулярно-волновой дуализм, представляющий собой основное и универсальное свойство материи. Согласно указанному принципу любой волне в природе соответствует частица и наоборот – любая частица в природе способна проявлять свойства волны. При этом физические величины, характеризующие волну (волновой вектор \vec{k} и частота ω) и частицу (энергия E и импульс \vec{p}) связаны между собой соотношениями $E = \hbar\omega$ и $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. К настоящему времени обнаружено большое количество экспериментальных фактов, подтверждающих корпускулярно-волновой дуализм материи. Квантовая физика является более общей теорией по сравнению с классической физикой. Квантовая теория незаменима при решении задач, характеризующих системы микрочастиц. Законы указанной теории позволили выяснить строение электронных оболочек атомов, установить природу химической связи, понять строение и свойства атомных ядер. Многие физические свойства материи смогли быть объяснены детально только с появлением квантовой физики.

Рассмотренные ранее оптические явления интерференции, дифракции, дисперсии и поляризации света показали, что свет обладает *волновыми* свойствами.

Однако последующее изучение взаимодействия света с веществом выявило, что свету, помимо указанных волновых свойств, присущи еще и другие свойства, которые можно считать атрибутами частиц, локализованных в определенном объеме, обладающих определенной массой, импульсом и энергией. В связи с этим возникло новое представление о свете как о квантах, рассматривая световой поток как поток своеобразных частиц – *квантов* света.

Представление о том, что и частицам присущи волновые свойства, принадлежит Луи Де Бройлю (1924 г.). Де Бройль предположил, что с потоком частиц связан некоторый волновой процесс, который оказывает влияние на поведение частиц и обуславливает целый ряд их свойств, несовместимых со свойствами частиц как корпускул. Наличие у частиц волновых свойств делает невозможным применение для их описания механики Ньютона. Теория, которая учитывает волновые свойства частиц, получила название *квантовой*. Основное уравнение квантовой физики, которое выполняет ту же роль, что и второй закон Ньютона в классической механике, называется уравнением Шредингера.

Учебно-методическая структура модуля

Модуль 7. Квантовая природа излучения. Элементы квантовой физики		
УБ-1. Квантовые свойства излучения	УБ-2. Элементы квантовой физики	УБ-3. Элементы атомной физики
<ul style="list-style-type: none"> • понятие кванта излучения и его массы • импульс и энергия кванта излучения • характеристики теплового излучения • фотоэффект • эффект Комптона • давление света 	<ul style="list-style-type: none"> • волна де Бройля для частиц • соотношения неопределенностей • волновая функция • среднее значение величин • уравнение Шредингера • частица в потенциальной яме • квантовый гармонический осциллятор • туннельный эффект 	<ul style="list-style-type: none"> • постулаты Бора • квантовые числа • спектр атома водорода • водородоподобные атомы • связь атомов в молекулах, спектры атомов и молекул • рентгеновское излучение • лазер

Методическая программа модуля

№ п/п	Тема занятия	Тип занятия	Вид занятия	Часы
1.	Квантовая природа света. Понятие массы, импульса и энергии кванта излучения	формирование новых знаний и систематизация навыков	лекция и практическое занятие	1/0,5
2.	Тепловое излучение и его законы	формирование новых знаний	лекция и практическое занятие	2/1
3.	Фотоэффект и его законы	углубление и систематизация знаний навыков	лекция и практическое занятие	1/0,5
4.	Эффект Комптона	формирование новых знаний	лекция и практическое занятие	1/1
5.	Давление света	углубление и систематизация навыков	лекция и практическое занятие	1/1
6.	Корпускулярно-волновой дуализм частиц. Гипотеза де Бройля. Соотношение неопределенностей	формирование новых знаний	лекция и практическое занятие	2/1
7.	Статистический смысл волновой функции. Временное и стационарное уравнение Шредингера	формирование новых знаний	лекция и практическое занятие	2/1
8.	Частица в потенциальной яме. Квантовый гармонический осциллятор. Туннельный эффект	формирование новых знаний	лекция и практическое занятие	2/1

9.	Теория Бора для атома водорода. Спектр атома водорода	углубление и систематизация навыков	лекция и практическое занятие	2/1
10.	Атом водорода в квантовом описании. Квантовые числа. Уравнение Шредингера для атома водорода	формирование новых знаний	лекция и практическое занятие	2/1
11.	Спектры водородоподобных атомов и молекул	формирование новых знаний	лекция и практическое занятие	1/1
12.	Рентгеновские спектры. Многоэлектронные атомы	формирование новых знаний	лекция	1
13.	Периодический закон Д. И. Менделеева	углубление и систематизация навыков	лекция и практическое занятие	1/1
14.	Вынужденное излучение. Лазеры	формирование новых знаний	лекция	2

УБ-1. Квантовые свойства излучения

Введение

Учебный блок посвящен рассмотрению вопросов, связанных с явлениями, в которых в полной мере проявились корпускулярные свойства света – тепловое излучение, фотоэффект, эффект Комптона и давление света. В рассматриваемых явлениях свет ведет себя как поток частиц – *фотонов*. Согласно гипотезе Планка энергия фотона равна $E = h\nu$, и в соответствии с соотношением для массы и энергии $E = mc^2$, можно записать

$$h\nu = mc^2.$$

Отсюда для *массы фотона* в рамках корпускулярных представлений получаем выражение

$$m = \frac{h\nu}{c^2}.$$

Следует отметить, что в отличие от обычных частиц (электрон, протон и т.п.) фотон обладает нулевой массой покоя. Иными словами, квант электромагнитного излучения существует, только распространяясь со скоростью света. *Импульс фотона* равен

$$p = mc = \frac{h\nu}{c^2} \cdot c = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}.$$

Однако такие явления, как интерференция и дифракция света, могут быть объяснены только на основе волновых представлений. Таким образом, свет проявляет *корпускулярно-волновой дуализм* или двойственность свойств: в одних явлениях проявляется его волновая природа, в других – свет ведет себя как поток частиц.

При изучении данного раздела студенты должны

иметь представление:

- об основных характеристиках движениях и связях между ними (импульс, энергия, давление);
- об основных характеристиках колебательного движения – период, частота, фаза, амплитуда;
- о волновых процессах, уравнении волны.

обладать навыками:

- применения элементов дифференциального и интегрального исчисления;
- о способах решения дифференциальных уравнений второго порядка и интегральном исчислении.

Учебная программа блока

№ п/п	Содержание блока	Форма подготовки *	Литература
1	Масса фотона. Импульс и энергия фотона. Тепловое излучение Основные характеристики теплового излучения. Абсолютно черное тело. Законы излучения абсолютно черного тела. Формула Планка. Оптическая пирометрия	л	[1] – §36.4, §35.1 – 35.3 [2] – §24.1 – 24.3, §25.5
2	Внешний фотоэффект. Законы фотоэффекта	с	[1] – §36.1, §36.2 [2] – §25.2 – 25.4
3	Эффект Комптона. Давление света	л	[1] – §36.4 – 36.6 [2] – §25.5 – 25.6

Форма подготовки: л – лекция; с – самостоятельная работа

Цели обучения

Что должен знать	Что должен уметь
<ul style="list-style-type: none"> • Основные характеристики и законы теплового излучения. Основные способы (оптическая пирометрия) определения температуры нагретых тел • Корпускулярно-волновой дуализм света. Фотоны и их характеристики • Законы внешнего фотоэффекта • Физическую сущность явлений внешнего фотоэффекта, эффекта Комптона и давления света 	<ul style="list-style-type: none"> • Определять энергию, импульс, массу световых квантов • Вычислять основные характеристики теплового излучения нагретого тела • Рассчитывать характеристики фотоэлектронов, пользуясь законами фотоэффекта • Вычислять давление света на поверхность • Пользоваться законами, подтверждающими корпускулярные (квантовые) свойства света

1.1. Краткое содержание теоретического материала

Тепловое излучение. Основные характеристики теплового излучения. Абсолютно черное тело

Тепловое излучение представляет собой электромагнитное излучение тел, которое возникает за счет внутренней энергии тела, характеристики которого зависят от температуры и оптических свойств тела.

Для описания теплового излучения используются следующие характеристики:

1. *Поток излучения* Φ – энергия, излучаемая за единицу времени с поверхности тела электромагнитными волнами всех частот и по всем направлениям.

2. *Энергетическая светимость* r_T – поток энергии, излучаемый единицей поверхности излучающего тела по всем направлениям (в пределах телесного угла 2π) по всем частотам (длинам волн) излучения:

$$r_T = \frac{\Phi}{S} \quad (1)$$

3. *Спектральная плотность излучения* $r_{\lambda T}$ – представляет собой мощность излучения с единичной площади поверхности тела, приходящая на единичный интервал длин волн вблизи данной длины волны λ . Функция распределения $r_{\lambda T}$ характеризует распределение мощности излучения по спектру излучения тела. Спектральная плотность излучения и энергетическая светимость связаны соотношением

$$r_{\lambda T} = \frac{dr_T}{d\lambda}, \quad (2)$$

где dr_T – энергетическая светимость тела при температуре T в диапазоне длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$. Из соотношения следует, что

$$dr_T = r_{\lambda T} d\lambda.$$

Очевидно, что для определения энергетической светимости тела при данной температуре r_T необходимо воспользоваться соотношением

$$r_T = \int_0^{\infty} r_{\lambda T} d\lambda.$$

Вместо распределения энергии по интервалам длин волн $r_{\lambda T}$, можно воспользоваться распределением по частотам $r_{\omega T}$: $dr_T = r_{\omega T} d\omega$, но поскольку

$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$, то связь между интервалами частот и длин волн

$$d\omega = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda. \quad (3)$$

Очевидно, что $dr_T = r_{\omega T} d\omega = r_{\lambda T} d\lambda$, поэтому с учетом (3)

$$r_{\omega T} = r_{\lambda T} \left| \frac{d\lambda}{d\omega} \right| = r_{\lambda T} \left| -\frac{\lambda^2}{2\pi c} \right| = r_{\lambda T} \frac{\lambda^2}{2\pi c}. \quad (4)$$

Поэтому расчет спектральных плотностей излучения тела осуществляется в соответствии с формулой (4).

4. *Поглощательная способность* – отношение потока энергии, поглощенной телом к потоку, падающему на тело

$$a_{\lambda T} = \frac{\Phi_{\lambda T}^{\text{погл}}}{\Phi_{\lambda T}^{\text{пад}}}, \text{ или } a_T = \frac{\Phi_T^{\text{погл}}}{\Phi_T^{\text{пад}}}. \quad (5)$$

Тело, которое при любой температуре поглощает всю энергию падающего на него электромагнитного излучения, называется *абсолютно черным телом (АЧТ)*; для него $a_{\lambda T} = 1$. Абсолютно черное тело представляет собой идеальную физическую модель. В природе таких тел нет. Большинство реальных тел являются *серыми*; для них $a_{\lambda T} < 1$. Однако некоторые тела в определенных условиях могут по своим свойствам приближаться к абсолютно черному телу. Физические величины, характеризующие излучательную способность черного тела, для наглядности принято в формулах обозначать большими буквами R_T и $R_{\lambda T}$.

Законы излучения абсолютно черного тела. Формула Планка

Если имеется несколько тел, нагретых до различной температуры, то спустя некоторое время произойдет выравнивание температур, даже если передача теплоты конвекцией и теплопроводностью исключена. Горячие тела путем излучения передают холодным больше энергии, чем получают от них, и так до тех пор, пока не наступит *равновесное состояние*. В состоянии термодинамического равновесия у тел, обменивающихся энергией лишь путем излучения и поглощения, отношение энергетической светимости тела к его поглощательной способности является постоянной величиной, не зависящей от природы тел, и для всех тел выражается одной и той же функцией длины волны и температуры:

$$\left(\frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}} \right)_1 = \left(\frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}} \right)_2 = \dots = \left(\frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}} \right)_i = R_{\lambda T}. \quad (6)$$

Соотношение (6) называется *законом Кирхгофа*. Функция $R_{\lambda T}$ представляет собой *спектральную плотность излучения* абсолютно черного тела. В интегральном виде закон Кирхгофа записывается следующим образом:

$$\frac{r_T}{a_T} = R_T, \quad (7)$$

где R_T – энергетическая светимость абсолютно черного тела.

Задача о нахождении математического выражения функции $R_{\lambda T}$ спектральной плотности излучения абсолютно черного тела являлась основной в теории излучения. Зависимости $R_{\lambda T}$ от λ и T , согласующиеся с опытными данными, удалось получить М. Планку в 1900 г. Для этого ему пришлось предположить, что испускание и поглощение веществом электромагнитного излучения происходит порциями, или *квантами*, энергия которых пропорциональна частоте излучения, т.е.

$$E = h\nu,$$

где $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка.

Вид функции $R_{\lambda T}$, теоретически установленной М. Планком, описывает спектр излучения абсолютно черного тела

$$R_{\lambda T} = \frac{4\pi^2 \hbar c^2}{\lambda^5 \left(\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1 \right)}, \quad \text{где } \hbar = \frac{h}{2\pi}. \quad (7)$$

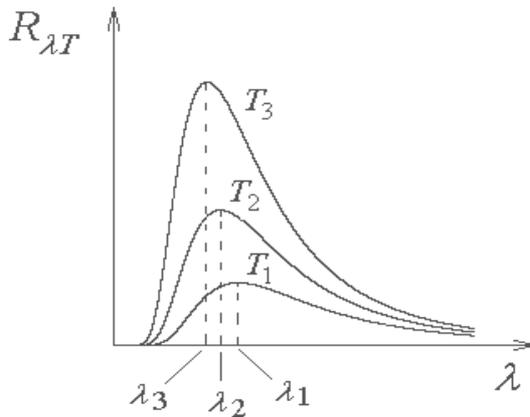


Рис. 1.1

Графики функции $R_{\lambda T}$ для различных температур представлены на рис. 1.1 ($T_1 < T_2 < T_3$). Воспользовавшись соотношением (4), можно получить соотношение для $R_{\omega T}$:

$$R_{\omega T} = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2 \left(\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1 \right)}.$$

Из формулы Планка (4) следуют основные законы теплового излучения:

1. *Закон Больцмана*: энергетическая светимость черного тела пропорциональна четвертой степени температуры

$$R_T = \sigma T^4, \quad (8)$$

где $\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8}$ Вт/(м²К) – постоянная Стефана – Больцмана.

2. *Закон смещения Вина* устанавливает связь длины волны λ_m , соответствующей максимуму спектральной плотности излучения абсолютно черного тела с температурой тела T

$$\lambda_m = \frac{b}{T}, \quad (9)$$

где $b = 2,9 \cdot 10^{-3}$ м·К – постоянная Вина. Согласно данному закону с увели-

чением температуры тела максимум функции $R_{\lambda T}$ смещается в коротковолновую область (рис. 1.1), т.е. $\lambda_3 < \lambda_2 < \lambda_1$.

3. *Максимальная спектральная плотность* излучения черного тела возрастает пропорционально пятой степени температуры

$$R_{\lambda T}^{\max} = b' T^5, \quad (10)$$

где $b' = 1,9 \cdot 10^{-5} \text{ Вт}/(\text{м}^3 \text{ К}^5)$.

Оптическая пирометрия

Оптической пирометрией называется совокупность оптических методов измерения температуры, основанных на законах теплового излучения. Приборы, применяемые для этого, называются *пирометрами*.

В выражения (8), (9) и (10) входит температура излучающего тела. Поэтому любое из данных выражений может быть использовано для нахождения температуры раскаленных тел. Пирометры подразделяются на три основные группы: *радиационные*, *яркостные* и *цветовые* пирометры [4].

В *радиационных* пирометрах регистрируется интегральное (полное) излучение исследуемого нагретого тела. Температура, определяемая пирометром, называется радиационной T_p и связана с истинной температурой тела T соотношением

$$T = \frac{T_p}{\sqrt[4]{a_T}},$$

где a_T – поглощательная способность тела при данной температуре.

В *яркостных* пирометрах температура определяется на основе сравнения излучения светящегося тела с излучением абсолютно черного тела на одном и том же фиксированном участке спектра.

В *цветовых* пирометрах определяется максимум спектральной плотности излучения серого тела λ_m , который совпадает с максимумом для абсолютно черного тела. По формуле (9) определяют температуру тела.

В соответствии с *квантовой* (корпускулярной) гипотезой Планка, решившей проблему теплового излучения, также объясняются такие явления как *фотоэффект*, *эффект Комптона*, способность света оказывать *давление*.

Фотоэффект. Законы фотоэффекта

Фотоэффектом (внешним) называется явление испускания электронов веществом под действием света. Электроны, вылетающие из вещества при внешнем фотоэффекте, называются *фотоэлектронами*, а электрический ток, образуемый ими при упорядоченном движении во внешнем электрическом поле, называется *фототоком*.

Схема установки по изучению фотоэффекта представлена на рис. 1.2.

Катод К, покрытый исследуемым металлом, освещается монохроматическим светом, проходящим через окно О. Напряжение U между анодом и катодом регулируется с помощью потенциометра и измеряется вольтметром V. Две батареи B_1 и B_2 включены навстречу друг другу и позволяют не только изменять величину, но и знак напряжения U . Фототок измеряется гальванометром G.

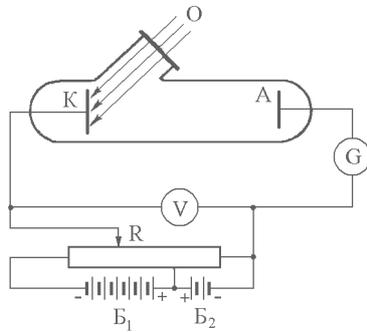


Рис. 1.2

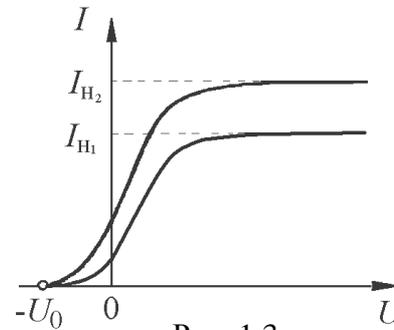


Рис. 1.3

На рис. 1.3 изображены зависимости фототока от напряжения, соответствующие различным энергетическим освещенностям катода. Частота света одинакова. Существование фототока в области отрицательных напряжений объясняется тем, что фотоэлектроны, выбитые светом из катода, обладают отличной от нуля начальной кинетической энергией. За счет уменьшения этой энергии электроны могут совершать работу против сил задерживающего электрического поля и достигать анода.

Исследования А. Г. Столетова привели к установлению основных закономерностей фотоэффекта:

1. Сила фототока насыщения прямо пропорциональна падающему световому потоку (энергетической освещенности катода);
2. Максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов не зависит от интенсивности падающего света, а определяется лишь частотой падающего монохроматического света и растет с увеличением частоты;
3. Для каждого вещества существует минимальная частота, называемая красной границей фотоэффекта, при которой еще возможен фотоэффект.

Второй и третий выводы из закономерностей внешнего фотоэффекта возможно истолковать лишь на основе квантовых представлений о свете. А. Эйнштейн, развивая идеи М. Планка, высказал гипотезу, что свет не только излучается, но распространяется и поглощается веществом в виде отдельных дискретных квантов электромагнитного излучения – *фотонов*. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта выражает закон сохранения энергии в фотоэффекте при условии, что квант света полностью поглощается свободным электроном в металле:

$$h\nu = A + \frac{mV_{\max}^2}{2}, \quad (11)$$

$$h\nu = A + E_K,$$

где A – работа выхода электрона из материала, m и v_{\max} – соответственно масса электрона и его максимальная скорость, $h\nu$ – энергия падающего кванта света, E_K – кинетическая энергия электрона.

Максимальную скорость электронов можно определить также по величине тормозящей разности потенциалов, при которой фототок обращается в нуль

$$\frac{mv_{\max}^2}{2} = eU_0. \quad (12)$$

В этом случае можно записать

$$h\nu = A + eU_0; \quad U_0 = \frac{h\nu}{e} - \frac{A}{e}.$$

Зависимость $U_0(\nu)$ изображена на рис. 1.4.

Работа выхода электронов из материала не зависит от частоты падающего света и может быть определена по таблицам, если известен материал, из которого выбиваются электроны, либо по частоте излучения, соответствующей красной границе фотоэффекта ν_k (рис. 1.4):

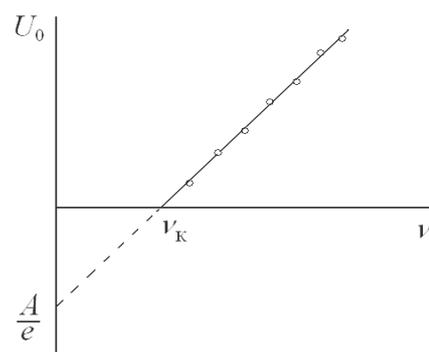


Рис. 1.4

$$A = h\nu_k = \frac{hc}{\lambda_k}. \quad (13)$$

Расчет кинетической энергии фотоэлектронов зависит от энергии падающего излучения: если энергия кванта света сравнима с энергией покоя электрона, то выбиваемый в ходе фотоэффекта электрон является релятивистской частицей. На практике считается, что при энергиях фотонов менее 5 кэВ фотоэлектрон является классической частицей, максимальную кинетическую энергию которой можно рассчитать по формуле

$$E_K = \frac{mv_{\max}^2}{2}.$$

При энергиях фотонов, вызывающих фотоэффект, свыше 5 кэВ электрон может развивать скорости близкие к скорости света в вакууме. В этом случае, согласно специальной теории относительности, кинетическая энергия фотоэлектронов рассчитывается как

$$E_K = E - E_0 \quad \text{или} \quad E_K = mc^2 - m_0c^2,$$

при этом $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v_{\max}^2}{c^2}}}$, где m_0 – масса покоя электрона, v_{\max} – максимальная скорость электрона.

При решении задач в указанном случае можно

пренебречь работой выхода электрона из металла как заведомо малой по сравнению с кинетической энергией частицы.

Внутренний фотоэффект. Применение фотоэффекта

В полупроводниках и диэлектриках помимо внешнего фотоэффекта наблюдается *внутренний фотоэффект*, состоящий в том, что под действием света увеличивается число свободных носителей заряда. В результате электропроводность вещества увеличивается. Это явление называют *фотопроводимостью*. Особый интерес представляет *вентильный фотоэффект* (фотоэффект в запирающем слое), состоящий в возникновении электродвижущей силы вследствие внутреннего фотоэффекта вблизи поверхности контакта между металлом и полупроводником или двумя полупроводниками *p*- и *n*-типа.

Фотоэффект широко используется в науке и технике для регистрации и измерения световых потоков, для непосредственного преобразования энергии света в энергию электрического тока, для преобразования световых сигналов в электрические. Приборы, действие которых основано на использовании фотоэлектрического эффекта, называются фотоэлементами. Вакуумный фотоэлемент представляет собой эвакуированный стеклянный баллон, часть внутренней поверхности которого покрыта слоем металла, играющим роль фотокатода. В качестве анода используются металлическое кольцо или редкая сетка, также находящиеся внутри баллона. Фотоэлемент включается в цепь аккумуляторной батареи. При освещении катода из него вследствие внешнего фотоэффекта выбиваются электроны, и в цепи возникает фотоэлектрический ток. Величина ЭДС батареи выбирается такой, чтобы фототок был равен току насыщения. В зависимости от спектрального состава света используются фотоэлементы, катоды которых изготовлены из различных материалов. Например, для регистрации видимого света и инфракрасного излучения применяют фотоэлементы с кислородно-цезиевым катодом; для регистрации коротковолновой части видимого света и ультрафиолетового излучения применяют фотоэлементы с сурьмяно-цезиевым катодом. Интегральная чувствительность вакуумных фотоэлементов, равная отношению фототока насыщения к световому потоку, падающему на катод, не превосходит 150 мкА/лм.

Фототок насыщения и интегральную чувствительность можно значительно увеличить путем заполнения баллона фотоэлемента разреженным инертным газом (обычно аргоном при давлениях от 0,01 до 0,1 мм рт. ст.). Такие фотоэлементы называются газонаполненными. Большая чувствительность газонаполненного фотоэлемента, чем такого же вакуумного, обусловлена увеличением числа носителей тока вследствие ударной ионизации молекул газа электронами. Газонаполненные фотоэлементы менее стабильны в работе и обладают большей инерционностью, чем вакуумные.

Для увеличения тока внутри фотоэлемента используется также явление вторичной электронной эмиссии. На этом принципе основано действие электронных умножителей.

Полупроводниковые фотоэлементы с внутренним фотоэффектом, или фотосопротивления, обладают значительно большей чувствительностью, чем описанные выше фотоэлементы, в которых используется внешний фотоэффект. Например, чувствительность фотосопротивления сульфида кадмия может достигать 1 А/лм. Фотосопротивления широко применяются для обнаружения и измерения инфракрасного и других излучений. Основным недостатком фотосопротивлений заключается в их большой инерционности, которая возрастает с увеличением чувствительности.

Наибольшее и все возрастающее применение получили вентильные фотоэлементы (фотоэлементы с запирающим слоем), действие которых основано на вентильном фотоэффекте. К их числу относятся кремниевые, германиевые, сернисто-серебряные, селеновые и другие фотоэлементы. Вентильные фотоэлементы позволяют осуществлять непосредственное преобразование лучистой энергии в электрическую: под действием освещения они возбуждают электрический ток во внешней цепи без применения какого-либо дополнительного источника ЭДС. Интегральная чувствительность этих фотоэлементов значительно больше, чем у фотоэлементов с внешним фотоэффектом. Например, максимальная интегральная чувствительность при освещении эталонным источником света с температурой 2840 К у селенового фотоэлемента равна 600 мкА/лм, у сернисто-серебряного – 8000 мкА/лм и у германиевого – 30000 мкА/лм. Вентильные фотоэлементы широко используются в фотометрии для измерения световых потоков. Кремниевые и некоторые другие вентильные фотоэлементы используются для изготовления «солнечных» батарей, преобразующих энергию солнечного света в электрическую. Кремниевые «солнечные» батареи применяются, например, для питания радиоаппаратуры на искусственных спутниках Земли и автоматических межпланетных станциях. Их КПД в настоящее время достигает 10 – 11 %. Как показывают теоретические расчеты, КПД для кремниевых батарей может быть доведен до 20 %.

Эффект Комптона

Квантовые свойства света проявляются и в эффекте, который обнаружил А. Комптон, наблюдая рассеяние рентгеновского излучения веществом – *эффект Комптона*. Фотон при столкновении со свободными

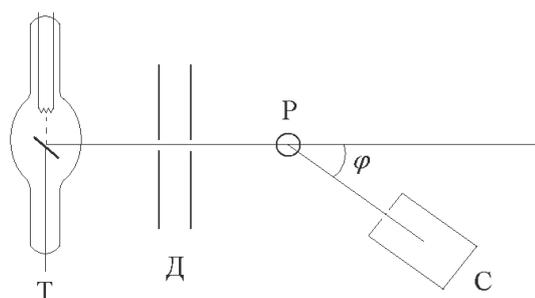


Рис. 1.5

электронами вещества передает им лишь часть своей энергии, при этом изменяется частота и направление движения фотона.

Изучение рассеяния рентгеновских лучей производится с помощью установки, схема которой изображена на рис. 1.5. Пучок рентгеновских лучей, образованных рентгеновской трубкой Т с помощью диафрагм Д, падает на рассеивающее тело Р. Под углом φ к первоначальному направлению находится диафрагма рентгеновского спектрографа С, с помощью которого регистрируется длина волны рассеянного рентгеновского излучения.

С квантовой точки зрения рассеяние света, как и при фотоэффекте, является результатом взаимодействия фотонов падающего на вещество излучения с электронами этого вещества. При этом должны выполняться законы сохранения энергии и импульса.

Согласно закону сохранения энергии

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + mc^2. \quad (14)$$

где $h\nu$ и $h\nu'$ – соответственно энергии падающего и рассеянного фотона; mc^2 и m_0c^2 – полные энергии электрона соответственно после и до столкновения с фотоном. Масса электрона m связана с массой покоя m_0 известным соотношением

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

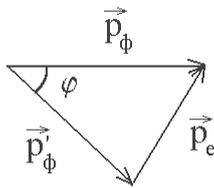


Рис. 1.6

Согласно закону сохранения импульса, векторы импульса ($p_\phi = \frac{h\nu}{c}$) падающего и рассеянного ($p'_\phi = \frac{h\nu'}{c}$) фотонов и электрона отдачи ($p_e = mv$) составляют треугольник (рис. б), поэтому

$$(mv)^2 = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2 \cdot \frac{h\nu}{c} \cdot \frac{h\nu'}{c} \cdot \cos \varphi. \quad (15)$$

Решая совместно уравнения (14) и (15), получим $\Delta\lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos \varphi)$,

или

$$\Delta\lambda = \frac{2h}{m_0c} \sin^2(\varphi/2), \quad (16)$$

где φ – угол рассеяния кванта излучения, m_0 – масса покоя электрона, c – скорость света.

Величина $\lambda_k = \frac{h}{m_0c}$ называется *комptonовской длиной волны* и представляет собой изменение длины волны при $\varphi = 90^\circ$. Если $\varphi = 0^\circ$, то $\Delta\lambda = 0$,

т.е. в направлении первичного потока квантов не происходит изменения длины волны; если $\varphi = 180^\circ$, то $\Delta\lambda = 2\lambda_k$, следовательно, в обратном направлении при рассеянии происходит наибольшее изменение энергии фотона, а электрон отдачи приобретает наибольшую кинетическую энергию и движется в направлении первичного потока фотонов.

Формула (16) показывает, что изменение длины волны $\Delta\lambda$ очень мало и не зависит от длины волны падающего излучения λ , поэтому его можно наблюдать лишь для коротких волн. Для видимого света отношение $\Delta\lambda_k/\lambda \sim 10^{-5}$ и наблюдать эффект изменения длины волны фотона при рассеянии практически невозможно.

Давление света

Наличие у фотона импульса также означает, что свет, падающий на какое-либо тело, должен оказывать на это тело *давление*, равное импульсу, сообщаемому фотонами единице поверхности в единицу времени.

Вычислим величину давления. Пусть на тело, площадь поверхности которого S , в секунду падает N квантов света с частотой ν . Коэффициент отражения равен ρ . Импульс, передаваемый поверхности отразившимися квантами равен $2\rho N \frac{h\nu}{c}$, а поглотившимися равен $(1-\rho)N \frac{h\nu}{c}$. Суммарный импульс, сообщаемый поверхности в единицу времени, равен $\Delta p = (1-\rho)N \frac{h\nu}{c} + 2\rho N \frac{h\nu}{c}$.

Световое давление определяется отношением $\frac{\Delta p}{S}$:

$$p = \frac{(1-\rho)N \frac{h\nu}{c} + 2\rho N \frac{h\nu}{c}}{S} = \frac{N h \nu}{c S} (1 + \rho) = \frac{W}{c} (1 + \rho),$$

где $W = \frac{N h \nu}{S}$ – энергетическая освещенность (облученность) поверхности.

Таким образом, *давление света* на поверхность выражается формулой

$$p = \frac{W}{c} (1 + \rho), \quad (17)$$

где W – энергетическая освещенность поверхности (энергия, падающая на единицу поверхности в единицу времени), c – скорость света, ρ – коэффициент отражения света поверхностью.

В случае, когда фотоны падают на поверхность под углом φ к нормали, световое давление можно определить из соотношения

$$p = \frac{W}{c} (1 + \rho) \cdot \cos^2 \varphi. \quad (18)$$

1.2. Методические указания к лекционным занятиям

№	Вопросы лекции	Форма изучения	Литература	Вопросы для самоконтроля студентов
1	Квантовые свойства света. Масса, импульс и энергия фотона	л/с	[1] – §36.4 [2] – §24.3 – §25.5	<ul style="list-style-type: none"> • Как можно определить массу кванта света? Запишите формулу. • Какова взаимосвязь импульса и энергии фотона? • Запишите выражения для массы и импульса фотона.
2	Тепловое излучение. Основные характеристики теплового излучения. Абсолютно черное тело. Законы излучения абсолютно черного тела. Формула Планка. Оптическая пирометрия	л	[1] – §35.1 – 35.3 [2] – §24.1 – 24.3	<ul style="list-style-type: none"> • Какое излучение называется тепловым? • Какие основные характеристики используются для описания теплового излучения? Дайте определение характеристикам. • Какое тело называется абсолютно черным? Серым? • Запишите соотношение, связывающее энергетическую светимость тела и его спектральную плотность излучения. • Нарисуйте график зависимости спектральной плотности излучения от длины волны. Что происходит с графиком зависимости при повышении температуры тела? • Сформулируйте закон Кирхгофа в интегральной форме. • Сформулируйте закон Кирхгофа в дифференциальной форме. • Запишите закон Стефана – Больцмана. • Что такое оптическая пирометрия? • Назовите основные типы пирометров.
3	Внешний фотоэффект. Законы фотоэффекта	л/с	[1] – §36.1, §36.2 [2] – §25.2 – 25.4	<ul style="list-style-type: none"> • В чем состоит явление фотоэффекта? • Каковы основные закономерности фотоэффекта? • Запишите уравнение Эйнштейна для фотоэффекта. • Что такое задерживающее напряжение? • Что называется красной границей фотоэффекта?
4	Давление света Эффект Комптона	л	[1] – §36.4 – 36.6 [2] – §25.5 – 25.6	<ul style="list-style-type: none"> • Запишите формулу для вычисления давления света. • Каков характер зависимости давления света от его интенсивности? от угла падения на поверхность? • Опишите суть эффекта Комптона. • Запишите законы сохранения энергии и импульса при рассеянии света частицей в эффекте Комптона? • На основе каких предположений удалось объяснить изменение частоты излучения при его рассеянии в эффекте Комптона? • Что такое комптоновская длина волны? • Для каких волн возможно наблюдать эффект Комптона и почему?

1.3. Методические указания к практическим занятиям

№ п/п	Тема занятия	Тип задач	Рекомендации по решению	Соответствующие задачи из сборников
1	Квантовые свойства света	Определение массы, импульса и энергии фотона	При определении массы фотона и его импульса необходимо помнить соотношения, рассмотренные ранее в специальной теории относительности: $E = mc^2$ и $E = pc$	[5] – № 19.1 – 19.8 [6] – № 23.21 – 23.25
2	Законы теплового излучения	Определение характеристик теплового излучения	<ul style="list-style-type: none"> – использовать формулы-определения основных характеристик теплового излучения (энергетическая светимость, поглощательная способность и т.д.), помня, что они применимы как для реальных тел, так и для абсолютно черного тела; – использовать законы теплового излучения (закон Кирхгофа, закон Стефана – Больцмана и закон Вина); – использовать формулу Планка для расчета энергетической светимости абсолютно черного тела 	[5] – № 18.2, 18.4 – 18.7, 18.12 – 18.16, 18.20 – 18.22 [6] – № 23.4 – 23.8, 23.10, 23.16, 23.18 – 23.20
3	Фотоэффект. Давление света. Эффект Комптона	<p>Определение красной границы фотоэффекта, максимальной скорости фотоэлектронов и задерживающего напряжения.</p> <p>Вычисление давления света, а также числа квантов падающих на поверхность.</p> <p>Расчет изменения длины волны, частоты, энергии рентгеновского излучения при рассеянии фотонов на свободных частицах</p>	<p>При решении задач на фотоэффект необходимо:</p> <ul style="list-style-type: none"> – оценить энергию фотонов, вызывающих фотоэффект с целью определения возможного характера движения электронов (классический либо релятивистский); – для расчета характеристик внешнего фотоэффекта использовать понятие красной границы фотоэффекта, задерживающего напряжения, а также уравнение Эйнштейна. <p>При определении давления света:</p> <ul style="list-style-type: none"> – помнить, что энергетическая освещенность (облученность) представляет собой энергию всех квантов, падающих на единицу площади в за единицу времени; – при описании взаимодействия кванта света с поверхностью материала использовать законы сохранения импульса и энергии (в этом случае решение задачи должно сопровождаться рисунком). <p>При решении задач на эффект Комптона:</p> <ul style="list-style-type: none"> – следует воспользоваться полученным соотношением для изменения длины волны фотона при рассеянии, а также связью между длиной волны, частотой и энергией кванта; – использовать законы сохранения импульса и энергии (в этом случае решение задачи должно сопровождаться рисунком). 	[5] – № 19.14 – 19.18, 19.21, 19.26 – 19.33 [6] – № 23.37, 23.33, 23.39, 23.26 – 23.30, 23.41 – 23.43, 23.46, 23.47, 23.49, 23.50

1.4. Примеры решения задач

Задача 1. *Исследование спектра излучения Солнца показывает, что максимум спектральной плотности энергетической светимости соответствует длине волны 500 нм. Принимая Солнце за абсолютно черное тело, определить для Солнца: а) энергетическую светимость; б) излучаемый поток энергии; в) массу всех излучаемых электромагнитных волн за 1 с.*

Решение:

а) Энергетическая светимость определяется законом Стефана – Больцмана

$$R_T = \sigma T^4. \quad (1)$$

Температура излучающей поверхности может быть определена из закона смещения Вина

$$\lambda = \frac{b}{T}.$$

Выразив температуру, $T = \frac{b}{\lambda}$ и подставив в (1), получаем

$$R_T = \sigma \left(\frac{b}{\lambda} \right)^4.$$

Произведя вычисления, находим $R_T = 64 \text{ МВт/м}^2$.

б) Поток энергии равен произведению энергетической светимости на площадь поверхности Солнца

$$\Phi = R_T S = R_T 4\pi r^2,$$

где r – радиус Солнца. Вычисляя, находим $\Phi = 3,9 \cdot 10^{26} \text{ Вт}$.

в) Определим массу электромагнитных волн, излучаемых за 1 с, применив закон, связывающий массу и энергию $E = mc^2$. С другой стороны энергия равна произведению потока на время: $E = \Phi t$. Следовательно, $mc^2 = \Phi t$, откуда

$$m = \frac{\Phi t}{c^2}. \quad (2)$$

Производя вычисления по формуле (2) найдем массу: $m = 4,3 \cdot 10^{10} \text{ кг}$.

Ответ: а) $R_T = 64 \text{ МВт/м}^2$; б) $\Phi = 3,9 \cdot 10^{26} \text{ Вт}$; в) $m = 4,3 \cdot 10^{10} \text{ кг}$.

Задача 2. *Определить с помощью формулы Планка энергетическую светимость абсолютно черного тела, приходящийся на узкий интервал длин волн $\Delta\lambda = 1 \text{ нм}$, соответствующий максимуму энергетической светимости при температуре тела $T = 3000 \text{ К}$.*

Решение: Для нахождения энергетической светимости воспользуемся формулой

$$R_{\lambda T} = \frac{4\pi^2 \hbar c^2}{\lambda^5 \left(\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1 \right)}. \quad (1)$$

Поскольку речь идет об узком интервале длин волн, то

$$\Delta R = R_{\lambda T} \Delta \lambda. \quad (2)$$

Для определения длины волны, на который приходится максимум, воспользуемся законом смещения Вина

$$\lambda = \frac{b}{T}. \quad (3)$$

Подставляя (3) в (1), и используя (2), получаем

$$\Delta R = \frac{4\pi^2 \hbar c^2 T^5 \Delta \lambda}{b^5 \left(\exp\left(-\frac{2\pi \hbar c}{kb}\right) - 1 \right)}.$$

Вычисляем энергетическую светимость $\Delta R = 3,2 \cdot 10^3 \text{ Вт/м}^2$.

Ответ: $\Delta R = 3,2 \cdot 10^3 \text{ Вт/м}^2$.

Пример 3. Натрий освещается монохроматическим светом с длиной волны 40 нм. Определить задерживающее напряжение, при котором фототок прекращается. Длина волны соответствующая красной границе фотоэффекта равна 584 нм.

Решение. Из закона сохранения энергии можно определить задерживающее напряжение как

$$U_3 = \frac{m v_{\max}^2}{2e}. \quad (1)$$

Кинетическую энергию выразим из уравнения Эйнштейна для фотоэффекта

$$\frac{m v_{\max}^2}{2} = h\nu - A. \quad (2)$$

Работа выхода

$$A = h\nu_{\kappa} = \frac{hc}{\lambda_{\kappa}}. \quad (3)$$

Поставляем (3) в (2) и получаем

$$\frac{m v_{\max}^2}{2} = hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{\kappa}} \right). \quad (4)$$

Задерживающее напряжение найдем, поставив (4) в (1)

$$U_3 = \frac{hc}{e} \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_k} \right).$$

Вычисляя, получаем $U_3 = 28,9$ В.

Ответ: $U_3 = 28,9$ В.

Пример 4. *Определить энергию электрона отдачи при эффекте Комптона, если фотон ($\lambda_0 = 100$ нм) был рассеян на угол 180° .*

Решение. Энергия электрона отдачи равна разности энергий падающего и рассеянного фотонов

$$E = h\nu_0 - h\nu = \frac{hc}{\lambda_0} - \frac{hc}{\lambda} = \frac{hc(\lambda - \lambda_0)}{\lambda_0\lambda} = \frac{hc\Delta\lambda}{\lambda_0\lambda}. \quad (1)$$

Изменение длины волны фотона в результате рассеяния на свободном электроном

$$\Delta\lambda = \frac{2h}{m_0c} \sin^2(\theta/2). \quad (2)$$

Подставив (2) в (1) и учитывая, что $\lambda = \lambda_0 + \Delta\lambda$, найдем энергию электрона отдачи.

$$E = \frac{2h^2 \sin^2(\theta/2)}{m_0\lambda \left(\lambda + \frac{2h \sin^2(\theta/2)}{m_0c} \right)}.$$

Вычисляем $E = 9 \cdot 10^{-17}$ Дж.

Ответ: $E = 9 \cdot 10^{-17}$ Дж.

Пример 5. *Давление света с длиной волны 500 нм на поверхность с коэффициентом отражения 0,3, расположенную перпендикулярно падающему свету, равно 0,2 мкПа. Определить число фотонов, падающих каждую секунду на единицу площади поверхности.*

Решение. Давление света на поверхность равно

$$p = \frac{W}{c} (1 + \rho),$$

где W – энергетическая облученность, равная энергии всех фотонов, падающих

в единицу времени на единичную поверхность, $W = Nh\nu$. Так как $\nu = \frac{c}{\lambda}$, то

$$p = \frac{Nh}{\lambda}(1 + \rho),$$

откуда число фотонов

$$N = \frac{p\lambda}{h(1 + \rho)}.$$

Вычисляя, получаем $N = 1,2 \cdot 10^{20} \text{ 1/(м}^2\text{с)}$.

Ответ: $N = 1,2 \cdot 10^{20} \text{ 1/(м}^2\text{с)}$.

1.5. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти массу фотона: 1) красного света ($\lambda = 700 \text{ нм}$); 2) рентгеновских лучей ($\lambda = 25 \text{ нм}$); 3) γ -лучей ($\lambda = 1,25 \text{ пм}$).
2. Определить в эВ пределы, в которых находится энергия фотонов, соответствующих видимой части спектра (от 400 до 800 нм).
3. Какую длину волны имеет квант света, энергия которого равна энергии электрона, ускоренного разностью потенциалов 5 В?
4. Сколько квантов содержится в излучении, энергия которого 2 мкДж? Длина волны этого излучения 600 нм.
5. Найти массу фотона, импульс которого равен импульсу молекулы водорода при температуре 20°C. Скорость молекулы считать равной средней квадратичной скорости.
6. Какую длину волны имеет квант света, энергия которого равна энергии электрона, скорость которого составляет 80 % от скорости света.
7. Определить, с какой скоростью должен двигаться протон, чтобы его импульс был равен импульсу фотона с длиной волны 0,55 мкм.
8. Определить температуру, при которой средняя кинетическая энергия молекулы двухатомного газа равна энергии фотонов, соответствующих излучению 0,6 мкм.
9. Определить, сколькими степенями свободы обладает молекула газа, средняя кинетическая энергия которой при температуре 8000 К равна энергии кванта света длиной волны 600 нм.
10. Алюминиевый шарик массой 10 г при освещении его светом с длиной волны 400 нм за 10 мин нагрелся на 1 градус. Какое количество фотонов поглощал шарик ежесекундно?

11. Поток излучения абсолютно черного тела 10 кВт. Максимум энергии излучения приходится на длину волны 0,8 мкм. Определить площадь излучающей поверхности.
12. Определить, как и во сколько раз изменится мощность излучения черного тела, если длина волны, соответствующая максимуму его спектральной плотности энергетической светимости, сместилась с 720 нм до 400 нм.
13. Черное тело находится при температуре 3000 К. При остывании тела длина волны, соответствующая максимуму его спектральной плотности энергетической светимости, изменилась на 8 мкм. Определить температуру, до которой тело охладилось.
14. Из смотрового окошечка печи излучается поток 4 кДж/мин. Определить температуру печи, если площадь окошечка 8 см².
15. При охлаждении абсолютно черного тела длина волны, соответствующая максимуму его излучения, увеличилась от 0,4 до 0,7 мкм. Во сколько раз уменьшилась при этом полная энергетическая светимость тела?
16. Определить температуру и энергетическую светимость абсолютно черного тела, если максимум энергии излучения приходится на длину волны 600 нм.
17. При увеличении температуры абсолютно черного тела в два раза длина волны, на которую приходится максимум спектральной плотности энергетической светимости, уменьшилась на 400 нм. Определить начальную и конечную температуры тела.
18. Абсолютно черное тело изготовлено в виде полости с малым отверстием радиуса 5 мм. Полость нагревают изнутри током, проходящим по вольфрамовой спирали. Нагреватель потребляет мощность 100 Вт, 10 % которой рассеивается в окружающую среду через стенки полости. Найти температуру, установившуюся внутри полости.
19. Количество лучистой энергии ежесекундно посылаемой Солнцем через площадку 1 м², расположенную перпендикулярно солнечным лучам на верхней границе земной атмосферы, называется солнечной постоянной. Определить величину солнечной постоянной, считая Солнце абсолютно черным телом с температурой поверхности 5800 К. Радиус Солнца $6,95 \cdot 10^8$ м, расстояние от Солнца до Земли $1,5 \cdot 10^{11}$ м.
20. Температура внутренней поверхности муфельной печи при открытом отверстии площадью 30 см² равна 1300 К. Принимая, что отверстие печи излучает как черное тело, определить, какая часть мощности рассеивается стенками, если потребляемая печью мощность составляет 1,5 кВт.
21. Красная граница фотоэффекта для некоторого металла 0,275 мкм. Найти: а) работу выхода электрона из этого металла; б) максимальную скорость электронов, вырываемых из металла светом длиной волны 180 нм;

- в) максимальную кинетическую энергию вырываемых электронов.
22. Красная граница фотоэффекта для цинка 310 нм. Определить максимальную кинетическую энергию фотоэлектронов в электрон-вольтах, если на цинк падает свет с длиной волны 200 нм.
23. Цинковую пластинку освещают ультрафиолетовым светом длиной волны 30 нм. Определить, на какое максимальное расстояние от пластинки может удалиться фотоэлектрон, если вне пластинки имеется задерживающее однородное электрическое поле напряженностью 10 В/см.
24. Фотон с энергией 10 эВ падает на серебряную пластину и вызывает фотоэффект. Определить импульс, полученный пластиной, если принять, что направления движения фотона и фотоэлектрона лежат на одной прямой перпендикулярной поверхности пластин.
25. На фотоэлемент с катодом из лития падает свет с длиной волны 200 нм. Найти наименьшее значение задерживающей разности потенциалов, которую нужно приложить к фотоэлементу, чтобы прекратить фототок.
26. На металлическую пластину направлен пучок ультрафиолетового излучения (0,25 мкм). Фототок прекращается при минимальной задерживающей разности потенциалов 0,96 В. Определить работу выхода электронов из металла.
27. На металлическую пластину направлен монохроматический пучок света с частотой $7,3 \cdot 10^{14}$ Гц. Красная граница фотоэффекта для данного материала 560 нм. Определить максимальную скорость фотоэлектронов.
28. Квант света длиной волны 232 нм вырывает с поверхности пластины электрон. Определить суммарный импульс, сообщаемый при этом пластине, если электрон вылетает навстречу падающему фотону. Электрон обладает энергией 2 эВ.
29. На цинковую пластину направлен монохроматический пучок света. Фототок прекращается при задерживающей разности потенциалов 1,5 В. Определить длину волны света, падающего на пластину.
30. Фотоны с энергией 5 эВ вырывают фотоэлектроны из металла с работой выхода 4,7 эВ. Определить максимальный импульс, передаваемый поверхности этого металла при вылете электрона.
31. Давление света с длиной волны 40 нм, падающего нормально на черную поверхность, равно 2 нПа. Определить число фотонов, падающих за время 10 с на площадь 1 мм^2 этой поверхности.
32. Определить коэффициент отражения поверхности, если при энергетической освещенности 120 Вт/м^2 давление света на нее оказалось равным 0,5 мкПа.
33. Давление света, производимое на зеркальную поверхность, 5 мПа. Определить концентрацию фотонов вблизи поверхности, если длина волны света, падающего на поверхность, равна 0,5 мкм.

34. На зеркальную поверхность под углом 60° к нормали падает пучок монохроматического света. Плотность потока энергии светового пучка 1 кВт/м^2 . Определить давление, производимое светом на зеркальную поверхность.
35. Человеческий глаз наиболее чувствителен к зеленому свету ($0,55 \text{ мкм}$), для которого порог чувствительности глаза соответствует 80 фотонам, падающим на сетчатку за 1 сек. Какой мощности света соответствует этот порог?
36. На расстоянии 5 м от точечного монохроматического $\lambda = 5 \text{ мкм}$ изотропного источника расположена площадка $S = 8 \text{ мм}^2$ перпендикулярно падающим пучкам. Определить число фотонов, ежесекундно падающих на площадку. Мощность излучения 100 Вт.
37. Свет с длиной волны 600 нм нормально падает на зеркальную поверхность и производит на нее давление 4 мкПа. Определить число фотонов, падающих за 10 с на площадь 1 мм^2 этой поверхности.
38. Определить энергетическую освещенность (облученность) зеркальной поверхности, если давление, производимое излучением, равно 40 мкПа. Излучение падает нормально к поверхности.
39. На зеркальную поверхность площадью 6 см^2 падает нормально поток излучения 0,8 Вт. Определить давление и силу давления света на эту поверхность.
40. Точечный источник монохроматического (1 нм) излучения находится в центре сферической зачерненной колбы радиусом 10 см. Определить световое давление, производимое на внутреннюю поверхность колбы, если мощность источника 1 кВт.
41. Определить длину волны рентгеновского излучения, если при комптоновском рассеянии этого излучения под углом 60° длина волны рассеянного света оказалась равной 57 пм.
42. Фотон с энергией 1,025 МэВ рассеялся на первоначально покоившемся свободном электроны. Определить угол рассеяния фотона, если длина волны рассеянного фотона оказалась равной комптоновской длине волны $\lambda_k = 2,43 \text{ пм}$.
43. Фотон с длиной волны 5 пм испытал комптоновское рассеяние под углом 90° на первоначально покоившемся электроны. Определить изменение длины волны фотона при рассеянии и энергию электрона отдачи.
44. Фотон с длиной волны 5 пм испытал комптоновское рассеяние под углом 90° на первоначально покоившемся электроны. Определить изменение длины волны фотона при рассеянии и импульс электрона отдачи.
45. Фотон с длиной волны 700 нм испытал комптоновское рассеяние под углом 90° на первоначально покоившемся электроны. Определить какую долю первоначальной энергии теряет при этом фотон и какую скорость приобретает электрон.

46. Фотон с энергией 0,25 МэВ рассеялся на первоначально покоившемся свободном электроны. Определить кинетическую энергию электрона отдачи, если длина волны рассеянного фотона изменилась на 20 %.
47. Фотон с энергией 0,3 МэВ рассеялся под углом 180° на свободном электроны. Определить долю энергии фотона, приходящуюся на рассеянный фотон.
48. Фотон с энергией 100 кэВ рассеялся на первоначально покоившемся свободном электроны на угол 90° . Определить энергию фотона после рассеяния.
49. Фотон с энергией 0,25 МэВ рассеялся под углом 120° на первоначально покоившемся свободном электроны. Определить кинетическую энергию электрона отдачи.
50. Найти длину волны рентгеновского излучения, если максимальная кинетическая энергия комптоновских электронов 0,19 МэВ.

УБ-2. Элементы квантовой физики

Введение

В классической механике движение материальной точки в случае одномерного движения описывается вторым законом Ньютона:

$m \frac{d^2x}{dt^2} = F_x$. Но микрочастицы обладают волновыми свойствами, поэтому

для описания движения частицы должно быть использовано другое уравнение. Это уравнение должно учитывать волновые свойства частиц, т.е. должно быть *волновым уравнением*. Для нерелятивистской частицы таким соотношением является *уравнение Шредингера*. Данный блок «Элементы квантовой физики» посвящен рассмотрению волновых свойств частиц и основным соотношениям квантовой механики – *соотношению неопределенностей Гейзенберга и уравнению Шредингера*.

При изучении данного раздела студенты должны

иметь представление:

- о квантовании энергии, импульса и др.;
- об излучении и поглощении электромагнитных волн с энергетической точки зрения;
- о гармонических колебаниях.

обладать навыками:

- применения элементов дифференциального и интегрального исчисления.
- решения дифференциальных уравнений второго порядка.

Учебная программа блока

№ п/п	Содержание блока	Форма подготовки	Литература
1	Волновые свойства частиц. Статистический смысл волн де Бройля. Соотношение неопределенностей Гейзенберга	л	[1] – §37.1 – 37.4 [2] – §26.1 – 26.3
2	Волновая функция и ее статистический смысл	л	[1] – §37.3 [2] – §27.1 – 27.2
3	Уравнение Шредингера в общем виде и для стационарных состояний	л	[1] – §37.5 [2] – §27.3
4	Частица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме	л	[1] – §37.6 – 37.8 [2] – §27.4
5	Квантовый гармонический осциллятор	л	[1] – §37.9
6	Туннельный эффект	л	[2] – §27.6

Цели обучения

Что должен знать	Что должен уметь
<ul style="list-style-type: none"> • Сущность корпускулярно-волнового дуализма • Соотношение неопределенностей: для координаты и импульса, для энергии и времени • Физический смысл соотношений неопределенности • Физический смысл волновой функции • Основное уравнение квантовой механики в общем виде и для стационарных состояний • Решения уравнения Шредингера для частицы в прямоугольной потенциальной яме • Вид волновой функции для частицы в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме • Вид волновой функции для линейного гармонического осциллятора • Энергию линейного гармонического осциллятора 	<ul style="list-style-type: none"> • Определять длину волны де Бройля различных частиц • Пользоваться соотношением неопределенностей Гейзенберга для оценки неопределенности длины по известной неопределенности импульса либо энергии • Определять вероятность нахождения частицы в данной точке пространства и в элементе объема • Использовать ψ-функцию состояния и уравнение Шредингера для определения энергии состояния • Использовать волновую функцию для нахождения вероятностей и средних значений величин • Определять вероятность нахождения частицы в потенциальной яме • Находить вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер произвольной формы

2.1. Краткое содержание теоретического материала

Волновые свойства частиц. Статистический смысл волн де Бройля

Луи де Бройль выдвинул гипотезу о том, что корпускулярно-волновой дуализм, т.е. двойственность свойств, характерен не только для света, но и для любых материальных объектов. Согласно этой гипотезе всякой движущейся частице с энергией E и импульсом p , соответствует длина волны λ . Ранее было получено соотношение, связывающее длину волны и импульс частицы

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (1)$$

Соотношение называется формулой *де Бройля*. Следовательно, при распространении частиц в неоднородных средах они должны проявлять свойства, аналогичные волнам. Т.е. частицы должны вести себя так, как волны с длиной λ , определяемой формулой (1). Указанные волны называют *волнами де Бройля*.

Гипотеза де Бройля была подтверждена разными экспериментаторами. В опытах Дэвиссона и Джермера пучок электронов при отражении от кристаллической пластинки давал дифракционную картину.

При ускорении электрона в электрическом поле разностью потенциалов менее 10^4 В можно записать

$$\frac{mv^2}{2} = qU,$$

откуда скорость, приобретаемая электроном равна

$$v = \sqrt{\frac{2qU}{m}}.$$

Таким образом, длина волны де Бройля для электрона вычисляется по формуле:

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2qmU}}. \quad (2)$$

При указанных напряжениях (менее 10^4 В) длины волн де Бройля ускоренных электронов лежат в интервале от 100 до 1 нм, и соизмеримы с размерами атомов и молекул вещества. Волновые свойства электронов должны обнаруживаться в явлениях дифракции и интерференции на веществе. В качестве дифракционной решетки для электронов в опытах использовалась кристаллическая решетка различных веществ.

Томсон и Тартаковский получили дифракционную картину при прохождении электронного пучка через металлическую фольгу. В опытах Штерна дифракционные явления обнаруживались также у атомных и молекулярных пучков. Наличие у частиц волновых свойств вынуждает трак-

товать физический смысл волн де Бройля как *вероятностный*, т.е. при определенных условиях существует ограничение применения к частицам понятий координаты и импульса в их классическом смысле: эти параметры могут быть определены с некоторой вероятностью.

Однако для более крупных частиц и тел длины волн де Бройля оказываются намного меньше размеров самих тел. Это практически исключает проявление волновых свойств у таких тел.

Соотношение неопределенностей

Математическим выражением дуализма свойств частиц является *соотношение неопределенностей Гейзенберга*

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar, \quad (3)$$

где Δx и Δp_x неопределенности координаты и проекции импульса частицы;

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$. Данное соотношение показывают, что координата x и проекция импульса p_x частицы не могут быть определены *одновременно* сколь угодно точно, а только в соответствии с формулой (3). Соотношение неопределенностей накладывает в квантовой механике существенные ограничения на возможности описания движения частицы по некоторой траектории.

Соотношения, подобные (3), справедливы и для ряда других пар физических величин, например для других координат, и соответствующих проекции импульса.

Соотношения, подобные (3), справедливы и для ряда других пар физических величин, например для других координат, и соответствующих проекции импульса.

Квантовая теория позволяет также получить соотношение неопределенностей для энергии и времени:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (4)$$

Здесь Δt представляет собой время, в течение которого микрочастица обладает энергией $E \pm \Delta E$. Например, атом на самом низком энергетическом уровне может пребывать сколь угодно долго ($\Delta t = \infty$), поэтому энергия этого состояния является вполне определенной, т.е. согласно (4) $\Delta E = 0$.

Но, например, в возбужденном состоянии атом пребывает весьма недолго, в течение времени Δt , тогда его энергия в этом возбужденном состоянии может быть определена с точностью $\Delta E = \frac{\hbar}{\Delta t}$ и будет равна $E \pm \Delta E$. Таким образом, энергия излученного фотона может быть определена лишь с точностью ΔE , которая определяется временем Δt жизни атома в возбужденном состоянии. На опыте неопределенность энергии проявляется в том,

что частота излучения фотона имеет неопределенность $\Delta\nu = \frac{\Delta E}{h}$, а, следовательно, спектральные линии размыты или имеют конечную ширину.

Волновая функция и ее статистический смысл

В квантовой физике возникает проблема отыскания такого уравнения, которое учитывало бы одновременно движение частиц (как уравнения движения Ньютона) и волновые свойства частиц, как вероятностные величины того или иного состояния движения (координат, энергии).

Наличие у частиц волновых свойств требует ввести для описания состояния частиц волновую функцию ψ , подобную уравнению волны. В общем случае волновая функция должна зависеть от координат и времени $\psi = \psi(x, y, z, t)$.

Так, например, волновая функция свободно движущейся частицы представляет собой плоскую волну де Бройля (по аналогии с уравнением плоской монохроматической волны):

$$\psi = \psi_0 \cos(\omega t - kx) = \psi_0 \cos\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{p}{\hbar}x\right). \quad (5)$$

В комплексной форме уравнение плоской волны имеет вид:

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - kx)}, \quad \psi(x, t) = \psi_0 e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{p}{\hbar}x\right)},$$

где E, p – энергия и импульс частицы; ω, k – частота и волновое число, соответствующие длине волны де Бройля λ частицы; ψ_0 – амплитуда волны де Бройля; $i = \sqrt{-1}$.

Непосредственный физический смысл связывается не с самой ψ -функцией, а с ее квадратом модуля $|\psi|^2 = \psi\psi^*$, где ψ^* – комплексно сопряженная волновая функция. Величина

$$dP = |\psi|^2 dV \quad (6)$$

дает вероятность обнаружения частицы в элементе пространства объемом dV вблизи точки с координатами (x, y, z) , а квадрат модуля ψ -функции

$$|\psi|^2 = \frac{dP}{dV}$$

имеет смысл *плотности вероятности* или вероятность обнаружить частицу в данной точке пространства. Таким образом, величина $|\psi|^2$ определяет *интенсивность* волны де Бройля в данной точке.

Пребывание частицы в пространстве существования ее волновой функции является достоверным событием и его вероятность должна быть равна единице. Данное утверждение в квантовой физике называется *усло-*

вием нормировки волновой функции. Математически это условие определяется интегралом по всему объему, где может находиться частица

$$\int_V |\psi|^2 dV = 1. \quad (7)$$

Особо следует отметить, что в квантовой механике представление о физических величинах совершенно иное, чем в классической физике. Поэтому, любой физической величине ставится в соответствие *оператор* данной величины \hat{L} , а задача о нахождении значений физической величины сводится к решению операторного уравнения вида

$$\hat{L}\psi = L\psi,$$

где ψ – *собственная волновая функция* оператора \hat{L} , L – *собственное значение* оператора, т.е. значение величины, наблюдаемое на опыте.

Итак, любая квантово механическая задача сводится к отысканию *собственных волновых функций* ψ и *собственных значений* L операторов физических величин.

Волновая функция является основной характеристикой состояния микрообъектов. С помощью волновой функции в квантовой механике определяются *средние значения* физических величин. Так, среднее значение физической величины \bar{L} , которой соответствует оператор \hat{L} , вычисляется следующим образом:

$$\bar{L} = \int_V \hat{L}|\psi|^2 dV, \quad (8)$$

где интегрирование ведется по всему объему, а ψ -функция удовлетворяет условию нормировки (7).

Уравнение Шредингера в общем виде и для стационарных состояний

Волновая функция частицы является решением *общего уравнения Шредингера*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U\psi, \quad (9)$$

представляющего собой *основное уравнение нерелятивистской квантовой механики*. Величина, обозначенная Δ

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

представляет собой *оператор Лапласа*. Данное уравнение (9) является опытным, т.е. установлено экспериментальным путем. Правильность его подтвер-

ждается тем, что его решения соответствуют практическим результатам.

Уравнение (9) записывают также в операторном виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi,$$

где

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U} = \hat{E}_k + \hat{U},$$

представляет собой оператор полной энергии (*оператор Гамильтона*), рав-

ный сумме операторов кинетической $\hat{E}_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$ и потенциальной энергии

$\hat{U} = U(r)$, которая в квантовой механике определяется классическим образом.

Особое значение в квантовой механике имеют *стационарные состояния*, когда частица движется в стационарном поле, потенциал которого в каждой точке зависит лишь от координаты и не зависит от времени. Для таких состояний уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \psi = E \psi, \quad (10)$$

или в операторном виде

$$\hat{H} \psi = E \psi. \quad (11)$$

Большинство задач квантовой механики состоит в отыскании собственных волновых функций и собственных значений E оператора полной энергии \hat{H} . Легко проверить, что волновая функция, удовлетворяющая данному уравнению (11), может быть представлена как произведение двух частей – координатной и временной:

$$\psi(x, y, z, t) = A e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(x, y, z). \quad (12)$$

Плотность вероятности данной функции не зависит от времени $|\psi|^2 = |\psi(x, y, z)|^2$. Сама ψ (12) описывает стационарные состояния. Уравнение (11) получается при подстановке данной функции (12) в общее уравнение Шредингера (9).

В случае одномерного движения стационарное уравнение Шредингера содержит производную по координате x и его записывают в следующем виде:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0. \quad (13)$$

Частица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме

Одним из наиболее простых примеров, демонстрирующих применение стационарного уравнения Шредингера (13), является задача отыскания собственных волновых функций и собственных значений энергии для частицы, находящейся в *прямоугольной потенциальной яме* с бесконечно высокими стенками.

Итак, микрочастица находится в поле, которое характеризуется следующим значением потенциальной энергии: в интервале от $x = 0$ до $x = L$ энергия $U = 0$; на границах области $U \rightarrow \infty$ (рис. 2.1). При этих условиях можно утверждать, что частица не выходит за пределы области $(0, L)$. Для наглядности можно представить частицу, запертую в яме с бесконечно высокими стенками: внутри ямы частица движется свободно, но за пределы ее выйти не может.

Уравнение Шредингера для одномерного движения принимает вид (13)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0.$$

Так как в данной задаче потенциальная энергия должна удовлетворять условиям

$$U = \begin{cases} 0, & \text{при } 0 \leq x \leq L \\ \infty, & \text{при } x < 0, x > L \end{cases},$$

уравнение Шредингера для области $0 \leq x \leq L$ принимает вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0.$$

Вводя обозначение

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E, \quad (14)$$

получим уравнение

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0.$$

Решением такого уравнения является сумма гармонических функций:

$$\psi = A \sin(kx) + B \cos(kx).$$

Из условия на границе $\psi(0) = 0$ получим, что коэффициент $B = 0$, а при $\psi(L) = 0$ получим, что $A \sin(kx) = 0$, это возможно при значениях аргумента $kx = n\pi$, где $n = 1, 2, 3, \dots$. Отсюда вытекает, что $k = \frac{n\pi}{L}$.

Итак, *собственные волновые функции* частицы в потенциальной яме имеют вид

$$\psi = A \cdot \sin \frac{\pi n x}{L}.$$

Для нахождения постоянной A используют условие нормировки волновой функции (7):

$$\int_0^L |\psi|^2 dx = 1, \quad \text{или} \quad \int_0^L A^2 \sin^2 \left(\frac{\pi n x}{L} \right) dx = 1.$$

интегрируя, получаем $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$.

Собственные нормированные волновые функции частицы в потенциальной яме имеют вид:

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin \frac{\pi n x}{L}. \quad (15)$$

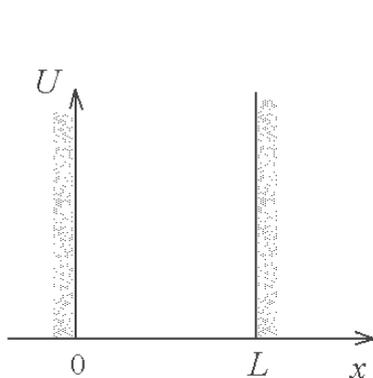


Рис. 2.1

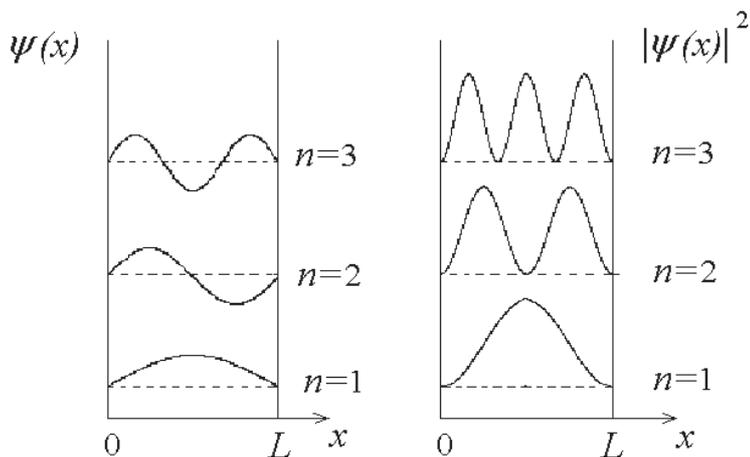


Рис. 2.2

Рис. 2.3

Графики волновых функций изображены на рис. 2.2. Они представляют собой стоячие волны де Бройля.

Собственные волновые функции используются для нахождения плотности вероятности обнаружения частицы в различных точках, для чего определяется квадрат модуля волновой функции $|\psi|^2$. Графики плотности вероятности при различных n представлены на рис. 2.3.

В общем случае для определения вероятности нахождения микро-частицы в интервале (x_1, x_2) необходимо вычислить интеграл:

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi n x}{L} dx. \quad (16)$$

На рис. 2.4 заштрихованной области соответствует вероятность обнаружить частицу в интервале от x_1 до x_2 для основного состояния ($n = 1$).

Из (14) определяем энергию микрочастицы

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}, \quad E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2. \quad (17)$$

Видно, что энергия частицы в потенциальной яме принимает не любые значения, а лишь определенные – *дискретные*. В этом случае говорят, что энергия *квантуется*. Целое число n является *главным квантовым числом*, определяющим энергию частицы в потенциальной яме.

Импульс микрочастицы внутри ямы принимает значения

$$p = \hbar k = \frac{\hbar \pi}{L} n. \quad (18)$$

Видно, что разность энергий между двумя соседними энергетическими уровнями

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \left((n+1)^2 - n^2 \right) = (2n+1) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (19)$$

растет по мере увеличения n . Однако при больших значениях главного квантового числа происходит относительное сближение энергетических уровней

$$\frac{\Delta E}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \approx \frac{2}{n}. \quad (20)$$

Таким образом, при больших значениях n выполняется условие $\Delta E \ll E_n$, т.е. спектр энергии можно считать почти непрерывным или *квазинепрерывным* и квантование энергии дает результаты, близкие к результатам классического рассмотрения. Аналогичные рассуждения можно провести, рассматривая потенциальную яму с большой шириной. При большой ширине ямы расстояние между уровнями может быть мало по сравнению с энергией частицы. В этом случае энергетический спектр также является квазинепрерывным. В этом состоит **принцип соответствия**: *при больших квантовых числах выводы и результаты квантовой механики должны соответствовать классическим результатам*. В общем смысле принцип соответствия требует, чтобы новая теория включала в себя как частный случай классическую теорию.

Квантовый гармонический осциллятор

Следующий пример применения стационарного уравнения Шредингера – это описание частицы, находящейся в *потенциальной яме* параболической формы. Как и в классической механике, данную систему называют *гармоническим осциллятором*. Потенциальная энергия U характеризуется зависимостью от координаты x

$$U = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}, \quad (21)$$

где m – масса частицы, ω_0 – собственная циклическая частота колебаний осциллятора.

Однако в квантовой механике поведение осциллятора, например, его энергетический спектр и вероятность обнаружения частицы в различных точках, вытекают из решения уравнения Шредингера. С учетом потенциальной энергии вида (21) уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \psi = 0.$$

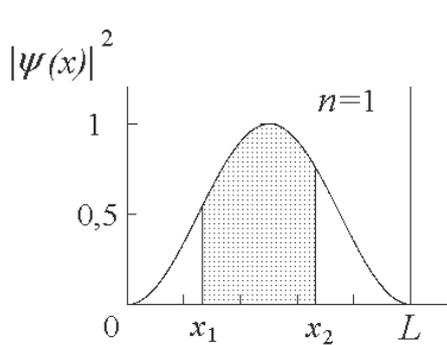


Рис. 2.4

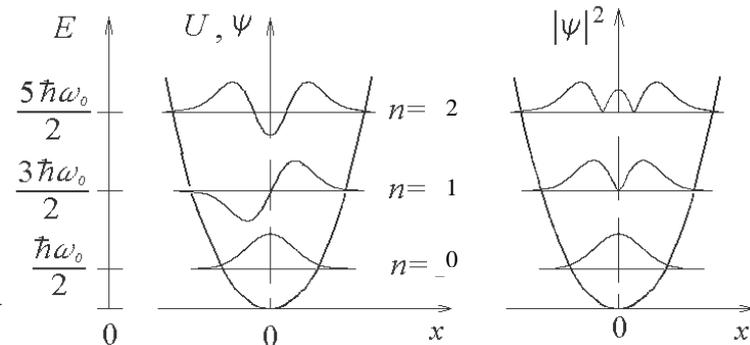


Рис. 2.5

Вводя безразмерные величины

$$z = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega},$$

уравнение Шредингера переписывают в виде

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + (\lambda - z^2)\psi = 0. \quad (22)$$

Решением данного уравнения являются функции вида (волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора):

$$\psi_n(z) = A_n \cdot H_n(z) \cdot e^{-\frac{z^2}{2}}, \quad n=0, 1, 2, 3, \dots \quad (23)$$

где A_n – постоянная нормировки, определяемая для каждого n отдельно; $H_n(z)$ – полиномы Эрмита, являющиеся членами степенного ряда:

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2z, \quad H_2 = 4z^2 - 2 \dots$$

Энергетический спектр E гармонического осциллятора является дискретным и принимает значения:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0, \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (24)$$

На рис. 2.5 представлен энергетический спектр E , вид волновых функций ψ и плотность вероятности $|\psi|^2$ для первых трех уровней гармонического осциллятора. В отличие от классического осциллятора, энергия которого изменяется непрерывно, энергия квантового осциллятора принимает дискретные значения. Кроме того, из формулы (24) следует, что минимальная энергия осциллятора равна $E_0 = \frac{\hbar \omega_0}{2}$, т.е. не равна нулю, что было очевидным для классического осциллятора. Данный факт подтверждается многочисленными экспериментами. Так при $T \rightarrow 0$ атомы вещества совершают колебания и обладают энергией, называемой нулевой.

Разность между соседними уровнями энергии является постоянной величиной $\Delta E = \hbar \omega_0$, т.е. уровни энергии равноотстоят друг от друга (рис. 2.5). При больших уровнях энергии отношение $\frac{\Delta E}{E_n} \approx \frac{2}{n}$, т.е. происходит относительное сближение уровней энергии и спектр можно считать почти непрерывным – *квазинепрерывным* – как и для классического осциллятора. Распределение вероятности обнаружить частицу в яме приближается к классическому распределению.

Туннельный эффект

Мы считали, что на границах потенциальной ямы волновая функция становится равной нулю. В действительности дело обстоит сложнее. Волна де Бройля на границе испытывает отражение, но и частично проходит в область вне потенциальной ямы. Другими словами, существует определенная вероятность обнаружить частицу за пределами ямы. Этот результат существенно отличается от выводов классической физики.

Рассмотрим частицу, обладающую энергией E и движущуюся на потенциальный барьер высотой U_0 (рис. 2.6). Уравнение Шредингера при движении частицы в области от 0 до L внутри барьера имеет вид

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi = 0.$$

Обозначив $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)$, получаем

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} - \alpha^2 \psi = 0. \quad (25)$$

Решением данного дифференциального уравнения является функция вида

$$\psi = Ae^{-\alpha x} + Be^{\alpha x}. \quad (26)$$

Учитывая, что волновая функция при любых значениях x , не должна обращаться в бесконечность, принимаем $B = 0$. Следовательно, волновая функция имеет вид

$$\begin{aligned} \psi &= Ae^{-\alpha x}, \\ \psi &= Ae^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x}. \end{aligned} \quad (27)$$

Тогда вероятность обнаружить частицу в точке с координатой x равна

$$P(x) = |\psi|^2 = A^2 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x}. \quad (28)$$

Вероятность обнаружить частицу в точке с координатой $x = 0$ равна $P(0) = A^2$, тогда вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер шириной L равна отношению

$$D = \frac{P(L)}{P(0)},$$

и представляет собой коэффициент прозрачности потенциального барьера.

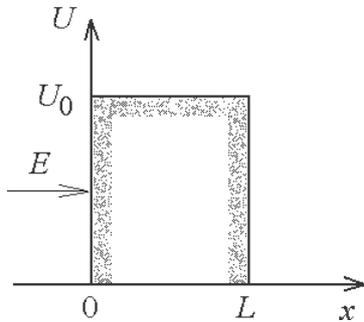


Рис. 2.6

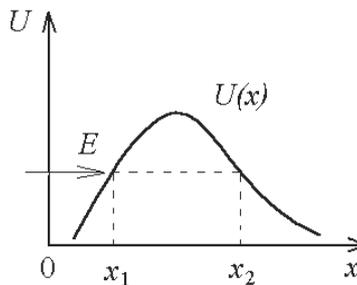


Рис. 2.7

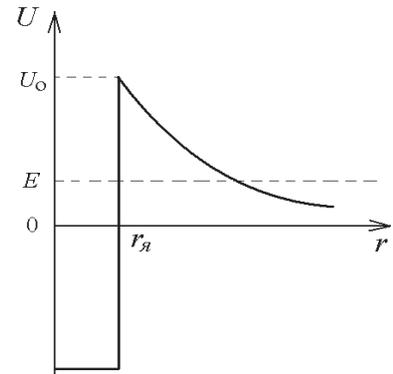


Рис. 2.8

Итак, в случае прямоугольного потенциального барьера шириной L вероятность его прохождения микрочастицей равна

$$D = e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}L}. \quad (29)$$

В случае преодоления частицей потенциального барьера сложной формы коэффициент прозрачности определяется по формуле

$$D = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x)-E)} dx}. \quad (30)$$

где x_1 и x_2 – координаты начала и конца потенциального барьера, описываемого функцией $U(x)$ (рис. 2.7).

Важным примером прохождения частицы через потенциальный барьер является распад радиоактивных ядер. При α -распаде материнское ядро испускает α -частицу, состоящую из двух протонов и двух нейтронов. На рис. 2.8 изображен график зависимости потенциальной энергии взаимодействия частицы U с ядром от расстояния r . Оценка высоты потенциального барьера, например, для ядра полония ^{210}Po – наиболее применяемого радиоактивного изотопа – дает значение $U_0 = 23$ МэВ. Полоний же испускает α -частицы с энергией $E = 5,3$ МэВ. Мы видим, что энергия вылетающей из ядра частицы существенно меньше высоты барьера, так что α -распад возможен только в результате туннельного эффекта. Можно рассчитать прозрачность кулоновского барьера по формуле (30) и потом оценить период полураспада радиоактивных ядер.

2.2. Методические указания к лекционным занятиям

№	Вопросы лекции	Форма изучения	Литература	Вопросы для самоконтроля студентов
1	Волновые свойства частиц. Гипотеза де Бройля. Экспериментальное подтверждение теории де Бройля. Статистический смысл волн де Бройля. Соотношение неопределенностей	л	[1] – §37.1 – 37.4 [2] – §26.1 – 26.3	<ul style="list-style-type: none"> В каких экспериментах впервые были обнаружены волновые свойства частиц? Электрон и протон движутся с одинаковой скоростью. Какой из этих частиц соответствует меньшая длина волны? Каков физический смысл волны де Бройля? Запишите соотношение неопределенностей для координаты и проекции импульса. Поясните с помощью примера физический смысл соотношения. Запишите соотношение неопределенностей для энергии и времени. Поясните с помощью примера физический смысл соотношения. Как с помощью соотношения неопределенностей объяснить устойчивость атомной структуры?
2	Волновая функция и ее статистический смысл и свойства. Принцип причинности в квантовой механике	л	[1] – §37.3 [2] – §27.1 – 27.2	<ul style="list-style-type: none"> Что такое волновая функция? Каков ее физический смысл? Запишите условие нормировки волновой функции. Каков смысл данного соотношения? Как определяются средние величины в квантовой механике? Что такое принцип соответствия?
3	Уравнение Шредингера в общем виде и для стационарных состояний	л	[1] – §37.5 [2] – §27.3	<ul style="list-style-type: none"> Запишите уравнение Шредингера в общем виде. Запишите уравнение Шредингера для стационарного случая. Каков общий вид волновой функции для стационарных состояний? Что называется оператором Гамильтона? Что называется оператором кинетической энергии?
4	Частицы в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме	л	[1] – §37.6 – 37.8 [2] – §27.4	<ul style="list-style-type: none"> Какой вид имеет волновая функция частицы в потенциальной яме? Какие значения энергии соответствуют частице в потенциальной яме? Поясните смысл выражения «энергия квантуется». Получите выражение для импульса частицы в яме. Что такое главное квантовое число? Как определить вероятность нахождения частицы в заданном интервале?
5	Квантовый гармонический осциллятор	л	[1] – §37.9	<ul style="list-style-type: none"> Что такое квантовый гармонический осциллятор? Каков вид волновой функций для квантового гармонического осциллятора в основном состоянии? Где вероятнее всего обнаружить частицу в основном состоянии? Запишите выражение для значений энергии квантового гармонического осциллятора. Что можно сказать об особенностях спектра энергии?
6	Туннельный эффект	л	[2] – §27.6	<ul style="list-style-type: none"> Как вычисляется вероятность прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер? Как вычисляется вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер произвольной формы?

2.3. Методические указания к практическим занятиям

№ п/п	Тема занятия	Тип задач	Рекомендации по решению	Соответствующие задачи из сборников
1	Волновые свойства частиц. Соотношение неопределенностей для энергии и времени	Определение волн де Бройля различных частиц. Применение соотношения неопределенностей к нахождению энергии, скорости, импульса микрочастиц	<p>При решении задач на определение характеристик волны де Бройля следует помнить, что – в уравнении де Бройля под импульсом понимается его релятивистское выражение</p> $p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}};$ <p>– что энергия теплового движения частиц идеального газа равна $E = \frac{3}{2}kT$,</p> <p>– энергия, приобретаемая частицей при прохождении разности потенциалов, $E = qU$.</p> <p>При решении задач на соотношение неопределенностей Гейзенберга необходимо пользоваться следующими формулами-связями:</p> <p>– связь между импульсом и энергией частицы $p^2 = 2mE$;</p> <p>– связь между изменением импульса и изменением энергии частицы $\Delta p = \sqrt{\frac{m}{2E}} \Delta E$</p> <p>– связь между длиной волны и частотой, а также их приращениями: $\lambda = \frac{c}{\nu}$ и $\Delta \lambda = -\frac{c}{\nu^2} \Delta \nu$</p>	[5] – № 19.34 – 19.41 [6] – № 24.11 – 24.20, 24.3, 24.5, 24.8 – 24.10
2	Частица в потенциальной яме (бесконечной и параболической формы). Квантовый гармонический осциллятор. Туннельный эффект	Определение вероятности нахождения частиц в потенциальной яме и вероятности прохождения через различные типы потенциальных барьеров. Определение вероятности нахождения и энергии гармонического осциллятора	<p>При определении вероятности нахождения частицы в заданном интервале в потенциальной яме необходимо воспользоваться соотношением (16)</p> <p>При решении задач на прохождение частицы через барьер произвольной формы необходимо:</p> <p>– выяснить координаты начала и конца барьера;</p> <p>– установить зависимость потенциальной энергии от координаты $U(x)$;</p> <p>– необходимо помнить, что величина коэффициента прозрачности барьера $D < 1$.</p> <p>При определении энергии осциллятора с использованием заданной волновой функции, необходимо воспользоваться уравнением Шредингера (22).</p>	[6] – № 24.21 – 24.30

2.4. Примеры решения задач

Пример 1. Найти длину волны де Бройля для случаев: 1) электрона, летящего со скоростью $0,8 c$; 2) тела массой 10^{-3} кг, движущегося с такой же скоростью.

Решение. Длина волны де Бройля определяется выражением

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\nu},$$

так как масса m зависит от скорости ν

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{\nu^2}{c^2}}},$$

следовательно

$$\lambda = \frac{h}{m_0\nu} \cdot \sqrt{1 - \frac{\nu^2}{c^2}}.$$

Вычисляя значение длин волн де Бройля для рассматриваемых случаев, получаем: $\lambda_1 = 1,8 \cdot 10^{-12}$ м, $\lambda_2 = 1,65 \cdot 10^{-29}$ м.

Ответ: 1) $\lambda_1 = 1,8 \cdot 10^{-12}$ м; 2) $\lambda_2 = 1,65 \cdot 10^{-29}$ м.

Задача 2. Определить длину волны де Бройля молекулы гелия при температуре 300 К.

Решение. Длина волны де Бройля для нерелятивистской частицы определяется соотношением $\lambda = \frac{h}{m_0\nu}$. Гелий – одноатомный газ, средняя энергия

молекул которого при температуре T равна $E = \frac{3}{2}kT$. Скорость может быть

определена как среднеквадратичная скорость из соотношения $\frac{m_0\nu^2}{2} = \frac{3}{2}kT$,

$\nu = \sqrt{\frac{3kT}{m_0}}$. Окончательно для длины волны де Бройля получаем $\lambda = \frac{h}{\sqrt{3km_0T}}$.

Учитывая, что $m_0 = 4 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27}$ кг, получаем $\lambda = 2,6 \cdot 10^{-11}$ м.

Ответ: $\lambda = 2,6 \cdot 10^{-11}$ м.

Задача 3. Средняя кинетическая энергия электрона в невозбужденном состоянии в атоме водорода 13,6 эВ. Используя соотношение неопределенностей, найти наименьшую погрешность, с которой можно вычислить координату электрона в атоме.

Решение. Наименьшая погрешность, с которой можно вычислить координату электрона в атоме, определяется соотношением неопределенностей Гейзенберга

$$\Delta x = \frac{\hbar}{\Delta p}.$$

Для определения минимальной погрешности координаты возьмем неопределенность импульса, равную самому импульсу, что соответствует максимальному Δp .

$$\Delta p \sim p = \sqrt{2Em_e}.$$

Окончательно получаем $\Delta x = \frac{\hbar}{\sqrt{2Em_e}}$. Учитывая, что $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг,

находим неопределенность координаты электрона $\Delta x = 0,53 \cdot 10^{-10}$ м. Следует отметить, что это значение неопределенности координаты совпадает с радиусом первой орбиты для электрона в атоме водорода.

Ответ: $\Delta x = 0,53 \cdot 10^{-10}$ м.

Пример 4. Частица находится в основном состоянии ($n = 1$) в потенциальном ящике шириной L . Найти вероятность нахождения частицы в области $L/3 < x < 2L/3$.

Решение Вероятность нахождения частицы в указанном интервале определяется формулой: $P = \int_{L/3}^{2L/3} \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx$. Используя соотношение

$\sin^2 \alpha = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\alpha)$, вычисляем интеграл:

$$P = \frac{1}{L} \int_{L/3}^{2L/3} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{L}\right) dx = \frac{1}{L} \left(x - \frac{L}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{L}\right)_{L/3}^{2L/3} = 0,61.$$

Т.е. вероятность обнаружить частицу в указанной области равна 61 %.

Ответ: $P = 61$ %.

Пример 5. Две частицы, электрон и протон, обе с энергией 5 эВ, движутся в одном направлении и встречаются на своем пути прямоугольный потенциальный барьер высотой 10 эВ и шириной 1 нм. Определить отношение вероятностей прохождения частицами этого барьера.

Решение. Вероятность прохождения частицы через указанный барьер определяется коэффициентом прозрачности

$$D = e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}l}.$$

Искомое отношение вероятностей равно

$$\frac{D_1}{D_2} = \frac{e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_e(U_0-E)}l}}{e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_p(U_0-E)}l}}.$$

Массы электрона и протона соответственно равны

$$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}, m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ кг}.$$

Вычисляя, получаем

$$\frac{D_1}{D_2} = 2,6.$$

Ответ: $D_1/D_2 = 2,6$.

Пример 6. Найти собственные значения оператора \hat{A} , принадлежащие собственной функции ψ_A , если: $\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2}$, $\psi_A = \sin 3x$.

Решение. Подействуем оператором \hat{A} на волновую функцию $\psi_A = \sin 3x$:

$$\hat{A}\psi_A = -\frac{d^2}{dx^2}(\sin 3x) = 9 \sin 3x.$$

Сравнивая с операторным уравнением

$$\hat{A}\psi_A = A\psi_A,$$

приходим к выводу, что собственное значение искомого оператора $A = 9$.

Ответ: $A = 9$.

2.5. Задачи для самостоятельного решения

1. Вычислить наиболее вероятную дебройлевскую длину волны молекул азота, содержащихся в воздухе при комнатной температуре.

2. Определить кинетическую энергию протона и электрона, для которых длина волны де Бройля равна 0,06 нм.
3. Определить энергию, которую необходимо дополнительно сообщить электрону, чтобы его дебройлевская длина волны уменьшилась от 0,2 мм до 0,1 нм.
4. На сколько по отношению к комнатной должна измениться температура идеального газа, чтобы дебройлевская длина волны его молекул уменьшилась на 20 %?
5. Параллельный пучок моноэнергетических электронов падает нормально на диафрагму в виде узкой прямоугольной щели, ширина которой 0,06 мм. Определить скорость этих электронов, если известно, что на экране, отстоящем от щели на расстоянии 40 мм, ширина центрального дифракционного максимума 10 мкм.
6. Из катодной трубки на диафрагму с узкой прямоугольной щелью нормально к плоскости диафрагмы направлен поток моноэнергетических электронов. Определить анодное напряжение, трубки, если известно, что на экране, отстоящем от щели на расстоянии 0,5 м, ширина центрального дифракционного максимума 10,0 мкм. Ширину щели принять равной 0,10 мм.
7. Протон обладает кинетической энергией 1 кэВ. Определить дополнительную энергию, которую необходимо ему сообщить для того, чтобы длина волны де Бройля уменьшилась в три раза.
8. Определить длины волн де Бройля α -частицы и протона, прошедших одинаковую ускоряющую разность потенциалов 1 кВ.
9. Кинетическая энергия электрона равна удвоенному значению его энергии покоя ($2m_0c^2$). Вычислить длину волны де Бройля для такого электрона.
10. Какой кинетической энергией должен обладать электрон, чтобы дебройлевская длина волны электрона была равна его комптоновской длине волны.
11. Сравнить длины волн де Бройля электрона, прошедшего разность потенциалов 1000 В, атома водорода, движущегося со скоростью равной средней квадратичной скорости при температуре 27⁰С, и шарика массой 1 г, движущегося со скоростью 0,1 м/с.
12. Оценить с помощью соотношения неопределенностей минимальную кинетическую энергию электрона, движущегося внутри сферы радиусом 0,05 нм.
13. Используя соотношение неопределенностей, оценить наименьшие ошибки в определении скорости электрона и протона, если координаты центра масс этих частиц могут быть установлены с неопределенностью 1 мкм.
14. Какова должна быть кинетическая энергия протона в моноэнергетическом пучке, используемого для исследования структуры с линейными размерами 10⁻¹³ см?

15. Используя соотношение неопределенностей, оценить ширину одномерного потенциального ящика, в котором минимальная энергия электрона 10 эВ.
16. α -частица находится в бесконечно глубоком, одномерном, прямоугольном потенциальном ящике. Используя соотношение неопределенностей, оценить ширину ящика, если известно, что минимальная энергия α -частицы 8 МэВ.
17. Среднее время жизни атома в возбужденном состоянии составляет 10^{-8} с. При переходе атома в нормальное состояние испускается фотон, средняя длина волны которого равна 600 нм. Оценить ширину, излучаемой спектральной линии, если не происходит ее уширения за счет других процессов.
18. Среднее время жизни атома в возбужденном состоянии составляет около 10^{-8} с. При переходе атома в нормальное состояние испускается фотон, средняя длина волны которого равна 400 нм. Оценить относительную ширину излучаемой спектральной линии, если не происходит уширения линии за счет других процессов.
19. На фотографии, полученной с помощью камеры Вильсона, ширина следа электрона составляет $0,8 \cdot 10^{-3}$ м. Найти неопределенность в нахождении его скорости.
20. Средняя кинетическая энергия электрона в невозбужденном атоме водорода 13,6 эВ. Используя соотношение неопределенностей, найти наименьшую погрешность, с которой можно вычислить координату электрона в атоме.
21. Показать, что для частицы, неопределенность координаты которой $\Delta x = \lambda/(2\pi)$ (λ – длина волны де Бройля), неопределенность ее скорости равна по порядку величины самой скорости частицы.
22. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить размеры ядра атома, считая, что минимальная энергия нуклона в ядре 8 МэВ.
23. Используя соотношение неопределенностей, оценить энергию электрона, находящегося на первой боровской орбите в атоме водорода.
24. Используя соотношение неопределенностей, показать, что в ядре не могут находиться электроны. Линейные размеры ядра принять равными $5,8 \cdot 10^{-15}$ м. Учесть, что удельная энергия связи в среднем 8 МэВ/нуклон.
25. Атом испустил фотон с длиной волны 0,550 мкм. Продолжительность излучения 10 нс. Определить наибольшую погрешность, с которой может быть измерена длина волны излучения.
26. Частица находится в потенциальной яме шириной L . Определить вероятность нахождения частицы в интервале $0 < x < L/5$ на первом энергетическом уровне.
27. Частица находится в потенциальной яме шириной L . Определить вероятность нахождения частицы в интервале $L/4 < x < L/3$ на втором энергетическом уровне.

28. Частица в потенциальной яме шириной L находится в возбужденном состоянии. Определить вероятность нахождения частицы в интервале $L/3 < x < L/2$ на третьем энергетическом уровне.
29. Вычислить отношение вероятностей нахождения электрона в интервалах $L/4 < x < L/2$ и $0 < x < L/4$ на первом энергетическом уровне одномерной потенциальной ямы, ширина которой L .
30. Электрон находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной L с бесконечно высокими стенками. Найти спектр энергии электрона, считая, что возможны лишь те его состояния, для которых внутри потенциальной ямы укладывается целое число полувольт де Бройля.
31. Электрон находится в одномерном прямоугольном потенциальном ящике с бесконечно высокими стенками. В каких точках обнаружение электрона наименее вероятно, если он находится в основном состоянии? Какие изменения произойдут, если электрон перейдет в возбужденное состояние с $n = 3$?
32. Частица находится в бесконечно глубокой, прямоугольной, одномерной потенциальной яме шириной L . Определить вероятность обнаружения частицы в области с координатой $L/3 \leq x < (L/3 + \Delta L)$, где $\Delta L = 0,001 \cdot L$.
33. Частица находится в одномерной, бесконечно глубокой, прямоугольной потенциальной яме шириной L во втором возбужденном состоянии. Найти вероятность обнаружения частицы в центральной области шириной ΔL , если: а) $\Delta L = L/3$; б) $\Delta L = L/100$.
34. Частица находится в одномерном прямоугольном потенциальном ящике с бесконечно высокими стенками в возбужденном состоянии с $n = 5$. В каких областях вероятность обнаружения частицы равна нулю?
35. Определить, при какой ширине одномерной потенциальной ямы дискретность энергии электрона становится сравнимой с энергией теплового движения при температуре 300 К.
36. Электрон находится в основном состоянии в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, ширина которой $1,4 \cdot 10^{-9}$ м. Определить энергию, излучаемую при переходе электрона с третьего энергетического уровня на второй. Как изменяется при этом импульс электрона?
37. Электрон находится в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, ширина которой 1 нм. Определить наименьшую разность энергетических уровней электрона.
38. Определить ширину одномерной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками, если при переходе электрона с третьего энергетического на второй излучается энергия 1 эВ?
39. Рассматривая электрон в твердом теле как линейный гармонический осциллятор, находящийся в основном состоянии, найти во сколько раз отличаются плотности вероятности обнаружения электрона в точках x_0 и $2x_0$.

Какие изменения произойдут, если вместо электрона был бы протон?

40. Волновая функция одного из состояний линейного гармонического осциллятора имеет вид:

$$\psi(x) = Cx \exp\left(-\frac{\lambda x^2}{2}\right), \quad \lambda = \frac{m\omega}{\hbar}.$$

С помощью уравнения Шредингера найти энергии осциллятора в этом состоянии.

41. Частица массой m движется в одномерном потенциальном поле $U = \frac{kx^2}{2}$ (гармонический осциллятор). Волновая функция частицы для основного состояния имеет вид $\psi(x) = A \exp(-\alpha x^2)$, где A – нормировочный коэффициент, α – положительная постоянная. С помощью уравнения Шредингера найти значения постоянной α и энергии E частицы в этом состоянии.

42. Найти энергию линейного гармонического осциллятора в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\psi(x) = C(1 - 2\lambda x^2) \cdot \exp\left(-\frac{\lambda x^2}{2}\right), \quad \lambda = \frac{m\omega}{\hbar}.$$

Указание: использовать стационарное уравнение Шредингера.

43. Используя условие нормировки, найти значение константы C в волновой функции $\psi_n = C \sin(\pi n x / l)$ частицы, находящейся в бесконечно глубокой, прямоугольной потенциальной яме.

44. Определить коэффициент пропускания прямоугольного потенциального барьера высотой 10 эВ и шириной $5 \cdot 10^{-10}$ м для электрона с энергией 9 эВ.

45. Определить коэффициент пропускания прямоугольного потенциального барьера высотой 5 эВ и шириной $2 \cdot 10^{-10}$ м для протона с энергией 4 эВ.

46. Чему равна ширина прямоугольного потенциального барьера высотой 8 эВ коэффициент пропускания которого для электрона с энергией 7 эВ равен 1,6 %?

47. Определить высоту прямоугольного потенциального барьера шириной $2 \cdot 10^{-10}$ м, если коэффициент пропускания для электрона с энергией 20 эВ равен 1 %.

48. Через прямоугольный потенциальный барьер шириной $L = 2 \cdot 10^{-10}$ м проходит 30 % всех падающих на него электронов. Найти высоту барьера U_0 , если энергия электронов E составляет 15 эВ.

49. Во сколько раз изменится вероятность прохождения электронов через прямоугольный потенциальный барьер шириной $L = 4 \cdot 10^{-10}$ м и высотой $U_0 = 20$ эВ, если энергия электронов E возрастает с 7 эВ до 14 эВ?

50. Найти вероятность прохождения электроном потенциального барьера

шириной $l = 4 \cdot 10^{-10}$ м и высотой $V_0 = 45$ эВ, изображенный на рис. 2.9. Энергия электрона $E = 20$ эВ.

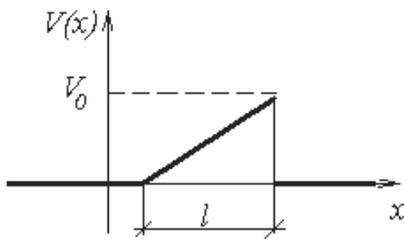


Рис. 2.9

51. Определить вероятность прохождения электрона с энергией $E = 10$ эВ через прямоугольный потенциальный барьер шириной $L = 3 \cdot 10^{-10}$ м и высотой $U_0 = 15$ эВ.

52. Во сколько раз изменится коэффициент пропускания прямоугольного потенциального барьера высотой 5 эВ и шириной $2 \cdot 10^{-10}$ м, если энергия электрона уменьшится с 4 эВ до 3 эВ?

53. Найти собственные значения оператора \hat{A} , принадлежащие собственной функции ψ_A , если:

$$\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2}, \quad \psi_A = \sin 2x;$$

54. Найти собственные значения оператора \hat{A} , принадлежащие собственной функции ψ_A , если:

$$\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2, \quad \psi_A = \exp(-x^2/2);$$

55. Найти собственные значения оператора \hat{A} , принадлежащие собственной функции ψ_A , если:

$$\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx}, \quad \psi_A = \frac{\sin \alpha x}{x}.$$

УБ-3. Элементы атомной физики

Введение

Гипотеза о том, что все вещества состоят из огромного числа атомов, высказывалась с древних времен. Атомы рассматривались как неделимые частицы вещества.

В развитии атомистической теории выдающуюся роль сыграл Д. И. Менделеев, разработавший Периодическую систему элементов. Периодическая закономерность в свойствах атомов различных элементов свидетельствует о некоторой общности в их природе. Открыв Периодическую систему, Менделеев впервые на научной основе поставил вопрос о единой природе атомов.

Современные представления о строении атомов получены на основании многочисленных экспериментальных данных. Изучая рассеяние α -частиц, Э.Резерфорд показал, что весь положительный заряд и почти вся масса сосредоточены в ядре, размеры которого имеют порядок 10^{-15} м. В опытах Франка и Герца было показано, что энергия атомов может изменяться дискретно, т.е. порциями. Новые, квантовые представления легли в основу теории атома водорода. Теория атома водорода по Бору успешно объясняет строение спектра водородного атома. Удовлетворительные результаты получаются и для водородоподобных атомов. Однако теория Бора представляет собой лишь переходный этап на пути создания теории атомных и ядерных явлений. Такой теорией явилась *квантовая механика*. Применение ее к атомным системам позволило объяснить многообразие атомных и ядерных явлений.

При изучении данного раздела студенты должны **иметь представление:**

- о квантовании энергии, импульса и др.;
- об излучении и поглощении электромагнитных волн с энергетической точки зрения;

обладать навыками:

- применения элементов дифференциального и интегрального исчисления.
- решения дифференциальных уравнений второго порядка.

Учебная программа блока

№ п/п	Содержание блока	Форма подготовки	Литература
1	Теория атома водорода по Бору. Спектр атома водорода	с	[1] – §38.2 – 38.5 [2] – §28.1
2	Атом водорода в квантово-механическом описании. Квантовые числа. Спин электрона. Принцип Паули	л	[1] – §39.1 – 39.5 [2] – §28.2.1 – 28.2.4

Окончание табл.

3	Рентгеновские спектры	л	[2] – §28.3.1 – 28.3.2
4	Многоэлектронные атомы. Классификация электронов. Периодический закон Д. И. Менделеева	л	[1] – §39.6 [2] – §28.2.5
5	Молекула. Молекулярные спектры. Электронные спектры молекул. Колебательные спектры молекул. Вращательные спектры молекул. Электронно-колебательные спектры молекул. Вращательно-колебательные спектры молекул. Комбинационные спектры молекул. Сплошные и диффузионные спектры молекул. Молекулярная спектроскопия	л	[1] – §39.7 – 39.11 [2] – §28.2.6
6	Типы оптических переходов. Инверсная заселенность. Вынужденное излучение. Лазеры. Свойства лазерного излучения	л	[1] – §39.7, 40.1 – 40.2 [2] – §28.3.3 – 28.3.4

Цели обучения

Что должен знать	Что должен уметь
<ul style="list-style-type: none"> • Постулаты Бора • Значение энергии состояний электрона в атоме водорода • Серии спектров излучения атома водорода • Вид волновой функции электрона в атоме водорода при заданных значениях трех квантовых чисел • Принцип Паули • Физический смысл квантовых чисел: главного, орбитального, магнитного и спинового • Свойства рентгеновского излучения • Типы молекулярных спектров • Свойства лазерного излучения • Принцип работы оптического квантового генератора (лазера) 	<ul style="list-style-type: none"> • Определять длины волн излучения различных серий спектра атома водорода • Применять постулаты Бора при решении задач • Использовать волновую функцию для нахождения вероятностей и средних значений величин для атома водорода • Определять в рамках боровской теории атома водорода скорость электрона, частоту, период обращения по орбите, энергию • Рассчитывать вероятность пребывания электрона в $1S$-состоянии • Определять средние значения физических величин для $1S$-состояния атома водорода • Определять энергию состояния с использованием волновой функции и уравнения Шредингера • Определять частоты излучения рентгеновского спектра • Определять частоты излучения при переходе молекул между колебательными и вращательными энергетическими уровнями

3.1. Краткое содержание теоретического материала

Теория атома водорода по Бору. Спектр атома водорода

На основании проведенных опытов Резерфорд предложил планетарную модель атома, согласно которой атом представляет собой положительно за-

ряженное ядро, вокруг которого по круговым орбитам движутся электроны. На основании модели Резерфорда Бором была построена количественная модель простейшего атома – *водорода*. Предложенная модель атома, хотя и является полуклассической, представляет собой наглядную модель, использующую понятие стационарных состояний, объясняющую энергетические и спектральные закономерности атомной структуры. В основу развитой им модели Бор положил ряд *постулатов*:

1. Атом может находиться только в особых, стационарных состояниях, в которых он не излучает и не поглощает энергии. Стационарным состояниям соответствуют стационарные орбиты, по которым электроны движутся с ускорением, но излучения не происходит.

2. Излучение (поглощение) света происходит при переходе атома из одного стационарного состояния в другое. Энергия излучаемого либо поглощаемого кванта света равна разности энергий в начальном и конечном состоянии ($E_n > E_k$):

$$h\nu = E_n - E_k, \quad (1)$$

где h – постоянная Планка ($h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с), ν – частота световой волны.

Кроме того, согласно *правилу квантования орбит*, из всех возможных орбит электрона являются разрешенными только те, на которых укладывается целое число длин волн де Бройля для электрона $2\pi r = n\lambda$, $n = 1, 2, 3, \dots$:

$$2\pi r = n \frac{h}{m\nu}; m\nu r = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar.$$

Таким образом, момент импульса $L = m\nu r$ электрона *квантуется*, принимает только определенные значения, равные целому числу n , умноженному на $\hbar = h/2\pi$:

$$m\nu r = n\hbar. \quad (2)$$

Полная энергия электрона складывается из кинетической и потенциальной энергий:

$$E = E_k + E_n = \frac{m\nu^2}{2} + \left(-\frac{ke^2}{r} \right), \quad (3)$$

где $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$.

Применяя второй закон Ньютона к движущемуся по орбите электрону

$$F = ma_{ц} = \frac{m\nu^2}{r},$$

и учитывая выражение для кулоновской силы $F = \frac{ke^2}{r^2}$, получаем $\frac{ke^2}{r^2} = \frac{m\nu^2}{r}$

$$\frac{ke^2}{2r} = \frac{m\upsilon^2}{2}. \quad (3)$$

Кинетическая энергия равна по модулю половине потенциальной. Таким образом, *полная энергия* электрона

$$E = \frac{ke^2}{2r} + \left(-\frac{ke^2}{r} \right) = -\frac{ke^2}{r}. \quad (4)$$

Радиус орбиты можно получить, решив совместно систему уравнений (2) и (3)

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2 n^2}{me^2}. \quad (5)$$

Определим радиус первой орбиты (*первый боровский радиус*)

$$r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

Радиусы стационарных орбит также квантованы и выражаются через r_1 : $r_n = r_1 n^2$, и равны соответственно $r_1, 4r_1, 9r_1 \dots$

Заменив r в уравнении (4) выражением (5), получим

$$E = E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (6)$$

Разрешенные значения энергии определяются соотношением (6), где n принимает значения 1, 2, 3, 4 Число n называется *главным квантовым числом*. Оно определяет энергию электрона на данном уровне.

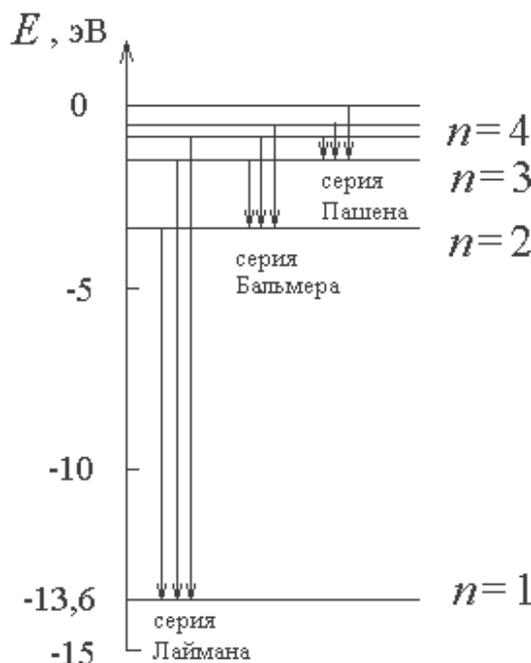


Рис. 3.1

Энергетическая диаграмма изображена на рис. 3.1. Состояние с минимальной энергией, или основное состояние, соответствует $n = 1$, а его энергия $E_1 = -13,6$ эВ. Поэтому выражение (6) можно записать в более компактной форме

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}. \quad (7)$$

Частота излучения, соответствующая переходу из состояния с энергией E_n в состояние с E_k с учетом второго постулата, может быть найдена:

$$\nu = \frac{E_n - E_k}{2\pi\hbar} = \frac{me^4}{64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3} \cdot \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_n^2} \right). \quad (8)$$

Т.к. $\nu = \frac{c}{\lambda}$, аналогичное соотношение для длины волны излучения имеет вид

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3 c} \cdot \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_n^2} \right) \quad \text{или} \quad \frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_n^2} \right), \quad (9)$$

где введена постоянная величина $R = \frac{me^4}{64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3 c} = 1,0974 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ – постоянная Ридберга.

Переходы между различными уровнями энергии объединены в серии (рис. 3.1).

Серия Лаймана (ультрафиолетовая область спектра) включает длины волн (частоты) излучения при переходе из выше лежащих уровней в основное состояние (см. рис. 3.1). Длины волн излучения определяется формулой

$$\frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

где n принимает значения 2, 3, 4 и т.д.

Длины волн *серии Бальмера* (видимая область спектра) определяются переходами на второй уровень (рис. 3.2)

$$\frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

где n принимает значения 3, 4, 5 и т.д.

Длины волн *серии Пашена* (инфракрасная область спектра) определяются переходами на третий уровень (рис. 3.3)

$$\frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

где n принимает значения 4, 5, 6 и т.д.

Результаты теории Бора совпали с экспериментальными данными. Однако применение теории Бора к более сложным атомным системам не-

возможно. Проблема состоит в том, что для описания явлений атомных масштабов законы классической физики неприменимы. Возникла необходимость построения новой теории – квантовой физики.

Атом водорода в квантово-механическом описании. Квантовые числа

Атом водорода с его самой простой структурой представляет собой очень хороший объект для применения уравнения Шредингера. С точки зрения квантовой механики электрон находится в потенциальной яме кулоновского поля ядра. Поскольку в атоме водорода потенциальная энергия электрона равна

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

то электрон находится в атоме в потенциальной яме гиперболической формы. В результате это приводит к существованию дискретных значений энергии E_n , каждой из которых соответствует система волновых функций ψ .

Уравнение Шредингера в этом случае принимает вид

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\psi = 0. \quad (10)$$

Поскольку поле является центрально симметричным, удобно воспользоваться сферической системой координат: r, θ, φ . Подставив в (10) выражение для оператора Лапласа в сферических координатах, получим уравнение

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0. \quad (11)$$

Будем решать уравнение (11), основываясь на методе разделения переменных. Искомую волновую функцию представим в виде произведения радиальной части $R(r)$, зависящей только от расстояния до ядра и угловую $Y(\theta, \varphi)$, зависящую от углов:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi). \quad (12)$$

Подставив (11) в (12), умножив все на r^2/R и переставив члены, получим

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right\} \frac{1}{Y} = - \left\{ \frac{r^2}{R} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \right) \right\} R$$

Данное уравнение распадается на два уравнения, включающие постоянное число $l(l+1)$:

$$\left\{ \frac{r^2}{R} \left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \right) \right\} R = l(l+1); \quad (13)$$

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right\} \frac{1}{Y} = -l(l+1). \quad (14)$$

Теперь разделим переменные в уравнении (14), содержащем θ и φ , подставив в него функцию вида $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ и, умножив на $\sin^2\theta/\Phi\Theta$.

$$\frac{\sin^2 \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + l(l+1) \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}. \quad (15)$$

Обозначив константу разделения $-m_l^2$ в (15), получим два уравнения

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \right) = 0. \quad (16)$$

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m_l^2 \Phi = 0. \quad (17)$$

Таким образом, для определения собственных волновых функций и собственных значений энергии частицы мы получили три уравнения (13), (16) и (17), причем последнее из них содержит только один параметр m_l , а (16) и (17) по два.

Решение начинается с уравнения (16), из которого находятся значения m_l . Параметр m_l может принимать значения $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. Соотношение (17) является уравнением на собственные волновые функции и собственные значения оператора *проекции момента импульса*. Величина проекции момента импульса определяется *магнитным квантовым числом* m_l :

$$L_z = m_l \hbar,$$

проекция момента импульса принимает дискретные значения, т.е. квантуется. Волновая функция Φ , являющаяся решением уравнения (17) определяется выражением

$$\Phi(\varphi) = A e^{im_l \varphi},$$

значение *реальной* части волновой функции для различных m_l представлено в табл. 3.1.

Уравнение (13) можно переписать следующим образом

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} = 0$$

или

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(rR) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) = 0. \quad (18)$$

Как видим, в уравнении (18) в скобках у потенциальной энергии появилась добавка. Можно показать, что добавке соответствует энергия вращательного движения

$$\frac{L^2}{2mr^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2},$$

где *момент импульса* частицы равен

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}. \quad (19)$$

Квантовое число l может принимать значения $l = 0, 1, 2 \dots n-1$. Каждому значению l соответствует $2m_l + 1$ значений m_l . Квантовое число l получило название *орбитального квантового числа*, и оно определяет величину *момента импульса электрона* (19).

Решение уравнения (18) для радиальной части волновой функции $R(r)$ дает дискретный набор значений *энергии*

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (20)$$

Результат нахождения энергии в рамках квантовой механики (20) совпадает с классическим расчетом в теории Бора. Выражения для радиальной части волновой функции $R(r)$ представлены в табл. 3.2.

Состояния с $l = 0$ называют *s-состояниями*. В *s-состоянии* ($l = 0, m_l = 0$) волновая функция сферически симметрична (т.е. не зависит от углов θ и φ): $\psi = R(r)$ (табл. 3.1 и 3.2). Момент импульса электрона равен нулю.

Состояния с $l = 1$ называют *p-состояниями*. В *p-состоянии* m_l может уже принимать три значения: $-1, 0, 1$. Волновая функция в этом состоянии является комбинацией трех функций, а значит, зависит от трех координат.

Состояния с $l = 2$ называют *d-состояниями*, а с $l = 3$ – *f-состояниями*.

Таблица 3.1

Функции $\Theta(\theta)$ и $\Phi(\varphi)$ для *s-, p-, d-состояний* (с точностью до нормировочного множителя)

Состояние	l	m_l	$\Theta(\theta)$	$\Phi(\varphi)$
<i>s</i>	0	0	1	1
<i>p</i>	1	0	$\cos\theta$	1
		1	$\sin\theta$	$\cos\varphi$
		-1		$\sin\varphi$
<i>d</i>	2	0	$3\cos^2\theta - 1$	1
		1	$\sin\theta\cos\theta$	$\cos\varphi$
		-1		$\sin\varphi$
		2	$\sin^2\theta$	$\cos 2\varphi$
		-2		$\sin 2\varphi$

Таблица 3.2

Функции $R(r)$ для s -, p -, d -состояний (с точностью до нормировочного множителя)

Состояние	n	l	$R(\rho), \rho = r/a$
1s	1	0	$e^{-\rho}$
2s	2	0	$(2 - \rho)e^{-\frac{\rho}{2}}$
2p	2	1	$\rho e^{-\frac{\rho}{2}}$
3s	3	0	$(21 - 18\rho + 2\rho^2)e^{-\frac{\rho}{3}}$
3p	3	1	$(6 - \rho)\rho e^{-\frac{\rho}{3}}$
3d	3	2	$\rho^2 e^{-\frac{\rho}{3}}$

Итак, волновая функция определяется набором трех квантовых чисел n, l, m_l и зависит от переменных r, θ, φ . Ее обозначают $\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi)$. Так, волновая функция в основном 1s-состоянии определяется соотношением

$$\psi_{100} = R(r) = Ae^{-\frac{r}{a}},$$

где $a = 0,53 \cdot 10^{-10}$ м – первый боровский радиус, $A = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$ – коэффициент, который определяется с помощью условия нормировки:

$$\int_0^{\infty} A^2 e^{-\frac{2r}{a}} 4\pi r^2 dr = 1.$$

Волновая функция s -состояния является чисто радиальной, а значит сферически симметричной и не зависит от углов.

Волновые функции используются для определения вероятности нахождения электрона. Вероятность обнаружить электрон в элементе объема dV шарового слоя в основном ($n = 1$) s -состоянии равна

$$dP = |R(r)|^2 dV = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} \right)^2 4\pi r^2 dr = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} dr. \quad (21)$$

Радиальная плотность вероятности

$$\rho = \frac{dP}{dr} = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} \quad (22)$$

определяет вероятность обнаружить электрон на заданном расстоянии r , от ядра.

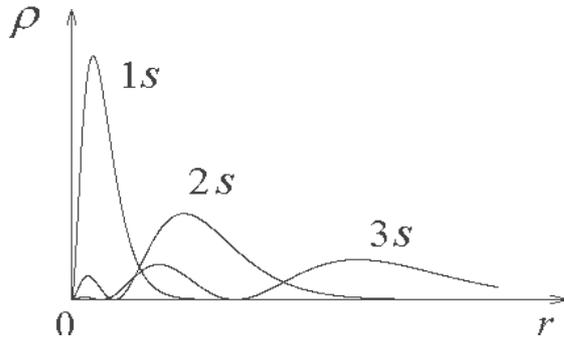


Рис. 3.2

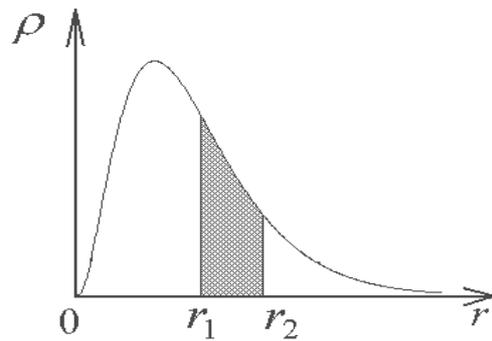


Рис. 3.3

График зависимости $\rho(r)$ для $1s$ -состояния приведен на рис. 3.2. Максимуму функции $\rho(r)$ соответствует расстояние, совпадающее с радиусом первой боровской орбиты. Графики $\rho(r)$ для $2s$ и $3s$ -состояний имеют уже несколько максимумов, вероятность встретить электрон дальше от ядра возрастает.

Для определения вероятности обнаружения электрона в шаровом слое от r_1 до r_2 , например, в $1s$ -состоянии, необходимо вычислить интеграл

$$P = \int_{r_1}^{r_2} |R(r)|^2 dV = \int_{r_1}^{r_2} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} \right)^2 4\pi r^2 dr. \quad (23)$$

Искомой вероятности соответствует площадь криволинейной трапеции (рис. 3.3).

Спин электрона. Принцип Паули

Опытами О. Штерна и В. Герлаха в 1921 г. было установлено, что наблюдается пространственное квантование атомов с одним валентным электроном, находящимся в s -состоянии. В таком состоянии у атомов отсутствует момент импульса. Пространственное квантование, обнаруженное в таких опытах, относилось к собственному моменту импульса электрона – спину и подтвердило наличие двух возможных ориентаций спина в магнитном поле.

Абсолютное значение спинового момента импульса электрона находится по формуле

$$L_s = \sqrt{s(s+1)}\hbar, \quad (24)$$

s – спиновое квантовое число электрона, равное $1/2$. Поэтому численное значение спина электрона равно

$$L_s = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar.$$

Пространственное квантование спина означает, что проекция вектора спина на направление внешнего поля находится по формуле

$$L_{sz} = m_s \hbar, \quad (25)$$

m_s – магнитное спиновое квантовое число, которое принимает значения $\pm \frac{1}{2}$.

Полная характеристика квантового состояния электрона в атоме водорода требует задания четырех квантовых чисел: главного квантового числа n ; орбитального l ; магнитного m_l ; спинового m_s .

При этом каждому значению энергии будет соответствовать несколько состояний с различными l , m_l , m_s . Состояния с одинаковой энергией называются *вырожденными*, а число различных состояний, соответствующих какому-либо значению энергии, называют *кратностью вырождения*. Доказывается, что кратность вырождения энергетического уровня с главным квантовым числом n равна $2n^2$.

Принцип Паули: в любом атоме не может быть двух электронов, находящихся в двух одинаковых стационарных состояниях, определяемых набором четырех квантовых чисел – главного n , орбитального l , магнитного m_l и спинового m_s .

Принципу Паули подчиняются и другие частицы, имеющие полуцелый спин (в единицах \hbar) – *фермионы*. Итак, в любой системе фермионов не может быть двух частиц, находящихся в одинаковых квантовых состояниях.

Рентгеновские спектры

Рентгеновские лучи возникают при столкновениях быстрых электронов с атомами вещества. Они обладают всеми свойствами, которые характеризуют световые лучи, однако, оптические свойства рентгеновских лучей выражены слабо и труднонаблюдаемы (например, коэффициент преломления лучей в средах отличается от единицы только в шестом знаке) [1].

Рентгеновские лучи представляют собой электромагнитное излучение с очень короткими длинами волн от 0,06 до 120 Å. Со стороны длинных волн рентгеновские лучи перекрываются ультрафиолетовыми лучами, а коротковолновое рентгеновское излучение сливается с γ -лучами радиоактивных веществ.

Рентгеновские лучи получают в настоящее время при помощи рентгеновских трубок, представляющих собой баллон с разреженным воздухом, внутрь которого введены два металлических электрода: катод, являющийся источником электронов в трубке, и анод (или антикатод), являющийся местом возбуждения рентгеновских лучей при бомбардировке его электронами [8].

Для ускорения электронов между анодом и катодом создается напряжение порядка десятков и сотен киловольт.

В зависимости от способа эмиссии электронов из катода рентгеновские трубки разделяются на газонаполненные, или ионные, и вакуумные, или накальные (электронные).

Более употребительны вакуумные рентгеновские трубки. Источником свободных электронов в них является вольфрамовая нить, накаливаемая током от вспомогательного источника и служащая катодом трубки. Давление воздуха в этих трубках не превышает $10^{-6} - 10^{-7}$ мм рт. ст. Освобожденные из катода электроны ускоряются электрическим полем и, двигаясь к аноду, достигают скоростей порядка сотен тысяч километров в секунду, в зависимости от величины напряжения между анодом и катодом. Достигнув анода, электроны резко затормаживаются при ударе о его поверхность. При этом происходит превращение части кинетической энергии электронов в энергию электромагнитного излучения; однако большая часть энергии электронов превращается в энергию молекулярно-теплового движения частиц анода, что вызывает его сильное нагревание. Коэффициент полезного действия рентгеновских трубок невелик и зависит от анодного напряжения и вещества анода (0,15 % при 20 кВ и 7,5 % при 1000 кВ). Интенсивность рентгеновского излучения определяется эмпирической формулой

$$I = kiU^2Z,$$

где i – сила тока в трубке; U – напряжение; Z – порядковый номер атома вещества антикатада (анода); K – коэффициент пропорциональности.

Рентгеновское излучение, возникающее в результате торможения электронов, называется «тормозным».

Возникновение тормозного излучения можно объяснить следующим образом. Движущиеся электроны, как и всякий электрический ток, образуют вокруг себя магнитное поле. Резкое изменение скорости электронов при ударе об антикатод равносильно ослаблению и исчезновению магнитного поля, в результате чего и возникают электромагнитные волны.

Тормозное рентгеновское излучение имеет сплошной спектр и потому часто называется «белым излучением» (по аналогии со сплошным спектром белого света). Это объясняется тем, что одни электроны тормозятся быстрее, другие медленнее, что и приводит к возникновению электромагнитного излучения с различными длинами волн.

По квантовой теории сплошной спектр тормозного излучения объясняется следующим образом: пусть кинетическая энергия электрона перед его соударением с анодом равна $\frac{m\upsilon_0^2}{2}$; если часть этой энергии превраща-

ется при соударении в тепло A , то энергия фотона рентгеновского излучения будет равна

$$h\nu = \frac{m\nu_0^2}{2} - A. \quad (26)$$

Так как при случайных соударениях величина A имеет различное значение, то энергия фотона $h\nu$ может быть различной. Следовательно, в рентгеновском излучении могут присутствовать фотоны с различными частотами и спектр его будет непрерывным. На рис. 3.4 даны кривые распределения энергии в спектрах излучения рентгеновской трубки, полученные опытным путем, при двух значениях напряжения ($U_2 > U_1$).

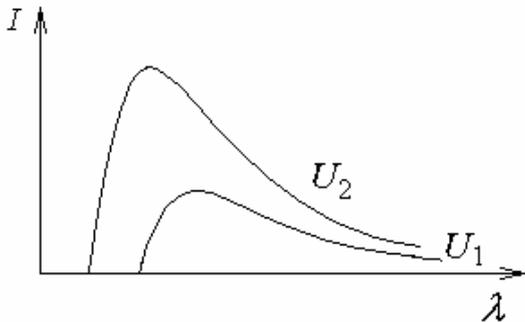


Рис. 3.4

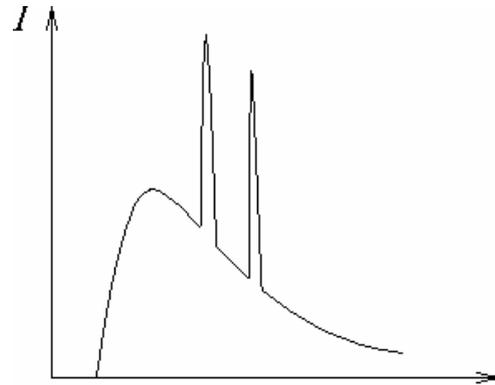


Рис. 3.5

Из рис. 3.4 видно, что при повышении напряжения интенсивность рентгеновского излучения возрастает. Далее видно, что для каждого напряжения спектр рентгеновских лучей резко обрывается со стороны коротких волн.

Существование резкой коротковолновой границы в рентгеновском спектре можно объяснить следующим образом: при ударе электрона об анод в предельном случае он может отдать всю свою энергию на излучение. Тогда из формулы (26) следует, что

$$\frac{m\nu^2}{2} = h\nu_{\max} = \frac{hc}{\lambda_{\min}}.$$

Это равенство и определяет коротковолновую границу рентгеновского спектра. Так как $\frac{m\nu^2}{2} = eU$, где U – приложенная разность потенциалов и e – заряд электрона, то

$$eU = \frac{hc}{\lambda_{\min}}; \quad \lambda_{\min} = \frac{hc}{eU}.$$

Следовательно, минимальная длина волны тормозного излучения обратно пропорциональна напряжению трубки.

При больших напряжениях в рентгеновской трубке наряду с рентгеновским излучением, имеющим сплошной спектр, возникает рентгеновское излучение, имеющее линейчатый спектр. Это излучение называется характеристическим. Последний налагается на сплошной спектр, как это показано на рис. 3.5.

Механизм возбуждения характеристического излучения иной, чем тормозного излучения. Это излучение возникает в том случае, когда в результате удара электронов атомы вещества анода приходят в возбужденное состояние с большой энергией. При возвращении атомов в нормальное энергетическое состояние происходит излучение фотонов характеристического излучения с энергией, равной разности энергии атома в возбужденном и нормальном состояниях. Так как атомы различных веществ имеют различные энергетические уровни в зависимости от их строения, то и спектры характеристического излучения зависят от строения атомов вещества анода.

Характеристическое рентгеновское излучение также получается при бомбардировке вещества α -частицами, протонами или его облучением достаточно короткими рентгеновскими лучами.

Если при электронной бомбардировке возбуждается как сплошное, так и характеристическое излучение, то при ударах α -частиц или протонов возникают только характеристические лучи. При возбуждении рентгеновских лучей путем облучения вещества другими рентгеновскими лучами излучение состоит частью из рассеянных первичных лучей, частью из характеристического излучения данного вещества.

При рассеянии рентгеновских лучей наблюдаются и первичные фотоны. Это объясняется тем, что часть фотонов испытывает соударение с сильно связанными электронами, лежащими во внутренних электронных оболочках атома. При этом фотон взаимодействует уже с атомом в целом, т.к. масса атома велика, то по закону упругого соударения фотон почти не передает атому энергии и, следовательно, длина волны фотона при рассеивании не изменяется.

Характеристические рентгеновские спектры различных элементов имеют однотипную структуру и состоят из нескольких серий, обозначаемых буквами K , L , M , N и O . Каждая серия насчитывает небольшое число линий, обозначаемых в порядке возрастания частоты индексами α , β , γ , (K_α , K_β , K_γ ; L_α , L_β , L_γ и т. д.). Спектры разных элементов имеют сходный характер. При увеличении атомного номера Z весь рентгеновский спектр лишь смещается в коротковолновую часть, не меняя своей структуры. Это объясняется тем, что рентгеновские спектры возникают при переходах электронов во внутренних электронных оболочках атомов, которые имеют сходное строение.

Схема возникновения рентгеновских спектров дана на рис. 3.6. Возбуждение атома состоит в удалении одного из внутренних электронов. Если, например, вырывается один из двух электронов K -слоя, то освободившееся место может быть занято электроном из какого-либо внешнего слоя (L , M , N и т. д.). При этом возникает K -серия. Аналогично возникают и другие серии. Серия K обязательно сопровождается остальными сериями, т.к. при испускании ее линий освобождаются уровни в слоях L , M и т.д., которые будут в свою очередь заполняться электронами из более высоких слоев.

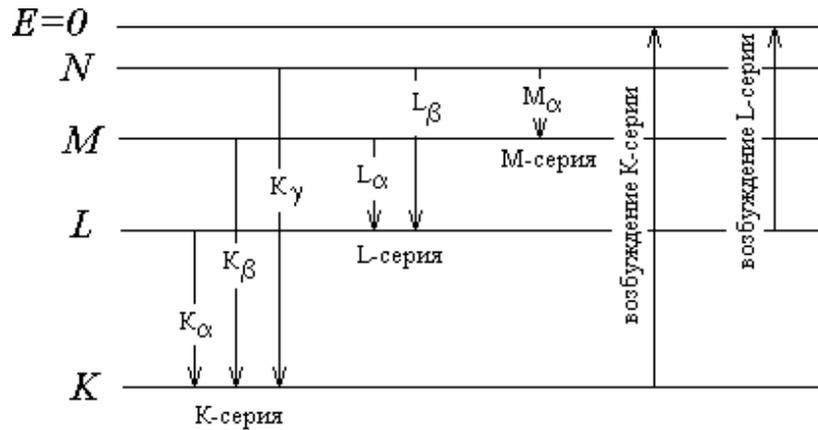


Рис. 3.6. Схема возникновения различных серий рентгеновского спектра

В 1913 г. английский физик Мозли установил закон, связывающий частоты линий рентгеновского спектра с атомным номером Z испускающего их элемента. Согласно этому закону частоты линии K_{α} можно представить формулой

$$\omega_{K_{\alpha}} = R(Z - 1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right);$$

линии K_{β} – формулой

$$\omega_{K_{\beta}} = R(Z - 1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right);$$

линии L_{α} – формулой

$$\omega_{L_{\alpha}} = R(Z - 7,5)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$$

и т.д., где R – постоянная Ридберга.

Все эти формулы имеют вид

$$\omega = R(Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right). \quad (27)$$

Закон Мозли обычно выражают формулой

$$\sqrt{\omega} = C(Z - \sigma) \quad (28)$$

(C и σ – константы, имеющие свое значение для каждой линии) и формулируют следующим образом: корень квадратный из частоты является линейной функцией атомного номера Z .

Закон Мозли позволяет по измеренной длине волны рентгеновских линий точно установить атомный номер данного элемента; он сыграл большую роль при размещении элементов в периодической системе.

Мозли дал простое теоретическое объяснение найденного им закона. По Мозли линии с частотами, определяемыми формулой (27), совпадают с линиями, испускаемыми при переходе электрона, находящегося в поле заряда $(Z - \sigma) \cdot e$ с уровня с номером n_2 на уровень с номером n_1 . Смысл константы σ легко понять: электроны, совершающие переходы при испускании рентгеновских лучей, находятся под воздействием ядра, притяжение которого несколько ослаблено действием остальных окружающих его электронов. Это экранирующее действие и находит свое выражение в необходимости вычесть из Z некоторую величину σ .

Необходимо отметить, что формула (27) основана на допущении, что постоянная экранирования σ для обоих уровней имеет одинаковое значение. На самом же деле экранирование, например, для K -уровня будет слабее, чем для L -уровня, потому что электрон, находящийся в L -оболочке, экранируют оба электрона K -оболочки и, кроме того, частичное участие в экранировании принимают остальные электроны L -оболочки, в то время как для электрона K -оболочки экранирование осуществляется только одним K -электроном. Более строго формулу (27) следует писать в виде

$$\omega = R \left[\frac{(Z - \sigma_1)^2}{n_1^2} - \frac{(Z - \sigma_2)^2}{n_2^2} \right]. \quad (29)$$

Очень важно отметить, что для возбуждения, например, серии K необходимо предварительно затратить энергию на удаление электрона за пределы атома из слоя K . Освободившееся в слое K место может быть заполнено электроном из любого слоя, т.е. может сопровождаться излучением любой линии серии K . Обычно в излучении принимают участие множество атомов: некоторые из них излучают одну линию, другие – другую, следовательно, появляется сразу вся K -серия. Наряду с этим возникают и другие серии L , M и т.д.

Таким образом, в рентгеновских спектрах (в отличие от оптических спектров) серия или возникает вся сразу, или не возникает вовсе (если приносимая порция энергии недостаточна для удаления электрона из какой-либо оболочки за пределы атома).

Рентгеновское излучение обладает как волновыми, так и корпускулярными свойствами. Причем корпускулярные свойства такие как фотоэф-

эффект и эффект Комптона проявляются особенно резко, т.к. энергия фотонов растет обратно пропорционально длине волны; длины же волн рентгеновских лучей очень малы.

Кроме испускания рентгеновского излучения, в тяжелых атомах наблюдается эффект Оже. Энергия, освобождающаяся при спонтанном электронном переходе из L -, M - или N -оболочки атома в состояние на более глубокую оболочку, оказывается больше энергии ионизации для внешних (валентных) электронов. За счет энергии перехода может происходить не испускание фотона рентгеновских лучей, а удаление внешнего электрона из атома, не сопровождающееся излучением (безрадиационные, или безызлучательные переходы) [1].

Многоэлектронные атомы

Квантовая механика дает удовлетворительное описание свойств простейшего атома – атома водорода. Значительно сложнее обстоит дело для атомов, содержащих большое количество электронов. Потенциальная энергия каждого такого электрона складывается из энергии притяжения

его к ядру $U_1 = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i}$ (Ze – заряд ядра) и энергии отталкивания от других электронов) $U_{ik} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ik}}$ (r_{ik} – расстояние между i -м и k -м электронами).

Наличие в потенциальной энергии членов U_{ik} не позволяет получить точного решения уравнения Шредингера. Поэтому прибегают к приближенным методам решения этого уравнения. Один из этих методов, получивший название метод самосогласованного поля, состоит в том, что движение электрона предполагают в некотором результирующем поле, образованном ядром и остальными $(Z-1)$ электронами. Это поле называют самосогласованным.

Движение электрона в самосогласованном поле можно рассматривать в первом приближении, как движение в водородоподобном атоме, состоящем из ядра с зарядом $+Ze$ и сферически симметричной оболочки, образованной $(Z-1)$, электронами. Поэтому в описании свойств такого электрона сохраняется много общего с описанием свойств электрона в атоме водорода.

Классификация электронов

Приближенное решение уравнения Шредингера для многоэлектронного атома позволяет определить энергетические уровни, на которых могут

размещаться электроны атома. Распределение их по составляющим определяется принципом Паули, установленного на основе обобщения огромного экспериментального материала. Принцип Паули утверждает, что в каждом состоянии, характеризующемся 4 квантовыми числами – n , l , m_l , m_s может находиться только один электрон.

По мере увеличения положительного заряда ядра при переходе от одного химического элемента к другому увеличивается число электронов, образующих оболочку атома. Каждый вновь присоединяемый электрон стремится занять состояние с наименьшей энергией. Однако, если это состояние уже занято, то оно не допустимо по Паули для других электронов и им приходится размещаться в других состояниях. В табл. 3.3 представлено распределение электронов в соответствии с принципом Паули и в предположении, что меньшим значениям квантовых чисел соответствуют меньшие значения энергии. Электроны с одним и тем же квантовым числом n образуют электронный слой. Этим слоям присвоены следующие названия: $n = 1$ называется *K* слоем, с $n = 2$ – *L* слоем, с $n = 3$ – *M* слоем, с $n = 4$ – *N* слоем, с $n = 5$ – *O* слоем и т.д. В каждом слое может разместиться $2n^2$ электронов. Внутри каждого слоя электроны делятся на подгруппы, различающиеся орбитальным квантовым числом l : подгруппа *S*, имеющая $l = 0$, подгруппа *p*, имеющая $l = 1$, подгруппа *d*, имеющая $l = 2$, и т.д. В каждой подгруппе может разместиться $2(2l + 1)$ электронов.

Распределение электронов по состояниям записывается с помощью цифр и символов *s*, *p*, *d*, *f*, *g*. Цифра слева указывает порядковый номер электронного слоя и равна главному квантовому числу n ; цифра справа указывает число электронов в подгруппе. Например, распределение по состояниям первых 10 электронов табл. 1 записывается следующим образом: $1S^2 2S^2 2P^6$. Это означает, что 2 электрона размещены в подгруппе *S* первого слоя, 2 электрона в подгруппе *S* второго слоя [Д2].

Табл. 3.4 представляет собой периодическую таблицу химических элементов, построенную на основе принципа Паули. Число электронов в каждом слое должно соответствовать числу элементов в периоде. Так первый период должен содержать 2 элемента, второй – 8, третий – 18, четвертый – 32, и т.д. Каждый период оканчивается элементом, у которого полностью укомплектован соответствующий электронный слой. Электронная оболочка такого атома обладает сферической симметрией и весьма устойчива. Поэтому такой атом не должен проявлять склонность отдавать или приобретать дополнительные электроны и в химическом отношении должен быть инертным.

Началом каждого периода служит элемент, у которого начинается комплектование нового электронного слоя. Так как сферически симметричные электронные облака укомплектованных внутренних оболочек атома

предельно компенсируют заряд ядра, то связь вновь присоединенного электрона с ядром будет относительно слабой. Поэтому в начале каждого периода должен стоять типичный металл.

Таблица 3.3

<i>n</i>	Наименование слоя	Число электронов в подгруппе					Число электронов в слое
		<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	
1	<i>K</i>	2					2
2	<i>L</i>	2	6				8
3	<i>M</i>	2	6	10			18
4	<i>N</i>	2	6	10	14		32
5	<i>O</i>	2	6	10	14	18	50

Таблица 3.4

Периоды	Атомный номер	Элементы	<i>K</i>			<i>L</i>			<i>M</i>			<i>N</i>		
			<i>s</i>	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>
I	1	H	1											
	2	He	2											
II	3	Li	2	1										
	4	Be	2	2										
	5	B	2	2	1									
	6	C	2	2	2									
	7	N	2	2	3									
	8	O	2	2	4									
	9	F	2	2	5									
	10	Ne	2	2	6									
III	11	Na	2	2	6	1								
	12	Mg	2	2	6	2								
	13	Al	2	2	6	2	1							
	14	Si	2	2	6	2	2							
	15	P	2	2	6	2	3							
	16	S	2	2	6	2	4							
	17	Cl	2	2	6	2	5							
	18	Ar	2	2	6	2	6							
IV	19	K	2	2	6	2	6			1				
	20	Ca	2	2	6	2	6			2				
	21	Sc	2	2	6	2	6	1	2					
	22	Ti	2	2	6	2	6	2	2					
	23	V	2	2	6	2	6	3	2					
	24	Cr	2	2	6	2	6	4	1					
	25	Mn	2	2	6	2	6	5	2					
	26	Fe	2	2	6	2	6	6	2					
	27	Co	2	2	6	2	6	7	2					
	28	Ni	2	2	6	2	6	8	2					
	29	Cu	2	2	6	2	6	10	1					
	30	Zn	2	2	6	2	6	10	2					
	31	Ga	2	2	6	2	6	10	2	1				
	32	Ge	2	2	6	2	6	10	2	2				
	33	As	2	2	6	2	6	10	2	3				
	34	Se	2	2	6	2	6	10	2	4				
	35	Br	2	2	6	2	6	10	2	5				
	36	Kr	2	2	6	2	6	10	2	6				

Периодический закон Менделеева

Сравним теоретическую табл. 3.4 с реальной периодической таблицей Д. И. Менделеева.

Первый период таблицы Менделеева содержит 2 элемента: водород и гелий. У водорода начинается и у гелия заканчивается комплектование первого электронного слоя, способного вместить лишь 2 электрона. Как и следовало ожидать, гелий является инертным газом.

Второй период таблицы Менделеева содержит 8 элементов, что также находится в соответствии с табл. 3.4. Третий электрон лития начинает комплектования второго слоя, вследствие чего литий является щелочным металлом. На 10-м элементе – неоне – заканчивается комплектование слоя, и неон оказывается инертным газом.

С 11-го электрона натрия идет заполнение 3-го электронного слоя. Согласно табл. 1 этот слой должен содержать 18 электронов. Поэтому 3-й период таблицы Менделеева должен был бы содержать 18 элементов. В действительности же он содержит лишь 8 элементов, заканчивается инертным газом аргоном. Здесь обнаруживается первое отступление таблицы Менделеева от периодической таблицы (табл. 3.4). Оно обусловлено лишь тем, что сферическая симметрия электронного облака достигается не только тогда, когда электронный слой укомплектовался полностью, но и в случае, когда заполняются первые две подгруппы – *s* и *p*, способные вместить 8 электронов. Комплектование этих подгрупп в 3-м слое как раз и заканчивается у 18-го элемента – аргона. Поэтому аргон оказывается инертным газом, завершающим 3-й период таблицы Менделеева. При этом подгруппа *3d* этого слоя остается незаполненной.

Согласно теоретической табл. 3.4 19-й электрон калия должен был бы начать комплектование как раз подгруппы *3d*. В действительности он идет в подгруппу *s* 4-ого слоя. Объясняется это тем, что сделанное при построении табл. 1 допущение, что большим квантовым числам соответствуют большие энергии, для сложных атомов оправдывается не всегда. В частности, состояние *4s* оказывается энергетически более низким, чем состояние *3d*. Поэтому в подгруппу *4s* идет не только 19-й электрон калия, но и 20-й электрон кальция. Зато с 21-го электрона скандия начинается комплектование незаполненной подгруппы *3d*, способной вместить 10 электронов. Подгруппы *4s* и *3d* энергетически настолько близки, что в ряде элементов наблюдается переход электронов из одной подгруппы в другую. Этим объясняется переменная валентность и другие свойства таких важных в практическом отношении металлов, как хром, марганец, железо, кобальт и никель.

Электронная структура атомов первых 36 элементов таблицы Менделеева приведена в табл. 2.

Начиная с 29-го элемента – меди – вновь начинается комплектование 4-го слоя. Первые 2 подгруппы (*s* и *p*) этого слоя заполняются у 36-го элемента – криптона, который, как и следовало ожидать, является инертным газом.

Подобные отступления от теоретической табл. 3.4 наблюдаются и далее. Они обусловлены тем, что в сложных многоэлектронных атомах расположение энергетических уровней не совсем следует тому порядку, который свойственен свободному атому водорода.

Таким образом, квантовая механика позволила понять природу одного из основных законов естествознания – периодический закон Д. И. Менделеева. Она показала, что периодичность свойств химических элементов обусловлена повторяемостью строения внешних электронных слоев атомов при непрерывном росте их порядкового номера в таблице Д. И. Менделеева.

Молекула. Молекулярные спектры

Молекулой называется наименьшая частица данного вещества, обладающая его основными химическими свойствами и состоящая из одинаковых или различных атомов, соединенных в одно целое химическими связями (химическими силами). Химические силы имеют в своей основе различные взаимодействия внешних электронов атомов.

Большой класс молекул образуют ионные молекулы, состоящие из ионов химических элементов, входящих в молекулу. Общая сумма положительных и отрицательных зарядов ионов в молекуле равна нулю, вследствие чего ионные молекулы электрически нейтральны. Силы, обеспечивающие устойчивость молекулы, имеют электрическую природу.

Примерами типичных ионных молекул могут служить молекулы щелочно-галогидных солей, образованные ионами атомов элементов I и VII групп периодической системы: NaCl ($\text{Na}^+ \text{Cl}^-$), RbBr, CsI и т.п. Поскольку ионные молекулы могут быть образованы лишь из ионов атомов различных химических элементов, связь ионов в таких молекулах называется также гетерополярной (от греческого слова «гетеро» – «разный»).

Атомными молекулами называются молекулы, в которых основное состояние соответствует нормальным состояниям атомов. Силы, обеспечивающие устойчивость атомных молекул, являются обменными и имеют специфический квантовый характер. Они действуют между внешними электронами атомов в молекуле.

Атомные молекулы в ряде случаев образованы одинаковыми атомами. Поэтому связь атомов в таких молекулах называется гомеополярной (от

греческого слова «гомео» – «одинаковый»), или ковалентной. Гомеоплярными являются молекулы H_2 , N_2 , O_2 , молекулы гидридов, например, LiH , PdH и т.д., боридов металлов и т.д., образованные из атомов элементов первых трех групп периодической системы [1].

Электронные спектры молекул

В соответствии с возможными типами движений в молекуле волновая функция молекулы может быть приближенно представлена в виде произведения трех волновых функций, отвечающих электронным движениям, колебаниям и вращениям молекул при условии взаимной независимости этих движений:

$$\Psi = \Psi_{\text{э}} \cdot \Psi_{\text{к}} \cdot \Psi_{\text{в}}.$$

При подстановке Ψ в соответствующее уравнение Шредингера оно может распадаться на три уравнения, решение каждого из которых дает энергетический спектр соответствующего движения: электронного – $E_{\text{э}}$, колебательного – $E_{\text{к}}$, вращательного – $E_{\text{в}}$. Полная энергия молекулы приближенно равна:

$$E = E_{\text{э}} + E_{\text{к}} + E_{\text{в}}.$$

По порядку величины $E_{\text{э}} \gg E_{\text{к}} \gg E_{\text{в}}$. На рис. 3.7 схематично представлена энергетическая диаграмма электронных, колебательных и вращательных уровней.

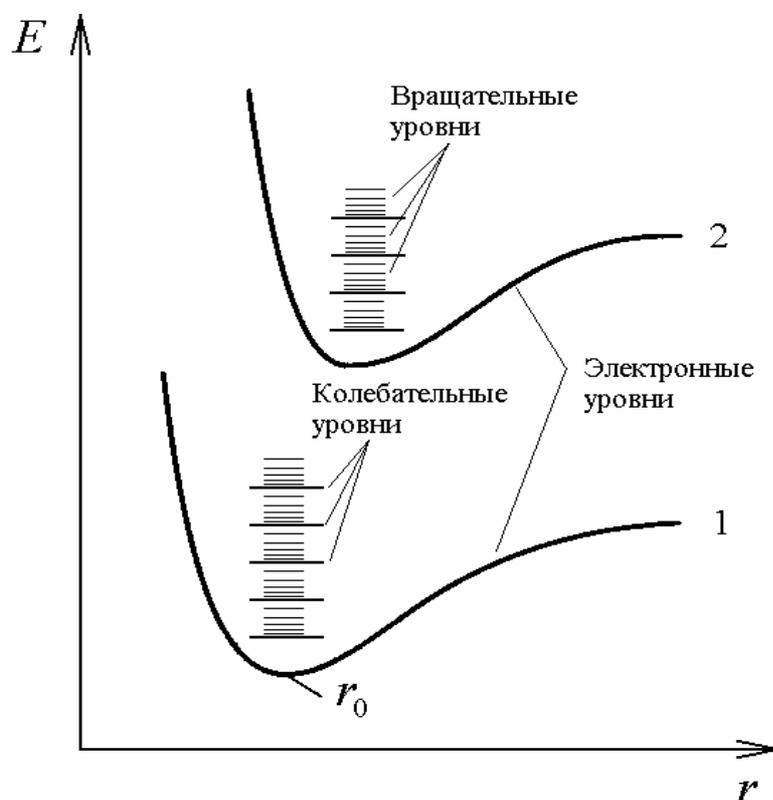


Рис. 3.7

Электронные термы (уровни) молекул не отличаются по своему происхождению от электронных термов изолированных атомов. Число электронных термов значительно превышает число этих термов в атомах. Любой атом в молекуле находится в электрическом поле остальных ее атомов; электронные уровни молекул образованы из электронных уровней ее атомов, расщепленных на многочисленные подуровни в результате эффекта Штарка во внутримолекулярном поле. Эффектом Штарка называется расщепление спектральных линий под действием на излучающее вещество внешнего электрического поля.

Энергетические электронные уровни молекулы определяются ее электронной конфигурацией, т.е. совокупностью квантовых чисел, соответствующих состояниям всех электронов молекулы. В основу систематики этих уровней и спектров молекул кладется векторная модель молекулы, являющаяся обобщением векторной модели атома. В этой модели использовано пространственное квантование орбитального и спинового моментов электрона в атоме, с последующим сложением векторов орбитального \vec{L} и спинового \vec{S} моментов двумя способами, зависящими от взаимодействия орбитальных и спиновых моментов электронов в атоме (сильная и слабая связи).

Колебательные спектры молекул

При изменении равновесных положений атомов в молекуле могут возникать их колебания около положения равновесия (внутримолекулярные колебания). В квантовой теории внутримолекулярные колебания рассматриваются как причина возникновения колебательных спектров молекул. Колеблющиеся атомы в молекуле рассматриваются во многих случаях как ангармонические осцилляторы.

В простейшем случае двухатомной молекулы ее потенциальную энергию записывают с помощью потенциала Леннарда – Джонса:

$$U(r) = \frac{a}{r^6} - \frac{b}{r^{12}},$$

где a и b – постоянные, или потенциала Морзе:

$$U(\rho) = D(1 - e^{-\alpha\rho})^2,$$

где $\rho = \frac{r - r_e}{r_e}$, α – постоянная; r_e – равновесное расстояние между атомами,

соответствующее минимуму $U(r)$; ρ – относительное смещение атомов из их равновесных положений. Величина D имеет смысл энергии диссоциа-

ции молекулы на атомы, $D = U(\infty) - U(0)$. Уравнение Шредингера для колебаний молекулы:

$$\frac{d^2\psi}{d\rho^2} + \frac{8\pi I_e}{h^2} (E_k - U(\rho))\psi = 0,$$

где I_e – момент инерции молекулы в равновесном состоянии; E_k – колебательная энергия молекулы.

При малых колебаниях молекулы $U(\rho) \approx D\alpha^2\rho^2$ и уравнение Шредингера сводится к уравнению для гармонического осциллятора. Колебательный энергетический спектр

$$E_\nu = h\nu \left(\nu + \frac{1}{2} \right),$$

где $\nu = \frac{\alpha}{2\pi} \sqrt{\frac{2D}{I_e}}$; ν – частота собственных колебаний осциллятора; $\nu = 0, 1, 2, \dots$

называется колебательным квантовым числом, для которого имеет место правило отбора

$$\Delta\nu = \pm 1.$$

Величина

$$E_0 = \frac{1}{2} h\nu$$

называется нулевой колебательной энергией. Колебательные энергетические уровни рассматриваемых молекул находятся на одинаковом расстоянии друг от друга.

В случае ангармонических колебаний двухатомной молекулы ее энергетический колебательный спектр

$$E_\nu = h\nu \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - h\chi\nu \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2,$$

где $\chi = \frac{h\nu}{4D} \ll 1$ называется постоянной ангармоничности.

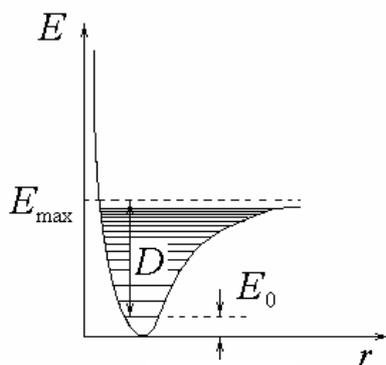


Рис. 3.8

Колебательный энергетический спектр показан на рис. 3.8. Расстояние между энергетическими уровнями

$$\Delta E = h\nu - 2(\nu + 1)\chi h\nu$$

убывает с ростом ν . В этом случае правило отбора для ν не существует. Интенсивность линий спектра быстро убывает с ростом $\Delta\nu$. Энергетические уровни сходятся к границе $\Delta E = 0$, для которой

$$\nu_{\text{макс}} = \frac{1}{2\chi} - 1 \quad \text{и} \quad E_{\text{макс}} = \frac{h\nu}{4\chi} = D,$$

т.е. максимальная колебательная энергия молекулы равна ее энергии диссоциации D .

Вращательные спектры молекул

Возможны два основных вида вращения молекул: вращение молекулы как целого вокруг некоторого направления или точки и вращение одних частей молекулы относительно других – внутреннее вращение.

Характер вращения молекулы как целого определяется пространственным расположением атомов в молекуле, т.е. формой молекулы, которая может быть охарактеризована подобно твердому телу тремя главными моментами инерции, отвечающими трем главным осям молекулы:

$$I_i = \sum_k m_k r_k^2, \quad i = 1, 2, 3,$$

где m_k – масса k -ого атома в молекуле, а r_k – его расстояние от соответствующей главной оси. Главные оси симметричных молекул совпадают с их осями симметрии, а плоскость симметрии всегда перпендикулярна к одной из главных осей. Если все I_i молекулы равны друг другу, то она называется сферическим волчком; если равны друг другу два из I_i , то молекула называется симметричным волчком; если все три I_i различны, то молекула называется асимметричным волчком. К первому типу относятся молекулы P_4 , CH_4 , CCl_4 и т.п., ко второму типу – NH_3 , PCl_3 , BCl_3 и т.п., к третьему – H_2O и т.п.

Момент инерции двухатомной молекулы относительно оси, проходящей через ее центр инерции перпендикулярно прямой, соединяющей ядра атомов

$$I = \mu d^2,$$

где $\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$ – приведенная масса молекулы, m_1 и m_2 – массы каждого из атомов в молекуле (в двухатомной молекуле); d – межъядерное расстояние.

Энергия вращательного движения двухатомной молекулы

$$E_J = BJ(J+1),$$

где J – вращательное квантовое число ($J = 0, 1, 2, 3 \dots$); $B = \frac{\hbar^2}{2\mu d^2}$ – вращательная постоянная.

В общем случае распределение интенсивности между отдельными линиями во вращательном спектре связано с распределением молекул по

вращательным состояниям, характеризуемым числами J . Если это распределение является бoльцмановским, то

$$N_J = N \frac{(2J+1)e^{-\frac{hBJ(J+1)}{kT}}}{\sum_{J=0}^{\infty} (2J+1)e^{-\frac{hBJ(J+1)}{kT}}},$$

где N_J – число молекул, находящихся на j -ом вращательном уровне; N – общее число молекул.

Электронно-колебательные спектры молекул

Электронно-колебательные спектры молекул связаны с электронными переходами в атомах молекулы, колеблющихся около своих равновесных положений. Наложение колебательного спектра на электронный проявляется в том, что каждой линии электронного перехода соответствует ряд колебательных линий, образующих полосу.

Частоты электронно-колебательного спектра двухатомной молекулы выражаются формулой Деландра:

$$\nu_{\text{эк}} = \nu_0 + \nu' \left(\nu' + \frac{1}{2} \right) - \nu' \chi \left(\nu' + \frac{1}{2} \right)^2 - \nu \left(\nu + \frac{1}{2} \right) + \nu \chi \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2,$$

где штрих относится к верхнему уровню перехода, а величины ν и χ были даны ранее.

Частоты спектра, соответствующие $\nu = \text{const}$ (фиксированному нижнему уровню перехода) образуют поперечную серию Деландра; они характерны для спектров поглощения молекул. Частоты, соответствующие $\nu' = \text{const}$ (фиксированному верхнему уровню перехода), образуют продольную серию Деландра, характерную для спектров испускания молекул. Иногда в спектрах выделяются диагональные серии Деландра с $\nu' = \nu$. В каждой серии существует нулевая полоса, обусловленная переходами $\nu = 0 \leftrightarrow \nu' = 0$ и смещенная относительно соответствующей линии электронного спектра на величину $\frac{E_0}{h}$, где E_0 – нулевая колебательная энергия молекулы.

В связи с тем, что моменты инерции молекул и связанные с ними частоты молекулярных колебаний и значения константы ангармоничности зависят от масс атомов, входящих в молекулу, в электронно-колебательных спектрах проявляется изотопический эффект. Для нулевой полосы электронно-колебательного спектра изотопическое смещение линий равно

$$\Delta\nu_0 = (y-1) \left[\nu' \left(\nu' + \frac{1}{2} \right) - \nu \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \right] - (y^2 - 1) \left[\nu' \chi' \left(\nu' + \frac{1}{2} \right)^2 - \nu \chi \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 \right],$$

где $y = \sqrt{\frac{\mu'}{\mu}}$, μ – приведенные массы молекул двух изотопных составов:

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}, m_1 \text{ и } m_2 - \text{массы каждого из атомов в молекуле (в двухатомной молекуле)}.$$

Вращательно-колебательные спектры молекул

Вращательно колебательные спектры молекул образуются при колебательных переходах в атомах молекулы, вращающейся как целое. Частоты вращательного спектра по порядку величины в сотни и тысячи раз меньше частот колебательного спектра. Вращение молекулы, не нарушая ее колебательного спектра, приводит к «размытию» его линий в полосы, в результате чего спектр приобретает характерную линейчато-полосатую структуру. Поскольку $E_3 \gg E_B$, то на спектр, соответствующий электронным переходам, вращение молекулы практически не влияет.

Вращательно-колебательный спектр молекулы при неизменной ее электронной энергии возникает при наложении колебательного спектра на вращательный:

$$\nu_{\text{BK}} = \nu_B + \nu_K = \frac{E'_B - E_B}{h} + \frac{E'_K - E_K}{h},$$

где штрихами обозначены верхние энергетические состояния в каждом из переходов.

Комбинационные спектры молекул

Явление комбинационного рассеяния состоит в том, что в спектре света, рассеянного каким-либо жидким или твердым телом, наряду с частотами излучения источника света наблюдаются также смещенные частоты. Линии спектра, которым соответствуют $\nu_c = \nu_0 - \nu$, называются стоксовыми, линии с $\nu_\alpha = \nu_0 + \nu$ – антистоксовыми, где ν_0 – первоначальная частота света. Линии ν_c, ν_α образуют комбинационный спектр молекул.

Простейшее объяснение возникновения комбинационного рассеяния сводится к следующим двум схемам взаимодействия кванта с рассеивающей молекулой:

$$h\nu_0 + E(1) \rightarrow h\nu_c + E(2); \quad h\nu_0 + E(2) \rightarrow h\nu_\alpha + E(1),$$

где $E(1)$ и $E(2)$ – энергии колебательных состояний молекулы, причем $E(1) < E(2)$.

В первом случае за счет энергии фотона $h\nu_0$ молекула переходит в более высокое колебательное энергетическое состояние и возникает рассеянный фотон с меньшей частотой ν_c .

Во втором случае взаимодействие кванта с возбужденной молекулой приводит к появлению рассеянного фотона с большей частотой ν_α , равной:

$$\nu_\alpha = \nu_0 + \frac{E(2) - E(1)}{h},$$

и переходу молекулы в более низкое колебательное состояние.

Сплошные и диффузионные спектры молекул

Сплошные (истинно непрерывные) спектры молекул характеризуются тем, что их нельзя разделить на отдельные линии при какой-либо сколь угодно высокой разрешающей способности спектрального прибора. Сплошные спектры молекул связаны с переходом молекулы из дискретного состояния с $E < 0$ в непрерывное состояние с $E > 0$. Этому переходу соответствует как ионизация молекулы, так и ее диссоциация на ионы или нейтральные атомы. Диссоциация молекулы может быть вызвана увеличением колебательной энергии молекулы до таких пределов, при которых колебательным переходам в молекуле будут соответствовать квантовые числа $\nu \geq \nu_{\text{макс}}$. В результате таких переходов молекула, перейдя в неустойчивое возбужденное состояние, уже не возвращается в исходное состояние, а диссоциирует. Диссоциация молекулы может быть также вызвана соударением ее с достаточно быстрой частицей (например, нейтроном), а также поглощением молекулой кванта излучения, обладающего достаточной энергией (фотодиссоциация).

Возникновение сплошного спектра может быть также вызвано нагреванием вещества. В результате нагревания молекулы приобретают большие скорости движения. Возникающее при этом доплеровское смещение частот спектральных линий приводит к перекрыванию линий и даже слиянию отдельных линий в полосы. Другой причиной превращения дискретного спектра молекулы в непрерывный является ударное уширение линий, проявляющееся преимущественно во вращательных спектрах и вызванное существенным уменьшением времени жизни молекулы в возбужденном состоянии и соответственным увеличением ширины линии. В результате ударного уширения вращательные линии в полосе могут перекрываться настолько, что исчезнет и вращательная структура, а при еще более высоких давлениях и температурах вещества ударное уширение может привести и к перекрыванию отдельных полос.

Диффузные спектры молекул характеризуются размытостью полос, вызванной сильным уширением вращательных линий даже при обычных давлениях и температурах. Соответствующие этому уширению времена жизни молекулы в возбужденном состоянии на один-два порядка меньше периода вращения молекулы, в результате чего исчезает квантованность вращения и связанная с ней дискретная вращательная структура полос спектра. Это явление называется так называемой преддиссоциацией молекулы. Отличие ее от диссоциации состоит в том, что последняя происходит непосредственно из дискретного устойчивого в неустойчивое состояние молекулы, характеризуемое частью потенциальной кривой (рис. 3.9), соответствующей отталкиванию атомов в молекуле, тогда как преддиссоциация возникает из возбужденного состояния молекулы.

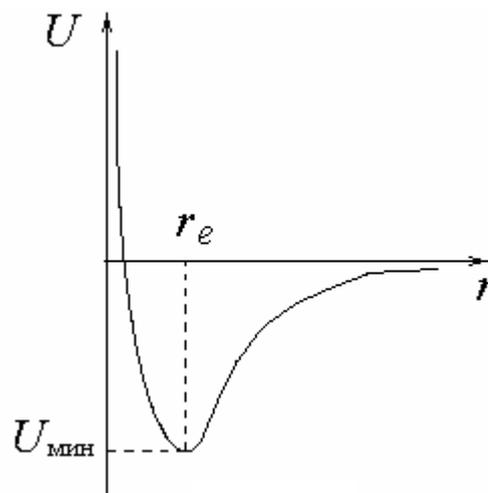


Рис. 3.9

Молекулярная спектроскопия

Изучение электронных спектров молекул дает сведения того же характера, что и изучение атомных спектров. Дополнительными являются сведения об электронных уровнях в молекуле, о распределении плотности электронов в молекулах и природе химических связей. Особый интерес для исследования структуры молекул представляет изучение колебательных и вращательных спектров молекул.

Колебательные и вращательные спектры молекул дают сведения о пространственном расположении атомов в молекулах, о возможных их равновесных конфигурациях, о распределении молекул по этим конфигурациям. Знание формы молекул позволяет понять природу валентных связей в них и тем самым выяснить реакционные способности молекул. Вращательные спектры обычно находятся в инфракрасной области и обнаружение и исследование их требуют специальной техники инфракрасной спектроскопии.

Благодаря простоте методов спектроскопия комбинационного рассеяния обладает рядом преимуществ перед инфракрасной спектроскопией. Из комбинационных спектров находят частоты собственных колебаний молекул (по колебательным спектрам), моменты инерции и форма молекул (по вращательным спектрам), а также те структурные изменения, которые претерпевают молекулы при изменениях агрегатного состояния вещества.

Типы оптических переходов. Инверсная заселенность

Возможны три типа оптических переходов: спонтанные (1), вынужденные с поглощением (2) и вынужденные с излучением (3) (рис. 3.10).

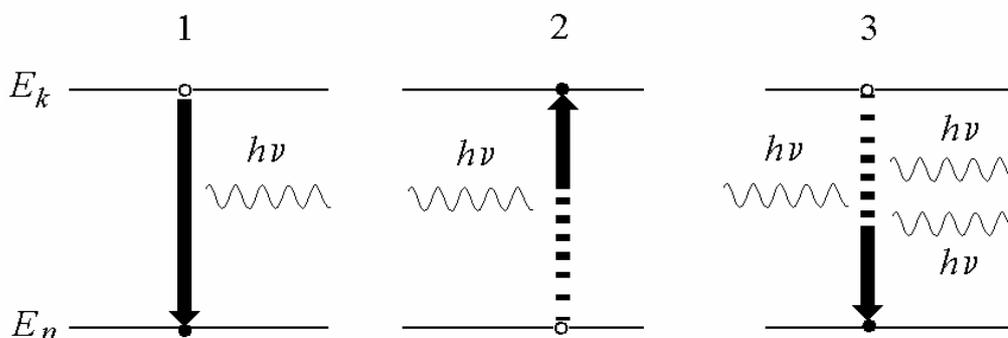


Рис. 3.10

Падающий на вещество свет постоянной частоты, совпадающий с частотой перехода $\nu = \frac{E_k - E_n}{h}$, будет вызывать два процесса: вынужденное поглощение (2) и вынужденное излучение (3). Первый процесс приводит к поглощению света и ослаблению падающего пучка, а второй – к увеличению интенсивности падающего светового пучка. Интенсивность света, прошедшего через среду, в которой реализуются два процесса, определяется законом Бугера:

$$I = I_0 e^{(\beta + \alpha)x},$$

где β – коэффициент усиления среды ($\beta > 0$), α – коэффициент поглощения среды ($\alpha < 0$), x – толщина слоя вещества. Таким образом, чтобы интенсивность прошедшего через среду света была больше интенсивности падающего, нужно чтобы $\beta + \alpha > 0$, т.е. усиление преобладало над поглощением. В этом случае совокупность атомов среды должна иметь *инверсную* населенность, а именно в состоянии с большей энергией E_k должно находиться большее число атомов, чем с меньшей энергией E_n . Доказано, что инверсная заселенность не может быть достигнута, например, температурным возбуждением в двух-уровневой системе. Выход для создания инверсной заселенности был найден с использованием трех- и более уровней энергии системы.

Вынужденное излучение. Лазеры

Устройства, принцип действия которых основан на использовании вынужденного излучения, называются *лазерами*. Структурная схема лазера, представленная на рис. 3.11 включает три основных элемента: лазерную активную среду, систему накачки и оптический резонатор.



Рис. 3.11

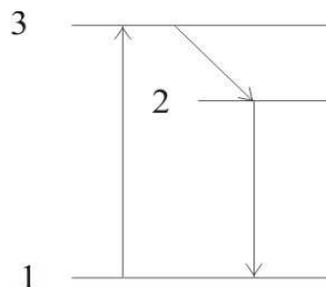


Рис. 3.12

Лазерная активная среда – среда, в которой создается инверсная заселенность и которая способна усиливать излучение на частоте лазерного перехода.

Процессы, приводящие к возникновению инверсной заселенности в активной среде, называются накачкой, а физическая система, обеспечивающая эти процессы, – *система накачки*.

Оптический резонатор – это система отражающих, преломляющих, фокусирующих, дисперсионных и других оптических элементов, в пространстве между которыми могут возбуждаться различные типы электромагнитных колебаний.

Практическое осуществление лазера стало возможным после того, как были найдены способы осуществления инверсной заселенности уровней в некоторых веществах.

В первом лазере рабочим телом был цилиндр из рубина. Торцы рубинового стержня были тщательно отполированы и параллельны друг другу. Один из торцов рубинового стержня делают зеркальным, а другой полупрозрачный. Рубин представляет собой окись алюминия (Al_2O_3), в котором некоторые атомы алюминия замещены атомами хрома. В рубиновом лазере для накачки используется мощная специальная лампа. Атомы возбуждаются за счет поглощения света. При поглощении света ионы хрома переходят в возбужденное состояние (3, рис. 3.12). На уровне 3 система «живет» в течение 10^{-8} с, после чего самопроизвольно переходит в состояние 2 без излучения света (энергия при этом передается кристаллической решетке). Таким образом, создается «перенаселенность» возбужденного уровня по сравнению с невозбужденным уровнем 1. Время жизни в состоянии 2 составляет около 10^{-3} с. Переход из состояния 2 в состояние 1 под действием внешней электромагнитной волны сопровождается вынужденным излучением. Это и используется в рубиновом лазере.

В результате переходов $2 \rightarrow 1$ начинается излучение волн всевозможных направлений. Те из них, которые идут под углом к оси кристалла,

выходят из него и не играют никакой роли. Но волна, отражаемая от его торцов, вызывает индуцированное излучение возбужденных ионов хрома, входящих в состав рубина, и быстро усиливается. В силу чего через торец выходит мощный кратковременный импульс красного света. Волна является когерентной, так как энергия излучается за очень короткое время. Рубиновый лазер работает в импульсном режиме.

Традиционно принято классифицировать лазеры по следующим признакам:

Агрегатному состоянию (газовые, жидкостные, твердотельные, полупроводниковые);

Методу накачки (химические, газодинамические, газоразрядные, инжекционные, оптические);

Временному режиму генерации (непрерывные, импульсные, импульсно-периодические);

Частотному режиму генерации (одночастотные, одно- и многомодовые);

Уровню генерируемой мощности (энергии) излучения;

Эксплуатационным параметрам.

Свойства лазерного излучения

Свойства лазерного излучения отличаются от свойств оптического излучения, испускаемого тепловыми и люминесцентными источниками. Эти отличия касаются в основном таких характеристик излучения, как монохроматичность, когерентность, направленность и яркость.

Лазерное излучение характеризуется высокой *степенью монохроматичности*, т.е. отношение $\frac{\Delta\nu}{\nu_0}$ может быть достаточно мало. Для лазеров эта величина составляет $\sim 10^{-12}$, в то время как для обычных источников излучения может быть достигнута степень монохроматичности $\sim 10^{-6}$.

Полностью когерентными, как известно, являются плоские монохроматические линейно поляризованные электромагнитные волны. Лазерное излучение обладает характеристиками, близкими к характеристикам таких волн. Когерентность обычных источников излучения невысока, поскольку отдельные атомы излучают фотоны самопроизвольно, независимо друг от друга. В активной среде лазера в результате многократного прохождения различных цугов волн, происходит их корреляция (согласование) по фазе, частоте и направлению распространения.

Направленность определяет расходимость светового пучка в про-

странстве и характеризуется плоским или телесным углом, в пределах которого распространяется большая часть энергии излучения. Так, для мало-мощных лазеров (10 мВт) угол расходимости равен $\sim 10^{-3}$ рад, а телесный угол $\sim 10^{-6}$ ср.

Наряду с яркостью для описания лазерного излучения пользуются общепринятыми характеристиками: мощность, энергия, поток излучения и сила света. Например, лазеры характеризуются высокой спектральной мощностью излучения. В узком интервале спектра кратковременно (10^{-11} с) у некоторых типов лазеров достигается мощность 10^{14} Вт/см².

Лазеры используются для испарения материалов в вакууме, для сварки. С помощью луча лазера производят хирургические операции, луч лазера используют в дальномерах и т.д.

3.2. Методические указания к лекционным занятиям

№	Вопросы лекции	Форма изучения	Литература	Вопросы для самоконтроля студентов
1	Теория атома водорода по Бору	с	[1] – §38.2 – 38.5 [2] – §28.1	<ul style="list-style-type: none"> Сформулируйте постулаты Бора. Объясните физический смысл правила квантования орбит. Как зависит энергия основных состояний от главного квантового числа? От чего зависит радиус орбиты электрона? Какие серии излучения вы знаете?
2	Уравнение Шредингера для атома водорода. Энергия. Спин. Квантовые числа. Спектр атома. Принцип Паули	л	[1] – §39.1 – 39.5 [2] – §28.2.1 – 28.2.4	<ul style="list-style-type: none"> Что такое орбитальное квантовое число и что оно определяет? Что такое магнитное квантовое число? что оно определяет? Что можно определить, зная выражения для радиальной и угловой части волновой функции. Как, например, определить среднее значение силы взаимодействия электрона с ядром в атоме водорода? Запишите исходное выражение. Что такое спин электрона. Каким образом удалось его обнаружить? Что такое спиновое квантовое число? Что такое кратность вырождения? Чему она равна для данного уровня с номером n? Сформулируйте принцип Паули. Какие частицы называются фермионами? бозонами? Приведите примеры
3	Рентгеновские спектры	л	[2] – §28.3.1 – 28.3.2	<ul style="list-style-type: none"> Что называют белым рентгеновским излучением? Как по квантовой теории объясняется сплошной спектр тормозного излучения? Какой вид имеют характеристические спектры? Закон Мозли? Константа экранирования? Серия характеристического спектра? В чем отличие рентгеновских спектров от оптических?
4	Многоэлектронные атомы. Периодический закон Д. И. Менделеева. Переход к многоэлектронным атомам	л	[1] – §39.6 [2] – §28.2.5	<ul style="list-style-type: none"> Какое поле называется самосогласованным? В чем суть метода самосогласованного поля? Принцип Паули? Какие электроны образуют электронный слой? Чем электроны в подгруппах отличаются друг от друга? Каким образом записывают распределение электронов по состояниям? В чем причина отступления таблицы Менделеева от периодической таблицы? В чем суть периодичности свойств химических элементов?

5	Молекула. Молекулярные спектры	л	[1] – §39.7 – 39.11 [2] – §28.2.6	<ul style="list-style-type: none"> • Почему ионные молекулы электрически нейтральны? • Как называются силы, обеспечивающие устойчивость атомных молекул? Природа этих сил? • Чем определяются энергетические электронные уровни молекулы? • В чем причина возникновения колебательных спектров молекул? • С чем связаны электронно-колебательные спектры молекул? • Когда возникает вращательно-колебательный спектр молекулы? • С чем связан сплошной спектр молекулы? • Какие сведения можно получить при помощи молекулярной спектроскопии?
6	Оптические квантовые генераторы	с	[1] – §39.7, 40.1 – 40.2 [2] – §28.3.3 – 28.3.4	<ul style="list-style-type: none"> • Что такое лазер? • Что такое инверсная заселенность? • Объясните на примере трехуровневой системы принцип вынужденного излучения. • Назовите свойства лазерного излучения. • Каковы основные типы лазеров?

3.3. Методические указания к практическим занятиям

№ п/п	Тема занятия	Тип задач	Рекомендации по решению	Соответствующие задачи из сборников
1	Теория Бора для атома водорода	Нахождение кинематических, динамических и энергетических характеристик электрона в рамках теории атома водорода по Бору. Спектр излучения атома водорода	При рассмотрении определения состояния электрона в атоме водорода в рамках теории Бора необходимо воспользоваться постулатами Бора, правилом квантования орбит, 2 законом Ньютона, выражениями для энергии электрона. При определении частот излучения атома водорода воспользоваться выражениями для спектральных серий излучения	[5] – № 20.1, 20.4, 20.5, 20.7 – 20.9, 20.18 – 20.20 [6] – № 24.31 – 24.35
2	Уравнение Шредингера для атома водорода. Квантовые числа	Определение вероятности нахождения электрона в атоме водорода с точки зрения квантовой физики. Определение средних значений величин	При нахождении вероятности нахождения электрона и средних значений физических величин необходимо вычислять интеграл вида $\int x^n e^{-\alpha x} dx$. При определении максимального значения <i>радиальной</i> плотности вероятности (для электрона в атоме водорода в <i>s</i> -состояниях) необходимо воспользоваться условием: $(R(r) ^2 \cdot 4\pi r^2)' = 0$	[6] – № 24.36 – 24.45
3	Рентгеновские спектры. Спектры молекул. Вращательная и колебательная энергия молекулы	Определение частот излучения, энергии диссоциации, постоянной ангармоничности	При определении частот рентгеновского спектра воспользоваться формулой Мозли. При определении частот излучения при переходе молекулы между колебательными или вращательными уровнями воспользоваться выражениями для соответствующих энергий	[5] – № 20.32 – 20.36

3.4. Примеры решения задач

Пример 1. *Определить энергию в электрон-вольтах и длину волны фотона, соответствующего самой длинноволновой линии серии Лаймана.*

Решение. Наименьшая длина волны серии Лаймана определяется переходом электрона со второго уровня $n = 2$ в основное состояние и может быть найдена по формуле:

$$\frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = \frac{3}{4} R.$$

Откуда $\lambda = \frac{4}{3R}$. Вычисляя длину волны с учетом того, что $R = 1,0974 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$, получаем $\lambda = 0,12 \text{ мкм}$. Определяем энергию фотона

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}.$$

Вычисления дают значение энергии $E = 16,41 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 10,24 \text{ эВ}$.

Ответ: $E = 10,24 \text{ эВ}$.

Пример 2. *Электрон находится в 2р-состоянии ($l = 1$) в атоме водорода. Определить максимум плотности вероятности для радиальной части волновой функции.*

Решение. В искомом состоянии радиальная часть волновой функции электрона описывается уравнением (см. табл. 3.2):

$$\psi_{210} = R(r) = A \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}},$$

где A – постоянная нормировки. Вероятность нахождения в элементе объема dV равна

$$dP = |R(r)|^2 dV = \left(A \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}} \right)^2 4\pi r^2 dr = \frac{4\pi A^2 r^4}{a^2} e^{-\frac{r}{a}} dr.$$

Следовательно, радиальная плотность вероятности описывается функцией

$$\rho(r) = \frac{dP}{dr} = \frac{4\pi A^2 r^4}{a^2} e^{-\frac{r}{a}}.$$

Для определения максимума функции $\rho(r)$ приравняем к нулю ее производную

$$(\rho(r))' = \left(\frac{4\pi A^2 r^4}{a^2} e^{-\frac{r}{a}} \right)' = 0; \quad 4r^3 e^{-\frac{r}{a}} - \frac{r^4}{a} e^{-\frac{r}{a}} = 0.$$

Решая полученное уравнение, находим расстояние, соответствующее наибольшей вероятности $r = 4a$. Данное расстояние в четыре раза превышает первый боровский радиус.

Ответ: максимум плотности вероятности при $r = 4a$.

Задача 3. Граничная длина волны K_α -серии характеристического рентгеновского излучения для некоторого элемента равна 0,0205 нм. Определить этот элемент.

Решение: Из формулы Мозли

$$\frac{1}{\lambda} = r(Z - a)^2 \left[\frac{1}{i^2} - \frac{1}{n^2} \right],$$

где λ – длина волны характеристического излучения, равная $\lambda = \frac{c}{\nu}$ (c – скорость света, ν – частота, соответствующая длине волны λ); R – постоянная Ридберга; Z – порядковый номер элемента, из которого изготовлен электрод; a – постоянная экранирования; i – номер энергетического уровня, на который переходит электрон; n – номер энергетического уровня, с которого перешел электрон (для K_α -серии $i = 1$; $n = 2$; $a = 1$); находим Z

$$Z = \sqrt{\frac{3}{4\lambda R}} + 1; \quad Z = \sqrt{\frac{4}{3 \cdot 0,0205 \cdot 10^{-10} \cdot 1,097 \cdot 10^7}} + 1 = 78.$$

Ответ: $Z = 78$ (платина)

Задача 4. Найти постоянную экранирования для α – серии рентгеновских лучей, если известно, что при переходе электрона в атоме вольфрама с M -слоя на L -слой испускается рентгеновские лучи с длиной волны $1,43 \cdot 10^{-10}$ м.

Решение: переход электрона с M -слоя на L -слой соответствует значениям $i = 2$ и $n = 3$; порядковый номер вольфрама в таблице Менделеева $Z = 74$. Из формулы Мозли найдём постоянную экранирования

$$a = Z - \sqrt{\frac{1}{\lambda R \left(\frac{1}{i^2} - \frac{1}{n^2} \right)}} = Z - \sqrt{\frac{4.45}{\lambda R}} = 74 - 67 = 7.$$

Ответ: $a = 7$.

Задача 5. Собственная циклическая частота колебаний молекулы HCl равна $\omega = 5,63 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$, коэффициент ангармоничности $\chi = 0,0201$. Определить: 1) энергию перехода молекулы с первого на второй колебательный энергетический уровень; 2) максимальное квантовое число ν_{max} ; 3) максимальную энергию колебаний; 4) энергию диссоциации.

Решение.

1) Энергия перехода между двумя соседними уровнями определим как разность колебательной энергии

$$\Delta E = E_{\nu+1} - E_{\nu}.$$

Колебательная энергия двухатомной молекулы определяется выражением

$$E_{\nu} = \hbar\omega\left(\nu + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega\chi\left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2.$$

Таким образом, разность энергий двух уровней равна

$$\Delta E = \hbar\omega\left(\nu + \frac{3}{2}\right) - \hbar\omega\chi\left(\nu + \frac{3}{2}\right)^2 - \hbar\omega\left(\nu + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\chi\left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 = \hbar\omega(1 - 2\chi(\nu + 1)),$$

Вычисляем энергию перехода: $\Delta E = 1,1 \cdot 10^{14} \text{ Дж} = 0,68 \text{ эВ}$.

2) Максимальное квантовое число найдем, приравняв разность соседних уровней к нулю

$$\Delta E = \hbar\omega(1 - 2\chi(\nu + 1)) = 0, \text{ откуда } \nu_{\text{max}} = \frac{1}{2\chi} - 1.$$

Подставив значение коэффициента ангармоничности, находим $\nu_{\text{max}} = 23$.

3) Максимальную колебательную энергию найдем, если в выражение для энергии подставить максимальное квантовое число ν_{max}

$$E_{\text{max}} = \hbar\omega\left(\nu_{\text{max}} + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega\chi\left(\nu_{\text{max}} + \frac{1}{2}\right)^2 = \hbar\omega\left(\frac{\chi}{4} + \frac{1}{4\chi}\right) \approx \frac{\hbar\omega}{4\chi}, \text{ т.к. } \frac{\chi}{4} \ll \frac{1}{4\chi}.$$

Вычисляем максимальную колебательную энергию $E_{\text{max}} = 4,61 \text{ эВ}$.

4) Энергия диссоциации определяется переходом с нулевого уровня энергии на самый возбужденный, соответствующий ν_{max}

$$D = E_{\text{max}} - E_0 = \frac{\hbar\omega}{4\chi} - \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar\omega}{4\chi}(1 - 2\chi) = E_{\text{max}}(1 - 2\chi).$$

Вычисления дают значение энергии диссоциации $D = 4,43 \text{ эВ}$.

Ответ: $\Delta E = 0,68 \text{ эВ}$; $\nu_{\text{max}} = 23$; $E_{\text{max}} = 4,61 \text{ эВ}$; $D = 4,43 \text{ эВ}$.

Задача 6. Для молекулы HF определить: 1) момент инерции, если расстояние между ядрами $d = 91,7 \cdot 10^{-12}$ м; 2) вращательную постоянную; 3) энергию, необходимую для возбуждения молекулы на первый вращательный уровень.

Решение. Воспользуемся формулой приведенной массы молекулы и определим момент инерции

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}; \quad I = \mu d^2 = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} d^2,$$

где m_1 и m_2 – массы атомов водорода и фтора соответственно.

Поставляя значения массы и межъядерного расстояния, найдем момент инерции $I = 1,33 \cdot 10^{-47}$ кг м².

Вращательная постоянная определяется формулой:

$$B = \frac{\hbar^2}{2\mu d^2}.$$

Вычисляя B , получаем $B = 4,37 \cdot 10^{-22}$ Дж.

Так как энергия вращательного движения двухатомной молекулы выражается соотношением $E_J = BJ(J + 1)$, то разность энергий двух соседних вращательных уровней

$$\Delta E_{J+1,J} = E_{J+1} - E_J = B(J + 1)(J + 2) - BJ(J + 1) = 2B(J + 1)$$

где J – вращательное квантовое число, равное нулю. Поэтому энергия, необходимая для возбуждения молекулы на первый вращательный уровень равна $\Delta E_{1,0} = 2B = 8,74 \cdot 10^{-22}$ Дж.

Ответ: $I = 1,33 \cdot 10^{-47}$ кг м²; $B = 4,37 \cdot 10^{-22}$ Дж; $\Delta E_{1,0} = 8,74 \cdot 10^{-22}$ Дж.

3.5. Задачи для самостоятельного решения

1. Невозбужденный атом водорода поглощает квант излучения с длиной волны 102,6 нм. Вычислить, пользуясь теорией Бора, радиус электронной орбиты возбужденного атома водорода.
2. Вычислить по теории Бора радиус второй стационарной орбиты и скорость электрона на этой орбите для атома водорода.
3. Вычислить по теории Бора период вращения электрона в атоме водорода, находящегося в возбужденном состоянии, определяемом главным квантовым числом 2.
4. Определить изменение энергии электрона в атоме водорода при излучении атомом фотона с частотой $6,28 \cdot 10^{14}$ Гц.
5. Во сколько раз изменится период вращения электрона в атоме водорода, если при переходе в невозбужденное состояние атом излучил фотон с длиной волны 97,5 нм?

6. На сколько изменилась кинетическая энергия электрона в атоме водорода при излучении атомом фотона с длиной волны 435 нм?
7. В каких пределах должна лежать длина волн монохроматического света, чтобы при возбуждении атомов водорода квантами этого света радиус орбиты электрона увеличился в 16 раз?
8. В однозарядном ионе лития электрон перешел с четвертого энергетического уровня на второй. Определить длину волны излучения, испущенного ионом лития.
9. Электрон в атоме водорода находится на третьем энергетическом уровне. Определить кинетическую, потенциальную и полную энергию электрона. Ответ выразить в электрон-вольтах.
10. Фотон выбивает из атома водорода, находящегося в основном состоянии, электрон с кинетической энергией 10 эВ. Определить энергию фотона.
11. Определить частоту света, излучаемого двукратно ионизированным атомом лития при переходе электрона на уровень с главным квантовым числом 2, если радиус орбиты электрона изменился в 9 раз.
12. С какой частотой вращается электрон вокруг ядра в атоме водорода, если его орбита имеет радиус $3 \cdot 10^{-10}$ м?
13. Во сколько раз линейная скорость электрона на первой орбите в атоме водорода больше скорости пассажирского самолета, летящего со скоростью 850 км/ч?
14. На какое минимальное расстояние приблизится протон с кинетической энергией 60 кэВ к покоящемуся ядру атома золота при лобовом соударении?
15. Зная радиус первой боровской орбиты в атоме водорода, определите линейную и угловую скорости движения электрона по этой орбите.
16. Вычислите численные значения кинетической, потенциальной и полной энергии электрона на первой боровской орбите.
17. Во сколько раз отличается период обращения электрона по первой и второй Боровским орбитам в атоме водорода.
18. В однозарядном ионе лития электрон перешел с четвертого энергетического уровня на первый. Определить длину волны излучения, испущенного ионом лития.
19. Вычислить по теории Бора период вращения электрона в атоме водорода, находящегося в возбужденном состоянии, определяемом главным квантовым числом 3.
20. Вычислите численное значение кинетической и полной энергии электрона на второй боровской орбите.
21. Вычислить для атома водорода длины волн первых трех линий серии Лаймана. Каково соотношение между энергиями квантов света данных линий?

22. Вычислить для атома водорода длины волн первых трех линий серии Бальмера.
23. Во сколько раз отличается энергия кванта света первой линии серии Лаймана от второй линии серии Бальмера?
24. Вычислить для атома водорода длины волн первых трех линий серии Пашена.
25. Найти период обращения электрона на первой боровской орбите в атоме водорода и его угловую скорость.
26. Вычислить для атома водорода длины волн первых трех линий серии Лаймана.
27. Вычислить для атома водорода частоты и энергии волн первых трех линий серии Бальмера.
28. Вычислить для атома водорода длины волн первых трех линий серии Лаймана.
29. Найти радиусы первых трех электронных орбит атома водорода и скорости электрона на этих орбитах.
30. Волновая функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi = Ae^{-r/a}$, где a – первый боровский радиус. Найти постоянную нормировки A .
31. Электрон атома водорода находится в основном состоянии. Найти наиболее вероятное расстояние электрона от ядра.
32. Электрон атома водорода находится в $2s$ -состоянии. Найти наиболее вероятные расстояния электрона от ядра.
33. Волновая функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$, где a – первый боровский радиус. Вычислить вероятность того, что электрон находится внутри области, ограниченной сферой радиусом, равным первому боровскому радиусу.
34. Волновая функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$, где a – первый боровский радиус. Вычислить вероятность того, что электрон находится вне области, ограниченной сферой радиусом, равным первому боровскому радиусу.
35. Волновая функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$, где a – первый боровский радиус. Вычислить вероятность того, что электрон находится внутри области от $a/2$ до $2a$, где a – первый боровский радиус.

36. Найти среднее расстояние $\langle r \rangle$, на котором будет обнаружен электрон от ядра атома водорода, находящегося в основном состоянии.

37. Волновая функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$, где a – первый боровский радиус.

Найти средний электростатический потенциал, создаваемый электроном в центре атома водорода.

38. Найти среднее значение потенциальной энергии электрона атома водорода, находящегося в основном состоянии.

39. Волновая функция, описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, имеет вид $\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$, где a – первый боровский радиус.

Найти среднюю силу взаимодействия электрона с ядром в атоме водорода.

40. Найти среднее значение кинетической энергии электрона атома водорода, находящегося в основном состоянии.

41. Радиальная волновая функция одного из состояний электрона в атоме водорода имеет вид $R_{210}(r) = C \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$, где C – нормировочная постоянная; a – первый боровский радиус. Используя уравнение Шредингера, найти энергию электрона в этом состоянии.

42. С помощью уравнения Шредингера найти энергию электрона в атоме водорода с волновой функцией $R_{200}(r) = C \left(2 - \frac{r}{a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$, где C – нормировочная постоянная; a – первый боровский радиус.

43. Состояние частицы в сферически-симметричном потенциальном поле описывается радиальной волновой функцией $R(r) = C \exp(-\alpha r)$, где C – нормировочная постоянная; α – некоторая постоянная. Используя уравнение Шредингера найти значение энергии частицы и параметра α .

44. Радиальная волновая функция одного из состояний атома водорода имеет вид $R_{210}(r) = C \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$. Используя условие нормировки, найти значение постоянной C .

45. Граничное значение длины волны K -серии характеристического рентгеновского излучения некоторого элемента равно 0,174 нм. Определить этот элемент.

46. Найти граничную длину волны K -серии рентгеновского излучения от платинового антикатада.

47. При каком наименьшем напряжении на рентгеновской трубке с жемчужным антикатодом появляются линии K_{α} -серии?
48. Какую наименьшую разность потенциалов необходимо приложить к рентгеновской трубке с вольфрамовым антикатодом, чтобы в спектре излучения вольфрама были все линии K -серии?
49. Граничная длина волны K -серии характеристического рентгеновского излучения некоторого элемента равна $0,1284$ нм. Определить этот элемент.
50. Определить минимальную длину волны тормозного рентгеновского излучения, если к рентгеновской трубке приложены напряжения 30 кВ; 75 кВ.
51. Наименьшая длина волны тормозного рентгеновского излучения, полученного от трубки, работающей под напряжением 15 кВ, равна $0,825$ нм. Вычислить по этим данным постоянную Планка.
52. При переходе электрона в атоме меди с M -слоя на L -слой испускаются лучи с длиной волны $1,2 \cdot 10^{-10}$ м. Вычислить постоянную экранирования в формуле Мозли.
53. Наибольшая длина волны K -серии характеристического рентгеновского излучения равно $1,94 \cdot 10^{-10}$ м. Из какого материала сделан антикатод?
54. К рентгеновской трубке, применяемой в медицине для диагностики, приложено напряжение 45000 В. Найти границу сплошного рентгеновского спектра.
55. Гармонический осциллятор находится в основном состоянии ($n = 0$). Какова вероятность обнаружения частицы в области ($-A < x < A$), где A – амплитуда классических колебаний?
56. Определить среднюю потенциальную энергию $U(x)$ гармонического осциллятора, находящегося в основном состоянии, выразив ее через нулевую энергию E_0 .
57. Собственная циклическая частота ω колебаний молекулы водорода равна $8,08 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$. Найти амплитуду A классических колебаний молекулы.
58. Зная собственную циклическую частоту ω колебаний молекулы CO ($\omega = 4,08 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$), найти коэффициент β квазиупругой силы.
59. Определить энергию E возбуждения молекулы HCl с нулевого колебательного энергетического уровня на первый, если известны собственная циклическая частота $\omega = 5,63 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ и коэффициент ангармоничности $\chi = 0,0201$.
60. Определить число колебательных энергетических уровней, которое имеет молекула HBr , если коэффициент ангармоничности $\chi = 0,0208$.
61. Во сколько раз отличаются максимальная и минимальная (отличная от нуля) разности двух соседних энергетических уровней для молекулы H_2 ($\chi = 0,0277$)?
62. Определить максимальную колебательную энергию E молекулы O_2 , для которой известны собственная циклическая частота $\omega = 2,98 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ и коэффициент ангармоничности $\chi = 0,0946$.

63. Определить энергию диссоциации D (в электрон-вольтах) молекулы CO , если ее собственная частота $\omega = 4,08 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ и коэффициент ангармоничности $\chi = 0,0583$. Изобразить на потенциальной кривой схему колебательных энергетических уровней и отметить на ней энергию диссоциации.
64. Найти коэффициент ангармоничности у молекулы N_2 , если ее энергия диссоциации $D = 9,80 \text{ эВ}$ и собственная циклическая частота $\omega = 4,45 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$. На потенциальной кривой изобразить схему энергетических уровней молекулы и отметить на ней энергию диссоциации.
65. Молекула NO переходит из низшего возбужденного состояния в основное. Определить длину волны λ испущенного при этом фотона, если собственная циклическая частота $\omega = 3,59 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ и коэффициент ангармоничности $\chi = 0,0873$. На потенциальной кривой изобразить схему колебательных энергетических уровней молекулы и отметить на ней соответствующий энергетический переход.
66. Найти момент импульса L двухатомной молекулы, соответствующий низшему возбужденному состоянию.
67. Определить изменение ΔL момента импульса двухатомной молекулы при переходе ее с первого вращательного уровня на второй.
68. Определить угловую скорость ω вращения молекулы S_2 , находящейся на первом возбужденном вращательном уровне. Межъядерное расстояние $d = 189 \text{ пм}$.
69. Вычислить вращательную постоянную B для молекулы CO , если межъядерное расстояние $d = 113 \text{ пм}$. Ответ выразить в мэВ.
70. Найти момент импульса L молекулы кислорода, вращательная энергия E которой равна $2,16 \text{ мэВ}$.
71. Найти момент инерции J и межъядерное расстояние d молекулы CO , если интервалы ΔE между соседними линиями чисто вращательного спектра испускания молекул CO равны $0,48 \text{ мэВ}$.
72. Определить для молекулы $HC1$ вращательные квантовые числа двух соседних уровней, разность энергий $\Delta E_{J+1,J}$ которых равна $7,86 \text{ мэВ}$. Межъядерное расстояние $d = 127 \text{ пм}$.
73. Для молекулы N_2 найти: 1) момент инерции J , если межъядерное расстояние $d = 110 \text{ пм}$; 2) вращательную постоянную B ; 3) изменение $|\Delta E|$ энергии при переходе молекулы с третьего вращательного энергетического уровня на второй. Относительная атомная масса $A_N = 14$.
74. Для молекулы O_2 найти: 1) приведенную массу, и; 2) межъядерное расстояние d , если вращательная постоянная $B = 0,178 \text{ мэВ}$; 3) угловую скорость вращения, если молекула находится на первом вращательном энергетическом уровне. Относительная атомная масса $A_O = 16$.

75. Для молекулы NO найти: 1) момент инерции J молекулы, если межъядерное расстояние $d = 115$ пм; 2) вращательную постоянную B молекулы; 3) температуру T , при которой средняя кинетическая энергия поступательного движения молекулы равна энергии, необходимой для ее возбуждения на первый вращательный энергетический уровень. Относительные атомные массы азота и кислорода равны соответственно 14 и 16.
76. Установить числовое соотношение между энергией E излучения и спектроскопическим волновым числом $\tilde{\nu}$.
77. Найти расстояние d между ядрами молекулы CH , если интервалы между соседними линиями чисто вращательного спектра испускания данной молекулы равны 29 см^{-1} .
78. Определить, на сколько изменится импульс молекул азота при испускании спектральной линии с длиной волны $\lambda = 1250$ мкм, которая принадлежит чисто вращательному спектру.
79. Длины волн λ_1 и λ_2 двух соседних спектральных линий в чисто вращательном спектре молекулы HCl соответственно равны 117 и 156 мкм. Вычислить вращательную постоянную (см^{-1}) для молекулы HCl .

УЧЕБНЫЙ МОДУЛЬ 8. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ. ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

Любое тело (газ, жидкость, твердое тело) представляет собой систему или коллектив, состоящий из огромного числа микрочастиц. В таких системах проявляются специфические, так называемые статистические, закономерности, являющиеся предметом, изучения статистической физики или физической статистики.

Физическая статистика, изучающая свойства невырожденных коллективов (молекулярный газ, электроны и дырки в собственных и слаболегированных полупроводниках), называется *классической статистикой* (*статистика Максвелла – Больцмана*).

Физическая статистика, изучающая свойства вырожденных коллективов, называется *квантовой статистикой*. Различают две квантовые статистики. Квантовую статистику *фермионов* (электроны, протоны) называют *статистикой Ферми – Дирака*. Квантовую статистику *бозонов* (фотоны, фононы) называют *статистикой Бозе – Эйнштейна*.

Физика твердого тела является в настоящее время одним из важнейших разделов науки, имеющим весьма широкое практическое применение. Она лежит в основе материаловедения, производства полупроводников, пьезоэлектриков, сегнетоэлектриков, магнитных материалов, оптических кристаллов. Предметом физики твердого тела является изучение состава твердых тел, их атомно-электронной структуры, установление зависимости между различными физическими свойствами, составом и структурой твердого тела.

Учебно-методическая структура модуля

Модуль 8. Элементы квантовой статистики. Физика твердого тела	
УБ-1. Квантовые статистики Ферми – Дирака и Бозе – Эйнштейна	УБ-2. Зонная теория твердого тела. Контактные явления
<ul style="list-style-type: none"> • критерий вырожденности • фазовое пространство • плотность состояний • функция распределения • фермионы и бозоны • электроны в металле • энергия Ферми • фононы • температура Дебая • теплоемкость кристалла 	<ul style="list-style-type: none"> • виды связей в твердых телах • валентная зона и зона проводимости • металлы, полупроводники, диэлектрики • эффективная масса частицы • статистика электронов и дырок в полупроводнике контакт металл-металл • дефекты в твердых телах • контакт металл-полупроводник • <i>p-n</i>-переход и его вольтамперная характеристика

Методическая программа модуля

№ п/п	Тема занятия	Тип занятия	Вид занятия	Часы
1	Статистический и термодинамический подход в физике твердого тела. Критерий вырожденности в статистической физике	формирование новых знаний	лекция	1
2	Фазовое пространство. Элементарная ячейка в фазовом пространстве. Плотность числа состояний	формирование новых знаний	лекция	1
3	Квантовая статистика Ферми – Дирака. Распределение электронов проводимости в металле по энергиям при абсолютном нуле температуры. Энергия Ферми. Влияние температуры на распределение электронов	формирование новых знаний	лекция и практическое занятие	1/1
4	Квантовая статистика Бозе – Эйнштейна. Теория теплоемкости Эйнштейна	формирование новых знаний	лекция и практическое занятие	1/1
5	Нормальные колебания решетки. Акустические и оптические фононы. Закон дисперсии для фононов. Теплоемкость кристаллической решетки и ее зависимость от температуры (теория Дебая)	формирование новых знаний	лекция и практическое занятие	1/1
6	Силы связи и внутренняя структура твердых тел	формирование новых знаний	лекция	1
7	Основы зонной теории твердого тела. Деление тел на изоляторы, проводники и полупроводники	формирование новых знаний	лекция	1
8	Статистика носителей заряда в полупроводниках. Собственная и примесная проводимость полупроводников. Подвижность носителей заряда. Эффект Холла в полупроводниках. Дефекты в твердых телах	формирование новых знаний	лекция и практическое занятие	2/1
9	Понятие о контактных явлениях. Контакт металл-металл, металл-полупроводник. Контакт электронного и дырочного полупроводников (<i>p-n</i> -переход) и его вольтамперная характеристика	формирование новых знаний	лекция	2

УБ-1. Квантовые статистики Ферми – Дирака и Бозе – Эйнштейна

Введение

Данный учебный блок посвящен рассмотрению статистического описания таких коллективов частиц как электроны в металлах и полупро-

водниках, поведения атомов кристаллической решетки твердого тела. Основными задачами, решаемыми в данном разделе, являются определение концентрации свободных и связанных носителей заряда и оценка термодинамических параметров систем взаимосвязанных частиц.

При изучении данного раздела студенты должны

иметь представление:

- о характере и типах связи в твердых телах;
- о строении твердых тел;
- об основных положениях квантовой механики, необходимых для понимания физических процессов в твердых телах;
- о квантовых статистиках Ферми – Дирака и Бозе – Эйнштейна, о классической статистике Больцмана;
- о классической электронной теории, понятии потенциала, работы выхода, энергии заряженной частицы.

обладать навыками:

- применения элементов дифференциального и интегрального исчисления;
- применения элементов математической статистики.

Учебная программа блока

№ п/п	Содержание блока	Форма подготовки	Литература
1	Статистический и термодинамический подход в физике твердого тела. Критерий вырожденности в статистической физике	л	[1] – §41.4
2	Фазовое пространство. Элементарная ячейка в фазовом пространстве. Плотность числа состояний	л	[1] – §41.1 [3] – §3.1
3	Квантовая статистика Ферми – Дирака. Распределение электронов проводимости в металле по энергиям при абсолютном нуле температуры. Энергия Ферми. Влияние температуры на распределение электронов	л	[1]–§41.2,41.4–41.5 [2] – §31.3 [3]–§3.3, 3.7–3.8
4	Квантовая статистика Бозе – Эйнштейна. Теория теплоемкости Эйнштейна	л	[1] – §41.3, 41.7
5	Нормальные колебания решетки. Акустические и оптические фононы. Закон дисперсии для фононов. Теплоемкость кристаллической решетки и ее зависимость от температуры (теория Дебая)	л	[1] – §41.8 [2] – §30.6 – 30.7

Цели обучения

Что должен знать	Что должен уметь
<ul style="list-style-type: none"> • Суть термодинамического и статистического подхода в описании коллектива частиц • Понятие химического потенциала • Основные квантовые статистики (Ферми – Дирака и Бозе – Эйнштейна) • Основные классические статистики (Больцмана и Максвелла) • Примеры применения статистик к различным коллективам частиц • Понятие вырожденности и невырожденности коллектива частиц • Критерий вырожденности. Температура вырождения • Понятие функции распределения, вероятности состояния и плотности состояний • Энергия Ферми. Статистика носителей заряда в проводниках • Модель фотонного газа. • Зависимость теплоемкости от температуры при низких и высоких температурах. Температура Дебая 	<ul style="list-style-type: none"> • Рассчитывать вероятность состояния и среднее число частиц исходя из основных физических статистик Ферми – Дирака, Бозе – Эйнштейна и Больцмана • Определять число носителей заряда в проводниках в заданном интервале энергий при $T = 0$ К • Определять энергию Ферми и среднюю энергию электронов для проводников при $T = 0$ К • Определять температуру вырождения для заданного коллектива частиц • Определять теплоемкость решетки при низких и высоких температурах в рамках теории Дебая и Эйнштейна • Определять дебаевскую температуру и частоту

1.1. Краткое содержание теоретического материала

Статистический и термодинамический подход в физике твердого тела

Любое твердое тело представляет собой систему или коллектив, состоящий из огромного числа микрочастиц. В таких системах проявляются специфические, так называемые статистические, закономерности, являющиеся предметом изучения статистической физики или физической статистики.

Существует два способа описания состояния коллектива, состоящего из большого числа микрочастиц, – *термодинамический и статистический*.

При *термодинамическом подходе* к описанию свойств коллектива, состоящего из огромного числа частиц, его рассматривают как макроскопическую систему, нисколько не интересуясь теми частицами, из которых он состоит. Такую систему называют термодинамической системой. Термодинамическая система может быть изолированной и неизолированной. Изолированная система не имеет никакого взаимодействия с окружающей средой, неизолированная может обмениваться с окружающей средой теп-

лотой и работой. Состояние системы, в котором она может находиться сколь угодно долго, называется *равновесным*. Оно однозначно определяется заданием совокупности независимых физических параметров – параметров состояния. Основными из них являются объем системы V , давление p и температура T . Однако часто этих параметров бывает недостаточно для полной характеристики состояния системы. Так, для системы, состоящей из многих веществ, необходимо задать еще концентрацию этих веществ, для системы, находящейся в электрическом или магнитном поле, необходимо задать напряженности этих полей и т. д.

Всякое изменение в термодинамической системе, связанное с изменением хотя бы одного параметра состояния, называют термодинамическим процессом. Совокупность всех видов энергии, заключенной в изолированной системе, называют внутренней энергией системы. Она складывается из кинетической энергии частиц, образующих систему, потенциальной энергии взаимодействия частиц и внутренней энергии самих частиц.

Однако энергия системы может изменяться не только в результате сообщения количества теплоты TdS и совершения работы pdV , но и при изменении числа частиц dN в ней. Поэтому в общем виде закон сохранения энергии необходимо записать следующим образом

$$dE = TdS - pdV + \mu dN ,$$

где параметр μ называется химическим потенциалом, dS – изменение энтропии. Для изолированной системы $dE = \mu dN$. Отсюда

$$\mu = \frac{dE}{dN} .$$

Таким образом, химический потенциал выражает *изменение энергии изолированной системы постоянного объема, вызванное изменением в ней числа частиц на единицу*.

Рассмотрим условие равновесия системы, полное число частиц которой остается неизменным, но частицы могут переходить из одного тела системы в другое. Примером такой системы являются два электронных проводника, например два металла, приведенные в контакт и поддерживаемые при постоянной температуре. Обозначим химический потенциал электронного газа в первом металле μ_1 во втором μ_2 . Пусть из первого металла во второй перетекает dN электронов. Это вызовет уменьшение энергии первого металла на $dE_1 = \mu_1 dN$ и увеличение энергии второго металла на $dE_2 = \mu_2 dN$. Для того чтобы металлы находились в равновесии, необходимо, чтобы

$$dE_1 = dE_2 \text{ или, } \mu_1 dN = \mu_2 dN .$$

Отсюда находим условие равновесия:

$$\mu_1 = \mu_2 .$$

Это условие справедливо не только для рассмотренного случая контакта двух электронных проводников, но и для контакта любых фаз: твердой и жидкой, жидкой и газообразной и т.д. Во всех случаях *условием равновесия является равенство химических потенциалов*.

Состояние каждой частицы коллектива описывается заданием трех ее координат (x, y, z) и трех составляющих импульса (p_x, p_y, p_z). Составляя уравнения движения для частиц и решая их, можно, казалось бы, получить полные сведения о поведении системы и предсказать ее состояние в любой момент времени. Однако подобного рода расчеты не только чрезвычайно сложны, но и бесполезны. Сложность задачи видна из того, что для описания поведения молекул газа, заключенных в 1 м^3 при нормальных условиях, пришлось бы решать примерно 10^{26} -связанных между собой уравнений движения с учетом начальных условий, что практически сделать невозможно. Однако, если бы такое решение и было проведено, оно оказалось бы бесплодным, так как свойства системы, пришедшей в равновесие, не только не зависят от начальных значений координат и составляющих импульса, но и вообще остаются неизменными с течением времени, несмотря на то что координаты и импульсы частиц непрерывно изменяются. Отсюда следует, что коллектив, как целое, является системой, качественно отличной от отдельных частиц, и его поведение подчиняется иным закономерностям по сравнению с поведением отдельных частиц. Такими закономерностями являются *статистические закономерности*.

Основной особенностью статистических закономерностей является их *вероятностный* характер.

По характеру поведения в коллективе все микрочастицы можно разделить на две группы: *фермионы* и *бозоны*.

К *фермионам* относятся электроны, протоны, нейтроны и другие частицы с полуцелым спином: $\hbar/2, 3\hbar/2, \dots$

К *бозонам* относятся фотоны, фононы и другие частицы, обладающие целочисленным спином: $0, \hbar, 2\hbar, \dots$

В коллективе фермионы проявляют ярко выраженное стремление к «уединению». Если данное квантовое состояние уже занято фермионом, то никакой другой фермион данного типа не может находиться в этом состоянии. В этом заключается известный принцип В. Паули, которому подчиняются фермионы.

Бозоны, напротив, обладают стремлением к «объединению». Они могут неограниченно заселять одно и то же состояние, причем делают это тем «охотнее», чем их больше уже в этом состоянии.

Критерий вырожденности в статистической физике

Рассмотрим вопрос о возможном влиянии специфики частиц (их «фермионности» или, «бозонности») на свойства коллектива, как целого. Для проявления специфики необходимо, чтобы микрочастицы «встречались» друг с другом достаточно часто. Здесь под «встречей» понимается попадание двух частиц в одно и то же состояние или, по крайней мере, в достаточно близкие состояния [Д2].

Предположим, что на N одинаковых частиц приходится Γ различных состояний, в которых может находиться отдельная микрочастица. Мерой, частоты «встреч» может служить отношение $\frac{N}{\Gamma}$. Микрочастицы будут встречаться редко, если выполняется следующее условие:

$$\frac{N}{\Gamma} \ll 1. \quad (1)$$

В этом случае число различных вакантных состояний много больше числа микрочастиц: $\Gamma \ll N$. В таких условиях специфика фермионов и бозонов проявиться, очевидно, не может, поскольку в распоряжении каждой микрочастицы имеется множество различных свободных состояний и вопрос о заселении одного и того же состояния несколькими частицами практически не возникает. Поэтому свойства коллектива, как целого, не будут зависеть от специфики микрочастиц, из которых он состоит. Подобные коллективы называются *невыврожденными*, а условие (1) называют условием *невыврожденности*.

Если же число состояний Γ оказывается одного порядка с числом частиц N , т. е, если, выполняется: условие $\frac{N}{\Gamma} \approx 1$, то вопрос о том, как заселять состояния, поодиночке или коллективно, становится весьма актуальным. В этом случае специфика микрочастицы проявляется в полной мере, оказывая значительное влияние на свойства коллектива, как целого. Такие коллективы называются *вырожденными*.

Физическая статистика, изучающая свойства невырожденных коллективов, называется *классической статистикой*. Ее связывают с именами Максвелла и Больцмана (*статистика Максвелла – Больцмана*).

Физическая статистика, изучающая свойства вырожденных коллективов, называется *квантовой статистикой*. Влияние специфики частиц на свойства вырожденного коллектива обуславливает существенное различие между вырожденным коллективом фермионов и вырожденным коллективом бозонов. В связи с этим различают две квантовые статистики.

Квантовую статистику фермионов связывают с именами Э. Ферми (отсюда, кстати говоря, и происходит термин «фермион») и А. Дирака. Ее называют *статистикой Ферми – Дирака*.

Квантовую статистику бозонов связывают с именами Бозе (отсюда термин «бозон») и А. Эйнштейна. Ее называют *статистикой Бозе – Эйнштейна*.

Из предыдущего следует, что в квантовых статистиках фигурируют только квантовые объекты, тогда как в классической статистике могут фигурировать и классические, и квантово-механические объекты. Если уменьшать число частиц в коллективе или увеличивать число возможных состояний микрочастицы, то вырожденный коллектив превращается, в конце концов, в невырожденный. В этом случае независимо от своей фермионной или бозонной природы коллектив будет описываться классической статистикой Максвелла – Больцмана.

Необходимо, прежде всего, выяснить границы применения классического подхода (*статистика Максвелла – Больцмана*) и квантового подхода (*статистики Ферми – Дирака и Бозе – Эйнштейна*).

Как уже говорилось, в вырожденном газе имеет место взаимное влияние частиц газа даже при отсутствии их силового взаимодействия.

В квантовой физике состояние частицы определяется в фазовом шестимерном пространстве координат и импульсов. Согласно соотношению неопределенностей Гейзенберга для координат и проекций импульсов можно записать:

$$\Delta x \Delta p_x \gg h; \quad \Delta y \Delta p_y \gg h; \quad \Delta z \Delta p_z \gg h.$$

Перемножая, получаем:

$$\Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \gg h^3; \quad \Delta V \Delta p^3 \gg h^3.$$

Согласно последнему соотношению за элементарную ячейку шестимерного фазового пространства принимается объем равный $\Delta \vartheta = h^3$. Т.е. на одно состояние в фазовом пространстве координат и импульсов приходится объем h^3 . Если N – число частиц в объеме V_0 , то объем, занимаемый одной частицей, равен:

$$\Delta V = \frac{V_0}{N} = \frac{1}{n},$$

где n – концентрация частиц.

Погрешность в определении импульса $\Delta p \geq p$, поэтому

$$\frac{1}{n} \cdot p^3 \gg h^3.$$

Преобразуя, получаем

$$n \left(\frac{h}{p} \right)^3 \ll 1.$$

Поскольку длина волны де Бройля для частицы равна

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\nu},$$

приходим к соотношению:

$$n\lambda^3 \ll 1. \quad (2)$$

Таким образом, согласно (2), для невырожденного состояния среднее число частиц газа в объеме λ^3 должно быть мало по сравнению с единицей. Учитывая, что $\lambda = \frac{h}{m\nu}$, а скорость зависит от температуры $\nu = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$, получаем

$$n \frac{h^3}{m^3} \ll \nu^3; \quad n \frac{h^3}{m^3} \ll \left(\frac{3kT}{m}\right)^{\frac{3}{2}}$$

Откуда получаем:

$$T \gg \frac{h^2}{3km} n^{\frac{2}{3}}.$$

Температура T_B

$$T_B = \frac{h^2}{3km} n^{\frac{2}{3}} \quad (3)$$

называется *температурой вырождения*. При выполнении условия $T \gg T_B$ газ является невырожденным. Таким образом, классический подход применим при температурах $T \gg T_B$. В этом случае коллектив частиц является невырожденным, и для его описания пользуются *статистикой Максвелла – Больцмана*.

Если же $T < T_B$, то система частиц является вырожденной и пользуются квантовыми статистиками *Ферми – Дирака* и *Бозе – Эйнштейна*.

В табл. 1 приведены примеры вычисления температуры вырождения для различных коллективов частиц. К квантовым коллективам частиц следует отнести электроны в металле (отсюда термин электронный ферми-газ) и фотонный газ, а к классическим коллективам – обычные молекулярные газы, электроны и дырки в собственных и слаболегированных полупроводниках.

Таблица 1

Примеры вырожденных и невырожденных газов

Коллектив	Концентрация частиц газа, м^{-3}	T_B , К	Тип коллектива и физическая статистика
Электронный газ в металле	$10^{28} - 10^{29}$	$10^4 - 10^5$	Вырожденный газ. Квантовая статистика Ферми – Дирака
Электронный газ в полупроводнике	$10^{20} - 10^{25}$	От 0,2 до 500	От невырожденного до вырожденного. Выбор статистики зависит от условий
Молекулярный газ (на примере H_2)	10^{25}	0,5	Невырожденный газ. Статистика Максвелла – Больцмана.
Фононный газ	$10^{28} - 10^{29}$	20 – 300	От невырожденного до вырожденного. Выбор статистики зависит от условий
Фотонный газ		∞	Вырожденный газ. Статистика Бозе – Эйнштейна

Фазовое пространство. Элементарная ячейка в фазовом пространстве. Плотность числа состояний

Поставим вопрос, каким образом распределение частиц по тем или иным состояниям связано с состоянием коллектива, как целого? Для того чтобы задать состояние коллектива, например газа частиц, надо указать его термодинамические параметры. Чтобы задать состояние частиц, надо указать значение их координат и составляющих импульсов или энергию, которая определяется их координатами и импульсами. Связь между этими двумя типами величин осуществляет *статистическая функция распределения*

$$N(E)dE = f(E)g(E)dE,$$

выражающая число частиц с энергией от E до $E + dE$ в системе, состояние

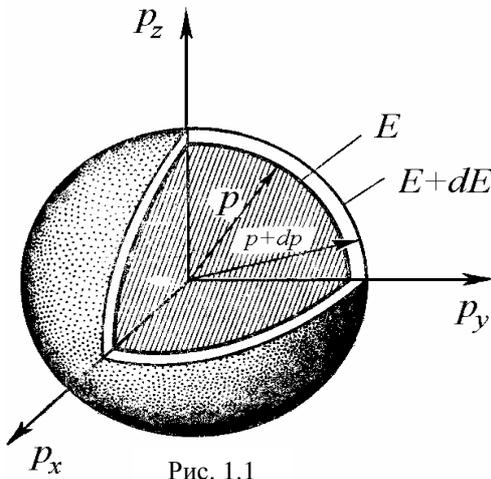


Рис. 1.1

которой описывается термодинамическими параметрами μ и T . Статистическая функция распределения представляется в виде произведения плотности числа состояний $g(E)$, интервала энергий dE и вероятности $f(E)$ заполнения этих состояний частицами. Функцию $f(E)$ называют *функцией распределения*.

Число состояний частиц, приходящихся на интервал энергии dE , пропорционально интервалу

$$dN(E) = g(E)dE, \quad (4)$$

где $g(E)$ – *функция плотности числа состояний* с энергией E .

Число состояний dN в элементе фазового пространства объемом $4\pi p^2 V dp$ координат-импульсов (рис. 1.1) равно

$$dN = \frac{4\pi p^2 V dp}{h^3}.$$

С учетом соотношений $E = \frac{p^2}{2m}$, и $dE = \frac{p}{m} dp$, выражаем число состояний через энергию. С учетом этого:

$$dN = \frac{4\pi}{h^3} \cdot 2mE \cdot \frac{dEm}{p} V = \frac{8\pi}{h^3} E \cdot m^2 \frac{dE}{\sqrt{2mE}} V = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE.$$

Сравнивая с (3), получаем

$$g(E) = \frac{2\pi}{h^3} V (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}.$$

С учетом того, что в одном состоянии может быть два электрона с противоположными спинами (вырождение по спину) нужно умножить $g(E)$ на 2:

$$g(E) = \frac{4\pi}{h^3} V (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}. \quad (5)$$

Таким образом, плотность числа состояний растет пропорционально корню из энергии: $g(E) \sim \sqrt{E}$. График функции (5) представлен на рис. 1.2.

Квантовая статистика Ферми – Дирака. Распределение электронов проводимости в металле по энергиям при абсолютном нуле температуры. Энергия Ферми. Влияние температуры на распределение электронов

Рассмотрим поведение электронов в проводнике. Электроны относятся к частицам с полуцелым спином, т.е. являются фермионами. Они подчиняются статистике Ферми – Дирака, которая дает вероятность состояния с энергией E . Согласно соответствующим расчетам, например, на основе общего

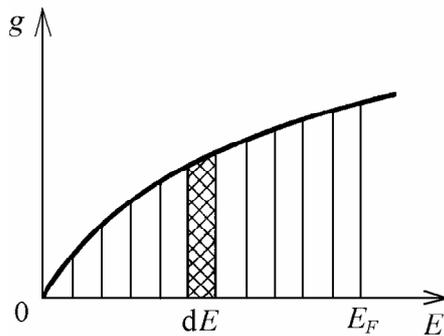


Рис. 1.2

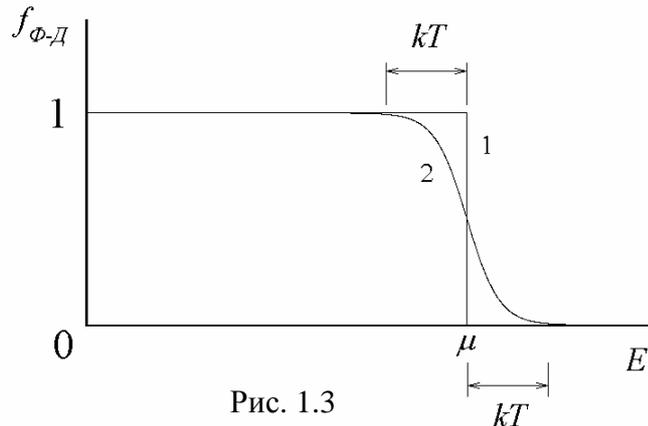


Рис. 1.3

подхода статистической физики – большого распределения Гиббса, вероятность того, что частица-фермион при температуре T и значении химического потенциала μ находится в состоянии с энергией E , равна

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}. \quad (6)$$

Данное соотношение называется *распределением (статистикой) Ферми – Дирака*.

На рис. 1.3 приведена зависимость функции распределения (6) от энергии при разных температурах. При $T = 0$ (рис. 1.3, кривая 1), если $E < \mu$, то $f(E) = 1$ и все состояния являются заполненными. Если же $E > \mu$, то $f(E) = 0$ и все состояния являются пустыми. Значения химического потенциала μ при $T = 0$ называют энергией Ферми E_F . Таким образом, при $T = 0$

все состояния с энергиями, меньшими E_F заняты электронами, а любое состояние с большей энергией является пустым.

Найдем энергию Ферми при $T = 0$. Мы знаем, что все состояния с энергией $E \leq E_F$ заняты электронами. Общее число частиц – N .

Число частиц, приходящихся на интервал энергии dE при $T = 0$ К

$$dN = g(E)dE = \frac{4\pi V}{h^3} \cdot (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE.$$

Интегрируя по всему диапазону энергии, получаем полное число частиц

$$N = \int_0^{E_F} g(E)dE = \int_0^{E_F} \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE = \frac{8\pi V}{3h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} (E_F)^{\frac{3}{2}}.$$

Отсюда находим энергию Ферми:

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (7)$$

Расчеты E_F по формуле (7) дают значения, которые лежат в интервале от 3 до 7 эВ для различных проводников. Энергия Ферми, будучи кинетической энергией поступательного движения свободных электронов, не является энергией их теплового движения. Она имеет чисто квантовую природу. Энергии Ферми соответствует так называемая температура Ферми, которая показывает, при какой температуре обычный невырожденный газ с массой молекул, равной массе электрона, имел бы энергию теплового движения kT , равную энергии Ферми

$$T_F = \frac{E_F}{k},$$

где k – постоянная Больцмана.

Число частиц, приходящихся на интервал энергии dE , при температуре T , отличной от нуля, равно

$$dN(E) = f(E)g(E)dE = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} \cdot \frac{4\pi V}{h^3} \cdot (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE.$$

Функция распределения частиц по энергиям равна [Д2]

$$\frac{dN}{dE} = \frac{4\pi}{h^3} \cdot (2m)^{\frac{3}{2}} V \sqrt{E} \cdot \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}. \quad (8)$$

График ее приведен на рис. 1.4.

Рассмотрим зависимость химического потенциала от температуры. Интегрируя полную функцию распределения по энергии (8), получим полное число свободных электронов в металле

$$N = \int_0^{\infty} f(E)g(E)dE = \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} \cdot \frac{4\pi V}{h^3} \cdot (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE.$$

Приближенное вычисление интеграла для области температур, в которой электронный газ является вырожденным, приводит к следующей зависимости μ от T

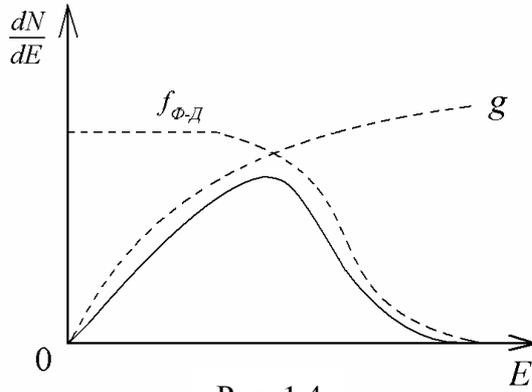


Рис. 1.4

$$\mu = E_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right).$$

Однако, вплоть до температуры плавления металла, kT остается меньше E_F , и уменьшение μ с повышением температуры оказывается настолько малым, что во многих случаях этим можно пренебречь и считать $\mu \approx E_F$.

Средняя энергия электронов вычисляется следующим образом

$$\bar{E} = \frac{E_{\text{полн}}}{N} = \frac{\int_0^{\infty} E f(E) g(E) dE}{\int_0^{\infty} f(E) g(E) dE} = \frac{\int_0^{\infty} \left(e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1 \right)^{-1} E^{\frac{3}{2}} dE}{\int_0^{\infty} \left(e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1 \right)^{-1} E^{\frac{1}{2}} dE}.$$

Приближенное вычисление этих интегралов приводит к следующему результату для средней энергии

$$\bar{E} = \frac{3}{5} E_F \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right).$$

С повышением T электроны подвергаются тепловому возбуждению и переходят на более высокие уровни (возбуждаются электроны из узкой полосы) (см. рис. 1.3, кривая 2). Уровни ниже E_F расположены на расстоянии

$$\Delta E = \frac{E_F}{N/2} = \frac{2E_F}{N}.$$

Пусть при повышении температуры увеличат свою энергию электроны с энергиями $E_F \pm kT$. В этой полосе число уровней

$$\Delta N = \frac{2kT}{\Delta E} = \frac{kTN}{E_F}.$$

На этих ΔN уровнях располагается $2\Delta N$ электронов. Число возбуждаемых электронов узкой полосы: $N' = 2 \frac{kT}{E_F} N$. При комнатной темпера-

туре $\frac{N'}{N} \approx 1 - 2\%$. Получим следующее приближенное соотношение для электронной теплоемкости

$$C_e \sim \frac{3}{2} R \frac{2kT}{E_F}.$$

Из соотношения видно, что теплоемкость вырожденного электронного газа в металле примерно во столько раз меньше теплоемкости невырожденного одноатомного газа, во сколько раз kT меньше E_F .

Таким образом, во всем диапазоне температур, при которых электронный газ в металле является вырожденным, его распределение мало отличается от распределения при абсолютном нуле. Тепловому возбуждению подвергается лишь незначительная доля электронов, располагающихся у уровня Ферми. При комнатной температуре эта доля составляет меньше 1 % от общего числа электронов проводимости. Так как при температурах, при которых возможно существование конденсированного состояния металла, электронный газ в нем является всегда вырожденным, то рассмотренные закономерности распределения электронов в металлах остаются справедливыми практически во всех случаях.

При выполнении критерия невырожденности любой газ, в том числе и электронный в металле, становится невырожденным. Для таких состояний вероятность мала, следовательно, $E - \mu \gg kT$ и функция Ферми – Дирака переходит в функцию Больцмана

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} \approx e^{-\frac{E-\mu}{kT}}.$$

В металлах, где концентрация свободных электронов очень высока (10^{28} см^{-3}), электронный газ всегда находится в вырожденном состоянии и описывается распределением Ферми – Дирака.

С невырожденным электронным газом приходится иметь дело в собственных (беспримесных) и в слаболегированных полупроводниках, являющихся основой всей современной полупроводниковой радиоэлектроники. Концентрация свободных электронов в таких полупроводниках значительно ниже, чем в металлах, и колеблется в зависимости от содержания активных примесей от $10^{16} - 10^{19}$ до $10^{23} - 10^{24} \text{ м}^{-3}$. При таких концентрациях выполняется условие (2) и электронный газ оказывается невырожденным.

Квантовая статистика Бозе – Эйнштейна

Функция распределения бозонов по состояниям была впервые получена индийским физиком Бозе и Эйнштейном и имеет следующий вид:

$$f_{Б-Э}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1}. \quad (9)$$

Она называется функцией *распределения Бозе – Эйнштейна*. Функция (9) определяет среднее число частиц-бозонов в состоянии с энергией E . В отличие от фермионов, подчиняющихся принципу Паули, бозоны могут занимать как свободные состояния, так и состояния, которые уже заняты другими бозонами, причем тем «охотнее», чем с большей плотностью эти состояния заполнены.

Теория теплоемкости Эйнштейна

Так же как и фотоны, кванты колебания кристаллической решетки твердого тела (*фононы*) являются бозонами.

Вопрос о тепловых свойствах твердого тела есть вопрос о поведении квантового газа *фононов*.

В первоначальной квантовой теории теплоемкости твердых тел (*теория теплоемкости Эйнштейна*) кристалл рассматривался как система N атомов, каждый из которых является квантовым гармоническим осциллятором. Колебания всех атомов происходят независимо друг от друга с одинаковой частотой ω . Средняя энергия $\langle W \rangle$, приходящаяся на одну степень свободы атома – квантового гармонического осциллятора, равна:

$$\langle W \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1},$$

где для фононов $E = \hbar\omega$, а $\mu = 0$.

Внутренняя энергия U моля твердого тела выразится следующим образом (без учета нулевой энергии):

$$U = 3N_A \langle W \rangle = 3N_A \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1},$$

откуда находится молярная теплоемкость твердого тела

$$C_M = 3R \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right)^2}.$$

Если ввести характеристическую температуру $T_\theta = \frac{\hbar\omega}{k}$ (температуру Эйнштейна), то

$$C_M = 3R \left(\frac{T_\theta}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{T_\theta}{T}}}{\left(e^{\frac{T_\theta}{T}} - 1 \right)^2}. \quad (10)$$

Этот результат (10) качественно описывает зависимость теплоемкости твердых тел от температуры. При высоких температурах ($\hbar\omega \ll kT$) в соответствии с законом о равномерном распределении энергии по степеням свободы $C_M = 3R$. При низких температурах ($\hbar\omega \gg kT$)

$$C_M = 3R \left(\frac{T_\theta}{T} \right)^2 e^{\frac{T_\theta}{T}}.$$

При $T \rightarrow 0$ теплоемкость $C_M \rightarrow 0$, что качественно согласуется с опытом.

Однако количественно поведение теплоемкости твердых тел вблизи абсолютного нуля простейшая квантовая теория не описывает. Предположение о том, что все атомы твердого тела совершают тепловые колебания независимо друг от друга с одинаковой частотой, чрезмерно упрощает подлинную картину колебаний частиц в кристаллической решетке. Между атомами (или другими частицами) твердого тела имеются настолько сильные взаимодействия, что все N частиц тела образуют связанную систему, обладающую $3N$ степенями свободы, причем колебания всех атомов могут происходить с различными частотами. Весьма сложная задача о распределении частот колебаний атомов в твердом теле явилась в свое время основной уточненной теории теплоемкости твердых тел (*теория Дебая*). Твердое тело обладает широким спектром частот колебаний. Имеются колебания с достаточно низкими и более высокими частотами. Низким частотам соответствуют упругие колебания кристалла звукового (или ультразвукового) диапазона. Связь между частицами в кристаллической решетке приводит к тому, что в кристалле распространяются упругие звуковые волны.

Нормальные колебания решетки. Акустические и оптические фононы. Закон дисперсии для фононов

Атомы твердых тел совершают тепловые колебания около положений равновесия. Вследствие их сильного взаимодействия между собой характер этих колебаний оказывается весьма сложным и точное его описание представляет огромные трудности. Поэтому прибегают к приближенным методам и различного рода упрощениям в решении этой задачи.

Вместо того чтобы описывать индивидуальные колебания частиц, рассматривают их коллективное движение в кристалле, как в пространственно упорядоченной системе. Такое упрощение основывается на том, что

вследствие действия мощных сил связи колебание, возникшее у одной частицы, немедленно передается соседним частицам и в кристалле возбуждается коллективное движение в форме упругой волны, охватывающей все частицы кристалла. Такое коллективное движение называется *нормальным колебанием* решетки. Число нормальных колебаний, которое может возникнуть в решетке, равно числу степеней свободы частиц кристалла, т. е. $3N$ (N – число частиц, образующих кристалл) [Д2].

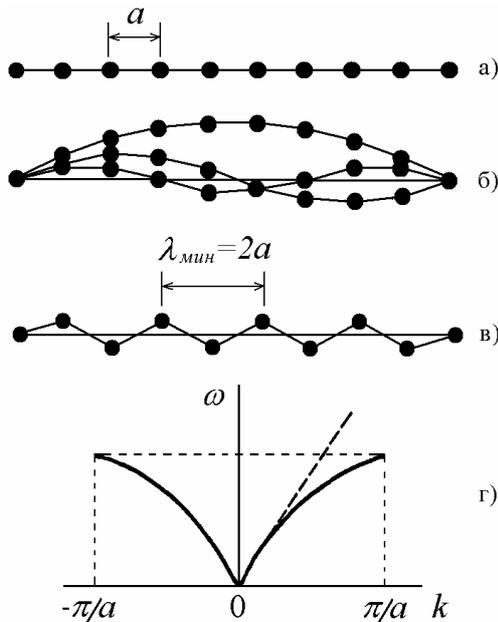


Рис. 1.5

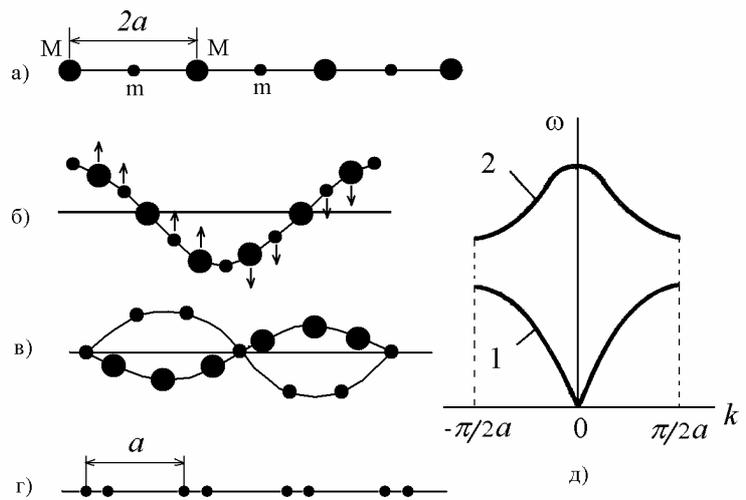


Рис. 1.6

На рис. 1.5, *а* показана одномерная модель твердого тела – линейная цепочка атомов, отстоящих на расстоянии a друг от друга и способных колебаться в направлении, перпендикулярном длине цепочки. Такую цепочку можно трактовать как струну. Если концы цепочки закреплены, то основное колебание, отвечающее самой низкой частоте ω_{\min} соответствует возникновению стоячей волны с узлами на концах (рис. 1.5, *б*). Следующему колебанию отвечает стоячая волна с узлами не только на концах, но и на середине цепочки. Третьему колебанию, или, как говорят, третьей гармонике, соответствует стоячая волна с двумя узлами, делящая цепочку на три равных части, и т.д.

Очевидно, что самая короткая длина волны равна удвоенному расстоянию между атомами (рис. 1.5, *в*):

$$\lambda_{\min} = 2a.$$

Ей отвечает максимальная частота

$$\omega_{\max} = 2\pi \frac{v}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi v}{a}.$$

где v – скорость распространения волн (звука) в цепочке. Для характеристики волновых процессов пользуются понятием волнового числа

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{v} = \frac{\omega}{v}.$$

Откуда следует, что $\omega = \nu k$, где ν – фазовая скорость сама является функцией волнового вектора

$$\nu = \nu_0 \frac{\sin(ka/2)}{ka/2}$$

где ν_0 – скорость распространения колебаний в упругой непрерывной струне, для которой $a = 0$.

Таким образом, частота колебаний является функцией волнового числа

$$\omega = \nu(k) \cdot k.$$

Подобного рода кривые, выражающие зависимость частоты колебаний от волнового числа, называются *дисперсионными* кривыми (рис. 1.5, *з*). При малых k частота растет линейно $\omega = \nu_0 \cdot k$. Затем достигает максимума. Колебания однородной цепочки атомов называются *акустическими*, так как включают в себя весь спектр звуковых колебаний цепочки. Они играют основную роль в определении тепловых свойств кристалла – теплоемкости, теплопроводности, термического расширения и т.д.

Рассмотрим цепочку, состоящую из двух сортов атомов массами M и m , правильно чередующихся друг за другом (рис. 1.6, *а*). В такой цепочке возможно появление двух типов нормальных колебаний. Колебания (рис. 1.6, *б*) ничем ни отличаются от акустических колебаний.

Если же колебания цепочки можно рассматривать как колебания друг относительно друга двух подрешеток (рис. 1.6, *в*), вставленных друг в друга, то подобные колебания называют *оптическими*, так как они играют основную роль в процессах взаимодействия света с кристаллом.

На рис. 1.6, *д* показаны дисперсионные кривые для акустических 1 и оптических 2 нормальных колебаний цепочки, состоящей из двух сортов атомов. В то время как для акустических колебаний частота растет с ростом волнового вектора и достигает максимального значения при $k = \frac{\pi}{2a}$, для оптических колебаний ω_{\max} имеет место при $k = 0$; с ростом k частота этих колебаний уменьшается и становится минимальной при $k = \frac{\pi}{2a}$.

Оптические колебания возникают не только в цепочке, состоящей из разнородных атомов, но и в том случае, когда цепочка состоит из двух более простых цепочек, составленных из одинаковых атомов и вставленных друг в друга, как показано на рис. 1.6, *з*. В элементарной ячейке такой цепочки содержится два атома. Оптические колебания возникают в результате колебаний одной подрешетки относительно другой.

Одним из основных вопросов теории колебаний решетки является вопрос о *распределении нормальных колебаний по частотам* [Д2]. Число колебаний (фононов) пропорционально частотному интервалу и плотности заполнения спектрального участка частотами $g(\omega)$

$$dN = g(\omega)d\omega.$$

Чтобы знать $g(\omega)$, нужно знать $\omega(k)$. Возьмем для простоты $\omega = \nu k$ (в окрестности минимума, при небольших значениях k). Тогда число фононов в объеме фазового пространства $4\pi p^2 V dp$ равно:

$$dN = \frac{4\pi p^2 V dp}{h^3} = \frac{4\pi k^2 dk V \hbar^3}{8\pi^3 \hbar^3}.$$

Тогда с учетом того, что $p = \hbar k = \frac{\hbar \omega}{\nu}$

$$dN = \frac{4\pi \omega^2 d\omega V \hbar^3}{\nu^3 8\pi^3 \hbar^3} = \frac{\omega^2 d\omega V}{2\pi^2 \nu^3}.$$

Поскольку возможны три типа колебаний (два поперечных и одно продольное), выражение нужно умножить на 3. В результате получим

$$dN = \frac{4\pi \omega^2 d\omega V \hbar^3}{\nu^3 8\pi^3 \hbar^3} = \frac{3\omega^2 d\omega V}{2\pi^2 \nu^3}.$$

Итак, функция распределения нормальных колебаний по частотам имеет вид

$$g(\omega) = \frac{3\omega^2 V}{2\pi^2 \nu^3}.$$

Поскольку число нормальных колебаний, которое может возникнуть в решетке, должно быть $3N$, то $g(\omega)$ должна удовлетворять условию:

$$\int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = 3N; \quad \int_0^{\omega_{\max}} \frac{3}{2} \frac{\omega^2 V}{\pi^2 \nu^3} d\omega = \frac{\omega_{\max}^3 V}{2\pi^2 \nu^3} = 3N.$$

Отсюда находим

$$\omega_{\max} = \nu \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}.$$

Эта максимальная частота ω_{\max} носит название *характеристической дебаевской частоты* ω_D , а температура соответствующей энергии фотона с ω_D – *характеристической температурой Дебая*.

$$\hbar \omega_D = kT_D; \quad T_D = \frac{\hbar \omega_D}{k}.$$

Вычисление температуры Дебая T_D дает для некоторых кристаллов следующие результаты.

кристалл	Si	Ge	C (алмаз)
T_D , К	658	366	1920

При температуре Дебая в твердом теле возбуждается весь спектр нормальных колебаний, включая и колебания с максимальной частотой ω_D . Поэтому дальнейшее повышение T не может вызвать появление новых колебаний. Увеличивается лишь степень возбуждения колебаний.

Теплоемкость кристаллической решетки и ее зависимость от температуры (теория Дебая)

Внутренняя энергия кристаллической решетки (с точностью до нулевой энергии), состоящей только из одного сорта атомов, может быть найдена суммированием энергии нормальных колебаний с различными частотами в объеме твердого тела:

$$U = \int_0^{\omega_D} \hbar\omega \cdot f_{B-\Theta}(E) \cdot g(\omega) d\omega;$$

$$U = \int_0^{\omega_D} \hbar\omega \cdot \frac{1}{e^{kT} - 1} \cdot \frac{3}{2} \frac{\omega^2 V}{\pi^2 \nu^3} d\omega = \frac{3}{2} \frac{V\hbar}{\pi^2 \nu^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{kT} - 1},$$

где ν – скорость распространения волн деформации (звука). Вычислить интеграл не удастся, поэтому займемся его анализом для низких и высоких температур.

В область низких температур $T \ll T_D$. При вычислении интеграла вводится переменная $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$, и верхний предел заменяется на бесконечность

$$U = \frac{3}{2} \frac{V\hbar}{\pi^2 \nu^3} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Получаем:

$$U = \frac{3}{2} \frac{V\hbar}{\pi^2 \nu^3} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^4 \cdot \frac{\pi^4}{15}.$$

Поскольку $\omega_D^3 = \nu^3 6\pi^2 \frac{N}{V}$, подставим вместо $\nu^3 = \frac{\omega_D^3 V}{6\pi^2 N}$, получаем:

$$U = \frac{9N}{(\hbar\omega_D)^3} (kT)^4 \frac{\pi^4}{15}.$$

Внутренняя энергия растет пропорционально T^4 , а теплоемкость

$$C = \frac{dU}{dT} = \frac{9Nk^4 \cdot 4T^3 \pi^4}{(\hbar\omega_D)^3 \cdot 15}.$$

пропорциональна T^3 . Поскольку $T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k}$, то

$$C = \frac{12}{5} \pi^4 Nk \left(\frac{T}{T_D} \right)^3. \quad (11)$$

Эта закономерность носит название *закон Дебая*. Зависимость (11) хорошо оправдывается в области температур ниже $T_D/50$. Молярная теплоемкость равна

$$C_M = \frac{12}{5} \pi^4 R \left(\frac{T}{T_D} \right)^3. \quad (12)$$

Опытные исследования теплоемкостей различных кристаллических тел при низких температурах показали, что закон (11) оправдывается не для всех кристаллов, а только для таких, для которых атомы в кристаллической решетке связаны со своими соседями примерно одинаково прочно во всех трех направлениях. Для слоистых кристаллов типа графита, в которых силы связи между соседними атомами внутри слоя значительно больше сил связи, между ближайшими атомами из двух соседних слоев, теплоемкость при температурах, близких к абсолютному нулю, оказывается пропорциональной квадрату абсолютной температуры. Обнаружены и такие кристаллы, для которых теплоемкость вблизи абсолютного нуля пропорциональна первой степени температуры. Такие кристаллы имеют нитевидное или цепочечное строение. Силы связи внутри нити много больше, чем между соседними нитями.

Теория Дебая приводит к выводам, которые хорошо совпадают с экспериментальными данными в широком интервале температур, но и она не свободна от недостатков. Трудно, например, согласиться с тем, что энергия кристалла отождествляется с энергией стоячих волн. В стоячей волне узлы и пучности закономерно распределены в пространстве, поэтому исключается возможность тепловых флуктуаций, совершенно неизбежных при тепловом движении.

Дебаевская модель твердого тела является упрощенным представлением твердого тела в виде изотропной упругой среды, способной совершать колебания в конечном интервале частот от нуля до ω_D . Поэтому выводы этой теории (например, зависимость теплоемкости от температуры) хорошо совпадают с экспериментальными данными только для кристаллов с простыми решетками (химические элементы и некоторые простые соединения типа галоидных солей или окислов). К телам сложной структуры теория Дебая неприменима, так как энергетический спектр колебаний таких тел оказывается чрезвычайно сложным. В молекулярных кристаллах, например, кроме поступательно-коле-

бательного движения молекулы как целого, приходится учитывать ее крутильные колебания и колебания атомов или групп атомов внутри молекулы.

Теплоемкость твердого тела определяется колебаниями узлов кристаллической решетки, а характер этих колебаний зависит от структуры решетки. Если при изменении температуры в твердом теле происходят структурные изменения, то их безошибочно можно обнаружить по нарушению монотонности графика температурной зависимости теплоемкости. Изучение температурного хода теплоемкости позволяет обнаружить фазовые переходы второго рода, которые не сопровождаются ни тепловым эффектом, ни изменением объема, но теплоемкость близ точки перехода изменяется скачком.

В области высоких температур верхний предел равен $x_D = \frac{\hbar\omega_D}{kT}$ и внутренняя энергия определяется:

$$U = \frac{3}{2} \frac{V\hbar}{\pi^2\nu^3} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^4 \int_0^{x_D} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Поскольку $x_D = \frac{\hbar\omega_D}{kT} \ll 1$, $e^x \approx 1 + x$, интеграл упрощается

$$U = \frac{9N}{(\hbar\omega_D)^3} (kT)^4 \cdot \int_0^{x_D} x^2 dx = \frac{9N}{(\hbar\omega_D)^3} (kT)^4 \cdot \left(\frac{\hbar\omega_D}{kT} \right)^3 \cdot \frac{1}{3} = 3NkT.$$

Таким образом, внутренняя энергия кристалла при высоких температурах пропорциональна T

$$U = 3NkT.$$

Теплоемкость же является постоянной величиной: $C = 3Nk$.

Молярная теплоемкость всех химически простых кристаллических тел при достаточно высоких температурах ($T > T_D$) одинакова и равна: $C_M = 3N_A k = 3R$. Эта закономерность известна как *закон Дюлонга и Пти*.

Зависимость молярной теплоемкости от температуры для решетки и

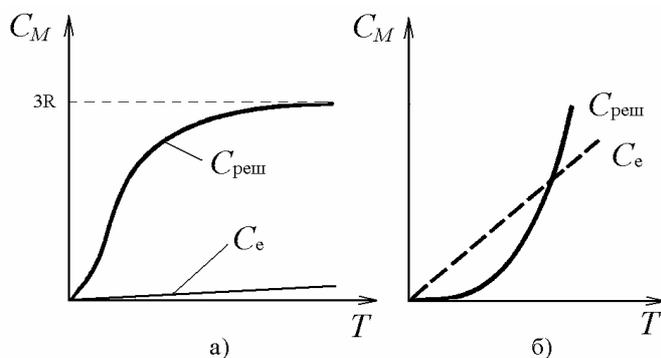


Рис. 1.7

и электронного газа приведена на рис. 1.7. Вклад электронов в теплоемкость металлов становится заметным при очень низких температурах, где теплоемкость кристаллической решетки, пропорциональная T^3 , становится даже меньше электронной теплоемкости C_e , пропорциональной T (рис. 1.7, б).

1.2. Методические указания к лекционным занятиям

№	Вопросы лекции	Форма изучения	Литература	Вопросы для самоконтроля студентов
1	Критерий вырожденности в статистической физике	л	[1] – §41.4	<ul style="list-style-type: none"> • Что такое вырожденный и невырожденный коллектив микрочастиц? • Какие квантовые распределения вы знаете? • Какие классические распределения вы знаете? • При каких условиях квантовые распределения переходят в классические? • Что такое температура вырождения?
2	Фазовое пространство. Элементарная ячейка. Плотность состояний	л	[1] – §41.1 [3] – §3.1	<ul style="list-style-type: none"> • Что такое фазовое пространство? чему равен объем элементарной ячейки в фазовом пространстве? • Что такое функция плотности состояний? Запишите выражение, проиллюстрируйте графиком
3	Понятие о квантовой статистике Ферми – Дирака. Распределение электронов проводимости в металле по энергиям при абсолютном нуле температуры. Энергия Ферми. Влияние температуры на распределение электронов	л	[1] – §41.2, 41.4 – 41.5 [2] – §31.3 [3] – §3.3, 3.7 – 3.8	<ul style="list-style-type: none"> • Что такое энергия Ферми и как она определяется при $T = 0$ К? • Какой статистике подчиняются электроны в металле? электроны в полупроводнике? От чего это зависит? • Как зависит функция распределения Ферми – Дирака от энергии и от температуры? • Почему при больших энергиях функция распределения Ферми – Дирака может быть заменена функцией Больцмана?
4	Понятие о квантовой статистике Бозе – Эйнштейна. Элементы теории теплоемкости Эйнштейна	л	[1] – §41.3, 41.7	<ul style="list-style-type: none"> • Что представляет собой функция распределения Бозе – Эйнштейна? • В чем суть теории теплоемкости Эйнштейна? • Каков характер зависимости теплоемкости кристалла при низких температурах? При высоких температурах? • С чем связана основная часть теплоемкости кристалла? • Каков вклад электронной теплоемкости в теплоемкость кристалла при высоких и низких температурах?
5	Фононный газ. Нормальные колебания решетки. Акустические и оптические фононы. Закон дисперсии для фононов. Теплоемкость кристаллической решетки и ее зависимость от температуры (теория Дебая)	л	[1] – §41.8 [2] – §30.6 – 30.7	<ul style="list-style-type: none"> • Чем определяется максимально возможная частота нормальных колебаний решетки кристалла, энергия каждого нормального колебания? • Что такое акустические колебания? Оптические колебания? • Что такое температура Дебая? • Как вычисляется внутренняя энергия кристаллической решетки в рамках модели Дебая? • В чем суть теории теплоемкости Дебая?

1.3. Методические указания к практическим занятиям

№ п/п	Тема занятия	Тип задач	Рекомендации по решению
1	Критерий вырожденности. Квантовый электронный газ в металле	Задачи на определение температуры вырождения. Определение энергии Ферми. Определение доли электронов в заданном интервале энергий при абсолютном нуле	Помнить, что температура вырождения связана с основными параметрами «газа»: концентрацией и массой частиц
2	Квантовые распределения Ферми – Дирака и Бозе – Эйнштейна	Определение вероятности состояния для фермионов. Нахождение среднего числа бозонов частиц в данном состоянии. Вычисление энергии Ферми при нуле температуры. Определение числа электронов в металле в заданном интервале энергий	Для определения вероятности состояния фермиона воспользоваться распределением Ферми – Дирака. Для определения среднего числа бозонов в данном состоянии воспользоваться распределением Бозе – Эйнштейна
3	Теплоемкость кристалла в теории Эйнштейна и Дебая	Определение молярной теплоемкости и температуры Дебая, Эйнштейна. Нахождение дебаевской частоты	Воспользоваться выражениями для молярной теплоемкости в теории Дебая и Эйнштейна

1.4. Примеры решения задач

Задача 1. Найти вероятность того, что свободный электрон в металле при $T = 293 \text{ K}$ будет находится в состоянии, характеризуемом: а) энергией, равной энергии Ферми E_F , б) энергией, отличающейся от E_F , на $+ 0,1 \text{ эВ}$.

Решение. Вероятность того, что при температуре T в состоянии, характеризующемся энергией E , будет находиться электрон, определяется функцией распределения Ферми – Дирака:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}. \quad (1)$$

Если $E = E_F$ то в формуле (1) показатель степени равен нулю и $f(E) = 0,5$.

Если состояние электрона характеризуется энергией E , отличающейся от E_F на величину $+ 0,1 \text{ эВ}$, то это значит, что электрон находится на уровне, расположенном выше, чем уровень Ферми.

Вероятность того, что этот уровень будет занят электроном, определим по формуле (1), полагая, что $E - E_F = 0,1 \text{ эВ}$ и $kT = 0,025 \text{ эВ}$:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{0,1}{0,025}} + 1} = 0,018.$$

При $E - E_F = - 0,1 \text{ эВ}$

$$f(E) = \frac{1}{e^{-\frac{0,1}{0,025}} + 1} = 0,98\dots$$

Ответ: $f(E_F) = 0,5$; $f(0,1) = 0,018$; $f(- 0,1) = 0,98$.

Задача 2. Определить среднюю энергию электрона в металле при абсолютном нуле температуры.

Решение. Полная энергия электронов в единице объема металла равна

$$E_{\text{полн}} = \int_0^{E_F} E \cdot g(E) dE = \int_0^{E_F} \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{3}{2}} dE = \frac{4\pi}{h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} (E_F)^{\frac{5}{2}} \frac{2}{5}.$$

С учетом того, что концентрация электронов связана с уровнем Ферми соотношением

$$n = \frac{8\pi V}{3h^3} (2m)^{\frac{3}{2}} (E_F)^{\frac{3}{2}}.$$

Полная энергия равна

$$E_{\text{полн}} = \frac{3}{5} n E_F$$

Средняя энергия электрона равна

$$\bar{E} = \frac{E_{\text{полн}}}{n} = \frac{3}{5} E_F, \quad \bar{E} = 5,6 \text{ эВ.}$$

Ответ: $\bar{E} = 5,6 \text{ эВ.}$

Задача 3. Вычислить максимальную энергию E_F (энергию Ферми), которую могут иметь свободные электроны в металле (медь) при температуре $T = 0 \text{ К}$. Принять, что на каждый атом меди приходится по одному валентному электрону.

Решение. Максимальная энергия E_F , которую могут иметь электроны в металле при $T = 0 \text{ К}$, связана с концентрацией свободных электронов соотношением

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (1)$$

Концентрация свободных электронов по условию задачи равна концентрации атомов, которая может быть найдена по формуле

$$n = \frac{\rho N_A}{M}, \quad (2)$$

где ρ – плотность меди; N_A постоянная Авогадро; M – молярная масса. Подставляя выражение (2) в формулу (1), получаем

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3\rho N_A}{8\pi M} \right)^{\frac{2}{3}}$$

Произведя вычисления, получим: $E_F = 1,2 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} = 7,4 \text{ эВ.}$

Ответ: $E_F = 7,4 \text{ эВ.}$

Задача 4. Кристаллический алюминий массой 10 г нагревается от 10 до 20 К . Пользуясь теорией Дебая, определить количество теплоты, необходимое для нагревания. Характеристическая температура Дебая для алюминия равна 418 К . Считать, что условие $T \ll T_D$ выполняется. $M = 27 \cdot 10^{-3} \text{ кг/моль}$.

Решение. Количество теплоты, необходимое для нагревания алюминия от температуры T_1 до T_2 , будем вычислять по формуле

$$Q = m \int_{T_1}^{T_2} c dT, \quad (1)$$

где m – масса алюминия; c – его удельная теплоемкость, которая связана с молярной теплоемкостью соотношением $c = C_m/M$. Учитывая это, формулу (1) запишем в виде

$$Q = \frac{m}{M} \int_{T_1}^{T_2} C_m dT. \quad (2)$$

По теории Дебая, если условие $T \ll T_D$ выполнено, молярная теплоемкость определяется предельным законом

$$C_m = \frac{12\pi^4}{5} R \left(\frac{T}{T_D} \right)^3, \quad (3)$$

где $R = 8,31$ Дж/(моль·К) – молярная газовая постоянная; T_D – характеристическая температура Дебая; T – термодинамическая температура. Подставляя (3) в (2) и выполняя интегрирование, получаем

$$Q = \frac{12\pi^4}{5} \frac{m}{M} R \int_{T_1}^{T_2} \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 dT = \frac{3\pi^4}{5} \frac{m}{M} \frac{R}{T_D^3} (T_2^4 - T_1^4).$$

Подставляя числовые значения, находим $Q = 0,36$ Дж.

Ответ: $Q = 0,36$ Дж.

Задача 5. *Используя квантовую теорию теплоемкости Эйнштейна, вычислить удельную теплоемкость при постоянном объеме алюминия при температуре $T = 200$ К. Характеристическую температуру Эйнштейна T_θ принять для алюминия равной 300 К.*

Решение. Удельная теплоемкость c вещества может быть выражена через молярную теплоемкость C_M соотношением

$$c = C_M / M,$$

где M – молярная масса. Молярная теплоемкость при постоянном объеме по теории Эйнштейна выражается формулой

$$C_M = 3R \left(\frac{T_\theta}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{T_\theta}{T}}}{\left(e^{\frac{T_\theta}{T}} - 1 \right)^2}.$$

Выражение для удельной теплоемкости принимает вид

$$c = \frac{3R}{M} \left(\frac{T_\theta}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{T_\theta}{T}}}{\left(e^{\frac{T_\theta}{T}} - 1 \right)^2}.$$

Произведя вычисления, получим: $c = 770$ Дж/(кг·К).

Ответ: $c = 770$ Дж/(кг·К).

1.5. Задачи для самостоятельного решения

1. Вычислить скорость дрейфа v электрона меди при наложении электрического поля напряженностью 100 В/м. Подсчитать отношение скорости дрейфа к скорости Ферми, если уровень Ферми для меди равен 7 эВ.
2. Определить долю свободных электронов в металле при $T = 0$ К, энергии которых заключены в интервале от $1/2E_{\text{макс}}$ до $E_{\text{макс}}$.
3. Найти долю свободных электронов в металле при температуре 0 К, кинетическая энергия которых больше половины максимальной.
4. Вычислить концентрацию свободных электронов в меди.
5. Найти максимальную скорость электронов в металле при 0 К.
6. Экспериментальное значение границы Ферми для лития при 0 К равно 3,5 эВ. Какое значение эффективной массы электрона следует подставить в формулу, чтобы получить согласие между теоретическим и экспериментальными значениями границы Ферми.
7. Найти число свободных электронов, приходящихся на один атом натрия при $T = 0^\circ\text{C}$, если уровень Ферми $E_F = 3,07$ эВ и плотность натрия равна $0,97$ г/см³.
8. До какой температуры надо было бы нагреть классический электронный газ, чтобы средняя энергия его электронов оказалась равной средней энергии свободных электронов в меди при $T = 0^\circ\text{C}$? Считать, что на каждый атом меди приходится один свободный электрон.
9. Воспользовавшись формулой распределения электронов по энергиям

$$dN(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^2 \sqrt{E} dE,$$

найти при $T = 0$ К: а) распределение свободных электронов по скоростям $dN(v)$; б) отношение средней скорости свободных электронов к их максимальной скорости.

10. Вычислить давление электронного газа в металлическом натрии при $T = 0^\circ\text{C}$, если концентрация свободных электронов в нем $n = 2,5 \cdot 10^{22} \text{ см}^3$. Воспользоваться уравнением для давления идеального газа.
11. Металлы литий и цинк приводят в соприкосновение друг с другом при температуре $T = 0 \text{ К}$. На сколько изменится концентрация электронов проводимости в цинке? Какой из этих металлов будет иметь более высокий потенциал?
12. Каково значение энергии Ферми E_F у электронов проводимости двухвалентной меди? Выразить энергию Ферми в джоулях и электрон-вольтах.
13. В медном проводнике с площадью поперечного сечения $0,2 \text{ см}^2$ идет ток 1 А . Какова средняя скорость дрейфа электронов?
14. Чему равна подвижность электронов натрия при комнатной температуре, если электропроводность его $0,23 \cdot 10^8 \text{ 1/(Ом}\cdot\text{м)}$, концентрация носителей заряда $2,5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$?
15. Оценить скорость распространения акустических колебаний в алюминии, дебаевская температура которого $T_D = 396 \text{ К}$.
16. Оценить скорость звука в кристалле, дебаевская температура которого $T = 300 \text{ К}$ и межатомное расстояние $a = 0,25 \text{ нм}$.
17. Оценить максимальные значения энергии и импульса фонона (звукового кванта) в алюминии, дебаевская температура которого $T_D = 374 \text{ К}$.
18. Используя теорию Дебая, вычислить удельную теплоемкость железа при температуре 12 К . Принять характеристическую температуру Дебая для железа 467 К , считать, что условие $T \ll T_D$ выполняется.
19. Теплоемкость серебра при 10 К равна $199 \text{ Дж/(кмоль}\cdot\text{К)}$. Определить характеристическую температуру Дебая.
20. Определить приближенно скорость звука в алмазе, зная, что Дебаевская температура алмаза равна 1860 К и постоянная решетки $d = 1,54 \text{ \AA}$.
21. Пользуясь теорией Дебая, найти молярную теплоемкость цинка при температуре 14 К . Характеристическая температура Дебая для цинка 308 К . Считать, что условие $T \ll T_D$ выполняется.
22. Слиток золота массой 500 г нагревают от 5 до 15 К . Определить, пользуясь теорией Дебая, количество теплоты, необходимое для нагревания. Характеристическая температура Дебая для золота 165 К . Считать, что условие $T \ll T_D$ выполняется.
23. Медный образец массой $m = 100 \text{ г}$ находится при температуре $T_1 = 10 \text{ К}$. Определить теплоту Q , необходимую для нагревания образца до температуры $T_2 = 20 \text{ К}$. Можно принять характеристическую температуру T_D для меди равной 300 К , а условие $T \ll T_D$ считать выполненным.
24. Используя квантовую теорию теплоемкости Эйнштейна, определить коэффициент упругости β связи атомов в кристалле алюминия. Принять для алюминия $T_E = 300 \text{ К}$.

25. Зная, что для алмаза $T_D = 2000$ К, вычислить его удельную теплоемкость при температуре $T = 30$ К.
26. Молярная теплоемкость C_M серебра при температуре $T = 20$ К оказалась равной $1,65$ Дж/(моль·К). Вычислить по значению теплоемкости характеристическую температуру T_D . Условие $T \ll T_D$ считать выполненным.
27. Вычислить по теории Дебая теплоемкость цинка массой $m = 100$ г при температуре $T = 10$ К. Принять для цинка характеристическую температуру Дебая $T_D = 300$ К и условие $T \ll T_D$ считать выполненным.

УБ-2. Зонная теория твердого тела. Контактные явления

Введение

В программу курса физики для вузов включены лишь отдельные вопросы из обширного объема материала, изучаемого физикой твердого тела. В настоящем разделе рассмотрена классификация кристаллов по типам кристаллической решетки, природа дефектов кристаллической решетки, элементы зонной теории твердых тел и ее применение к полупроводникам, металлам и диэлектрикам, а также элементы статистики носителей заряда в полупроводниках, дано понятие о контактных явлениях в твердых телах.

Главная проблема при теоретическом исследовании системы взаимодействующих частиц состоит в том, что при квантово-механическом описании указанных систем число переменных оказывается весьма большим, что вызывает математические трудности и приводит к невозможности получить прямое решение поставленной задачи через систему уравнений Шредингера. Современная квантовая теория твердого тела основывается на ряде упрощений. Зонная теория представляет собой одну из наиболее простых квантово-механических схем, учитывающих основные особенности движения электронов в кристаллах и позволяющих интерпретировать большое количество экспериментальных данных. Основными предположениями зонной теории, рассматриваемыми ею как постулаты, являются:

- при изучении движения электронов атомные ядра, по причине их большой массы, можно рассматривать как неподвижные источники поля, действующие на электроны;
- ядра в пространстве располагаются строго периодически в узлах идеальной кристаллической решетки;
- взаимодействие электронов друг с другом заменяется некоторым эффективным внешним полем.

При изучении данного раздела студенты должны
иметь представление:

- о характере и типах связи в твердых телах;
- о строении твердых тел;
- об основных положениях квантовой механики, необходимых для понимания физических процессов в твердых телах;
- о квантовых статистиках Ферми – Дирака и Бозе – Эйнштейна, о классической статистике Больцмана;
- о классической электронной теории, понятии потенциала, работы выхода, энергии заряженной частицы;
- о зонной теории;
- о энергии Ферми, работе выхода.

обладать навыками:

- применения элементов дифференциального и интегрального исчисления;
- применения элементов математической статистики.

Учебная программа блока

№ п/п	Содержание блока	Форма подготовки	Литература
1	Силы связи и внутренняя структура твердого тела	л	[1] – §41.2 [2] – §30.1 – 30.5
2	Основы зонной теории твердого тела	л	[1] – §43.1 [2] – §31.1 [3] – 2.1 – 2.7
3	Движение электронов в периодическом поле кристалла под действием внешнего поля. Эффективная масса электрона	л	[2] – §31.2, 32.1 – 32.3 [3] – 2.8 – 2.9
4	Деление тел на изоляторы, проводники и полупроводники	л	[1] – §43.3
5	Статистика носителей заряда в полупроводниках. Собственная и примесная проводимость полупроводников. Подвижность носителей заряда. Эффект Холла в полупроводниках	л	[1] – §43.4 – 43.5 [3] – §3.1 – 3.4
6	Дефекты кристаллической решетки	л	[3] – §3.5 – 3.9
7	Понятие о контактных явлениях. Контакт металл-металл	л	[1] – §44.1 [3] – §8.1 – 8.3
8	Контакт металл-полупроводник	л	[1] – §44.2 [3] – §8.4 – 8.6
9	Контакт электронного и дырочного полупроводников (<i>p-n</i> -переход) и его вольтамперная характеристика. Транзистор	л	[1] – §44.3 – 44.4 [3] – §8.8 – 8.9

Цели обучения

Что должен знать	Что должен уметь
<ul style="list-style-type: none"> • Типы связей в твердых телах • Типы кристаллических решеток • Обозначение направлений и плоскостей в кристалле и способ их определения • Принцип деления тел на проводники, полупроводники и диэлектрики в рамках зонной теории • Зависимость концентрации носителей заряда в собственных и примесных полупроводниках от температуры и ширины запрещенной зоны • Зависимость уровня Ферми от температуры для собственного полупроводника • Зависимость проводимости и подвижности носителей заряда в полупроводниках от температуры • Закон действующих масс для полупроводников • ВАХ <i>p-n</i>-перехода 	<ul style="list-style-type: none"> • Определять индексы направлений и плоскостей в кристаллической решетке • Вычислять период простых решеток • Определять плотность упаковки атомов в решетке • Определять концентрацию дефектов решетки • Рассчитывать проводимость собственного и примесного полупроводника • Рассчитывать ширину запрещенной зоны по результатам измерения температурной зависимости проводимости полупроводника • Пользоваться статистикой Ферми – Дирака, Больцмана для определения концентрации носителей заряда в полупроводниках • Рассчитывать проводимость, подвижность и концентрацию носителей заряда по результатам измерений эффекта Холла для невырожденного полупроводника

2.1. Краткое содержание теоретического материала

Силы связи и внутренняя структура твердого тела

При достаточном сближении атомов (молекул) между ними возникает взаимодействие, приводящее к появлению сил притяжения и отталкивания. Рассмотрим кратко природу этих сил.

Наиболее общим видом связи, возникающим между любыми атомами и молекулами, являются силы Ван-дер-Ваальса. В уравнении Ван-дер-Ваальса

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT ;$$

эти силы определяют поправку $\frac{a}{V^2}$. Поправка b учитывает действия сил отталкивания. Силы Ван-дер-Ваальса возникают между электрически нейтральными системами и системами, не обладающими электрическим моментом. При взаимодействии инертных газов они являются единственными силами, делающими возможным существование жидкого и твердого состояния этих веществ.

Атомы, стоящие в периодической системе Менделеева рядом с инертными газами, обладают склонностью принимать их конфигурацию путем отдачи или принятия электронов. При этом атом металла превращается в положительно заряженный ион, атом галоида – в отрицательно заряженный ион. Эти ионы взаимодействуют между собой по закону Кулона как два разноименных заряда. Такая связь получила название ионной или полярной.

Наличием полярной и Ван-дер-Ваальсовой связи невозможно объяснить существование соединений типа H_2 , O_2 , N_2 и т.п., типа алмаза. Однородные атомы не могут образовать противоположно заряженных ионов путем перераспределения валентных электронов, как это имеет место при взаимодействии металлов с галоидами. С другой стороны, прочность связи в молекулах H_2 , O_2 , N_2 и т.п. значительно больше той, которую способны обеспечить силы Ван-дер-Ваальса. Для такого рода соединений эти силы играют обычно роль небольшой поправки к той связи, которая определяет прочность перечисленных выше соединений. Эта связь получила название валентной или атомной. Ее называют также гомеопольной и обменной. В основе этой связи лежит обменный эффект (обмен атомов электронами), имеющий чисто квантовую природу, поэтому характерной особенностью атомной связи является ее насыщаемость и направленность. Насыщаемость выражает тот факт, что каждый атом может образовывать валентную связь лишь с определенным числом своих соседей. При этом осуществляется максимальное перекрытие облаков связующих электронов. Это и означает, что валентная связь имеет направленный характер.

Особую группу тел образуют металлы, стоящие в начале каждого периода таблицы Менделеева. Образование металлического состояния невозможно объяснить ни с точки зрения ионной, ни с точки зрения валентной связи. В самом деле, ионная связь возникает между атомами, имеющими различное сродство к дополнительному электрону, например, между атомами металла и галоида. Такая связь не может, очевидно, возникнуть между однородными атомами металла, обладающими одинаковым сродством к электрону. С другой стороны, атомы металла не имеют достаточного количества валентных электронов для образования валентной связи со своими ближайшими соседями. Так, атом меди имеет один валентный электрон, и может образовать валентную связь с одним атомом. В решетке же меди каждый атом окружен 12 ближайшими соседями, с которыми он должен находиться в силовой связи. Это указывает на то, что в металлах действует особый вид связи, получивший название металлической. Внешние валентные электроны в атомах металлов связаны с ядром относительно слабо, поэтому в основе металлической связи лежит обобществление

внешних валентных электронов, что делает ее схожей с валентной связью. Однако в случае валентной связи в обобществлении электронов участвуют пары атомов, являющиеся ближайшими соседями, и обобществлению подвергаются только пары электронов; эти электроны все время находятся между атомами. В случае же металлической связи в обобществлении валентных электронов участвуют все атомы кристалла и обобществленные электроны не локализируются уже у своих атомов, а свободно перемещаются внутри всей решетки.

В заключение следует подчеркнуть, что в реальных твердых телах каждая из рассмотренных выше связей в чистом виде почти никогда не встречается. Практически всегда имеет место наложение двух и более типов связей. Одна из них имеет, как правило, преобладающее значение, определяя структуру и свойства тела.

Кристаллическая решетка

Атомы большого числа твердых тел образуют упорядоченную структуру. Тело с упорядоченным расположением атомов называют кристаллическим.

Для описания правильной внутренней структуры твердых тел удобно пользоваться понятием пространственной или кристаллической решетки. Предположим, что кристалл состоит из атомов одного сорта, находящихся в узлах трехмерной решетки, задаваемой набором векторов

$$\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c},$$

где $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ – три некопланарных вектора и m, n, p – произвольные целые числа ($0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Описанная кристаллическая решетка называется решеткой Браве (рис. 2.1).

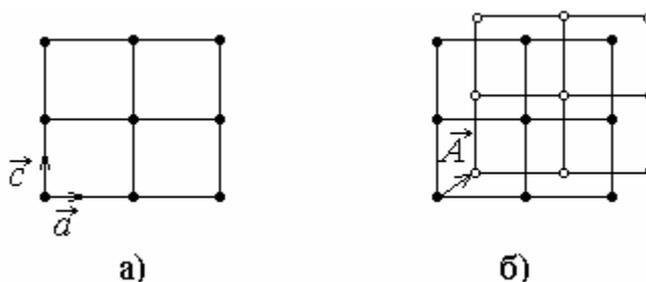


Рис. 2.1. Двумерные решетки: а) решетка Браве; б) решетка с базисом из двух атомов (●, ○)

Она может быть получена переносом (трансляцией) одного узла на векторы \vec{R} .

Если кристалл состоит из атомов двух сортов, то его решетка может быть представлена в виде двух, вставленных друг в друга решеток Браве,

задаваемых векторами $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. Такую решетку называют решеткой с базисом (рис. 2.1, б). Сдвиг одной решетки относительно другой описывается базисным вектором \vec{A} . Решетку с базисом можно построить трансляцией атомов базиса на векторы \vec{R} .

Параллелепипед, построенный на основных (или кратчайших) векторах $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ называют элементарной ячейкой. Если элементарными ячейками заполнить всё пространство, то можно получить периодическую решетку. Элементарная ячейка определяется тремя ребрами $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ и углами между ними α, β, γ (рис. 2.2). Эти величины называются параметрами решетки.

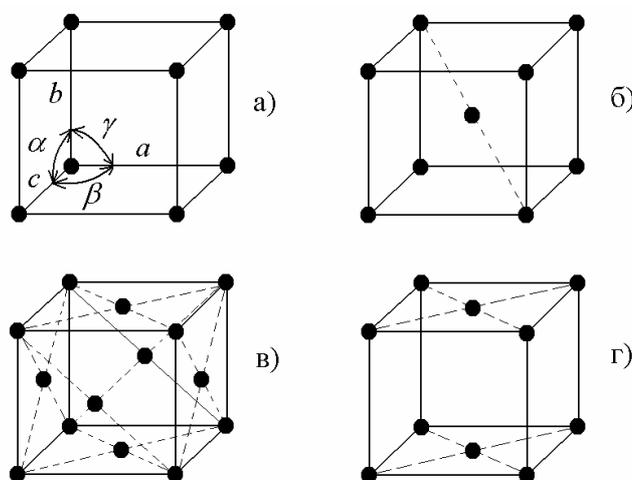


Рис. 2.2. Прimitivesкая (а), объемноцентрированная (б), гранецентрированная (в), базоцентрированная (г) элементарные ячейки.

Если узлы расположены только в вершинах элементарной ячейки, то она называется primitive (рис. 2.2, а). На такую ячейку приходится один узел, т.к. все узлы в ней являются эквивалентными и могут быть получены трансляцией одного узла на векторы $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. Объемноцентрированная (ОЦ) элементарная ячейка (рис. 2.2, б) является двухузельной, гранецентрированная (ГЦ) (рис. 2.2, в) – четырехузельной, базоцентрированная (БЦ) (рис. 2.2, г) – двухузельной.

Узлы решетки, лежащие ближе других к некоторому узлу, называются ближайшими соседями. Число этих узлов для данной решетки называется координационным числом Z . Простая кубическая решетка ($a = b = c$ и $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) имеет $Z = 6$; ОЦК – $Z = 8$; ГЦК – $Z = 12$.

Индексы узлов

Положение любого узла в решетке относительно выбранного начала координат определяется заданием трех его координат – x, y, z . Эти координаты можно выразить следующим образом:

$$x = ma; \quad y = nb; \quad z = pc,$$

где a, b, c – параметры решетки; m, n, p – целые числа.

Если за единицу измерения длин вдоль осей решетки принять не метр, а параметры решетки a, b, c (осевые единицы длины), то координатами узла будут просто числа m, n, p . Эти числа называются индексами узла и записываются следующим образом: $[[mnp]]$. Для отрицательного индекса знак минус ставится над индексом: $[[m\bar{n}p]]$.

Индексы направления

Для описания направления в кристалле выбирается прямая, проходящая через начало координат. Ее положение однозначно определяется индексами mnp первого узла, через который она проходит. Поэтому индексы узла mnp являются одновременно и индексами направления. Индексы направления обозначают $[mnp]$. По самому определению индексы направления представляют собой три наименьших целых числа, характеризующих положение ближайшего узла, лежащего на данном направлении.

В качестве примера напишем индексы основных направлений в кубической решетке. Индексы осей решетки: ось OX – $[100]$, ось OY – $[010]$, ось OZ – $[001]$.

Индексы плоскости

Положение плоскости определяется заданием трех отрезков A, B, C , которые она отсекает на осях решетки. Уравнение такой плоскости имеет вид:

$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1,$$

где x, y, z – координаты точки, лежащей в этой плоскости. Если плоскость проходит через узлы решетки, то координаты любого узла, лежащего в этой плоскости, будут равны индексам этого узла:

$$x = m; \quad y = n; \quad z = p.$$

Поэтому уравнение плоскости переписывается следующим образом:

$$m\frac{1}{A} + n\frac{1}{B} + p\frac{1}{C} = 1.$$

Так как m, n, p – целые числа, то такое возможно лишь при условии, что $1/A, 1/B, 1/C$ – рациональные числа, отношение которых можно заменить отношением трех целых чисел h, k, l :

$$\frac{1}{A} : \frac{1}{B} : \frac{1}{C} = h : k : l.$$

Эти числа и являются индексами плоскости, которые заключаются в простые скобки (hkl) .

Основы зонной теории твердого тела

Первой удачной попыткой объяснения электрических и магнитных свойств твердых тел, в первую очередь металлов, явилась теория свободных электронов. Она исходит из представления, что металл содержит свободные электроны, способные перемещаться по всему объему. Положительный заряд, компенсирующий заряд электронов, распределен в металле с равномерной плотностью и создает поле с постоянным положительным потенциалом V_0 . Во многих задачах этот потенциал полагается равным нулю и свободные электроны наделяются лишь кинетической энергией подобно частицам идеального газа. У поверхности металла потенциал резко падает от V_0 до 0, а потенциальная энергия электрона увеличивается с $U_0 = -eV_0$ до 0 (рис. 2.3). Это позволяет рассматривать металл как потенциальную яму (потенциальный ящик), заполненную свободными электронами.

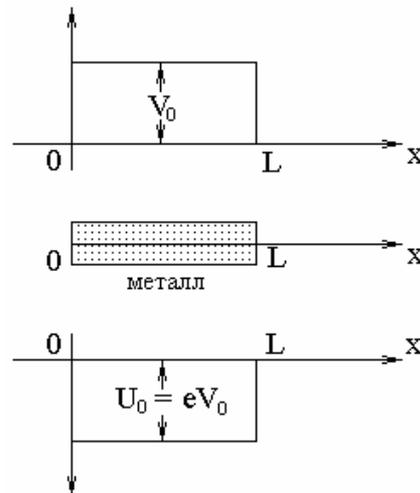


Рис. 2.3. Внутренний потенциал металла V_0 и потенциальная энергия электрона в металле U_0 .

Итак, если внутренний потенциал металла положить равным нулю, что не нарушает общности решения задачи, то уравнение Шредингера для свободного электрона будет совпадать с уравнением

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0, \quad (1)$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad (2)$$

где k – волновой вектор; E – энергия электрона.

Так как электрон не может свободно покидать металл, то волновая функция на его границах (в точках $x = 0$ и $x = L$) должна обращаться в нуль. Поэтому краевыми условиями задачи являются:

$$\psi(0) = 0; \quad \psi(L) = 0. \quad (3)$$

Этим условиям удовлетворяют следующие решения уравнения:

$$\psi_n(x) = A \sin k_n x, \quad (4)$$

$$k_n = n \frac{\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5)$$

и $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$. Подстановка (5) в (2) позволяет определить энергетический спектр свободных электронов в металле:

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}. \quad (6)$$

Из (6) видно, что этот спектр является дискретным.

В теории твердого тела вместо краевых условий (3) часто используются так называемые периодические краевые условия: твердое тело предполагается бесконечно большим, а его характеристики, рассматриваемые как функции координат, считаются периодическими с периодом, равным L ; при этом никаких условий, ограничивающих положение электрона внутри тела, не налагается.

Движение свободных электронов в бесконечно большом теле описывается бегущими волнами

$$\psi = A \cdot e^{ikx}, \quad (7)$$

являющимися решением уравнения Шредингера для свободных микрочастиц. Из требования периодичности волновой функции следует, что

$$\psi(x + L) = \psi(x). \quad (8)$$

Подставив сюда (7), получим

$$A \cdot e^{ik(x+L)} = A \cdot e^{ikx}.$$

Отсюда находим $e^{ikL} = 1$. Это уравнение удовлетворяется лишь при следующих значениях k :

$$k_n = n \frac{2\pi}{L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (9)$$

Подставляя (9) в (2) будем иметь:

$$E_n = n^2 \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2}. \quad (10)$$

Таким образом, периодические краевые условия приводят также к дискретному энергетическому спектру свободных электронов в металле. Распределение этих электронов по уровням описывается статистикой Ферми – Дирака, если электронный газ является вырожденным, и статистикой Максвелла – Больцмана, если газ является невырожденным.

Модель свободных электронов является весьма грубым приближением к реальной картине твердого тела. Она не учитывает структуры твердого тела, дискретного характера распределения положительных зарядов в нем, заменяя реальные силы взаимодействия электронов с узлами решетки, идеальным полем с постоянным потенциалом. Несмотря на это, теория свободных электронов позволила описать широкий круг явлений, связанный с эмиссией электронов, термоэлектрическими явлениями, магнитными свойствами металлов и др. Но теория свободных электронов оказалась бессильной при рассмотрении свойств твердых тел, зависящих от их внутренней структуры. Она не дает ответа на такой вопрос, почему одни тела являются проводниками, а другие – изоляторами.

Дальнейшим этапом в развитии электронной теории является зонная теория твердых тел. В зонной теории твердое тело рассматривается как тело кристаллическое, имеющее правильное внутреннее строение, и для описания поведения электронов в таком теле существует два приближенных метода [Д2].

Приближение, исходящее из связанных электронов (приближение сильной связи)

Суть этого метода состоит в том, что рассматривается большая совокупность изолированных атомов, каждый из которых обладает собственной системой дискретных энергетических уровней и прослеживается, что происходит с этими уровнями по мере сближения атомов и образования из них кристаллической решетки, свойственной данному веществу. Поэтому в основу метода кладутся волновые функции изолированных атомов (связанных электронов) и из них строятся волновые функции электронов твердого тела.

В частности получают, что при расстояниях r между атомами равных параметру решетки d валентные электроны приобретают способность практически беспрепятственно переходить от одного атома к другому и свободно странствовать по кристаллу. Этот переход осуществляется путем туннельного просачивания сквозь потенциальный барьер, разделяющий атомы. Наличие таких переходов уменьшает степень локализации электронов на определенных атомах и приводит к большей или меньшей неопределенности в значении их энергий, т.е. к размытию уровней и превращению их в полосы или зоны.

Т.о. туннельный эффект в кристалле доводит среднее время пребывания валентного электрона в определенном узле решетки до величины $\tau \sim 10^{-15}$ с. В соответствии с принципом неопределенностей неопределенность в значении энергии таких электронов равна:

$$\Delta E = \frac{h}{\Delta t} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{10^{-15}} = 0,66 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \sim 1 \text{ эВ}.$$

Это означает, что энергетический уровень валентных электронов, имеющий в изолированном атоме ширину $\approx 10^{-7}$ эВ превращается в кристалле в энергетическую зону шириной порядка единиц электрон-вольт.

Приближение, исходящее из свободных электронов (приближение слабой связи)

Этот метод исходит из прямо противоположного предположения, а именно: считается, что энергия взаимодействия электрона с решеткой мала по сравнению с его кинетической энергией (слабая связь). Это позволяет рассматривать электрон как практически свободный и пользоваться решением уравнения Шредингера для свободных электронов, исправив его учетом слабого возмущающего действия периодического поля решетки.

Общая задача об отыскании собственных волновых функций и собственных значений энергии электрона, движущегося в периодическом поле с произвольно заданным потенциалом, является весьма сложной. Но многие характерные черты поведения электрона в таком поле можно установить на простейшей линейной модели кристалла, показанной на рис. 2.4 и впервые рассмотренной Кронигом и Пени. В этой модели каждый атом кристалла представлен прямоугольной потенциальной ямой шириною a ; на протяжении всей ямы потенциальная энергия электрона $U = 0$. Атомы отделены друг от друга потенциальными барьерами высотой U и шириной b . Длина цепочки атомов равна L .

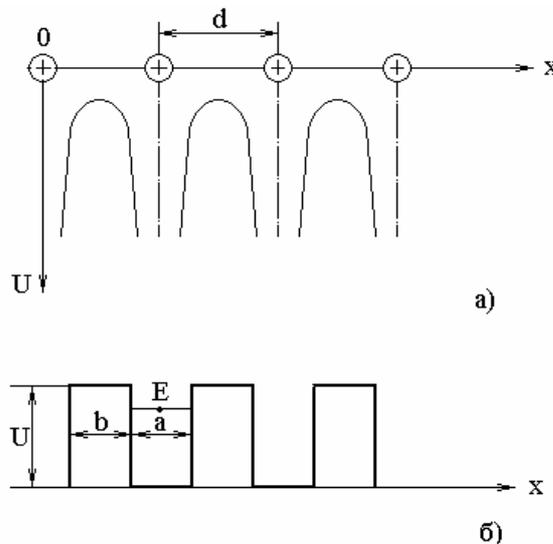


Рис. 2.4. Изменение потенциальной энергии электрона при перемещении вдоль линейной цепочки положительных ионов (а); простейшая линейная модель кристалла (б).

Движение электрона в таком поле описывается уравнением Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - U) \cdot \psi = 0.$$

Как показал Блох, решением этого уравнения является волновая функция следующего типа (*волна Блоха*):

$$\psi(x) = u(x) \cdot e^{ikx}. \quad (11)$$

Она представляет собой произведение уравнения плоской бегущей волны (e^{ikx}), описывающей движение свободного электрона в поле с постоянным потенциалом, на периодическую функцию $u(x)$, зависящую от волнового числа k и имеющую тот же период, что период потенциала $U(x)$ – период решетки d . Дифференцируя (11) дважды по x и подставляя ψ и $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ в уравнение Шредингера, получим:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - W_k - U) \cdot u = 0, \quad (12)$$

где

$$W_k = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot k^2. \quad (13)$$

В области $0 < x < a$, в которой $U = 0$, уравнение (12) имеет следующее решение:

$$u = A \cdot e^{i(\alpha-k)x} + B \cdot e^{-i(\alpha+k)x}, \quad (14)$$

где

$$\alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (15)$$

В области $a < x < (a + b)$, в которой $U \neq 0$ и $E < U$ (высота барьера выше кинетической энергии электрона), уравнение (12) имеет следующее решение:

$$u = C \cdot e^{i(\beta-ik)x} + D \cdot e^{-i(\beta+ik)x}, \quad (16)$$

где

$$\beta = \left[\frac{2m(U - E)}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (17)$$

Постоянные A, B, C, D , входящие в решения (14) и (16), находятся из условия непрерывности функции $u(x)$ и ее первой производной в местах скачка потенциала, т.е. в точках $x = 0$ и $x = a$. Использование этих условий позволяет определить не только коэффициенты A, B, C, D , но и установить связь между α и волновым числом k . Эта связь будет выражаться следующим уравнением:

$$\frac{p \sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos ka, \quad (18)$$

где

$$p = \frac{ma}{\hbar^2} Ub. \quad (19)$$

Величина p всегда положительна и определяет высоту барьера, разделяющего ямы; при $b \rightarrow 0$ расстояние a равно параметру решетки.

Так как параметр α непосредственно связан с энергией электрона E (15), то уравнение (18) выражает зависимость энергии электрона от волнового числа k . Поэтому, решая уравнение (18) относительно E , можно определить собственные значения энергии электронов как функцию волнового числа k . Так как $\cos(k\alpha)$, стоящий в правой части уравнения (18), может меняться в пределах от $+1$ до -1 , то αa может принимать только такие значения, при которых левая часть уравнения (18) не выходит за пределы области, простирающейся от $+1$ до -1 . Возможные при этом значения αa в соответствии с формулой (15) определяют разрешенные значения энергии электрона. Зоны разрешенных энергий отделены друг от друга полосами запрещенных энергий. Эти полосы соответствуют областям αa , в которых левая часть уравнения (18) больше $+1$ и меньше -1 .

Внутри первой полосы разрешенных энергий $\cos ka$ меняется от $+1$ до -1 . Этому соответствует изменение k в пределах от 0 до $\pm \pi$ или изменение k в пределах от $(-\pi/a)$ до $(+\pi/a)$:

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}. \quad (20)$$

(20) выражает область простираения первой энергетической зоны, или, как говорят, первой зоны Бриллюэна. Внутри второй энергетической зоны $\cos ka$ изменяется от -1 до $+1$; ka – от $-\pi$ до -2π и от π до 2π ; k – от $(-\pi/a)$ до $(-2\pi/a)$ и от (π/a) до $(2\pi/a)$. Эта область простираения второй энергетической зоны или зоны Бриллюэна и т.д.

В точках

$$k = n \frac{\pi}{a} \quad (n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots) \quad (21)$$

энергия $E(k)$ претерпевает разрыв, приводящий к образованию запрещенных зон ($\Delta E'_0, \Delta E''_0, \Delta E'''_0$ и т.д.) (рис. 2.5, б). Представляет интерес рассмотреть физическую природу этих разрывов. С этой целью выразим волновой вектор k через длину волны λ : $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ и подставим это выражение в соот-

ношение (21). Тогда условие, при котором происходит нарушение непрерывности функции $E(k)$ и возникновение запрещенных зон, переписывается следующим образом:

$$n\lambda = 2a. \quad (22)$$

Легко видеть, что оно представляет собой условие брэгговского отражения волн λ от атомных плоскостей решетки.

Известная формула Вульфа – Брэгга

$$2a \sin \theta = n\lambda \quad (23)$$

определяет те направления θ , под которыми возникают дифракционные максимумы лучей, рассеянных кристаллом. Лучи, падающие на атомные плоскости под углом, удовлетворяющие условию (23), полностью отражаются и через решетку пройти не могут. При $\theta = 90^\circ$, т.е. при падении лучей перпендикулярно к атомным плоскостям, $\sin \theta = 1$ и формула (23) переходит в (22).

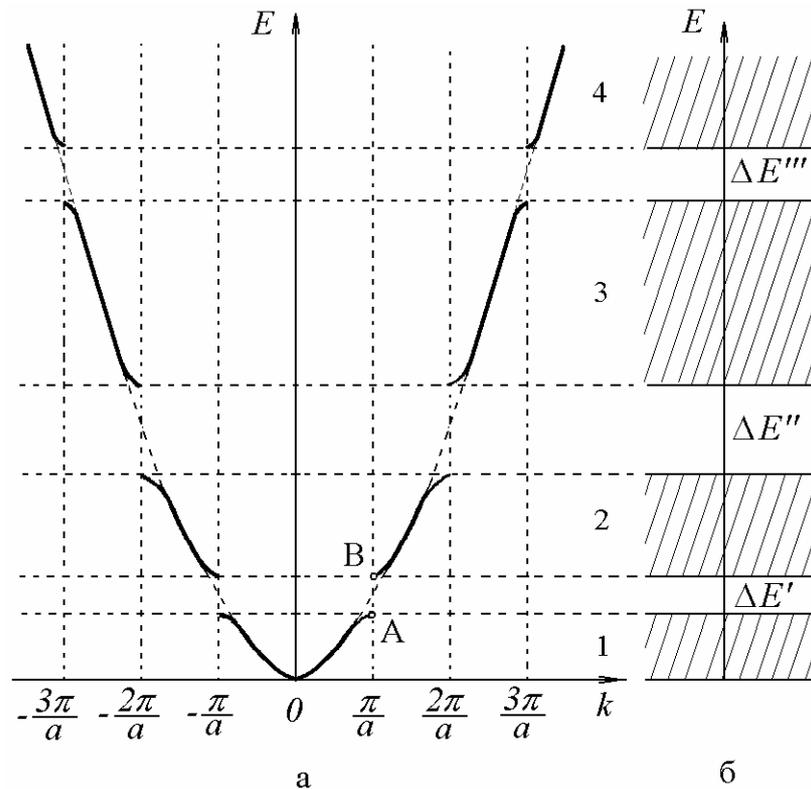


Рис. 2.5. Зависимость энергии электрона, движущегося вдоль линейной цепочки, от волнового числа (а); энергетический спектр электрона (б).

Электроны обладают волновыми свойствами и их движение через кристалл можно представлять себе как процесс распространения электронных волн. Если для этих волн условие Вульфа – Брегга не выполняется, то движение электрона описывается бегущей волной e^{ikx} и связь энергии E с волновым числом является однозначной. При выполнении условия Вульфа –

Брегга, т.е. в точках $k_n = n \frac{\pi}{a}$ наступает отражение электронных волн от атомных плоскостей, интерференция отраженных волн с бегущими и образование стоячих волн. Поэтому в точках $k_n = n \frac{\pi}{a}$ электроны следует представлять уже не бегущей волной, а стоячей, состоящей из двух одинаковых бегущих волн e^{ikx} и e^{-ikx} , распространяющихся в противоположные стороны. Эти волны дают два решения уравнения Шредингера. Для точки $k = \frac{\pi}{a}$ эти решения имеют следующий вид:

$$\psi_1 = e^{\frac{i\pi}{a}x} - e^{-\frac{i\pi}{a}x}, \quad \psi_2 = e^{\frac{i\pi}{a}x} + e^{-\frac{i\pi}{a}x}. \quad (24)$$

Решениям ψ_1 и ψ_2 соответствуют разные энергии: решению ψ_2 отвечает энергия E_{\min} , которая соответствует верхней границе первой зоны (точке А, рис. 2.5, а); решению ψ_1 – энергия E_{\max} , отвечающая нижней границе второй зоны (точке В, рис. 2.5, а). При k , несколько меньшим π/a , энергия электрона меньше E_{\min} , при k , несколько большем π/a , собственные значения энергии электрона лежат выше E_{\max} . В промежутке между E_{\min} и E_{\max} не лежит ни одного собственного значения энергии электрона, т.е. область между E_{\min} и E_{\max} представляет собой запрещенную зону энергии.

Сравнение обоих приближенных методов

Материал, изложенный выше, показывает, что, несмотря на резко различный подход к решению задачи о поведении электронов в кристалле, оба приближенных метода приводят к качественно согласующимся результатам. Именно, энергетический спектр электронов в кристалле должен состоять из областей разрешенных энергий (разрешенные зоны) и полос запрещенных энергий (запрещенные зоны).

С точки зрения приближения сильной связи, разрешенные зоны соответствуют дискретным уровням энергии электронов в свободном атоме. С точки зрения приближения слабой связи, запрещенные полосы соответствуют брэгговскому отражению электронных волн от атомных плоскостей решетки кристалла.

С ростом энергии ширина разрешенных зон увеличивается, а ширина запрещенных зон уменьшается.

Каждая зона содержит ограниченное число энергетических уровней, вследствие чего может вместить ограниченное число электронов. Зона, образованная из

$(2l + 1)$ -кратно вырожденного атомного уровня, содержит $(2l + 1)N$ подуровней и может вместить $2N(2l + 1)$ электронов, где N – число атомов в кристалле.

Так как эти результаты получены для двух предельных случаев – связанных и свободных электронов, то они должны оставаться справедливыми для любых промежуточных случаев, т.е. для любой связи и любой кинетической энергии.

Движение электронов в периодическом поле кристалла под действием внешнего поля. Эффективная масса электрона

На свободный электрон, обладающий массой m и зарядом $-e$, в электрическом поле с напряженностью ε действует сила $F = -e\varepsilon$, направленная против поля. В соответствии со вторым законом Ньютона электрон получит ускорение $a = -\frac{e\varepsilon}{m}$. Как и сила F , ускорение a направлено против поля.

Энергия электрона, движущегося со скоростью v , равна

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

где v – скорость электрона равная групповой скорости распространения электронных волн, p – импульс электрона, связанный с волновым числом k соотношением

$$p = \hbar k.$$

Графическая зависимость E от k выражается параболой (рис. 2.6).

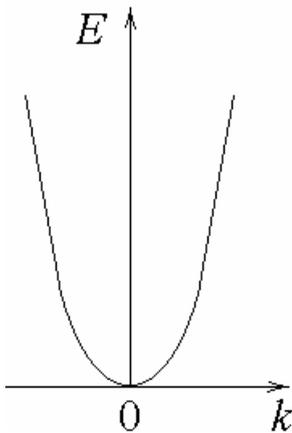


Рис. 2.6. Зависимость энергии свободной частицы E от волнового числа k

Движение электрона, находящегося в периодическом поле кристалла, под действием внешнего поля ε существенно отличается от движения свободного электрона, для которого сила $F = -e\varepsilon$ является единственной, определяющей характер движения. На электрон в периодическом поле кристалла действуют силы, приводящие к более сложному результирующему движению. Для описания этого движения определяют элементарную работу dE , которую совершает внешняя сила F , действующая на электрон в течение времени dt . За время dt электрон проходит путь $dx = vdt$, где $v = \frac{d\omega}{dk}$.

На пути dx сила F произведет элементарную работу

$$dE = Fdx = Fvdt.$$

Для электронных волн $\omega = \frac{E}{\hbar}$, где E – собственное значение энергии электрона. Поэтому групповая скорость

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}.$$

Подставляя значение v в выражение для dE , получим:

$$dE = \frac{F}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dk} \cdot dt.$$

Отсюда следует:

$$\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar}. \quad (25)$$

Дифференцируя v по времени, будем иметь:

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d^2E}{dk^2} \cdot \frac{dk}{dt}.$$

Подставляя $\frac{dk}{dt}$ из (25) получим,

$$\frac{dv}{dt} = \frac{F}{\hbar^2} \cdot \frac{d^2E}{dk^2}. \quad (26)$$

Формула (26) устанавливает связь между ускорением, с которым движется электрон, находящийся в периодическом поле кристалла, и внешней силой F , действующей на электрон со стороны внешнего поля ϵ . Из этой формулы следует, что под действием внешней силы F электрон в периодическом поле кристалла двигается в среднем так, как двигался бы под действием этой силы свободный электрон, если бы он обладал массой

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}}. \quad (27)$$

m^* называется эффективной массой электрона. Приписывая электрону, находящемуся в периодическом поле кристалла, массу m^* , мы можем считать этот электрон свободным и описывать его движение во внешнем поле так, как мы описываем движение обычного электрона.

Для свободного электрона энергия $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ является квадратичной

функцией от волнового числа и графически выражается параболой (рис. 2.6). Вторая производная от E по k выражает кривизну параболы у начала координат (при $k = 0$). Она равна $\frac{d^2E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m}$. Подставляя значение $\frac{d^2E}{dk^2}$ в формулу (27), получим $m^* = m$.

Следовательно, для свободного электрона эффективная масса равна просто массе электрона.

Эффективная масса учитывает воздействие решетки на движение электрона.

Рассмотрим зависимость эффективной массы от расположения электрона в разрешенной энергетической зоне, показанной на рис. 2.7.

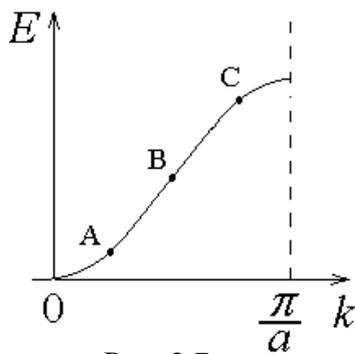


Рис. 2.7

Электрон, находящийся вблизи дна зоны (точка A на рис. 2.7) имеет $\frac{d^2E}{dk^2} > 0$ и соответственно $m^* > 0$. Такой электрон во внешнем поле ускоряется в направлении, совпадающем с направлением внешней силы. Величина m^* для него задается конкретным законом дисперсии $E(k)$, определяемым видом потенциальной энергии U , входящей в уравнение Шредингера.

В точке перегиба (точка B на рис. 2.7) $\frac{d^2E}{dk^2} = 0$ и m^* обращается в бесконечность. Следовательно, внешнее поле не может изменить скорость электрона, находящегося в этом состоянии.

Вблизи потолка разрешенной зоны (точка C на рис. 2.7) $\frac{d^2E}{dk^2} < 0$, поэтому $m^* < 0$ и электрон, находящийся в этом состоянии, ускоряется в направлении, противоположном направлению внешней силы.

Необходимо подчеркнуть, что введение понятия эффективной массы электрона является лишь удобным способом описания движения электрона, находящегося в периодическом поле кристалла, под действием внешней силы. Сама же эффективная масса не является массой в обычном смысле этого слова. Она не определяет ни запаса энергии, ни инертных, ни гравитационных свойств электрона. Например, для палладия $\frac{m^*}{m} = 43$, а для гер-

мания $\frac{m^*}{m} = 0,12$. Более того, m^* может быть как положительной, так и отрицательной. Эффективная масса является лишь коэффициентом пропор-

циональности в соотношении (2), связывающим внешнюю силу с ускорением движения электрона. Она имеет смысл лишь до тех пор, пока энергия электрона E может быть выражена как квадратичная функция волнового числа. В этом случае m^* сохраняется постоянной. Это имеет смысл при k , отвечающем дну и вершине энергетической зоны. В первом случае $m^* > 0$, во втором $m^* < 0$. Вблизи же точек перегиба m^* перестает быть аналогом массы. Так как практически всегда имеют дело с электронами, располагающимися или у дна зоны или у её вершины, то к таким электронам введение понятия эффективной массы вполне оправдано.

Деление тел на изоляторы, проводники и полупроводники

Согласно зонной теории твердых тел, электроны внешних энергетических зон имеют практически одинаковую свободу движения во всех телах независимо от того, являются эти тела металлами или изоляторами. Оно осуществляется путем туннельного просачивания электронов сквозь потенциальные барьеры, разделяющие соседние атомы кристаллической решетки. В отсутствие внешнего поля это движение не может, однако, привести к возникновению электрического тока, так как распределение электронов по скоростям является симметричным. Это означает, что если в решетке выбрать электрон, движущийся с данной скоростью в данном направлении, то обязательно найдется другой электрон, имеющий скорость такую же по величине, но прямо противоположную по направлению.

Рассмотрим поведение во внешнем поле электронов целиком заполненных и частично заполненных энергетических зон.

1. Электроны целиком заполненных зон. На каждый электрон внешнее электрическое поле с напряженностью ε действует сила $F = -e\varepsilon$. Эта сила стремится нарушить симметрию в распределении электронов по скоростям, пытаясь затормозить электроны, двигающиеся в направлении поля, и ускорить электроны, двигающиеся против поля. Так как подобное ускорение и замедление неизбежно связано с изменением энергии электрона, то оно означает переход электронов в новые квантовые состояния с большей или меньшей энергией. Такие переходы могут осуществляться только в том случае, если в энергетической зоне, к которой принадлежит данные электроны, имеются незанятые квантовые состояния, т.е. если зона укомплектована электронами не полностью. Если же электроны заполняют все энергетические уровни зоны и она отделена от следующей незанятой зоны достаточно широкой полосой запрещенных энергий, то внешнее поле будет не в состоянии оказы-

вать какое либо влияние на движение электронов, т.к. не способно поднять электроны в вышележащую свободную зону, ибо ширина запрещенной полосы $\Delta E_0 \approx 1$ эВ, а при напряженности внешнего поля ≈ 100 В/см электрон получает на длине своего свободного пробега ($\lambda = 10^{-6} - 10^{-8}$) энергию около $10^{-4} - 10^{-6}$ эВ. В пределах же данной зоны, не содержащей ни одного свободного уровня внешнее поле, может вызвать лишь перестановку электронов местами, что не нарушает симметрии распределения их по скоростям. Поэтому в твердых телах с наполовину заполненными зонами внешнее электрическое поле не может вызвать появления направленного движения электронов, способных двигаться по всему телу («свободных» электронов). Такие тела являются изоляторами или непроводниками.

На рис. 2.8, а показаны кривые распределения электронов по энергетическим зонам $n(E)$ и схема расположения самих зон для типичного диэлектрика. Занятые зоны заштрихованы, свободные – оставлены чистыми.

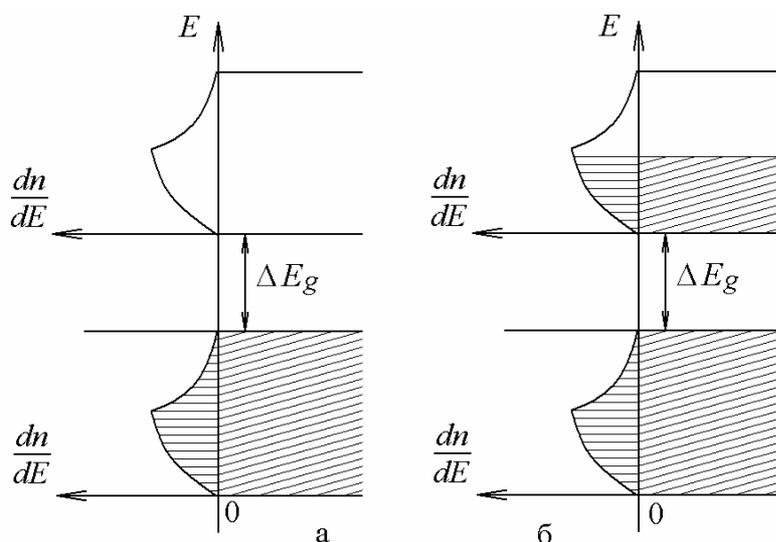


Рис. 2.8. Кривые распределения электронов по зонам и схема расположения зон в диэлектриках (а) и в полупроводниках (б).

2. Электроны частично заполненных зон. В частично заполненных зонах имеется большое число свободных состояний, Энергия которых очень мало отличается от энергии занятых уровней этой зоны (на величину 10^{-22} эВ). Поэтому уже слабое электрическое поле способно сообщить электронам достаточный добавочный импульс, чтобы перевести их на близлежащие свободные уровни. В теле появляется преимущественное движение электронов против поля, обуславливающее возникновение электрического тока. Такие тела являются проводниками.

На рис. 2.8, б показаны кривые распределения электронов по энергетическим зонам и схема расположения зон для проводника, у которого

внешняя энергетическая зона заполнена лишь частично. Так как именно эта зона обуславливает электрическую проводимость тела, то она называется зоной проводимости.

Электрическая проводимость возникает так же и в том случае, когда имеет место перекрытие зон. В качестве примера рассмотрим магний, имеющий структуру $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$. Количество электронов у него таково, что все энергетические зоны, включая и зону $3s$, должны быть целиком заполнены. Поэтому магний должен был быть изолятором. Но вследствие того, что у магния зоны $3s$ и $3p$ перекрываются и образуют общую (гибридную) зону, способную вместить значительно больше электронов, чем их содержится в зоне $3s$, он обладает электронной проводимостью, как типичный металл.

2. Полупроводники. Если верхняя энергетическая зона твердого тела является полностью укомплектованной и над ней располагается совершенно свободная зона, отделенная от заполненной сравнительно узкой полосой запрещенных энергий, то при абсолютном нуле тело является диэлектриком. При температуре отличной от абсолютного нуля, некоторое число электронов, располагающееся у верхней границы заполненной зоны, может приобрести энергию достаточную для преодоления запрещенной полосы ΔE_g , и перейти в свободную зону. Последняя превратится тогда в частично занятую зону, а в ранее целиком заполненной зоне появятся дырки. Чем меньше ширина запрещенной полосы ΔE_g и чем выше температура тела, тем больше электронов перейдет в свободную зону и тем больше дырок образуется в заполненной зоне. Для тел, у которых ΔE_g не превышает 1 эВ, уже при комнатной температуре в свободной зоне оказывается достаточное количество электронов, а в валентной зоне – дырок, чтобы обусловить заметную проводимость. С повышением температуры число таких дырок резко увеличивается, вследствие чего увеличивается и электрическая проводимость тела. Такие тела называются полупроводниками.

Статистика носителей заряда в полупроводниках. Собственная и примесная проводимость полупроводников

Свое название полупроводники получили благодаря тому, что по величине удельной проводимости они занимают промежуточное положение между хорошо проводящими электрический ток металлами

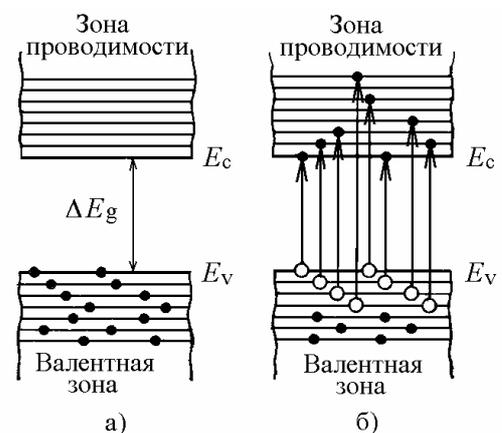


Рис. 2.9

(проводниками) и практически не проводящими ток диэлектриками. Однако деление веществ по проводимости на указанные классы возможно лишь на основе зонной теории твердого тела.

Ранее уже отмечалось, что в полупроводниковом кристалле при 0 К электроны заполняют все энергетические уровни валентной зоны, уровни же зоны проводимости свободны. Эти зоны в полупроводнике разделены запрещенной зоной (рис. 2.9, *a*), ширина которой ΔE_g может быть от сотых долей до 2 – 3 эВ. Благодаря этому, при 0 К и в отсутствие других внешних воздействий (освещения, облучения радиоактивным и рентгеновским излучением и т. д.) полупроводник не проводит электрического тока. При повышении температуры полупроводника начинаются переходы электронов из валентной зоны в зону проводимости, находясь в которой, электроны участвуют в проводимости (рис. 2.9, *б*). Эти переходы электронов происходят при любых температурах, отличных от абсолютного нуля.

Средняя энергия тепловых колебаний кристаллической решетки равна kT , но благодаря флуктуациям электрон может получить от решетки и большую энергию. Вероятность того, что при температуре T электрон получит

энергию ΔE_g , пропорциональна $e^{-\frac{\Delta E_g}{kT}}$. При ширине запрещенной зоны порядка десятых долей электронвольта и более вероятность перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости при температурах, близких к комнатной, очень мала, но с ростом температуры она очень быстро растет.

Как указывалось ранее, при переходе электрона из валентной зоны в зону проводимости в валентной зоне образуется свободная дырка, – т. е. такой переход создает одновременно два свободных носителя тока. Наряду с переходом электронов из валентной зоны в зону проводимости, происходит и обратный переход, при котором электрон возвращается на вакантный уровень в валентной зоне, в результате исчезают и свободный электрон, и свободная дырка. Этот процесс называют рекомбинацией свободных носителей заряда в кристалле. Процессы генерации (создания) и рекомбинации (исчезновения) свободных носителей заряда идут одновременно. В результате действия двух конкурирующих между собой процессов генерации и рекомбинации свободных носителей, в полупроводнике устанавливается при данной температуре некоторая равновесная концентрация свободных носителей заряда.

Удельная проводимость полупроводника в этом случае складывается из электронной и дырочной проводимости и вычисляется по формуле

$$\sigma_i = \sigma_n + \sigma_p = en\mu_n + ep\mu_p = en_i(\mu_n + \mu_p),$$

где n – концентрация свободных электронов, равная в собственном полупроводнике концентрации свободных дырок $n = p = n_i$, μ_n и μ_p – соответственно подвижности электронов и дырок. В дальнейшем будет показано, как определяется концентрация носителей заряда в собственном полупроводнике n_i .

Свободные носители электрического заряда, которые образуются благодаря переходу электронов из валентной зоны в зону проводимости полупроводника, называются собственными носителями, а проводимость, обусловленная ими, – собственной проводимостью. И хотя не существует полупроводников, в которых имеются только собственные носители и которые обладают собственной проводимостью, во многих случаях необходимо учитывать наличие собственной проводимости и ту роль, которую играют в полупроводнике собственные носители заряда.

Дефекты в кристалле создают локальные энергетические уровни в запрещенной зоне собственного полупроводника. Рассмотрим на примере кристалла такого типичного полупроводника, как кремний, образование локальных энергетических уровней в случае примесных атомов замещения.

Валентные электроны прочно связаны с кристаллической решеткой (энергия их связи 1,1 эВ) и поэтому в нормальном состоянии они не могут участвовать в проводимости кристалла. Если в кристалле атомы кремния будут частично замещены примесными атомами элемента V группы периодической системы (P, As, Sb), имеющими пять валентных электронов, то четыре из них заполнят валентные связи с четырьмя соседними атомами, а пятый окажется «лишним».

Зона проводимости кристалла является для «лишних» электронов примесных атомов областью их ионизации. Ионизационный потенциал для этих электронов уменьшается благодаря диэлектрическим свойствам, среды, следовательно, уменьшается энергия, необходимая для перевода электронов локальных уровней примеси в зону проводимости. Примесные энергетические уровни атомов V группы в кристалле кремния располагаются всего на несколько сотых долей электрон-вольта ниже дна зоны проводимости полупроводника (рис. 2.10).

Энергия ΔE_d , необходимая для перехода электрона с уровня примеси в зону проводимости, меньше, чем энергия перехода электрона из валентной зоны ΔE_g . Благодаря этому при невысоких температурах концентрация электронов, поставляемых примесными атомами в зону проводимости, значительно превосходит концентрацию соб-

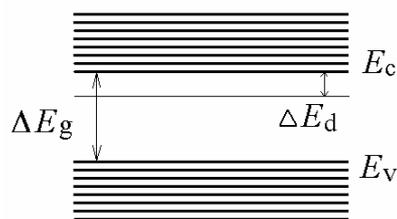


Рис. 2.10

ственных носителей и проводимость полупроводника определяется примесными носителями (примесная проводимость). Атомы примеси, рассмотренные нами, получили название донорных или просто доноров.

Если четырехвалентный атом Si замещен атомом элемента III группы периодической системы (например, бора), то трех его валентных электронов не хватает для заполнения валентных связей с соседними атомами, образуется вакантная связь, которая может быть заполнена за счет перехода в вакансию электрона из любой соседней заполненной связи. Переход электрона из заполненной связи в вакантную, с энергетической точки зрения, представляет собой переход электрона из заполненной валентной зоны кристалла на локальный уровень примеси (рис. 2.11).

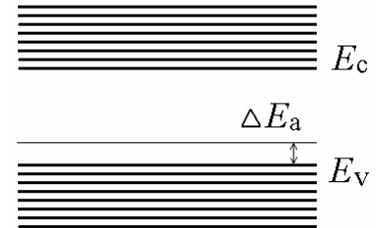


Рис. 2.11

Этот переход освобождает один из уровней в верхней части валентной зоны, тем самым, создавая в кристалле дырку. Переход электронов из валентной зоны на уровни примеси требует меньшей энергии, чем переход их в зону проводимости кристалла ($\Delta E_a < \Delta E_g$).

Очевидно, что при наличии в кристалле доноров, кристалл обладает электронной проводимостью, так как основными носителями заряда в нем будут электроны. При наличии в кристалле акцепторов проводимость в кристалле – дырочная.

В полупроводнике с донорной примесью удельная проводимость вычисляется по формуле

$$\sigma_n = en\mu_n,$$

а в полупроводнике с акцепторной примесью

$$\sigma_p = ep\mu_p.$$

В невырожденном полупроводнике функцию распределения Ферми – Дирака можно заменить классическим распределением Больцмана, т.к. $E \gg E_F$.

$$f_{\phi-Д}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \approx e^{-\frac{E-E_F}{kT}}$$

$$f_{\phi-Д}(E) = f_B(E)$$

Полное число электронов в зоне проводимости получим, интегрируя по всем значениям энергии, т.е. в пределах от E_C до ∞ :

$$N = \int_{E_C}^{\infty} f_B(E)g(E)dE = \int_{E_C}^{\infty} e^{-\frac{E-E_F}{kT}} \cdot \frac{4\pi V}{h^3} \cdot (2m_n)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_C} dE.$$

Вычисление этого интеграла приводит к следующему результату для концентрации электронов в зоне проводимости

$$n = 2 \left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{E_F - E_C}{kT}},$$

или

$$n = N_C \cdot e^{\frac{E_F - E_C}{kT}}, \quad (28)$$

где величина $N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$ – называется эффективной плотностью состояний в зоне проводимости. Для дырок получается аналогичное выражение

$$p = N_V \cdot e^{\frac{-E_F + E_V}{kT}}. \quad (29)$$

В собственном полупроводнике концентрация электронов в зоне проводимости равна концентрации дырок в валентной зоне

$$n = p.$$

Приравнивая (28) и (29)

$$N_C \cdot e^{\frac{E_F - E_C}{kT}} = N_V \cdot e^{\frac{-E_F + E_V}{kT}},$$

найдем выражение для уровня Ферми в собственном полупроводнике

$$E_F = \frac{kT}{2} \ln \frac{N_V}{N_C} + \frac{E_C + E_V}{2}.$$

При абсолютном нуле температуры уровень Ферми располагается посередине запрещенной зоны. С повышением температуры он смещается к зоне, в которой эффективная масса носителей заряда меньше. Однако во многих случаях в собственных полупроводниках это смещение незначительно и им можно пренебречь.

Произведение концентраций носителей заряда равно

$$np = N_C N_V \cdot e^{\frac{E_C - E_V}{kT}}. \quad (30)$$

Формула (30) показывает, что при фиксированной температуре произведение концентрации электронов и дырок для собственного полупроводника является величиной постоянной. Оказывается, что подобное соотношение справедливо и для примесного полупроводника. В этом состоит *закон действующих масс* в применении к свободным носителям в полупроводниках:

$$np = n_i^2,$$

где n_i – собственная концентрация, равная

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \cdot e^{-\frac{E_C - E_V}{2kT}}; \quad n_i = \sqrt{N_C N_V} \cdot e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}}.$$

Величина $E_g = E_C - E_V$ равна ширине запрещенной зоны полупроводника.

Итак, проводимость собственного полупроводника с учетом n_i равна

$$\sigma_i = \sigma_n + \sigma_p = en\mu_n + ep\mu_p = en_i(\mu_n + \mu_p);$$

$$\sigma_i = e(\mu_n + \mu_p) \sqrt{N_C N_V} \cdot e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}}.$$

Из выражения видно, что при $T \rightarrow \infty$ проводимость стремится к некоторой постоянной величине σ_0 , поэтому выражение удобно записать в виде

$$\sigma_i = \sigma_0 \cdot e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}}.$$

Выражение является приближенным, поскольку не учитывает зависимость подвижности и эффективных плотностей состояний электронов и дырок от температуры.

В большинстве случаев число дырок и электронов в полупроводниках различно. Это различие достигается путем введения примесей. Проводимость, созданная введением примеси, называется примесной. Таким образом, проводимость полупроводника определяется суммой собственной и примесной проводимости

$$\sigma = \sigma_i + \sigma_{пр}, \quad \sigma_{пр} = \sigma_n + \sigma_p = en\mu_n + ep\mu_p.$$

Примесь, которая отдает электроны, носит название донорной. Благодаря этому число дырок p будет намного меньше общего числа электронов n . Проводимость электронного полупроводника может быть записана в виде

$$\sigma_{пр} = \sigma_n = en\mu_n.$$

Величина концентрации электронов в невырожденном полупроводнике p -типа определяется по формуле

$$n = \sqrt{\frac{N_C N_D}{2}} \cdot e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}},$$

где N_D – концентрация примеси, $\Delta E_d = E_C - E_D$.

Таким образом, примесная проводимость полупроводника n -типа определяется выражением

$$\sigma_{пр} = e\mu_n \sqrt{\frac{N_C N_D}{2}} \cdot e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}}.$$

Приближенно можно считать

$$\sigma_{пр} = \sigma_{0пр} \cdot e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}}.$$

Полная проводимость полупроводника n -типа

$$\sigma = \sigma_i + \sigma_{\text{пр}} = \sigma_0 \cdot e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}} + \sigma_{0\text{пр}} \cdot e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}}.$$

Анализировать температурную зависимость проводимости полупроводника удобно с помощью графика этой зависимости, полученной в полупологарифмической системе координат. График зависимости показан на рис. 2.12. По оси абсцисс отложена обратная температура $\frac{1}{T}$, а по оси ординат – $\ln \sigma$. График зависимости имеет вид ломаной линии. Как видно, угловым коэффициентом участков зависимости при низких температурах определяет величину $\frac{\Delta E_d}{2kT}$, а при высоких $\frac{\Delta E_g}{2kT}$. Почти горизонтальному участку соответствуют температуры, при которых атомы примеси уже ионизованы, а собственная проводимость еще мала.

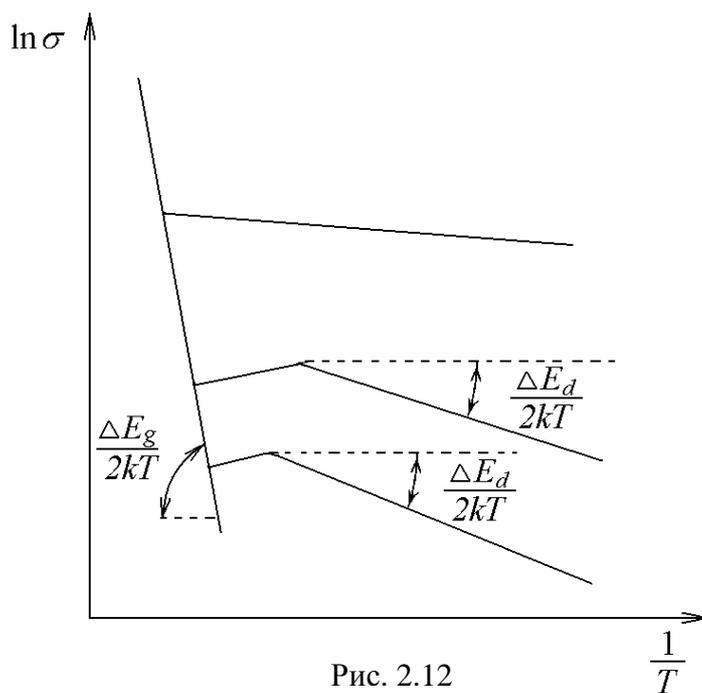


Рис. 2.12

Подвижность носителей заряда

Одним из основных вопросов теории электропроводности твердых тел является зависимость подвижности носителей заряда от температуры.

В области высоких температур основное значение имеет рассеяние электронов на тепловых колебаниях решетки (на фононах). Для невырожденного электронного газа для подвижности существует следующая зависимость от температуры

$$\mu \sim T^{-\frac{3}{2}},$$

а для вырожденного газа

$$\mu \sim T^{-1}.$$

В области низких температур основное значение имеет рассеяние на ионизированных примесных атомах. Для невырожденного газа

$$\mu \sim T^{\frac{3}{2}},$$

а для вырожденного газа

$$\mu \sim \text{const}.$$

На рис. 2.13 показана зависимость $\mu(T^{-1})$ для невырожденного и вырожденного газа. Положение максимума кривой для невырожденного газа зависит от концентрации дефектов: с увеличением концентрации дефектов (концентрации примеси N_{np}) максимум смещается в сторону больших температур.

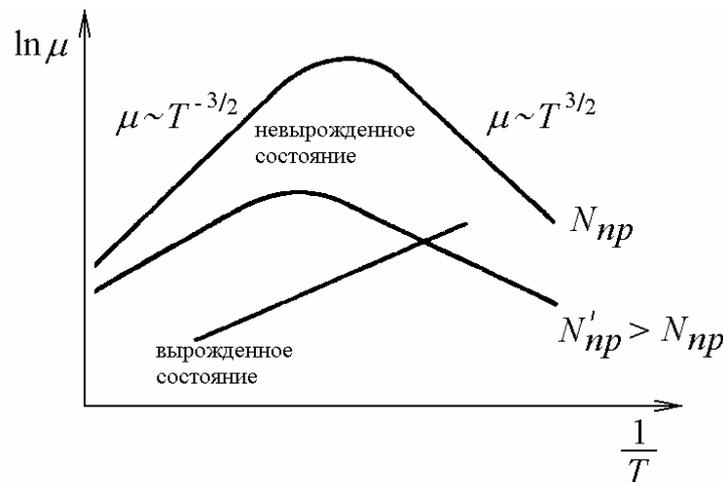


Рис. 2.13

Эффект Холла в полупроводниках

Изучение свойств полупроводника начинается по существу с определения знака и концентрации носителей заряда. Наиболее распространенным методом измерения концентрации и знака носителей заряда в проводнике является метод измерения напряжения Холла.

Напряжение Холла

$$U_x = R_x \frac{IB}{b},$$

где коэффициент R_x называется коэффициентом Холла и для металлического проводника равен

$$R_x = \frac{1}{en}$$

Для невырожденного полупроводника с носителями заряда одного знака

$$R_x = \frac{3\pi}{8} \frac{1}{en}$$

Для полупроводника со смешанной проводимостью (электронной и дырочной)

$$R_x = \frac{3\pi}{8e} \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{(p\mu_p + n\mu_n)^2}$$

Определив из опытных данных коэффициент Холла, можно вычислить концентрацию носителей заряда в проводнике. Известно, что знак холловской разности потенциалов зависит от знака носителей заряда в проводнике. Если для образца известно значение R_x и удельной проводимости, то в случае носителей одного знака легко найти подвижность

$$\mu = \frac{8}{3\pi} R_x \sigma$$

Дефекты кристаллической решетки

Идеально правильные кристаллические решетки не встречаются в природе. В реальных кристаллах обязательно присутствуют различного рода дефекты. Под дефектами (от латинского слова *defectus* – недостаток, изъян) понимают любые отклонения от правильного, упорядоченного расположения атомов в кристаллической решетке. Эти отклонения могут возникать как самопроизвольно (например, в процессе кристаллизации), так и создаваться искусственно, например, при механических воздействиях, при облучении кристалла электронами, нейтронами, рентгеновскими или ультрафиолетовыми лучами (такие дефекты называются радиационными). Посторонние атомы, проникающие в кристаллическую решетку, также нарушают ее упорядоченность.

Необходимость изучения дефектов кристаллов связана с тем, что именно дефекты определяют многие важные свойства твердых тел (электрические, механические, оптические).

Все дефекты обычно подразделяются на точечные, линейные (дислокации), поверхностные (границы раздела между зернами микрокристаллов, поверхность кристалла и др.) и объемные (пустоты, трещины, включения другой фазы и проч.). Дефекты могут образовываться как на поверхности, так и в объеме кристаллов [Д2].

Точечными дефектами называются несовершенства в кристаллической решетке, которые локализуются в областях кристалла размером порядка межатомного расстояния (10^{-8} см). Такими дефектами являются вакансии (узлы кристаллической решетки, в которых отсутствуют атомы), атомы, сместившиеся из узлов в междоузлия, примесные атомы замещения и внедрения (то есть находящиеся соответственно в узлах и междоузлиях кристаллической решетки), дефекты, представляющие собой объединения вакансий с электронами или дырками, соединения нескольких точечных дефектов.

Точечные дефекты будут возникать, в частности, из-за того, что некоторые атомы вблизи поверхности кристалла в какой-то момент времени могут обладать достаточной энергией, чтобы вырваться из своего равновесного положения. При этом в узле кристаллической решетки, который оставил атом, образуется вакансия, а сам атом либо переходит в другое равновесное положение, образуя или достраивая новый атомный слой, либо полностью покидает кристалл. Вакансия при этом может входить в объем (рис. 2.14, а). Принято называть вакансию без расположенного вблизи междоузельного атома *дефектом по Шоттки*. Концентрация дефектов по Шоттки может быть определена при данной температуре с помощью распределения Больцмана

$$n_{\text{Ш}} = n_0 e^{-\frac{\Delta E_{\text{Ш}}}{kT}},$$

где n_0 – концентрация атомов кристаллической решетки, $\Delta E_{\text{Ш}}$ – энергия образования дефекта (вакансии).

В случае одновременного образования междоузельного атома и вакансии дефект называется дефектом по Френкелю (рис. 2.14, б). Концентрация дефектов по Френкелю равна

$$n_{\text{Ф}} = \sqrt{n_0 n_{\text{М}}} e^{-\frac{\Delta E_{\text{Ф}}}{2kT}},$$

где $n_{\text{М}}$ – концентрация междоузельных атомов, $\Delta E_{\text{Ф}}$ – энергия образования дефекта (энергия перехода атома из узла решетки в междоузлие).

Можно представить себе и образование других собственных точечных дефектов, например, внедрение атома с поверхности в междоузлие и диффузия по междоузлиям в объем кристалла. Однако концентрация таких дефектов обычно мала. Число же вакансий колеблется в пределах 10^{15} –

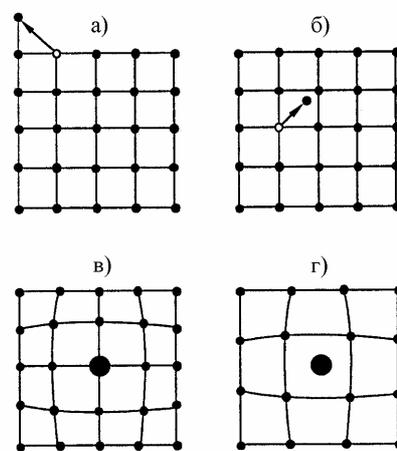


Рис. 2.14

10^{19} см^{-3} . Наиболее вероятные места возникновения собственных точечных дефектов – это дислокации, границы раздела между микрокристаллическими включениями, нарушения в поверхностной структуре, примесные атомы. В этих местах кристалла возникает деформация решетки и ослабление связей между атомами основного вещества (рис. 2.14, в, з). Энергия дефектообразования вблизи этих мест уменьшается. Такие места называют источниками дефектов.

Междоузельные атомы и вакансии могут перемещаться по кристаллу. Перемещение вакансии является результатом перехода соседнего с ней атома на ее место. Таким образом, вакансия скачком перемещается на одно межатомное расстояние. Конечно, наличие примесей, дислокаций и других нарушений кристаллической решетки влияет на скорость перемещения вакансий. Если на пути своего движения междоузельный атом встречает вакансию, то он может занять это вакантное место и оба дефекта исчезают. В этом случае говорят, что произошла рекомбинация дефектов. Дефекты могут исчезать и при достижении какого-либо протяженного нарушения в строении кристалла (например, дислокации). Такие места называются местами стока вакансий и междоузельных атомов.

Как было сказано ранее, примесные атомы также являются дефектами кристаллической решетки. Кристаллы, примесные атомы в которых располагаются в узлах решетки (рис. 2.14, в), называются твердыми растворами замещения. Если же примесь занимает междоузельные состояния (рис. 2.14, з), то кристалл называется твердым раствором внедрения.

Примесь не только искажает структуру кристаллической решетки, но и может сильно изменить число свободных носителей заряда в кристалле (см. гл. 4). Полностью исключить нежелательную примесь не удастся. Сверхчистый кремний, например, имеет концентрацию неконтролируемых примесей $10^{11} - 10^{12} \text{ см}^{-3}$.

Точечные дефекты могут сильно менять электрические свойства кристаллов, а также их механические и оптические свойства, стимулировать протекание химических реакций, диффузии и т.д. Технически «чистый» германий по проводимости близок к металлам, и только его очистка, снизившая содержание примесей до минимума, привела к тому, что его проводимость уменьшилась и он стал полупроводником. Очищенное железо перестает быть химически активным и не подвергается коррозии, многие металлы при очистке из хрупких превращаются в пластичные.

Искажение структуры кристалла, охватывающее достаточно большое число атомов в окрестности некоторой линии называется дислокацией. Краевая дислокация возникает при сдвиге (скольжении) атомных плоско-

стей друг относительно друга. Появляется как бы «лишняя» атомная плоскость (рис. 2.15, *a*), заканчивающаяся дислокационной линией (на рис. 2.15, *a* она проходит перпендикулярно плоскости чертежа вдоль края полуплоскости дислокации). Винтовая дислокация возникает при повороте части кристалла в направлении некоторой оси (оси дислокации) на одно межатомное расстояние (рис. 2.15, *б*).

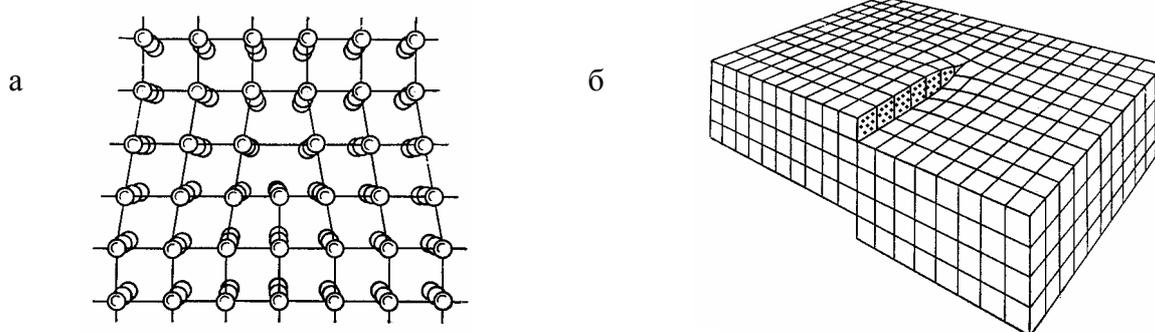


Рис. 2.15

Дислокации могут генерироваться под действием механических напряжений. Однако они возникают в кристалле и в процессе его роста, при этом источником дислокации могут служить скопления вакансий.

Дислокации способны перемещаться по кристаллу, достигая поверхности и исчезать. Возникновение и перемещение дислокаций, как и в случае точечных дефектов, сильно влияет на механические, оптические и электрические свойства кристаллов. Например, дислокации могут быть как источниками дополнительных носителей заряда, так и местами их рекомбинации или рассеяния.

Хорошо известно, что при небольших деформациях твердого тела возникают упругие силы, пропорциональные величине деформации (закон Гука). Однако при увеличении напряжения наблюдается отклонение от закона пропорциональности и появление остаточных (пластических) деформаций, связанных с наличием, возникновением и движением дислокаций в кристалле. Степень пластичности зависит от вида связи атомов друг с другом. Металлическая связь обеспечивает большую пластичность кристалла (медь, алюминий, серебро и др.), ковалентная – наоборот, большую хрупкость (алмаз, кварц, германий, кремний и др.).

Для увеличения прочности твердых тел необходимо создать условия, затрудняющие возникновение и перемещение дислокаций. Первое достигается изготовлением бездефектных нитевидных кристаллов. Второе, наоборот, введением в кристалл примесей, новых дислокаций, усложняющих перемещение уже имеющихся. Эффективной мерой является замена слабых связей атомов на прочные, например – молекулярных связей на ковалентные.

Понятие о контактных явлениях. Контакт металл-металл

Работой выхода A электрона из металла называется работа, которую нужно совершить при удалении электрона из металла в вакуум. Работа A совершается против сил притяжения со стороны избыточного положительного заряда, возникающего в металле в результате удаления электрона. Кроме того, необходимо преодолеть силы отталкивания со стороны ранее вылетевших электронов, если они не удалены и образуют вблизи поверхности проводника электронное «облако». Работа выхода имеет величину порядка нескольких эВ и зависит от рода металла и состояния его поверхности. В квантовой теории твердого тела работа выхода отсчитывается от верхнего занятого электронами уровня Ферми μ (рис. 2.16) [Д2].

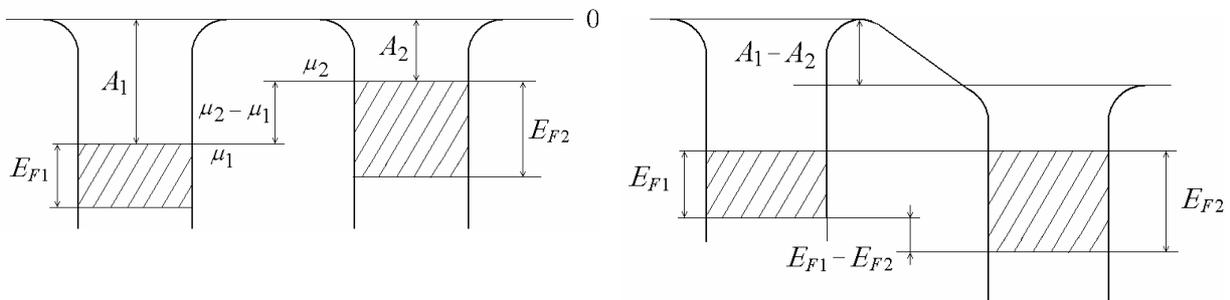


Рис. 2.16

В результате вылета из металла наиболее быстро движущихся электронов образуется недостаток отрицательного заряда в металлическом проводнике и его избыток в окружающем пространстве. Проявляется это в очень тонком слое по обе стороны от поверхности проводника (толщиной в несколько межатомных расстояний в металле). Считается, что поверхность металла представляет собой двойной электрический слой (контактный слой), подобный весьма тонкому конденсатору.

Разность потенциалов, характеризующая электрическое поле двойного слоя, называется поверхностным скачком потенциала или контактной разностью потенциалов между металлом и вакуумом

$$\Delta\varphi = \frac{A}{e},$$

где A – работа выхода, e – абсолютная величина заряда электрона.

Электрическое поле вне двойного слоя отсутствует, и потенциал вне металла за двойным слоем равен нулю. Внутри металла потенциал положителен и равен $\Delta\varphi$. Потенциальная энергия электронов проводимости отрицательна и равна $-e\Delta\varphi = -A$. Весь объем металла является для электронов проводимости потенциальной ямой, глубина которой равна работе выхода A .

При контакте двух разнородных металлов 1 и 2 с работами выхода A_1 и A_2 (см. рис. 2.15) происходит преимущественный переход электронов из металла с меньшей работой выхода в металл с большей работой выхода. Металлы заряжаются разноименно, и в состоянии термодинамического равновесия между двумя контактирующими разнородными металлами имеется разность потенциалов U_i , называемая внутренней контактной разностью потенциалов.

Разность потенциалов U_k между двумя точками, находящимися вблизи поверхности первого и второго контактирующих металлов и вне их, называется внешней контактной разностью потенциалов.

При контакте двух металлов, изображенных на рис. 2.16, электроны будут переходить преимущественно в направлении от металла 2 к металлу 1, и эти металлы зарядятся соответственно положительно и отрицательно. Одновременно происходит смещение энергетических уровней электронов. В состоянии термодинамического равновесия уровни Ферми в обоих металлах совпадают.

Внешняя контактная разность потенциалов зависит от работ выхода (рис. 2.16)

$$U_k = \frac{A_1 - A_2}{e}.$$

Внутренняя контактная разность потенциалов зависит от уровней Ферми в металлах:

$$U_i = \frac{E_{F1} - E_{F2}}{e}.$$

Изменение потенциала происходит на протяжении двойного электрического слоя, имеющего толщину d , которая приближенно оценивается по формуле

$$d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 U_k}{en}},$$

где n – концентрация зарядов в двойном слое, ε_0 – электрическая постоянная.

Толщина двойного слоя в контактирующих металлах имеет порядок междоузельных расстояний в металлах, и удельное сопротивление этого слоя не отличается от удельного сопротивления остального объема проводника. Сквозь контактный слой двух металлов электрический ток проходит одинаково хорошо в обоих направлениях, и отсутствует выпрямляющее действие контакта.

Контакт металл-полупроводник

Контакт металла с полупроводником n -типа ($A_M > A$)

Если $A_M > A$, то при контакте электроны из полупроводника будут переходить в металл, в результате чего контактный слой полупроводника

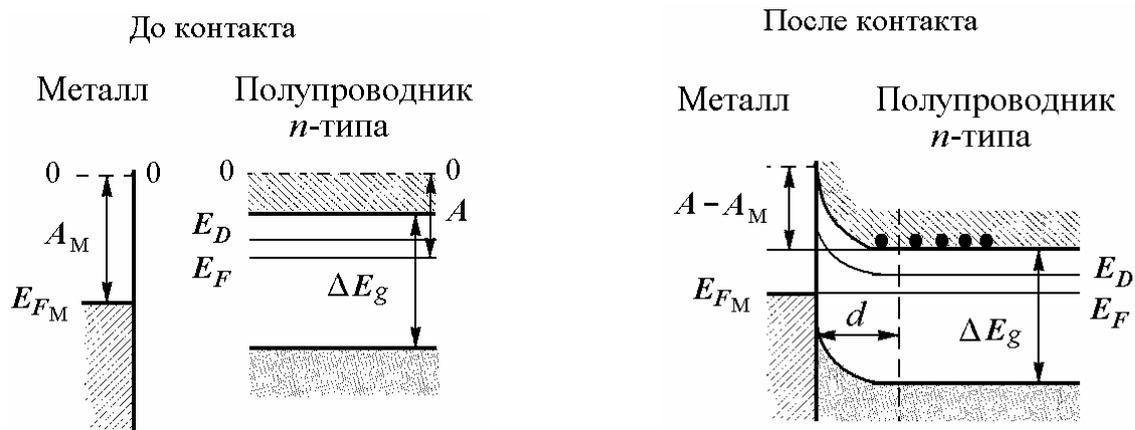


Рис. 2.17

обеднится электронами и зарядится положительно, а металл – отрицательно. Этот процесс будет происходить до достижения равновесного состояния, характеризуемого, как и при контакте двух металлов, выравниванием уровней Ферми для металла и полупроводника (рис. 2.17) [7]. На контакте образуется двойной электрический слой d , поле которого (контактная разность потенциалов) препятствует дальнейшему переходу электронов. Вследствие малой концентрации электронов проводимости в полупроводнике (порядка 10^{15} см^{-3} вместо 10^{22} см^{-3} в металлах) толщина контактного слоя в полупроводнике достигает примерно 10^{-6} см , т. е. примерно в 10 000 раз больше, чем в металле. Контактный слой полупроводника обеднен основными носителями тока – электронами в зоне проводимости, и его сопротивление значительно больше, чем в остальном объеме полупроводника. Такой контактный слой называется *запирающим*. При $d = 10^{-6} \text{ см}$ и $\Delta\phi = 1 \text{ В}$ напряженность электрического поля контактного слоя $E = 10^8 \text{ В/м}$. Такое контактное поле не может сильно повлиять на структуру спектра (например, на ширину запрещенной зоны, на энергию активации примесей и т.д.), и его действие сводится лишь к параллельному искривлению всех энергетических уровней полупроводника в области контакта. В случае контакта уровни Ферми выравниваются, а работы выхода – величины постоянные, при $A_M > A$ энергия электронов в контактном слое полупроводника больше, чем в остальном объеме. Поэтому в контактном слое дно зоны проводимости поднимается вверх, удаляясь от уровня Ферми. Соответственно происходит и искривление верхнего края валентной зоны, а также донорного уровня.

Контакт металла с полупроводником n -типа ($A_M < A$)

Если $A_M < A$, то при контакте металла с полупроводником n -типа электроны из металла переходят в полупроводник и образуют в контакт-

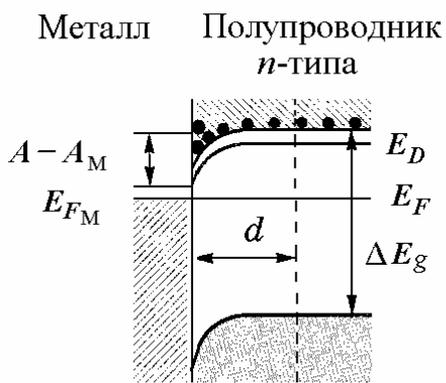


Рис. 2.18

ном слое полупроводника отрицательный объемный заряд. Следовательно, контактный слой полупроводника обладает *повышенной проводимостью*, т. е. не является запирающим. Рассуждая аналогично, можно показать, что искривление энергетических уровней по сравнению с контактом металл – полупроводник ***n*-типа** происходит в обратную сторону (рис. 2.18) [7].

Контакт металла с полупроводником *p*-типа

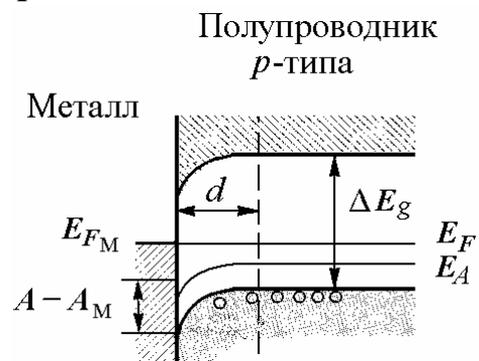
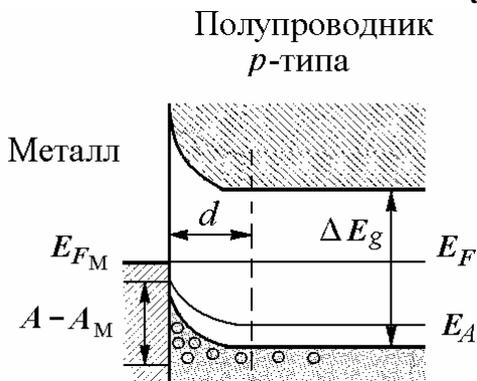


Рис. 2.19

Если $A_M > A$, то в контактном слое полупроводника *p*-типа (рис. 2.19, а) наблюдается избыток основных носителей тока – дырок в валентной зоне, и контактный слой полупроводника *обладает повышенной проводимостью*.

Если $A_M < A$, то в контактном слое полупроводника *p*-типа (рис. 2.19, б) наблюдается избыток отрицательных ионов акцепторных примесей и недостаток основных носителей тока – дырок в валентной зоне, и контактный слой полупроводника является запирающим.

При приложении к контакту внешнего электрического поля он пропускает ток практически только в одном направлении: либо из металла в полупроводник, либо из полупроводника в металл. Это важнейшее свойство запирающего слоя объясняется зависимостью его сопротивления от направления внешнего поля.

Если направления внешнего и контактного полей противоположны, то основные носители тока втягиваются в контактный слой из объема полупроводника; толщина контактного слоя, обедненного основными носителями тока, и его сопротивление уменьшаются. В этом направлении, называемом *пропускным*, электрический ток может проходить через контакт металл – полупроводник. Если внешнее поле совпадает по знаку с контактным, то основные носители тока будут перемещаться от границы с металлом; толщина обед-

ненного слоя возрастает, возрастает и его сопротивление. Очевидно, что в этом случае ток через контакт отсутствует, выпрямитель заперт – это *запорное* направление. Для запирающего слоя на границе металла с полупроводником *n*-типа ($A_M > A$) пропускным является направление тока из металла в полупроводник, а для запирающего слоя на границе металла с полупроводником *p*-типа ($A_M < A$) – из полупроводника в металл [7].

Контакт электронного и дырочного полупроводников (*p-n*-переход) и его вольтамперная характеристика

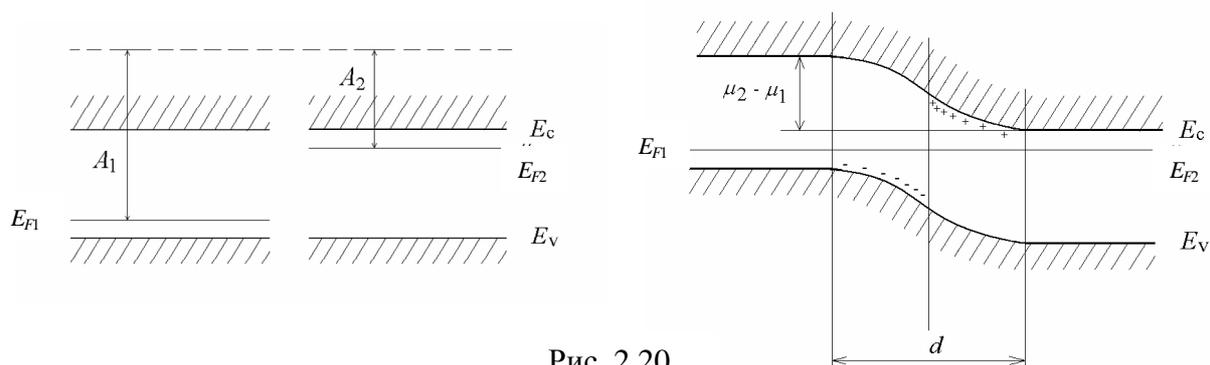


Рис. 2.20

Электронно-дырочный переход, или как его называют *p-n*-переход, образуется на границе между полупроводниками с дырочной (*p*-типа) и электронной (*n*-типа) проводимостью. Он является основным элементом во многих полупроводниковых приборах. *p-n*-переход не может быть образован в случае прижимного контакта двух кристаллов, отличающихся знаком свободных носителей заряда. Он представляет собой некоторую область внутри кристалла на границе между двумя его частями с разным типом проводимости.

Если между двумя кристаллами с проводимостями *p*- и *n*-типа (рис. 2.20) нет контакта, и электроны не могут переходить из одного в другой, то уровни Ферми в них расположены на разной высоте: в полупроводнике *p*-типа – ближе к валентной зоне, а в полупроводнике *n*-типа – ближе к зоне проводимости. Оба кристалла электрически нейтральны в любом участке своего объема, так как заряды ионизированных атомов полностью нейтрализованы зарядами противоположного знака свободных носителей заряда в них. В кристалле *p*-типа основными носителями заряда являются дырки, которые в основном образуются благодаря наличию в кристалле акцепторной примеси. Неосновными носителями в таком кристалле являются электроны, которые образуются за счет собственных атомов кристалла. В кристалле *n*-типа основными носителями заряда являются электроны, которые образуются благодаря наличию донорной примеси. Неосновными носителями здесь являются дырки, которые образуются за счет собственных атомов кристалла.

Если между обоими кристаллами создан электрический контакт, и свободные носители заряда получают возможность переходить из одного кристалла в другой, то кристаллы образуют единую систему и уровни Ферми в них устанавливаются на одинаковой высоте. Это приводит к тому, что энергетические зоны в обоих кристаллах, смещаются относительно друг друга и в области контакта образуется потенциальный барьер (рис. 2.20), высота которого равна

$$W = eU_k,$$

где U_k – контактная разность потенциалов.

Возникновение контактного поля и образование потенциального барьера происходит в результате следующих процессов. При создании контакта между кристаллами через него устремляются из одного кристалла в другой диффузионные потоки свободных электронов и дырок. В кристалле p -типа концентрация дырок значительно больше, чем в кристалле n -типа и потому из первого во второй будут переходить преимущественно дырки. По той же причине из кристалла n -типа в кристалл p -типа будут преимущественно переходить электроны. Электроны, перешедшие из кристалла n -типа в кристалл p -типа, рекомбинируют здесь с дырками. Рекомбинация происходит в тонком слое этого кристалла, прилегающем к границе кристаллов. В результате рекомбинации отрицательный заряд ионов акцепторной примеси в этом слое не компенсируется теперь положительным зарядом дырок и весь слой заряжается отрицательно. В кристалле n -типа в результате рекомбинации электронов с перешедшими сюда из кристалла p -типа дырками пограничный слой заряжается положительно потому, что положительный заряд ионов в донорной примеси не компенсируется отрицательным зарядом свободных электронов. В области контакта образуется двойной электрический слой объемных зарядов, а следовательно, контактное электрическое поле, напряженность которого направлена от кристалла n -типа к кристаллу p -типа. Приконтактная область обладает большим электрическим сопротивлением, так как концентрация свободных носителей заряда в ней очень мала. Эта приконтактная область и является p - n -переходом. Электрическое поле, возникшее в области p - n -перехода, препятствует дальнейшему переходу основных носителей заряда через контакт.

В условиях равновесия через контакт переходят только те свободные носители, энергия которых больше высоты потенциального барьера. Концентрация свободных электронов и дырок, способных преодолеть потенциальный барьер, будет пропорциональна $e^{-\frac{W}{kT}}$

Поток основных носителей заряда через p - n -переход представляет собой диффузионный ток $I_n + I_p$. Одновременно с движением основных носителей заряда, через p - n -переход движутся неосновные носители, причем их поток противоположен потоку основных носителей (электроны переходят из кристалла p -типа в кристалл n -типа, а дырки – в противоположном направлении). Неосновные носители заряда не встречают потенциального барьера в области p - n -перехода, наоборот, если благодаря тепловому движению неосновной носитель заряда попадет в область p - n -перехода, то электрическое поле в нем способствует его движению из одного кристалла в другой. Поток неосновных носителей через p - n -переход создает дрейфовый ток $I_{ns} + I_{ps}$.

В равновесном состоянии через p - n -переход проходят токи основных $I_n + I_p$ и неосновных $I_{ns} + I_{ps}$ носителей заряда электронов и дырок. Полный ток, очевидно, равен нулю

$$(I_n + I_p) - (I_{ns} + I_{ps}) = 0 \text{ или } I_n + I_p = I_{ns} + I_{ps}.$$

При приложении внешней разности потенциалов U в прямом направлении (плюс к p -, а минус к n -области) ток основных носителей заряда, в связи с понижением потенциального барьера, увеличится в $e^{\frac{qU}{kT}}$ раз, и полный ток будет равен

$$I = (I_n + I_p) - (I_{ns} + I_{ps}) = (I_{ns} + I_{ps}) e^{\frac{qU}{kT}} - (I_{ns} + I_{ps}),$$

$$I = (I_{ns} + I_{ps}) \left(e^{\frac{qU}{kT}} - 1 \right).$$

Ток $I_s = I_{ns} + I_{ps}$ называют *током насыщения*. Потому уравнение вольт-амперной характеристики p - n -перехода выглядит следующим образом.

$$I = I_s \left(e^{\pm \frac{qU}{kT}} - 1 \right).$$

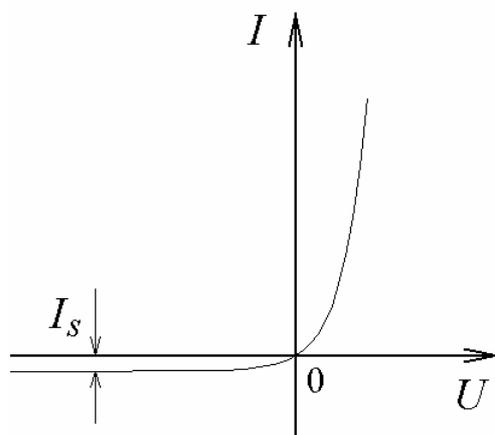


Рис. 2.21

Знак «+» относится к прямому направлению U , «-» относится к обратному.

На рис. 2.21 показан график вольт-амперной характеристики p - n -перехода. При комнатной температуре отношение прямого и обратного токов оказывается равным величине $I_{np} / I_{обр} \approx 10^9$, что свидетельствует о том, что p - n -переход обладает практически односторонней проводимостью, т.е. проявляет высокие выпрямляющие свойства.

При непрерывном увеличении обратного напряжения достигается такое напряжение $U_{\text{проб}}$, при котором сопротивление запирающего слоя резко падает, вследствие чего обратный ток резко возрастает. Это явление получило название пробоя p - n -перехода. В зависимости от природы физических процессов, обуславливающих резкое возрастание обратного тока, различают тепловой, туннельный и лавинный пробой.

Основными методами изготовления p - n -переходов являются: метод сплавления, эпитаксиальный метод, метод ионного легирования, методы диффузии [Д2].

Полупроводниковый триод (транзистор)

Устройство, использующее свойства p - n -переходов для усиления и генерирования электрических колебаний.

Точечные триоды значительно усиливают напряжение, но их выходные мощности малы из-за опасности перегрева (например, верхний предел рабочей температуры точечного германиевого триода лежит в пределах 50 – 800°С).

Плоскостные триоды являются более мощными. Они могут быть типа p - n - p и типа n - p - n в зависимости от чередования областей с различной проводимостью.

В случае плоскостного триода p - n - p (триода на основе n -полупроводника) рабочие «электроды» триода, которыми являются база (средняя часть транзистора), эмиттер и коллектор (прилегающие к базе с обеих сторон области с иным типом проводимости), включаются в схему с помощью невыпрямляющих контактов – металлических проводников. Между эмиттером и базой прикладывается постоянное смещающее напряжение в прямом направлении, а между базой и коллектором – постоянное смещающее напряжение в обратном направлении. Усиливаемое переменное напряжение подается на входное сопротивление $R_{\text{ВХ}}$, а усиленное – снимается с выходного сопротивления $R_{\text{ВЫХ}}$ (рис. 2.22) [7].

Протекание тока в цепи эмиттера обусловлено в основном движением дырок (они являются основными носителями тока) и сопровождается их «впрыскиванием» – инжекцией – в область базы.

Проникшие в базу дырки диффундируют по направлению к коллектору, причем при не-

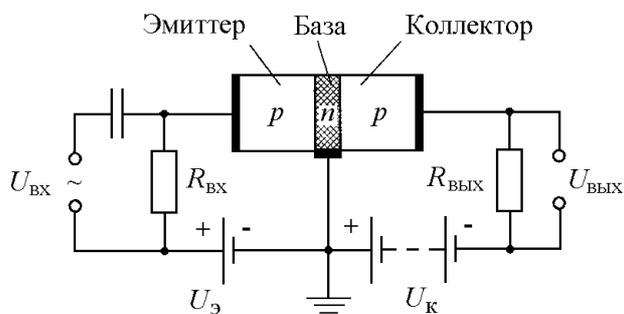


Рис. 2.22

большой толщине базы значительная часть инжектированных дырок достигает коллектора. Здесь дырки захватываются полем, действующим внутри перехода (притягиваются к отрицательно заряженному коллектору), вследствие чего изменяется ток коллектора. Следовательно, всякое изменение тока в цепи эмиттера вызывает изменение тока в цепи коллектора.

Прикладывая между эмиттером и базой переменное напряжение, получаем в цепи коллектора переменный ток, а на выходном сопротивлении – переменное напряжение. Величина усиления зависит от свойств *p-n*-переходов, нагрузочных сопротивлений и напряжения батареи U_K . Обычно $R_{\text{ВЫХ}} \gg R_{\text{ВХ}}$, поэтому $U_{\text{ВЫХ}}$ значительно превышает входное напряжение $U_{\text{ВХ}}$ (усиление может достигать 10 000). Так как мощность переменного тока, выделяемая в $R_{\text{ВЫХ}}$ может быть больше, чем расходуемая в цепи эмиттера, то транзистор дает и усиление мощности. Эта усиленная мощность появляется за счет источника тока, включенного в цепь коллектора. Таким образом, транзистор, подобно электронной лампе, дает усиление и напряжения, и мощности. Если в лампе анодный ток управляется напряжением на сетке, то в транзисторе ток коллектора, соответствующий анодному току лампы, управляется напряжением на базе.

2.2. Методические указания к лекционным занятиям

№	Вопросы лекции	Форма изучения	Литература	Вопросы для самоконтроля студентов
1	Силы связи и внутренняя структура твердых тел Кристаллическая решетка Индексы узлов Индексы направления	л	[1] – §41.2 [2] – §30.1 – 30.5	<ul style="list-style-type: none"> • Что лежит в основе ионной связи? • Что лежит в основе валентной или атомной связи? • Как осуществляется металлическая связь? • Какие тела называются кристаллическими? • Что такое решетка Браве? • Что такое элементарная ячейка? • Что называют параметрами решетки? • Чем задают положение любого узла кристаллической решетки? • Что такое индексы направления? • Что такое индексы плоскости?
2	Основы зонной теории твердых тел. Приближение, исходящее из связанных электронов (приближении сильной связи) Приближение, исходящее из свободных электронов (приближение слабой связи)	л	[1] – §43.1 [2] – §31.1 [3] – 2.1 – 2.7	<ul style="list-style-type: none"> • Что лежит в основе теории свободных электронов? • В чем недостаток теории свободных электронов? • В чем сущность приближения сильной связи в зонной теории твердого тела? • В чем сущность приближения слабой связи в зонной теории твердого тела? • Чему соответствуют разрешенные зоны с точки зрения приближения сильной связи? • Чему соответствуют запрещенные полосы с точки зрения приближения слабой связи?
3	Эффективная масса электрона Движение свободного электрона под действием внешнего поля Деление тел на изоляторы, проводники и полупроводники	л	[2] – §31.2, 32.1 – 32.3 [3] – 2.8 – 2.9	<ul style="list-style-type: none"> • Как импульс электрона связан с волновым числом k? • Как зависит энергия свободного электрона от волнового числа k? • Что называется эффективной массой электрона? • Для какого электрона эффективная масса равна его массе? • Что учитывает эффективная масса? • Когда эффективная масса больше нуля? • Когда эффективная масса меньше нуля? • Для каких случаев эффективная масса перестает быть аналогом массы?

4	<p>Статистика носителей заряда в полупроводниках. Собственная и примесная проводимость полупроводников</p> <p>Подвижность носителей заряда</p> <p>Эффект Холла в полупроводниках. Дефекты кристаллической решетки</p>	л	<p>[1] – §43.4 – 43.5</p> <p>[3] – §3.1 – 3.9</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Какой полупроводник обладает n-типом проводимости? • Какой полупроводник обладает p-типом проводимости? • Как определяется концентрация электронов проводимости в собственном полупроводнике от температуры. • Как определяется концентрация дырок в собственном полупроводнике от температуры. • Запишите зависимость проводимости собственного проводника от температуры. • Где располагается уровень Ферми для собственного полупроводника при $T = 0\text{ K}$? • Как изменится уровень Ферми при повышении температуры для собственного полупроводника. • Что такое уравнение электронейтральности? Приведите пример. • Что такое закон действующих масс? • Каков характер зависимости подвижности от температуры для вырожденного полупроводника? • Каков характер зависимости подвижности от температуры для невырожденного полупроводника? • Нарисуйте график зависимости логарифма концентрации от обратной температуры для невырожденного полупроводника. • Из какого эксперимента можно определить ширину запрещенной зоны полупроводника? • Из какого эксперимента можно определить энергию активации примеси в полупроводнике? • Какие точечные и линейные дефекты в кристаллах вы знаете? • Как можно оценить концентрацию точечных дефектов в кристалле?
5	<p>Понятие о контактных явлениях.</p> <p>Контакт металл-металл</p> <p>Контакт металла с полупроводником n-типа</p> <p>Контакт металла с полупроводником p-типа</p> <p>Контакт электронного и дырочного полупроводников (p-n-переход) и его вольтамперная характеристика</p> <p>Полупроводниковый триод (транзистор)</p>	л	<p>[1] – §44.1 – 44.4</p> <p>[3] – §8.1 – 8.9</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Что такое внешняя контактная разность потенциалов? • Что такое внутренняя контактная разность потенциалов? • В каком случае контакт металла и полупроводника является запирающим? Нарисуйте энергетическую диаграмму в области контакта. • В каком случае контакт металла и полупроводника является не запирающим? Нарисуйте энергетическую диаграмму в области контакта. • Запишите выражение для вольтамперной характеристики p-n-перехода. • Что такое ток насыщения? • Какие виды пробоя p-n-перехода вы знаете? • Опишите принцип усиления напряжения при включении транзистора с общей базой?

2.3. Методические указания к практическим занятиям

№ п/п	Тема занятия	Тип задач	Рекомендации по решению
1	Кристаллическая решетка. Индексы узлов. Индексы направления	Задачи на определение параметра элементарной ячейки, плотности упаковки, определения направления в кристаллах и плоскостей	При определении постоянной решетки необходимо установить тип решетки и воспользоваться соотношениями из молекулярной физики (плотность, масса одного атома)
2	Статистика носителей заряда в полупроводниках. Собственная и примесная проводимость полупроводников. Подвижность носителей заряда. Эффект Холла в полупроводниках. Дефекты кристаллической решетки	Определение концентрации, проводимости собственного и примесного полупроводника. Нахождение подвижности электронов и дырок. Определение концентрации точечных дефектов в кристалле	Подвижность носителей заряда можно связать с концентрацией, проводимостью, постоянной Холла При определении концентрации точечных дефектов в кристалле воспользоваться соответствующими статистическими формулами
3	Понятие о контактных явлениях. Контакт металл-металл, металл-полупроводник. <i>p-n</i> -переход и его вольтамперная характеристика	Определение внутренней и внешней контактной разности потенциалов, ширины контакта. Определение электрических параметров <i>p-n</i> -перехода	Воспользоваться соответствующими формулами

2.4. Примеры решения задач

Задача 1. *Определить индексы плоскости, отсекающие на осях решетки отрезки $A = 1$; $B = 2$ и $C = 3$.*

Решение: Отношение $\frac{1}{A} : \frac{1}{B} : \frac{1}{C} = \frac{1}{1} : \frac{1}{2} : \frac{1}{3}$ представляют рациональные числа.

Общим знаменателем правой части является 6. Подставленными множителями служат 6, 3, 2. Поэтому $m = 6$; $n = 3$; $p = 2$.

Следовательно $(m \ n \ p) = (6 \ 3 \ 2)$

Ответ: $(m \ n \ p) = (6 \ 3 \ 2)$.

Задача 2. *Определить отрезки, которые отсекает на осях решетки плоскость $(1 \ 2 \ 3)$.*

Решение: Из соотношений $m = D/A$; $n = D/B$; $p = D/C$, где D – общий знаменатель. Найдем $A = D/m$; $B = D/n$; $p = D/p$.

Следовательно, $A = 6/1 = 6$; $B = 6/2 = 3$; $C = 6/3 = 2$.

Ответ: $A = 6/1 = 6$; $B = 6/2 = 3$; $C = 6/3 = 2$.

Задача 3. *Медь имеет гранецентрированную кубическую решетку. Расстояние между ближайшими атомами меди 0,255 нм. Определить плотность меди и параметр решетки. $M = 63,54 \cdot 10^{-3}$ кг/моль.*

Решение. Плотность кристалла меди найдем по формуле $\rho = M/V_0$ (1), где M – молярная масса меди; V_0 – молярный объем. Он равен объему одной элементарной ячейки a^3 , умноженной на число Z_0 элементарных ячеек, содержащихся в одном моле кристалла:

$$V_0 = a^3 Z_0 \quad (2).$$

Число элементарных ячеек, содержащихся в одном моле кристалла, состоящего из одинаковых атомов, найдем, разделив постоянную Авогадро на число n атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку: $Z_0 = N_A/n$ (3). Для кубической гранецентрированной решетки $n = 4$. Подставляя (3) в (2), получим

$$V_0 = a^3 Z_0 / n \quad (4).$$

Подставляя (4) в (1), окончательно имеем

$$\rho = \frac{Mn}{a^3 N_A}.$$

Расстояние между ближайшими соседними атомами связано с параметром решетки a простым геометрическим соотношением (рис. 1)

$$a = d\sqrt{2}.$$

Подставляя числовые значения в расчетные формулы, находим:

$$a = 3,59 \cdot 10^{-10} \text{ м}; \rho = 9,12 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3.$$

Ответ: $a = 3,59 \cdot 10^{-10} \text{ м}; \rho = 9,12 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3.$

Задача 4. Удельная проводимость кремниевого образца при нагревании от температуры $t_1 = 0^\circ\text{C}$ до температуры $t_2 = 18^\circ\text{C}$ увеличилась в 4,24 раза. Определить ширину запрещенной зоны кремния ΔE .

Решение. Удельная проводимость собственных полупроводников

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}},$$

где σ_0 – постоянная, характерная для данного полупроводника; ΔE – ширина запрещенной зоны. Тогда отношение проводимостей при двух температурах

$$\frac{\sigma_1}{\sigma_2} = \frac{e^{-\frac{\Delta E}{2kT_1}}}{e^{-\frac{\Delta E}{2kT_2}}} = \exp\left[\frac{\Delta E}{2k}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)\right],$$

прологарифмировав, получаем

$$\ln \frac{\sigma_1}{\sigma_2} = \frac{\Delta E}{2k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right).$$

Откуда выражаем искомую ширину запрещенной зоны

$$\Delta E = \frac{2kT_1T_2 \ln(\sigma_1/\sigma_2)}{T_2 - T_1}.$$

Вычисляя, получаем $\Delta E = 1,1 \text{ эВ}$.

Ответ: $\Delta E = 1,1 \text{ эВ}$.

Задача 5. Чему равна подвижность электронов в натрии при 0°C , если электропроводность меди $0,23 \cdot 10^8 \text{ 1/(Ом}\cdot\text{м)}$, а концентрация носителей заряда $2,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$.

Решение. Подвижность электронов определяется как средняя дрейфовая скорость, отнесенная к единице напряженности электрического поля

$$\mu = \frac{v_d}{E} = \frac{e\tau}{m},$$

где τ – время релаксации. Так как $\tau = \frac{\sigma m}{ne^2}$, то $\mu = \frac{\sigma}{ne}$. Вычисляя, получаем $\mu = 0,56 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$.

Ответ: $\mu = 0,56 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$.

2.5. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти число атомов алюминия в единице объема. Плотность алюминия равна $2,7 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.
2. Плотность кристалла NaCl равна $2,18 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$. Определить постоянную решетки.
3. Молибден имеет объемно-центрированную кубическую кристаллическую решетку. Расстояние между ближайшими соседними атомами равно $0,272 \text{ нм}$. Определить плотность молибдена.
4. Чему равно число атомов в элементарной ячейке в случае 1) простой, 2) объемноцентрированной, 3) гранецентрированной кубических решеток?
5. Объемноцентрированная кубическая решетка состоит из атомов одного вида, имеющих радиус r . Пусть атомы расположены по диагонали, которая проходит через центр куба, касаются друг друга. Показать, что часть объема, занятая атомами при таком расположении равна $0,68$.
6. Пусть элементарная ячейка простой кубической решетки построена из одинаковых атомов, представляющих собой жесткие сферы радиусом r . Ребро ячейки $a = 2r$ (атомы касаются друг друга). Показать, что часть объема, занятая атомами при таком расположении равна $0,523$.
7. Найти параметр решетки и расстояние между ближайшими соседними атомами серебра, который имеет гранецентрированную кубическую кристаллическую решетку. Плотность серебра при комнатной температуре равна $10,49 \text{ г/см}^3$.
8. Пусть энергия частицы в поле других частиц зависит от расстояния между центрами частиц по закону: $U(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\beta}{r^8}$, где α и β – постоянные. При каком r частицы образуют стабильное соединение.
9. Кристаллические решетки натрия и меди кубические объемно- и гра-

нецентрированные соответственно. Зная, кроме того, плотность этих металлов, найти постоянные их кристаллических решеток.

10. Вычислить длину волны рентгеновского излучения, которое отражается во втором порядке от системы плоскостей (100) кристалла NaCl под углом скольжения $\alpha = 25^\circ$. Найти также угол, под которым это излучение отражается в максимальном порядке от данной системы плоскостей.

11. Показать, что показатели степени в выражении для потенциальной энергии атомов, находящихся на расстоянии r , $U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$ должны

удовлетворять условию $m > n$.

12. Чему равны расстояния между плоскостями (100), (110) и (111) в кубической решетке с параметром a ?

13. Определить постоянную решетки кристалла LiJ , если известно, что зеркальное отражение первого порядка рентгеновских лучей с длиной волны $2,10 \text{ \AA}$ от естественной грани этого кристалла происходит при угле скольжения $10^\circ 5'$.

14. При комнатной температуре плотность рубидия равна $1,53 \text{ г/см}^3$. Он имеет объемно-центрированную кубическую кристаллическую решетку. Определить расстояние между ближайшими соседними атомами рубидия.

15. Золото имеет гранецентрированную кубическую кристаллическую решетку. Найти плотность золота и расстояние между ближайшими атомами, если параметр решетки $0,407 \text{ нм}$.

16. Рассчитать отношение числа дефектов по Шоттки к числу дефектов по Френкелю при $T = 300 \text{ К}$, если энергия образования вакансий $0,75 \text{ эВ}$, а для образования дефекта внедрения требуется 3 эВ .

17. Для образования вакансии в алюминии требуется энергия примерно $0,75 \text{ эВ}$. Сколько существует вакансий на один атом кристалла в состоянии термодинамического равновесия при комнатной температуре? При 600°C ?

18. Пусть энергия, требуемая для перемещения атома натрия из внутренней части кристалла на поверхность, равна 1 эВ . Вычислить теплоемкость одного моля металла при комнатной температуре, обусловленную наличием в нем дефектов Шоттки.

19. Германиевый кристалл, ширина запрещенной зоны которого равна $0,72 \text{ эВ}$, нагревают от температуры 0°C до 15°C . Во сколько раз возрастает его удельная проводимость.

20. При нагревании кремниевого кристалла от температуры 0°C до 10°C его удельная проводимость возрастает в $2,28$ раза. По приведенным данным определите ширину (считая ее постоянной) запрещенной зоны кристалла кремния.

21. Во сколько раз изменится при повышении температуры от 300 до 310 К электропроводность: а) металла; б) собственного полупроводника, ширина запрещенной зоны которого равна 3 эВ?
22. Собственный полупроводник *Ge* имеет при некоторой температуре удельное сопротивление $\rho = 0,48 \text{ Ом}\cdot\text{м}$. Определить концентрацию носителей заряда, если подвижности электронов и дырок соответственно равны 0,36 и 0,16 м²/(В·с).
23. Рассчитать частоту красной границы собственной фотопроводимости для полупроводника, у которого ширина запрещенной зоны равна 0,41 эВ.
24. Удельное сопротивление некоторого чистого беспримесного полупроводника при комнатной температуре 0,50 Ом·м. После включения источника света оно стало 0,40 Ом·м, а через 8 мкс после выключения источника оказалось 0,45 Ом·м. Найти среднее время жизни электронов проводимости и дырок.
25. Дырки, создаваемые при освещении у поверхности электронного полупроводника, диффундируют в объем, имеющий температуру 300 К, где они рекомбинируют с электронами проводимости. Определить эффективную глубину проникновения дырок, если их время жизни равно 10⁻³ с, а подвижность 2000 см²/(В·с).
26. В кристалле кремния массой 120 г равномерно по объему распределены 25,7 мкг фосфора и 38,2 мкг галлия. Считая, что атомы примеси полностью ионизированы, вычислить удельное сопротивление кристалла.
27. Определить подвижность электронов в германии n-типа, для которого при некоторых условиях удельное сопротивление $\rho = 1,6 \cdot 10^{-2} \text{ Ом}\cdot\text{м}$ и коэффициент Холла $7 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3/\text{К}$.
28. Сопротивление кристалла PbS при температуре 20°C равно 10⁴ Ом. Определите его сопротивление при 80°C.
29. Для характеристики температурной зависимости сопротивления проводников от температуры вводится температурный коэффициент сопротивления α , который по определению равен

$$\alpha = \frac{1}{R_T} \frac{dR_T}{dT},$$

где R_T – сопротивление проводника при данной температуре T . Докажите, что для полупроводников он оказывается равным

$$\alpha = -\frac{\text{const}}{T^2}.$$

30. В некоторых полупроводниках длина свободного пробега электронов оказывается порядка межатомных расстояний. В такой ситуации движение электронов можно представить как случайные прыжки между соседними узлами решетки. Оценить при $T = 300$ К удельную проводимость такого полупроводника, если концентрация электронов 10^{18} см^{-3} , средняя частота прыжков 10^{13} с^{-1} , а межатомное расстояние $0,3$ нм.
31. Концентрация основных носителей заряда в $n\text{-Si}$ равна 10^{15} см^{-3} . Найти концентрацию неосновных носителей заряда.
32. Найти минимальную энергию E_{min} необходимую для образования пары электрон-дырка в кристалле GaAs, если его удельная проводимость изменяется в 10 раз при изменении температуры от 20 до -3°C .
33. Сопротивление R_1 кристалла PbS при температуре 20°C равно 10^4 Ом. Определить сопротивление R_2 при температуре 80°C .
34. Тонкая пластинка из кремния толщиной 2 см помещена перпендикулярно к линиям индукции однородного магнитного поля индукцией $B = 0,5$ Тл. При плотности тока 2 мкА/мм^2 направленного вдоль пластины, холловская разность потенциалов оказалась равной $2,8$ В. Определите концентрацию и подвижность носителей заряда.
35. В полупроводнике, подвижность электронов проводимости которого в 2 раза больше подвижности дырок, эффект Холла не наблюдается. Найти отношение концентрации дырок и концентрации электронов проводимости в этом полупроводнике.
36. Почему можно утверждать, что кристалл InAs с собственной проводимостью обладает проводимостью n -типа?
37. Отношение электропроводностей серебра и меди при одинаковой температуре равно $\frac{6,12}{5,76}$. Вычислить отношение подвижностей электронов в этих металлах, считая, что на каждый атом приходится по одному свободному электрону.
38. Электропроводность меди $6 \cdot 10^7 (\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$. Определить время релаксации электрона, считая, что каждый атом поставляет в зону проводимости один электрон.
39. Вычислить среднюю длину свободного пробега электронов проводимости натрия при комнатной температуре. Электропроводность натрия $0,23 \cdot 10^8 (\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$.
40. В образце германия подвижность электронов $0,38 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, а подвижность дырок $0,16 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$. В этом образце эффект Холла не наблюдается. Какая часть тока переносится дырками?

41. Определить примесную электропроводность германия, который содержит индий с концентрацией $5 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ и сурьму с концентрацией $2 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$. Подвижности электронов и дырок для германия соответственно равны 0,38 и $0,18 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$.
42. Определить примесную электропроводность германия, который содержит бор с концентрацией $2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ и мышьяк с концентрацией $5 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$. Подвижности электронов и дырок для германия соответственно равны 0,38 и $0,18 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$.
43. Определить примесную электропроводность кремния, который содержит бор с концентрацией $5 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ и сурьму с концентрацией $5 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$. Подвижности электронов и дырок для кремния соответственно равны 0,16 и $0,04 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$.
44. Германиевый образец нагревают от 0 до 17°C . Принимая ширину запрещенной зоны кремния $\Delta E = 0,72 \text{ эВ}$, определить, во сколько раз возрастет его удельная проводимость.
45. Определить ширину запрещенной зоны собственного полупроводника, если при температурах T_1 и $T_2 (T_1 < T_2)$ его сопротивления соответственно равны R_1 и R_2 .
46. Концентрация электронов в собственном полупроводнике при температуре 400 К оказалась равной $1,38 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Найти соотношение для произведения эффективных масс электрона и дырки к массе свободного электрона $\frac{m_n m_p}{m_0^2}$, если известно, что ширина запрещенной зоны меняется по закону $\Delta E_g = (0,785 - 4 \cdot 10^{-4} T) \text{ эВ}$.
47. В исследуемом полупроводнике по данным измерения эффекта Холла концентрация электронов составляла $1,3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ при 400 К и $6,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ при 350 К. Найти ширину запрещенной зоны материала, считая, что она меняется с температурой по линейному закону.
48. Вычислить собственные концентрации электронов в германии и кремнии при $T = 300 \text{ К}$. Эффективные массы плотности состояний в валентной зоне m_{dp} принять равными $0,362 m_0$ для Ge, $0,595 m_0$ – для Si. Ширина запрещенной зоны при $T = 300 \text{ К}$ составляет 0,66 эВ в Ge и 1,1 эВ в Si.
49. Вычислить удельные сопротивления собственных германия и кремния при $T = 300 \text{ К}$. Для подвижностей электронов и дырок ($\mu_n = b \mu_p$) в германии и кремнии принять следующие значения: для Ge: $\mu_n = 3,8 \cdot 10^3 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$, $b = 2,1$; для Si: $\mu_n = 1,45 \cdot 10^3 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$, $b = 2,9$.
50. При нагревании кремниевого кристалла от температуры $t_1 = 0^\circ\text{C}$ до температуры $t_2 = 10^\circ\text{C}$ его удельная проводимость возрастает в 2,28 раза.

По приведенным данным определить ширину ΔE_g запрещенной зоны кристалла кремния.

51. Найти минимальную энергию W_{\min} , необходимую для образования пары электрон – дырка в кристалле CaAs , если его удельная проводимость γ изменяется в 10 раз при изменении температуры от 20 до 3°C.

52. Сопротивление R_1 кристалла PbS при температуре $t_1 = 20^\circ\text{C}$ равно 10 Ом. Определить его сопротивление R_2 при температуре $t_2 = 80^\circ\text{C}$.

53. p - n -переход находится под обратным напряжением $U = 0,1$ В. Его сопротивление $R_1 = 692$ Ом. Каково сопротивление перехода при прямом напряжении?

54. Сопротивление p - n -перехода, находящегося под прямым напряжением $U = 1$ В равно 10 Ом. Определите сопротивление перехода при обратном напряжении.

55. Прямое напряжение U , приложенное к p - n -переходу, равно 2 В. Во сколько раз возрастает сила тока через переход при изменении температуры от 300 К до 273 К.

56. p - n -переход находится под обратным напряжением $U = 0,1$ В. Его сопротивление $R_1 = 692$ Ом. Каково сопротивление R_2 перехода при прямом напряжении?

57. Сопротивление R_1 p - n -перехода, находящегося под прямым напряжением $U = 1$ В, равно 10 Ом. Определить сопротивление R_2 перехода при обратном напряжении.

58. Прямое напряжение U , приложенное к p - n -переходу, равно 2 В. Во сколько раз возрастет сила тока через переход, если изменить температуру от $T_1 = 300$ К до $T_2 = 273$ К?

ЛИТЕРАТУРА

Основная

1. Детлаф А.А., Яворский Б.М. Курс физики: Учебное пособие для вузов. – М. : Высш. шк., 1989. – 608 с.
2. Макаренко Г.М. Курс общей физики: Учебное пособие для студентов технических специальностей высших учебных заведений. – Мн. : Изд «Дизайн ПРО» 2003. – 640 с.
3. Шалимова К.В. Физика полупроводников: Учебное пособие для вузов. – М. : Энергия, 1971. – 312 с.
4. Савельев И.В. Курс общей физики. Том 3. Оптика, атомная физика, физика атомного ядра и элементарных частиц. М. : Наука, 1973. – 1982 гг.
5. Физика: задания к практическим занятиям. Учебное пособие для вузов. Под общ. ред. Ж.П.Лагутиной. – Мн.: Выш. шк., 1989. – 236 с.
6. Волькенштейн В.С. Сборник задач по общему курсу физики М. : Наука, 1973.
7. Трофимова Т.И. Физика в таблицах и формулах : Учебное пособие для студентов вузов. – М. : Дрофа, 2002. – 432 с.
8. Геворкян Р.Г., Шепель В.В. Курс общей физики : Учебное пособие для вузов. – М. : «Высшая школа», 1972.

Дополнительная

- [Д1]. Трофимова Т.И. Сборник задач по курсу физики для ВТУЗов М. : Изд. «ОНИКС 21 век» 2003 г.
- [Д2]. Епифанов Г.И. Физика твердого тела. – М. : Высш. школа, 1977 (и 1965).
- [Д3]. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М. : Наука, 1978.
- [Д4]. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. – М. : Наука, 1990.
- [Д5]. Бушманов Б.Н., Хромов Ю.А. Физика твердого тела. – М. : Высш. школа, 1971.
- [Д6]. Астахов А.В. Курс физики. Том I. М., 1977 г.
- [Д7]. Иродов И.Е., Савельев И.В., Замша О.И. Сборник задач по общей физике М. : Изд. 5.

Учебное издание

ВАБИЩЕВИЧ Сергей Ананьевич
ВАБИЩЕВИЧ Наталья Вячеславовна
ОПАРИНА Нина Александровна

ФИЗИКА

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ
ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ
ЭЛЕМЕНТЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Учебно-методический комплекс
для студентов технических специальностей

Дизайн обложки И.С. Васильевой

Редактор Д.Н. Богачёв

Подписано в печать 07.07.08. Формат 60×84 1/16. Бумага офсетная. Гарнитура Таймс.
Ризография. Усл. печ. л. 10,44. Уч.-изд. л. 10,3. Тираж 245 экз. Заказ № 196

Издатель и полиграфическое исполнение:
учреждение образования «Полоцкий государственный университет»

ЛИ № 02330/0133020 от 30.04.04 ЛП № 02330/0133128 от 27.05.04

211440 г. Новополоцк, ул. Блохина, 29